

Victor Augusto S. V. Bittencourt

Emaranhamento intrínseco em sistemas tipo-Dirac

Brasil

06 de Março de 2018

Victor Augusto S. V. Bittencourt

Emaranhamento intrínseco em sistemas tipo-Dirac

Tese apresentada no Departamento de Física
da Universidade Federal de São Carlos para
a obtenção do título de Doutor em Física.

Universidade Federal de São Carlos
Departamento de Física
Programa de Pós-Graduação em Física

Orientador: Prof. Dr. Alex Eduardo de Bernardini

Brasil
06 de Março de 2018



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Física

Folha de Aprovação

Assinaturas dos membros da comissão examinadora que avaliou e aprovou a Defesa de Tese de Doutorado do candidato Victor Augusto Sant Anna Valderramos Bittencourt, realizada em 06/03/2018:

Alex Eduardo de Bernardini

Prof. Dr. Alex Eduardo de Bernardini
UFSCar

Celso Jorge Villas Boas

Prof. Dr. Celso Jorge Villas Boas
UFSCar

Vivaldo Leiria Campo Júnior

Prof. Dr. Vivaldo Leiria Campo Júnior
UFSCar

JOSÉ A. HOYOS NETO

Prof. Dr. José Abel Hoyos Neto
IFUSP

Roldão da Rocha Junior

Prof. Dr. Roldão da Rocha Junior
UFABC

Este trabalho é dedicado à minha querida esposa Natália.

Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador Alex Eduardo de Bernardini que, por quase uma década, me guiou e me ensinou com paciência, dedicação e companheirismo que jamais esquecerei.

Ao meu co-orientador do *Dipartimento di Fisica E. R. Caianiello*, na Universidade de Salerno, Prof. Dr. Massimo Blasone agradeço os ensinamentos de física e o companheirismo acadêmico e pessoal que tive o prazer de desfrutar durante meu período de estudos em Salerno.

Agradeço aos professores do departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos que fizeram parte da minha formação em física e sempre foram prestativos em seus ensinamentos. Em especial, ao prof. Dr. Giuliano Augustus Pavan Ribeiro, pelas lições de física matemática e mecânica quântica, ao prof. Dr. Paulo Daniel Emmel, pelos ensinamentos de física básica e mecânica estatística, ao Prof. Dr. César Constantino, pelas lições de eletrodinâmica e ao Prof. Dr. Celso Jorge Villas Boas, pelo período de mestrado e atenção constante à minha formação.

A minha família, minha mãe Angela, meu Pai Fernando, minhas irmãs Maria Fernanda, Stephanie e Cristal, e a minha madrinha Carmem, agradeço todo o apoio ao longo destes anos de estudo.

Agradeço aos meus amigos,

pelos reflexões e incansáveis discussões em física ao grande Thiago Silva Tavares que me acompanhou no mundo acadêmico desde a graduação.

ao grandes André Donegá Gargantini, Alan Michel Franco, Pedro Cesar Zavitoski Samuel Lima agradeço os sorrisos e momentos de descontração.

A todo o pessoal do time de Beisebol e Softbol da UFSCar que estiveram presentes nessa longa jornada e me acompanharam com toda a amizade do mundo dentro e fora de campo.

Grazie ai miei amici italiani per la compagnia nel vecchio mondo. Per le discussioni di fisica e per i espressi, grazie mille Giuseppe Cuono, Alfonso Maiellaro, Luciano Petruzzello, Onofrio Mazzarisi, Luca Smaldone, Luca Buoninfante, Gaetano Luciano, Maria Vittoria Gargiulo, Giulio Francesco Aldi e Gianpaolo Torre. Grazie ai miei amici di Salerno, Emanuele Autuori, Gerardo Esposito, Donato Guiglielmelli, Benito Novelli, Stefano Castello, Diodato Landi, Mario Luciani e Michele Mastrodomenico per i rilassati sabati. I can not forget my friends from Fermento Pub, Erdem Delice, for all the beers and the interesting discussions on various topics, and Nino Calenda, che fa le migliori birre

del mondo.

Devo agradecer especialmente à minha esposa Natália Lumi que durante todos esses anos de formação me apoiou pacientemente e esteve presente nas mais diversas situações, sempre com carinho e amor, e que agora me acompanhará em uma nova e desafiante etapa de nossas vidas.

Por último, agradeço ao Conselho Nacional de Pesquisa e Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro a este projeto de pesquisa.

Resumo

A equação de Dirac é associada a uma estrutura de grupos $SU(2) \otimes SU(2)$ que descreve dois graus de liberdade discretos, a paridade intrínseca e o spin, em geral emaranhados. Neste trabalho iremos descrever e caracterizar este emaranhamento spin-paridade tanto sob uma perspectiva geral quanto do ponto de vista de dois sistemas tipo-Dirac: um íon aprisionado de 4 níveis, no contexto da simulação da equação de Dirac, e o grafeno bicamada. Desenvolveremos uma metodologia para cálculo dos autoestados do Hamiltoniano de Dirac incluindo termos de potenciais externos constantes e estudaremos o caráter de não localidade de estados mistos de biespinores em conexão com transformações CP, constatando, por exemplo, que o emaranhamento spin-paridade é invariante diante este tipo de transformações. Investigaremos como *boosts* de Lorentz afetam o emaranhamento entre duas partículas descritas por biespinores, sendo a correlação em geral não invariante para estados antissimétricos, mas, considerando projeções quirais, obteremos propriedades de invariância para o emaranhamento. Na segunda parte do trabalho, descreveremos como o emaranhamento spin-paridade é traduzido para os sistemas tipo-Dirac considerados. No caso do grafeno bicamada, por exemplo, a estrutura $SU(2) \otimes SU(2)$ da equação de Dirac é refletida em emaranhamento entre os números quânticos de rede e camada. Iremos descrever a evolução de estados arbitrários destes sistemas e consideraremos a inclusão de efeitos de ruídos globais e locais na dinâmica tipo-Dirac, através de operadores de Kraus, associados à flutuações aleatórias de parâmetros dos sistemas. Para os dois sistemas o ruído degrada o emaranhamento advindo da estrutura $SU(2) \otimes SU(2)$. Nossos resultados servem de suporte à descrição de correlações intrínsecas em sistemas efetivamente descritos pela equação de Dirac, sobretudo no grafeno, que podem ser exploradas, por exemplo, para implementação de algoritmos quânticos.

Palavras-chave: Equação de Dirac. Emaranhamento. Oscilações quânticas. Íons aprisionados. Grafeno.

Abstract

Dirac equation is supported by a $SU(2) \otimes SU(2)$ group structure, such that its solutions describe two discrete degrees of freedom, intrinsic parity and spin, which in general are entangled. In this work we will characterize such spin-parity under a general perspective as well as from the point of view of two Dirac-like systems: a four level trapped ion, in the context of the quantum simulation of Dirac equation with external fields, and for the bilayer graphene. We will derive a method for the construction of the eigenstates of the Dirac Hamiltonian including constant external potentials. We will then study the non-local character of mixed bispinor states in connection with CP transformations, verifying that the spin-parity entanglement is invariant under such transformations. Additionally, we will investigate how Lorentz boosts affect the entanglement encoded in two bispinorial particles. In this last case, entanglement is not in general invariant for antisymmetric states, although the entanglement on chiral projections exhibit invariance properties. In the second part of the work, we will describe how the spin-parity entanglement is translated to the Dirac-like systems considered. For the bilayer graphene, for example, the $SU(2) \otimes SU(2)$ structure of Dirac equation is reflected onto entanglement between lattice and layer quantum numbers. We will describe the evolution of arbitrary states of such systems and we will consider the inclusion of global and local noise effects on the Dirac-like dynamics, through Kraus operators, related to random fluctuations of the system parameters. For both systems the noise degraded the entanglement associated with the $SU(2) \otimes SU(2)$ structure. Our results and the formalism here develop are a support for the description of intrinsic correlations in Dirac-like systems, specially for graphene, which can be further develop for implementation of quantum algorithms.

Keywords: Dirac equation. Entanglement. Quantum oscillations. Trapped Ions. Graphene.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Espalhamento de um biespinor livre por uma barreira de potencial bidimensional.	57
Figura 2 – Entropias de emaranhamento para a onda refletida S_R (gráfico da direita) e para a onda transmitida S_T (gráfico da esquerda) no problema de espalhamento pela barreira de potencial constante.	61
Figura 3 – Emaranhamento da onda refletida e da onda transmitida pela barreira de potencial para um biespinor incidente emaranhado incluindo uma fase incidente relativa entre as amplitudes de incidência	63
Figura 4 – Discórdia geométrica para o estado misto obtido pela fórmula (3.135) para o Hamiltoniano incluindo um potencial pseudo-escalar constante.	70
Figura 5 – Concorrência para os autoestados associados aos potenciais pseudo-escalar, tensorial e pseudo-vetorial em função de $\sin(\theta)$, com θ o ângulo entre \mathbf{B} e \mathcal{P}	73
Figura 6 – Concorrência entre spin e paridade intrínseca dos autoestados associados aos potenciais pseudo-escalar, tensorial e pseudo-vetorial em função de $\sin(\theta)$, onde θ é o ângulo entre \mathbf{W} e \mathcal{P}	74
Figura 7 – Discórdia geométrica (linha tracejada) e função de Bell (linha pontilhada) para uma mistura maximal de estados separáveis de helicidade (3.157) em função de m/E_p	76
Figura 8 – Negatividade (linhas sólidas), discórdia geométrica (linhas tracejadas) e função de Bell (linhas pontilhadas), em função de m/p para misturas (c.f. Eq. (3.165)).	79
Figura 9 – Negatividade (linha sólida), discórdia geométrica (linha tracejada) e função de Bell (linha pontilhada) em função de $\beta = 1/T$ para o estado térmico construído com os autoestados do Hamiltoniano de Dirac incluindo acoplamento não minimal.	80
Figura 10 – Valor absoluto da diferença entre a discórdia geométrica do estado original e a discórdia geométrica do estado transformado CP para estados mistos (c.f. Eq. (3.165)).	83
Figura 11 – Valor absoluto da diferença entre a discórdia geométrica do estado térmico e de sua transformada CP.	84
Figura 12 – Representação esquemática do cenário de <i>boost</i> considerado.	92
Figura 13 – Variação do emaranhamento global para o estado (3.209) em função da rapidez ω e da direção θ do <i>boost</i> e em função da rapidez do <i>boost</i> para valores fixos de θ	93

Figura 14 – Variação do emaranhamento global e do emaranhamento entre os spins em função da rapidez do <i>boost</i> ω para o estado (3.211).	94
Figura 15 – Variação do emaranhamento global sob <i>boosts</i> de Lorentz para o estado (3.212).	95
Figura 16 – Variação do emaranhamento entre spins sob <i>boosts</i> de Lorentz para o estado (3.212).	95
Figura 17 – Representação esquemática do conceito de simulação quântica.	99
Figura 18 – Representação esquemática de um íon de dois níveis internos aprisionado em uma armadilha harmônica.	100
Figura 19 – Representação das transições geradas pelo Hamiltoniano (4.6) que descreve um íon de dois níveis internos aprisionado interagente com um laser.	104
Figura 20 – Esquema dos níveis hiperfinos, típicos dos íons alcalinos utilizados na simulação da equação de Dirac.	109
Figura 21 – Concorrência, e módulo da quiralidade média $ \langle \hat{\gamma}_5 \rangle $, para a matriz densidade dada por (4.37).	112
Figura 22 – Probabilidades de transição, $P_{a \rightarrow a,b,c,d}$ em função de pt	115
Figura 23 – Probabilidades de sobrevivência, $P_{i \rightarrow i}$, para estados iniciais $ i\rangle = a\rangle$ e $ i\rangle = d\rangle$, em função de pt	116
Figura 24 – Concorrência e quiralidade média, $\langle \hat{\gamma}_5 \rangle$, em função de pt para o mesmo conjunto de parâmetros considerados na Fig. (22).	117
Figura 25 – Probabilidades de sobrevivência para os estados (4.64) sob ação do ruído global.	121
Figura 26 – Negatividade dos estados iniciais ρ_C e ρ_W sob ruído global.	122
Figura 27 – Discórdia geométrica para o estado inicial ρ_C sob ruído global.	123
Figura 28 – Emaranhamento para o estado inicial ρ_W (direita) e ρ_C (esquerda) sob o ruído local em função de pt	124
Figura 29 – Rede favo-de-mel e sua primeira zona de Brillouin	129
Figura 30 – Bandas de energia obtidas do Hamiltoniano <i>tight-binding</i> para o grafeno monocamada.	131
Figura 31 – Bandas de energia obtidas do Hamiltoniano <i>tight-binding</i> para <i>momenta</i> \mathbf{k} próximos ao ponto de Dirac \mathbf{K}	131
Figura 32 – Vista superior da configuração geométrica do empilhamento AB (Bernal) e representação esquemática das amplitudes de salto do modelo <i>tight-binding</i> para o grafeno bicamada.	133
Figura 33 – Bandas de energia para o ramo $s = 1$, $t/t_\perp = 8.29$, $t_3/t_\perp = 0.99$, e para $m/t_\perp = \Lambda/t_\perp = 0$ e zoom ao redor do ponto de Dirac K_+	138
Figura 34 – Gráfico auxiliar para as bandas de energia do ramo $s = 1$ em função de k_x	138

Figura 35 – Concorrência no espaço \mathbf{k} para $s = 1$, $m = 0$, $\Lambda = 0$ e mesmo conjunto de parâmetros utilizados na Fig. 33 e zoom ao redor do ponto de Dirac K_+	140
Figura 36 – Concorrência no espaço \mathbf{k} para $s = 1$ ao redor de K_+ para um termo de voltagem não nulo.	141
Figura 37 – Concorrência no espaço \mathbf{k} para $s = 1$ ao redor do ponto de Dirac K_+ para um termo de massa não nulo.	141
Figura 38 – Comparação do perfil de emaranhamento para \mathbf{k} na primeira zona de Brillouin.	142
Figura 39 – Gráficos da concorrência para vetores de onda próximos ao ponto de Dirac para diferentes valores da amplitude t_3	143
Figura 40 – Probabilidades de sobrevivência e emaranhamento entre rede e camada em função do parâmetro adimensional $t_{\perp}\tau$ para os estados $\rho_C(\tau = 0)$ e $\rho_W(\tau = 0)$	146
Figura 41 – Probabilidade de sobrevivência e negatividade para um estado inicialmente preparado como o autoestado ρ_{00} do Hamiltoniano (5.21) sob influência do ruído não-Markoviano.	148
Figura 42 – Probabilidade de sobrevivência e negatividade, para os estados iniciais (5.42) ρ_C e ρ_W sob o ruído não-Markoviano.	149

Lista de tabelas

Tabela 1 – Classificação das matrizes de potencial para a equação de Dirac.	66
---	----

Sumário

1	INTRODUÇÃO	14
2	A MECÂNICA QUÂNTICA DA EQUAÇÃO DE DIRAC	21
2.1	A equação de Dirac	21
2.1.1	As matrizes de Dirac	24
2.1.2	Transformações de Lorentz	25
2.1.3	Covariância da equação de Dirac	28
2.2	Propriedades e caracterização dos biespinores de Dirac	30
2.2.1	Espinores e as representações do grupo de Lorentz	30
2.2.2	Soluções de onda plana da equação de Dirac	33
2.2.3	Spin e helicidade	35
2.2.4	Quiralidade	38
3	EMARANHAMENTO SPIN-PARIDADE	40
3.1	A estrutura tensorial da equação de Dirac	40
3.2	Emaranhamento	43
3.2.1	Quantificadores de Emaranhamento	46
3.2.1.1	Entropia Linear e a Entropia de von Neumann	47
3.2.1.2	Concorrência e o emaranhamento de Formação	48
3.2.1.3	Critério de Peres e a negatividade	49
3.2.1.4	Outras correlações quânticas e a discórdia	50
3.2.2	Desigualdade de Bell e a não-localidade	52
3.3	Emaranhamento Spin-Paridade	54
3.3.1	Emaranhamento spin-paridade sob espalhamento por uma barreira de potencial	56
3.4	Emaranhamento spin-paridade sob potenciais externos globais	62
3.4.1	<i>Ansatz</i> para a matriz densidade sob potenciais constantes e propriedades de emaranhamento	66
3.5	Localidade das correlações codificadas em estados mistos sob potenciais constantes	74
3.5.1	Estados mistos de helicidade	75
3.5.2	Inclusão dos acoplamentos tensorial e pseudo-tensorial	77
3.5.3	Inclusão de efeitos térmicos	78
3.5.4	Papel das transformações de simetria CP	80
3.6	Emaranhamento codificado em pares de biespinores sob <i>boosts</i> de Lorentz	85
3.6.1	Estados de duas partículas biespinoriais	87

3.6.2	Efeitos dos <i>boosts</i> de Lorentz	89
3.6.3	Estados antissimétricos sob <i>boosts</i> de Lorentz	92
3.6.4	Transformação do emaranhamento em estados quirais	96
4	EMARANHAMENTO SPIN-PARIDADE NA SIMULAÇÃO DA EQUAÇÃO DE DIRAC COM ÍONS APRISIONADOS	98
4.1	O Hamiltoniano de Jaynes-Cummings	100
4.2	Simulação quântica da equação de Dirac com um íon aprisionado	103
4.3	Simulação quântica do Hamiltoniano de Dirac com acoplamento não-minimal e o emaranhamento spin-paridade	107
4.3.1	Evolução temporal de um estado arbitrário	111
4.4	Introdução de efeitos de ruído	117
4.4.1	Efeitos de ruído global	119
4.4.2	Efeitos de ruído local	122
4.5	Considerações finais	124
5	EMARANHAMENTO REDE-CAMADA NO GRAFENO BICAMADA	127
5.1	Modelo <i>tight-binding</i> para o grafeno monocamada e sua relação com a equação de Dirac	128
5.2	Relação entre a equação de Dirac com potenciais externos e o grafeno bicamada	132
5.2.1	Autoestados e autoenergias do Hamiltoniano do grafeno bicamada	136
5.3	Emaranhamento rede-camada	137
5.4	Dinâmica dos estados rede-camada maximamente emaranhados - efeitos de ruídos não-markovianos	142
5.4.1	Inclusão do ruído não-Markoviano de Ornstein-Uhlenbeck	146
5.5	Considerações Finais	149
6	CONCLUSÕES	152
	REFERÊNCIAS	158

Notação

Ao longo desta tese:

- O símbolo “ $\hat{}$ ” denotará operadores. Em particular as matrizes de Pauli serão indicadas por

$$\hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix};$$

$\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ e $\hat{\sigma}_z$.

- Variáveis em negrito indicarão vetores, por exemplo $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$;
- O produto escalar entre dois vetores será indicado por \cdot e o produto vetorial por \times
- O módulo de um vetor \mathbf{p} é indicado por $p = \sqrt{\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}}$ ou por $|\mathbf{p}|$ quando for necessária ênfase;
- Os vetores ortonormais cartesianos serão representados por \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y e \mathbf{e}_z ;
- A matriz identidade de ordem N será representada por \hat{I}_N .

1 Introdução

Dentre as diversas predições contra-intuitivas da mecânica quântica, o fenômeno do emaranhamento angariou nas últimas duas décadas grande atenção das mais diversas áreas da física. Tida pelo próprio Schrödinger como a característica marcante da física quântica (SCHRÖDINGER, 1935), esta correlação, advinda do princípio da superposição aplicado a sistemas compostos, foi discutida no escopo da não-localidade da mecânica quântica (BELL, 1964) e, no final da década de 1990, foi contextualizada operacionalmente como o recurso necessário à implementação do teletransporte quântico (PLENIO; VEDRAL, 1998). Devido à sua relação com ingredientes fundamentais da teoria quântica e à sua estrutura matemática que permite uma caracterização precisa, o emaranhamento tem desempenhado um papel de destaque no estudo de propriedades quânticas (HORODECKI et al., 2009) e na construção de algoritmos e protocolos de informação que utilizam o fenômeno para tornar eficientes tarefas computacionais que não podem ser implementadas de maneira eficaz em computadores operando sob as leis da física clássica (NIELSEN; CHUANG, 2000).

Fora do contexto da mecânica quântica usual, o emaranhamento também está presente intrinsecamente na formulação da mecânica quântica relativística da equação de Dirac (MIZRAHI, 2011; BERNARDINI; MIZRAHI, 2014). As soluções da equação de Dirac para partículas massivas são descritas em termos dos chamados bispinores de Dirac que pertencem a um grupo de simetrias específico, associado à invariância da equação de Dirac sob transformações de Poincaré e de paridade total, o $SU(2) \otimes SU(2)$ (TUNG, 1993; FONDA; GHIRARDI, 1970). A esta estrutura são associados dois graus de liberdade discretos: o spin e a paridade intrínseca (BERNARDINI; MIZRAHI, 2014). O sistema quântico descrito pelos bispinores de Dirac é então reinterpretado como um sistema quântico composto de dois subsistemas, cada um associado a um espaço de Hilbert de dimensão dois e, portanto, os bispinores podem ser interpretados como estados de dois bits quânticos: o bit quântico de spin e o bit quântico de paridade intrínseca (MIZRAHI, 2011; BERNARDINI; MIZRAHI, 2014). Sob esta perspectiva, a equação de Dirac descreve a dinâmica dos dois bits quânticos emaranhados em termos de uma variável contínua (posição ou *momentum*).

Diferente do emaranhamento usualmente codificado entre graus de liberdade de partículas diferentes, o emaranhamento presente nas soluções da equação de Dirac é um exemplo de emaranhamento intrínseco, isto é, codificado entre diferentes graus de liberdade de uma mesma partícula. Diversos outros exemplos de emaranhamento intrínseco são encontrados na literatura. Por exemplo, a oscilação quântica de sabores, em física de neutrinos, pode ser interpretada sob a luz das correlações quânticas presentes entre os

diferentes modos de massa que compõem um autoestado de sabor (BLASONE et al., 2008b; BLASONE et al., 2009; BLASONE et al., 2015). Em óptica quântica, fótons podem ser preparados em estados emaranhados entre polarização e *momentum* angular orbital (MOLINA-TERRIZA; TORRES; TORNER, 2007). Outro exemplo de emaranhamento intrínseco ocorre na interferometria de nêutrons, onde estados emaranhados entre spin e um número quântico associado ao caminho que o nêutron percorre no interferômetro (HASEGAWA et al., 2007) foram utilizados em montagens experimentais para verificar não localidade e violação da desigualdade de Bell neste sistema físico (KLEPP; SPONAR; HASEGAWA, 2014). Nestes últimos dois casos é possível transferir o emaranhamento *intrínseco* para o emaranhamento entre graus de liberdade de duas partículas. No caso da interferometria de nêutrons, por exemplo, o emaranhamento entre spin e caminho pode ser transformado em emaranhamento entre spin de dois átomos espacialmente separados (PRAMANIK et al., 2010; ADHIKARI et al., 2010).

Assim como a equação de Dirac livre, os potenciais externos que podem ser incluídos na dinâmica de Dirac, classificados de acordo com suas propriedades de transformação diante simetrias de Poincaré (THALLER, 1992), são também naturalmente descritos com a estrutura $SU(2) \otimes SU(2)$ e, portanto, afetam o conteúdo de emaranhamento intrínseco dos bispinores (BITTENCOURT; BERNARDINI, 2016). A inclusão de potenciais externos na dinâmica de Dirac é relevante em diversos sistemas físicos (THALLER, 1992), do estudo dos níveis hiperfinos do átomo de Hidrogênio (SAKURAI, 1967) até modelos de física nuclear (FURNSTAHL; RUSNAK; SEROT, 1998; MAO, 2003; GINOCCHIO, 2004). Também é interessante a inclusão dos potenciais externos em sistemas de baixa energia efetivamente descritos pela equação de Dirac (sistemas tipo-Dirac). Por exemplo, as interações entre um íon aprisionado de 4 níveis e lasers pode ser manipulada de modo a simular a dinâmica da equação de Dirac incluindo potenciais externos (CASANOVA et al., 2010; LAMATA et al., 2011; TENEV; IVANOV; VITANOV, 2013). Na física de grafeno, conhecida por ser efetivamente descrita pela equação de Dirac (CASTRO-NETO et al., 2009), a inclusão de potenciais externos na dinâmica efetiva surge, por exemplo, devido à desordens (PERES; GUINEA; NETO, 2006).

No contexto dos sistemas tipo-Dirac, para um sistema de baixas energias que possui dinâmica formalmente igual à dinâmica de Dirac, é possível traçar também uma relação entre o emaranhamento spin-paridade intrínseco aos bispinores e o emaranhamento entre subsistemas associados a graus de liberdade do sistema tipo-Dirac considerado. Este cenário é interessante não apenas do ponto de vista de simulação, para a reprodução do emaranhamento spin-paridade em experimentos controláveis e cujas propriedades físicas podem ser medidas com técnicas experimentais bem estabelecidas, mas também para a obtenção de novas informações sobre o sistema físico estudado através da relação direta com a mecânica quântica relativística da equação de Dirac.

Entre os diversos sistemas que podem ser manipulados para simular a equação de Dirac (GEORGESCU; ASHHAB; NORI, 2014), o íon aprisionado foi um dos mais considerados para a simulação da dinâmica relativística em diferentes cenários (LAMATA et al., 2007; BERMUDEZ; MARTIN-DELGADO; LUIS, 2008; CASANOVA et al., 2010; LAMATA et al., 2011; TENEV; IVANOV; VITANOV, 2013), principalmente devido ao alto grau de controlabilidade do sistema e da existência de técnicas experimentais precisas e bem estabelecidas (LEIBFRIED et al., 2003). A dinâmica de um íon aprisionado de dois níveis interagente com lasers externos é descrita através três termos (LEIBFRIED et al., 2003): o Hamiltoniano de Jaynes-Cummings, o Hamiltoniano de anti-Jaynes Cummings e a interação de *carrier*. Através da escolha conveniente dos parâmetros desta equação é possível emular a dinâmica da equação de Dirac com um íon de quatro níveis internos (LAMATA et al., 2007) tornando possível a medida em laboratório de fenômenos tipicamente relativísticos, como o paradoxo de Klein e o efeito *zitterbewegung* (CASANOVA et al., 2010; GERRITSMA et al., 2010; GERRITSMA et al., 2011). Além disso, é possível também simular a equação de Dirac incluindo potenciais externos, em particular, os efeitos de acoplamentos não-minimais com campos elétricos constantes (TENEV; IVANOV; VITANOV, 2013), sendo uma plataforma interessante para a investigação dos efeitos deste tipo de interação no emaranhamento spin-paridade dos biespiniores. As correlações entre spin e paridade intrínseca são traduzidas em termos do emaranhamento associado à números quânticos iônicos, possibilitando o estudo completo das correlações spin-paridade com o íon aprisionado (BITTENCOURT; BERNARDINI; BLASONE, 2016).

Alguns sistemas de baixa energia possuem dinâmica efetiva relativística intrínseca. O mais notório exemplo é o grafeno, material composto de uma camada de átomos de carbono organizados em uma rede do tipo favo-de-mel cujas excitações de baixas energias se comportam como férmions de massa nula descritos efetivamente pela equação de Dirac, gerando diversas propriedades únicas ao comportamento relativístico (CASTRO-NETO et al., 2009). Um exemplo, é o comportamento anômalo da condutância eletrônica do grafeno (NOVOSELOV et al., 2004; ZHANG et al., 2005; NOVOSELOV et al., 2006), consequência do efeito Hall fracionário típico da dinâmica relativística de Dirac, com inúmeras implicações experimentais e tecnológicas (CASTRO-NETO et al., 2009). Também devido a esta estrutura são observados o paradoxo de Klein e o efeito *zitterbewegung* no grafeno, ambos com implicações interessantes nas propriedades eletrônicas do material (KATSNELSON; NOVOSELOV; GEIM, 2006). Do mesmo modo que o grafeno de uma única camada, o grafeno de dupla camada (bicamada) também possui dinâmica dada em termos da equação de Dirac, neste caso, incluindo um termo de massa (CASTRO-NETO et al., 2009; MCCANN; KOSHINO, 2013). Mais do que isso, o Hamiltoniano *tight-binding* do grafeno bicamada pode ser diretamente mapeado em um Hamiltoniano modificado de Dirac incluindo termos de potenciais externos que geram emaranhamento intrínseco em seus autoestados (BITTENCOURT; BERNARDINI, 2017b). Neste caso, a estrutura

$SU(2) \otimes SU(2)$ da equação de Dirac é associada a dois graus de liberdade no grafeno, rede e camada, de modo que os autoestados do Hamiltoniano do grafeno apresentam emaranhamento rede-camada, que pode ser investigado completamente através da relação com a dinâmica relativística.

Neste contexto correlacional da equação de Dirac, os objetivos principais desta tese são fornecer uma caracterização geral do emaranhamento spin-paridade da equação de Dirac e descrever a sua relação com dois sistemas de baixas energias associados à dinâmica da equação de Dirac: o íon aprisionado, no contexto da simulação do acoplamento não-minimal com um campo elétrico, e o grafeno bicamada, para o cálculo e descrição geral do emaranhamento rede-camada.

Do ponto de vista da equação de Dirac, nosso foco principal será descrever e caracterizar o efeito de potenciais externos no emaranhamento spin-paridade. Em particular, obteremos uma metodologia genérica para o cálculo dos autoestados do Hamiltoniano de Dirac incluindo todos os possíveis potenciais externos constantes, sob a restrição de combinações específicas que satisfazem propriedades algébricas particulares (BITTENCOURT; BERNARDINI, 2016). Desta maneira é possível descrever, de um ponto de vista geral, as propriedades de emaranhamento spin-paridade das soluções da equação de Dirac incluindo os efeitos de potenciais externos. Construiremos estados mistos de bispinores e estudaremos o caráter de localidade - associado a possibilidade de um modelo de variáveis escondidas para correlações intrínsecas de spin-paridade (BERNARDINI; BITTENCOURT; BLASONE, 2018). Iremos descrever o efeito de transformações de conjugação de carga (C) e paridade (P) no emaranhamento e no caráter de não-localidade das correlações spin-paridade e constataremos, por exemplo, que mesmo em casos que o estado bispinorial não é invariante diante transformações CP, o conteúdo correlacional do estado se mantém invariante. Em particular os efeitos destas transformações são identificáveis nas correlações quânticas quantificadas pela quantidade chamada discórdia geométrica (DAKIC; VEDRAL; BRUKNER, 2010).

Neste cenário geral é também relevante investigar como o emaranhamento de duas partículas bispinoriais se comporta diante de *boosts* de Lorentz, conectando referenciais inerciais que se movimentam com velocidade relativa constante (CZACHOR, 1997; GINGRICH; ADAMI, 2002; PERES; SCUDO; TERNO, 2002; TERASHIMA; UEDA, 2003; JORDAN, 2007; FRIIS; BERGLMANN; HUBER, 2010). Esse cenário de *boost* foi extensivamente considerado na literatura em conexão com as desigualdades de Bell (CZACHOR, 1997; TERASHIMA; UEDA, 2003; CABAN, 2005; CABAN; REMBIELINSKI; WLODARCZYK, 2009; FRIIS; BERGLMANN; HUBER, 2010), entretanto sem considerar a estrutura $SU(2) \otimes SU(2)$ intrínseca à equação de Dirac. Neste caso, o estado de duas partículas é um estado de 4 bits quânticos e o emaranhamento pode ser codificado de diversos modos não equivalentes (HORODECKI et al., 2009). Consideraremos, neste cenário, os

efeitos de *boosts* de Lorentz no emaranhamento codificado apenas nos spins das partículas e em uma medida de emaranhamento global, o emaranhamento de Meyer-Wallach (MEYER; WALLACH, 2002). Especificaremos o cenário geral para a descrição deste cenário de *boost* em estados antissimétricos e observaremos que nem o emaranhamento entre os spins, nem o emaranhamento global, são invariantes diante *boosts* para estados preparados como autoestados de helicidade. Por outro lado, ao considerarmos estados preparados como autoestados de quiralidade, que não é uma quantidade conservada mas é uma quantidade invariante diante *boosts*, observamos propriedades de invariância do emaranhamento spin-paridade (BITTENCOURT; BERNARDINI; BLASONE, 2018).

No sistema de íons aprisionados, partindo do protocolo de simulação da equação de Dirac incluindo acoplamento não-minimal com um campo elétrico externo (TENEV; IVANOV; VITANOV, 2013), relacionaremos o emaranhamento spin-paridade em termos do emaranhamento entre *momentum* angular total e sua componente em um campo magnético auxiliar do íon aprisionado, e caracterizaremos as propriedades de emaranhamento intrínseco dos autoestados do Hamiltoniano simulado (BITTENCOURT; BERNARDINI; BLASONE, 2016). Uma vez que os autoestados forem calculados com a metodologia deduzida para um Hamiltoniano de Dirac geral, a dinâmica de um estado inicial arbitrário qualquer pode ser diretamente recuperada. Neste caso, considerando um estado inicialmente em um nível iônico específico, iremos caracterizar a dinâmica e o comportamento do emaranhamento deste estado. Observamos um padrão típico de oscilação quântica de um sistema de quatro níveis com uma correspondente oscilação de emaranhamento e consideraremos uma relação entre o emaranhamento e a quiralidade do estado. Incluiremos nesta descrição, através do formalismo de soma sob operadores de Kraus, efeitos de ruídos globais e locais nos correspondentes estados de biespinores modelados para estados de dois bits quânticos (YU; EBERLY, 2003; YU; EBERLY, 2004, 2004), associados com flutuações aleatórias dos campos externos da dinâmica, e estudaremos como estes ruídos clássicos influenciam o emaranhamento de estados maximamente emaranhados no contexto de sua simulação com íons aprisionados (BITTENCOURT; BERNARDINI, 2017a; BITTENCOURT; BERNARDINI, 2017c).

Para o grafeno bicamada, primeiro construiremos o mapa entre o Hamiltoniano do modelo *tight-binding* para o material em sua configuração mais estável, o empilhamento AB (Bernal) (MCCANN; KOSHINO, 2013), e um Hamiltoniano de Dirac modificado, incluindo termos de potenciais externos tensorial e pseudo-vetorial. Para este sistema identificamos os graus de liberdade associados à estrutura $SU(2) \otimes SU(2)$ como rede e camada. Através da relação com as soluções da equação de Dirac estudaremos o emaranhamento entre rede e camada dos autoestados do Hamiltoniano *tight-binding* que é altamente concentrado ao redor dos pontos de Dirac (BITTENCOURT; BERNARDINI, 2017b), que correspondem às extremidades da primeira zona de Brillouin. Observamos que as linhas de emaranhamento constante (em função do quasi-*momentum* dos estados de uma partícula do material)

possuem a mesma simetria das linhas de energia constante e a mesma distorção trigonal resultante do acoplamento entre camadas. Assim como no caso dos íons aprisionados, o formalismo será utilizado para descrever a dinâmica de um estado inicial arbitrário e estudaremos os efeitos de um ruído não-Markoviano (YU, 2010), associados à processos de Ornstein-Uhlenbeck (KUBO; TODA; HASHITSUME, 1991), de modo a investigar como os efeitos de memória do ruído afetam as propriedades de emaranhamento rede-camada das excitações do grafeno (BITTENCOURT; BLASONE; BERNARDINI, 2018). Neste caso concluímos que, em geral, quanto mais intensos os efeitos de memória, ou quanto mais não-Markoviano o ruído, por mais tempo as características iniciais do estado são preservadas.

Se por um lado o tema abordado nesta tese se encontra na interface entre a mecânica quântica relativística e a teoria da informação, por outro lado a relação entre as correlações intrínsecas dos biespinores e correlações em sistemas de baixa energia torna interessante, mesmo do ponto de vista aplicado, a investigação da estrutura composta da equação de Dirac. Em particular, o emaranhamento tem sido cada vez mais estudado em cenários de matéria condensada (LAFLORENCIE, 2016), incluindo em sistemas de grafeno onde, por exemplo, o emaranhamento foi contextualizado para a implementação de portas quânticas entre pontos quânticos e um qubit móvel (CORDOURIER-MARURI et al., 2014), e em investigações relacionadas às propriedades topológicas do material (LI; HALDANE, 2008; DOUÇOT et al., 2008; LÄUCHLI et al., 2010).

A descrição geral apresentada nesta tese pode ser estendida em diversas direções, tanto no sentido formal, considerando por exemplo efeitos de potenciais dependentes da posição no emaranhamento spin-paridade, e considerando cenários de *boosts* mais gerais, quanto para perspectivas aplicadas. Neste último caso, a descrição apresentada aqui é o passo inicial para uma descrição mais ampla do emaranhamento em sistemas de grafeno através da relação com a dinâmica de Dirac, visando a possibilidade futura de manipulação destas propriedades de correlação do material para, por exemplo, implementar portas quânticas entre os qubits rede e camada do grafeno.

Esta tese é estruturada em 4 capítulos, os dois primeiro devotados à introdução geral dos conceitos utilizados na tese e à descrição do emaranhamento spin-paridade, e os dois últimos descrevendo a tradução do emaranhamento spin-paridade para os dois sistemas tipo Dirac considerados.

No capítulo 2 descreveremos introdutoriamente a mecânica quântica da equação de Dirac para partícula livre. Discutiremos as propriedades de covariância da equação e introduziremos os biespinores de Dirac do ponto de vista das representações irredutíveis do grupo de Poincaré. Também neste capítulo introduziremos os conceitos de helicidade e quiralidade.

No capítulo 3 apresentaremos a forma tensorial da equação de Dirac e estudaremos,

de modo geral, as correlações entre spin e paridade intrínseca. Neste capítulo apresentaremos um exemplo ilustrativo, o espalhamento de uma onda plana, solução da equação de Dirac, por uma barreira de potencial constante (BITTENCOURT S. S. MIZRAHI, 2015), e introduziremos os potenciais externos na dinâmica de Dirac. Deduziremos o método para a obtenção dos autoestados do Hamiltoniano de Dirac modificado, incluindo potenciais externos constantes, que será amplamente utilizado nos capítulos subsequente, e descreveremos, de uma perspectiva geral, as propriedades correlacionais destes autoestados. Também neste capítulo construiremos estados mistos de biespinores e estudaremos a característica de não-localidade das correlações spin-paridade, nestes estados e a influência de transformações CP nestas correlações. O último tópico abordado neste capítulo é o cenário de *boost*, no qual descreveremos os efeitos desta transformação relativística no emaranhamento codificado em estados de duas partículas biespinoriais.

No capítulo 4 descreveremos como o emaranhamento spin-paridade é traduzido ao sistema de íon aprisionado utilizado na simulação do Hamiltoniano de Dirac incluindo acoplamento não minimal. Após uma breve introdução ilustrativa sobre a dinâmica do íon aprisionado e a simulação da equação de Dirac livre, partindo do protocolo de simulação, traçaremos a relação entre emaranhamento spin-paridade e emaranhamento entre *momentum* angular total e sua projeção na direção de um campo magnético auxiliar. Iremos recuperar a dinâmica de um estado arbitrário e estudar a evolução temporal do emaranhamento neste estado e consideraremos, na última seção do capítulo, os efeitos de ruídos locais e globais em estados maximamente emaranhados.

O capítulo 5 é dedicado a relação entre o grafeno bicamada e a equação de Dirac. Apresentaremos primeiro, de modo ilustrativo, a relação entre o grafeno monocamada e a equação de Dirac com termo de massa nula. Em seguida considerando o modelo *tight-binding* para o grafeno bicamada iremos construir o mapa para um Hamiltoniano de Dirac modificado e descreveremos as propriedades de emaranhamento rede-camada dos autoestados do grafeno. Utilizando uma metodologia similar à do capítulo 4, descreveremos a dinâmica de um estado arbitrário e consideraremos os efeitos de um ruído não-Markoviano na evolução temporal de estados maximamente emaranhados entre rede e camada.

Finalmente, no capítulo 6, apresentaremos nossas conclusões e futuras perspectivas.

2 A mecânica quântica da equação de Dirac

A equação de Dirac é uma equação de onda covariante que incorpora naturalmente o spin em sua dinâmica (GREINER, 2000; ITZYKSON; ZUBER, 1980; BERNARDINI, 2017). A formulação da mecânica quântica relativística segundo a equação de Dirac teve diversos sucessos, como por exemplo a reprodução dos níveis de energia do átomo de Hidrogênio incluindo as correções finas e hiperfinas (SAKURAI, 1967), e serviu como uma importante ponte para a formulação da teoria quântica de campos (ITZYKSON; ZUBER, 1980; WEINBERG, 1995). A equação de Dirac prevê a existência de estados com energia negativa e alguns efeitos associados, como o paradoxo de Klein, que só são corretamente interpretados no contexto da segunda quantização através da associação de tais estados com as antipartículas (GREINER, 2000; ITZYKSON; ZUBER, 1980; BERNARDINI, 2017). Além dos sistemas de altas energias, a equação de Dirac, conforme abordaremos com mais detalhes no capítulo 5, também descreve efetivamente o comportamento de excitações de baixas energias do grafeno, gerando propriedades eletrônicas únicas no material (CASTRO-NETO et al., 2009).

Neste capítulo apresentaremos uma breve revisão da mecânica quântica relativística segundo a equação de Dirac. Deduziremos a equação de quatro componentes e apresentaremos de maneira resumida suas propriedades matemáticas e as propriedades das matrizes de Dirac. Discutiremos a estrutura covariante da equação, construiremos e caracterizaremos, ao menos de maneira introdutória, suas soluções, os bispinores de Dirac. Apresentaremos também os conceitos de helicidade e quiralidade.

2.1 A equação de Dirac

Inicialmente a equação de Dirac foi proposta como uma equação de onda invariante diante de transformações de Lorentz (GREINER, 2000; ITZYKSON; ZUBER, 1980; BERNARDINI, 2017) visando descrever férmions carregados como elétrons e prótons (DIRAC, 1920; DIRAC, 1928). Da forma geral da equação de Schrödinger

$$\hat{H} \psi(\mathbf{x}, t) = i \frac{\partial \psi}{\partial t} = E \psi(\mathbf{x}, t), \quad (2.1)$$

procura-se deduzir uma equação de onda para uma partícula livre relativística que produza a relação de dispersão (onde no resto desta seção adotaremos unidades naturais $\hbar = c = 1$)

$$E^2 = p^2 + m^2, \quad (2.2)$$

onde m é a massa da partícula. Para tanto, basta considerar a ação de \hat{H}^2 na função de onda

$$\hat{H}^2 \psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = E^2 \psi(\mathbf{x}, t) = (p^2 + m^2)\psi(\mathbf{x}, t), \quad (2.3)$$

que, uma vez que o operador *momentum* é dado por $\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla$ tal que $\hat{\mathbf{p}}^2 \psi(\mathbf{x}, t) = -\nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) = p^2 \psi(\mathbf{x}, t)$ e, portanto

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + m^2 \right) \psi(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (2.4)$$

que é a equação de Klein-Gordon. Esta equação apresenta as propriedades de covariância desejadas, entretanto a possível densidade de probabilidade ρ obtida com suas soluções

$$\rho = \frac{i}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \quad (2.5)$$

não é positiva definida, ou seja, pode assumir valores negativos incompatíveis com sua interpretação como densidade de probabilidade (ITZYKSON; ZUBER, 1980). A não-positividade de (2.5) está associada ao fato de (2.4) ser de segunda ordem, de modo que ψ e $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ possuem valores arbitrários, positivos ou negativos, definidos pelas condições iniciais do problema. Além disso, a equação de Klein-Gordon possui soluções de energia negativa, motivando a procura de uma outra equação de onda que fosse covariante, reproduzisse a relação de energia-*momentum* relativística para a partícula livre e que possuísse uma densidade de probabilidade positiva definida.

Uma das maneiras de contornar a não positividade de (2.5) é definir uma equação de onda que seja de primeira ordem no tempo (GREINER, 2000; ITZYKSON; ZUBER, 1980). Para que a covariância seja mantida espera-se que a equação seja de primeira ordem na derivada espacial também, de modo a ser da forma

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\hat{\alpha}_x \hat{p}_x + \hat{\alpha}_y \hat{p}_y + \hat{\alpha}_z \hat{p}_z + \hat{\beta} m) \psi, \quad (2.6)$$

onde os coeficientes $\hat{\alpha}_i$ e $\hat{\beta}$ não podem ser números, uma vez que a equação não seria invariante diante de rotações espaciais neste caso. Supondo que tais coeficientes sejam matrizes, podemos a partir de (2.6) reproduzir a relação de dispersão energia-*momentum* (2.2) impondo a compatibilidade com a equação de Klein-Gordon. Seguindo de maneira similar a dedução de (2.4) obtêm-se

$$-\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \left(\sum_{i,j=x,y,z} \hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_j \hat{p}_i \hat{p}_j + \sum_{i=x,y,z} (\hat{\alpha}_i \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_i) \hat{p}_i m + \hat{\beta}^2 m^2 \right), \quad (2.7)$$

e, para que a equação acima seja formalmente equivalente à equação de Klein-Gordon, é necessário impor as seguintes relações

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_i^2 = \hat{\beta}^2 &= \hat{I}_4, \\ \hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_j + \hat{\alpha}_j \hat{\alpha}_i &= \{\hat{\alpha}_i, \hat{\alpha}_j\} = 2 \delta_{i,j} \hat{I}_4, \\ \hat{\alpha}_i \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_i &= \{\hat{\alpha}_i, \hat{\beta}\} = 0. \end{aligned} \quad (2.8)$$

A álgebra anticomutante (2.8) gera uma série de propriedades que as matrizes $\hat{\alpha}_i$ e $\hat{\beta}$, chamadas de matrizes de Dirac, satisfazem. Em particular, como $\hat{\beta}^2 = \hat{\alpha}_i^2 = \hat{I}_4$, as matrizes possuem autovalores iguais a $+1$ ou -1 e, além disso, das relações de anticomutação temos que o traço destas matrizes é nulo. Concluimos portanto que o número de autovalores positivos deve ser igual ao número de autovalores negativos, logo, a dimensionalidade n das matrizes deve ser par. A menor dimensionalidade possível para as matrizes de Dirac é $n = 2$ e acomoda um conjunto de, no máximo, três matrizes anticomutantes, e, para descrever a equação de Dirac em 3 dimensões espaciais, é necessário considerar para dimensionalidade mínima $n = 4$. Finalmente a equação de Dirac é escrita

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = (\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\beta} m) \psi(\mathbf{x}, t) = (-i \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \nabla + \hat{\beta} m) \psi(\mathbf{x}, t), \quad (2.9)$$

uma equação de 4 componentes acoplada cujas soluções $\psi(\mathbf{x}, t)$ são funções de onda de 4 componentes

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \begin{bmatrix} \psi_1(\mathbf{x}, t) \\ \psi_2(\mathbf{x}, t) \\ \psi_3(\mathbf{x}, t) \\ \psi_4(\mathbf{x}, t) \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

os chamados espinores regulares. Para que (2.9) seja corretamente interpretada no escopo da mecânica quântica, ou seja, para que o operador Hamiltoniano

$$\hat{H}_D = \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\beta} m \quad (2.11)$$

seja hermitiano, as matrizes de Dirac devem ser hermitianas, isto é $\boldsymbol{\alpha}_i^\dagger = \hat{\boldsymbol{\alpha}}$ e $\hat{\beta}^\dagger = \hat{\beta}$.

Diferente da equação de Klein-Gordon, através da equação de Dirac prevê uma densidade de probabilidade positiva definida. Considerando o Hermitiano conjugado de (2.9)

$$-i \frac{\partial}{\partial t} \psi^\dagger(\mathbf{x}, t) = i (\nabla \psi^\dagger(\mathbf{x}, t)) \cdot \hat{\boldsymbol{\alpha}} + \psi^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\beta} m, \quad (2.12)$$

e multiplicando (2.9) à esquerda por $\psi^\dagger(\mathbf{x}, t)$ e (2.12) à direita por $\psi(\mathbf{x}, t)$, obtém-se

$$\begin{aligned} i \psi^\dagger(\mathbf{x}, t) \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) \right) &= -i \psi^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot (\nabla \psi(\mathbf{x}, t)) + \hat{\beta} m \psi^\dagger(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t), \\ -i \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi^\dagger(\mathbf{x}, t) \right) \psi(\mathbf{x}, t) &= i (\nabla \psi^\dagger(\mathbf{x}, t)) \cdot \hat{\boldsymbol{\alpha}} \psi(\mathbf{x}, t) + \psi^\dagger(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t) \hat{\beta} m, \end{aligned}$$

e, subtraindo-as, deduz-se a equação da continuidade

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^\dagger(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t)) = -\nabla \cdot (\psi^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\boldsymbol{\alpha}} \psi(\mathbf{x}, t)) \quad (2.13)$$

na qual a densidade de probabilidade é identificada como $\psi^\dagger(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t)$, que é uma quantidade positiva definida que, conforme será mostrado adiante, é a componente temporal de um quadrivetor.

Para discutir as propriedades de covariância da equação de Dirac apresentaremos a seguir as propriedades das matrizes $\hat{\alpha}_i$ e $\hat{\beta}$ advindas das relações de anticomutação (2.8).

2.1.1 As matrizes de Dirac

As relações de anticomutação impostas sob as matrizes de Dirac (2.8) geram uma série de propriedades algébricas úteis que serão utilizadas amplamente ao longo desta tese.

Definimos as matrizes (para $i = x, y, z$)

$$\hat{\gamma}^0 = \hat{\beta}, \quad \hat{\gamma}_i = \hat{\beta}\hat{\alpha}_i, \quad (2.14)$$

que formam o conjunto $\hat{\gamma}^\mu$ ($\mu = 0, 1, 2, 3$) e satisfazem a relação de anticomutação obtida de (2.8)

$$\{\hat{\gamma}^\mu, \hat{\gamma}^\nu\} = 2g^{\mu\nu}\hat{I}_4, \quad (2.15)$$

onde $g^{\mu\nu} = \text{diag}\{1, -1, -1, -1\}$. Notemos que, devido às relações (2.8) as matrizes γ satisfazem

$$(\hat{\gamma}^0)^\dagger = \hat{\gamma}^0, \quad (\hat{\gamma}^i)^\dagger = -\hat{\gamma}^i, \quad (2.16)$$

isto é $\hat{\gamma}^0$ é hermitiana, enquanto as $\hat{\gamma}^i$ são anti-hermitianas. Devido a relação de anticomutação (2.15), qualquer produto arbitrário de matrizes γ pode ser sempre reduzido a um produto contendo 4 ou menos matrizes, são 16 produtos de matrizes não equivalentes, indicados por $\hat{\Gamma}^a$ com $a = 1, \dots, 16$, dados por:

- $\hat{\Gamma}^1 = \hat{I}_4$ (matriz Identidade);
- $\hat{\Gamma}^2, \dots, \hat{\Gamma}^5 = \hat{\gamma}^\mu$;
- $\hat{\Gamma}^6, \dots, \hat{\Gamma}^{11} = \hat{\sigma}^{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\hat{\gamma}^\mu, \hat{\gamma}^\nu] = i\hat{\gamma}^\mu\hat{\gamma}^\nu$, com $\nu \neq \mu$ (Produto de duas matrizes γ);
- $\hat{\Gamma}^{12} = \hat{\gamma}^5 = i\hat{\gamma}^0\hat{\gamma}^1\hat{\gamma}^2\hat{\gamma}^3$ (Produto das 4 matrizes γ , chamada de matriz quiral);
- $\hat{\Gamma}^{13}, \dots, \hat{\Gamma}^{16} = \gamma^\mu\gamma^5$ (Produto de três matrizes γ).

Além disso, da álgebra anticomutativa (2.15) essas 16 matrizes satisfazem as seguintes propriedades

- $(\hat{\Gamma}^a)^2 = s_a\hat{I}_4$ com $s_a = \pm 1$;
- Para cada $\hat{\Gamma}^a$ com $a > 1$, existe ao menos uma outra matriz $\hat{\Gamma}^b$ tal que $\{\hat{\Gamma}^a, \hat{\Gamma}^b\} = 0$;
- Para $a > 1$, $\text{Tr}[\hat{\Gamma}^a] = 0$;
- Dados $\hat{\Gamma}^a$ e $\hat{\Gamma}^b$, com $a \neq b$ existe uma $\hat{\Gamma}^c \neq \hat{\Gamma}^1$ tal que $\hat{\Gamma}^a\hat{\Gamma}^b = \alpha\hat{\Gamma}^c$ com $\alpha = \pm i$ ou $\alpha = \pm 1$;
- $\text{Tr}[\hat{\Gamma}^a\hat{\Gamma}^b] = s_a\delta_{ab}$;

- As matrizes $\hat{\Gamma}^a$ com $a = 1, \dots, 16$ são linearmente independentes. Ou seja: $\sum_{a=1}^{16} c^a \hat{\Gamma}^a = 0 \implies c^a = 0$.

Da independência linear e do fato que são 16 as matrizes $\hat{\Gamma}$, segue que o conjunto $\{\hat{\Gamma}\}$ forma uma base para o espaço de matrizes 4×4 , portanto, qualquer matriz \hat{X} desta dimensionalidade pode ser escrita como uma combinação linear das matrizes $\hat{\Gamma}$ como

$$\hat{X} = \sum_{a=1}^{16} x_a \hat{\Gamma}^a, \quad \text{com } x_a = \frac{s_a}{4} \text{Tr}[X \hat{\Gamma}^a]. \quad (2.17)$$

As relações (2.8,2.16) são satisfeitas por vários conjuntos distintos de matrizes 4×4 . Uma representação em particular, que será utilizada nesta tese, é a representação de Dirac na qual as matrizes $\hat{\alpha}_i$ e $\hat{\beta}$ são dadas por

$$\hat{\beta} = \begin{bmatrix} \hat{I}_2 & 0 \\ 0 & -\hat{I}_2 \end{bmatrix}, \quad \hat{\alpha}_i = \begin{bmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ \hat{\sigma}_i & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.18)$$

com $\hat{\sigma}_i$ as matrizes de Pauli. Nesta representação a matriz quirial $\hat{\gamma}^5$ é dada por

$$\hat{\gamma}^5 = \begin{bmatrix} 0 & \hat{I}_2 \\ \hat{I}_2 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.19)$$

Os diferentes conjuntos de matrizes que satisfazem (2.8,2.16), ou seja, as diferentes representações das matrizes de Dirac, são relacionadas através de transformações unitárias, isto é, dadas duas representações $\hat{\gamma}^\mu$ e $\hat{\gamma}^\mu$, existe uma transformação \hat{U} tal que

$$\hat{\gamma}^\mu = \hat{U}^\dagger \hat{\gamma}^\mu \hat{U}, \quad (2.20)$$

com $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$. A escolha da representação com a qual trabalhar segue, portanto, o critério de conveniência.

Uma vez apresentadas as propriedades básicas das matrizes de Dirac, focamos nossa atenção agora nas propriedades de covariância da equação de Dirac.

2.1.2 Transformações de Lorentz

Um dos motivadores na dedução da equação de Dirac foi a procura de uma equação de onda que seja compatível com a relatividade restrita no sentido de possuir a mesma forma em todos os referenciais inerciais. Antes de estudar as propriedades de covariância da equação de Dirac, isto é a invariância da equação diante transformações que relacionam diferentes referenciais inerciais, recordemos brevemente algumas definições e propriedades de quadrivetores, tensores e das transformações de Lorentz.

Uma transformação de Lorentz é uma transformação linear e homogênea que relaciona as coordenadas espaço-temporais de um referencial \mathcal{S} , dadas em termos do

quadrivetor x^μ , com as coordenadas x'^μ relativas a um segundo referencial inercial \mathcal{S}' através de (RINDLER, 1985)

$$x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu. \quad (2.21)$$

A imposição da invariância da velocidade da Luz tem como consequência a invariância do chamado tempo próprio (RINDLER, 1985)

$$ds^2 = dx^\mu dx_\mu = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = dt^2 - d\mathbf{x}^2, \quad (2.22)$$

e é suposto que as transformações de Lorentz não alteram esta quantidade. Na equação acima $g_{\mu\nu}$ é o tensor métrico que descreve a geometria do espaço-tempo, no caso da relatividade restrita, o espaço tempo de Minkowski para o qual a matriz associada ao tensor métrico é dada por $g = \text{diag}\{1, -1, -1, -1\}$. Para que (2.22) seja invariante diante de transformações do tipo (2.21), as matrizes Λ devem satisfazer

$$g_{\mu\nu} \Lambda^\mu_\rho \Lambda^\nu_\xi = g_{\rho\xi} \implies \Lambda^T g \Lambda. \quad (2.23)$$

As transformações de Lorentz formam um grupo, chamado grupo de Lorentz \mathcal{L} , que é composto de 4 conjuntos classificados de acordo com as propriedades matemáticas impostas por (2.23) (FONDA; GHIRARDI, 1970; TUNG, 1993). Analisando o determinante de (2.23), conclui-se que

$$(\det[\Lambda])^2 = 1 \implies \det[\Lambda] = \pm 1, \quad (2.24)$$

enquanto da componente $\rho = \xi = 0$ de (2.23)

$$(\Lambda^0_0)^2 \geq 1 \implies \Lambda^0_0 \geq 1 \quad \text{ou} \quad \Lambda^0_0 \leq -1. \quad (2.25)$$

Temos então

- Transformações próprias \mathcal{L}_+ com determinante positivo;
- Transformações impróprias \mathcal{L}_- com determinante negativo;
- Transformações ortócronas \mathcal{L}^\uparrow com $\Lambda^0_0 \geq 1$;
- Transformações anticronas \mathcal{L}^\downarrow com $\Lambda^0_0 \leq -1$.

Das combinações possíveis destes conjuntos apenas o conjunto de transformações próprias e ortócronas \mathcal{L}^\uparrow_+ forma um grupo, chamado grupo de Lorentz restrito. Este grupo inclui as rotações espaciais Λ_{Rot} dadas por

$$\begin{aligned} (\Lambda_{Rot})^0_0 &= 1, & (\Lambda_{Rot})^0_i &= (\Lambda_{Rot})^i_0 = 0, \\ (\Lambda_{Rot})^i_j &= \cos(\theta) \delta^i_j + (1 - \cos(\theta)) n^i n^j + \sin(\theta) \epsilon^{ijk} n^k, \end{aligned} \quad (2.26)$$

com $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ o vetor que descreve o eixo de rotação. Outra importante transformação incluída neste conjunto é o *boost* Λ_{boost} que relaciona dois referenciais que se movem com uma velocidade relativa constante, dado por

$$\begin{aligned} (\Lambda_{boost})^0_0 &= \cosh(\omega), & (\Lambda_{boost})^i_j &= \delta^i_j + (\cosh(\omega) - 1)n^i n^j, \\ (\Lambda_{boost})^0_i &= (\Lambda_{boost})^i_0 = \sinh(\omega)n^i, \end{aligned} \quad (2.27)$$

onde \mathbf{n} é o vetor associado à direção relativa de movimento entre os referenciais e ω é a chamada rapidez dada em termos da velocidade relativa v entre os referenciais por $\tanh(\omega) = v$.

Um exemplo importante de transformação discreta não inclusa no grupo \mathcal{L}_+^\uparrow é a reflexão espacial (ou paridade) $\Lambda_{Paridade}$

$$\Lambda_{Paridade} = \text{diag}\{1, -1, -1, -1\} \in \mathcal{L}_+^\downarrow. \quad (2.28)$$

Com relação às transformações de Lorentz, podemos distinguir diferentes objetos de acordo com suas leis de transformação (FONDA; GHIRARDI, 1970; RINDLER, 1985). Objetos V^μ que se transformam como as coordenadas espaciais

$$V^\mu \rightarrow V'^\mu = \Lambda^\mu_\nu V^\nu,$$

são chamados de vetores contravariantes. Vetores covariantes, por outro lado, são objetos indicados com índices baixos V_μ e se transformam como

$$V_\mu \rightarrow V'_\mu = (\Lambda^{-1})^\nu_\mu V_\nu. \quad (2.29)$$

Estes objetos estão associados ao formalismo da geometria diferencial e, neste contexto, são chamados quadri vetores duais que formam o espaço vetorial dual composto por funções lineares entre quadri vetores e números reais. O tensor métrico liga vetores contravariantes e covariantes

$$V^\mu = g^{\mu\nu} V_\nu, \quad V_\nu = g_{\mu\nu} V^\mu, \quad (2.30)$$

onde o tensor métrico contravariante é definido através da relação $g_{\mu\nu} g^{\nu\rho} = \delta_\mu^\rho$. Um exemplo de vetor covariante é o gradiente $\partial_\mu = \partial/\partial x^\mu$. O produto escalar entre dois quadri vetores V e W é definido como

$$V \cdot W = g_{\mu\nu} V^\mu W^\nu = V^\mu W_\mu = V^0 W^0 - \mathbf{V} \cdot \mathbf{W}, \quad (2.31)$$

e, assim como o tempo próprio (2.22), é mantido invariante diante de transformações de Lorentz. Tensores são objetos associados à composição através do produto tensorial de vetores covariantes e contravariantes e transformam-se como produtos destes objetos. O número de índices de um tensor é chamado de ordem e a quantidade de índices contravariantes/covariantes indica o tipo do tensor, por exemplo um vetor contravariante é um tensor de ordem 1 do tipo (1, 0). O tensor eletromagnético $F^{\mu\nu}$ é um exemplo de tensor de ordem 2 do tipo (2, 0) que se transforma como

$$F^{\mu\nu} \rightarrow F'^{\mu\nu} = \Lambda^\mu_\rho \Lambda^\nu_\sigma F^{\rho\sigma}. \quad (2.32)$$

2.1.3 Covariância da equação de Dirac

Com estas considerações em mente, podemos agora discutir as propriedades da equação de Dirac diante de transformações de Lorentz. Para tanto, escrevemos a equação de Dirac em sua *forma covariante*, dada em termos de produtos de quadri-vetores. Lembrando da definição das matrizes γ (2.14), a equação (2.9) é escrita como

$$i\hat{\gamma}^0 \frac{\partial \psi}{\partial t} = (-i\hat{\gamma} \cdot \nabla + m\hat{I}_4)\psi, \quad (2.33)$$

que pode ser imediatamente dada em termos da derivada covariante ∂_μ como

$$(i\hat{\gamma}^\mu \partial_\mu - m)\psi(x^\mu) = 0. \quad (2.34)$$

A covariância da equação de Dirac possui dois significados (GREINER, 2000; BERNARDINI, 2017). Primeiro deve haver uma lei que permita a obtenção da função de onda $\psi'(x'^\mu)$, relativa a um referencial \mathcal{S}' , a partir da função de onda $\psi(x^\mu)$, relativa a um referencial \mathcal{S} . O segundo significado de covariância está relacionado ao próprio princípio da relatividade, segundo o qual as leis físicas devem ser as mesmas em todos os referenciais inerciais. Então, a função de onda $\psi'(x'^\mu)$ deve ser solução da equação de Dirac com relação ao seu referencial, isto é, deve satisfazer a equação

$$(i(\hat{\gamma}')^\mu \partial'_\mu - m)\psi'(x'^\mu) = 0, \quad (2.35)$$

e, para que a física descrita pela equação com relação ao referencial \mathcal{S}' seja a mesma física descrita no referencial \mathcal{S} , as matrizes γ' devem satisfazer as mesmas relações de anticomutação e possuir as mesmas propriedades algébricas das matrizes γ . Como as diferentes representações da equação de Dirac são relacionadas através de transformações unitárias, e como transformações unitárias não mudam o conteúdo físico das equações de onda no contexto da mecânica quântica, podemos sem perda de generalidade usar o mesmo conjunto γ^μ para descrever a equação de Dirac em todos os referenciais inerciais.

A relação entre ψ' e ψ é dada em termos de um operador $\hat{S}(\Lambda)$, que depende da transformação Λ que representa o efeito da transformação de Lorentz em questão no espaço das soluções da equação de Dirac. Os objetos ψ que se transformam conforme estes operadores formam uma representação do grupo de Lorentz (FONDA; GHIRARDI, 1970; TUNG, 1993; WEINBERG, 1995). Devido à linearidade da equação de Dirac e das transformações de Lorentz, \hat{S} deve ser linear, e como a relação entre os referenciais \mathcal{S} e \mathcal{S}' deve ser possível, tal transformação deve também ser invertível, ou seja

$$\psi'(x'^\mu) = \hat{S}(\Lambda)\psi(x^\mu) \quad \text{e} \quad \psi(x^\mu) = \hat{S}^{-1}(\Lambda)\psi'(x'^\mu). \quad (2.36)$$

Mais adiante iremos discutir com mais detalhes e apresentar fórmulas explícitas para o operador \hat{S} .

Partindo da equação de Dirac no referencial \mathcal{S} :

$$(i\hat{\gamma}^\mu\partial_\mu - m)\hat{S}^{-1}(\Lambda)\psi'(x'^\mu) = 0 \implies (i\hat{S}(\Lambda)\hat{\gamma}^\mu\hat{S}^{-1}(\Lambda)\partial_\mu - m)\psi'(x'^\mu) = 0,$$

onde a equação foi multiplicada pela direita por $\hat{S}(\Lambda)$. Tendo em vista que $\partial_\mu = \Lambda_\mu^\nu\partial'_\nu$, para recuperar (2.35) deve ser imposto que

$$\hat{S}(\Lambda)\hat{\gamma}^\mu\hat{S}^{-1}(\Lambda) = \Lambda_\mu^\nu\gamma^\nu, \quad (2.37)$$

de modo que

$$(i\hat{S}(\Lambda)\hat{\gamma}^\mu\hat{S}^{-1}(\Lambda)\partial_\mu - m)\psi'(x'^\mu) = 0 \implies (i\gamma^\nu\Lambda_\nu^\mu\partial_\mu - m)\psi'(x'^\mu) = 0 \quad (2.38)$$

e, então, como $\Lambda_\nu^\mu\partial_\mu = \partial'_\nu$

$$(i\gamma^\nu\partial'_\nu - m)\psi'(x'^\mu) = 0, \quad (2.39)$$

ou seja, a equação de Dirac é covariante no sentido de possuir a mesma forma em todos os referenciais conectados por transformações de Lorentz.

Além de ser covariante, a densidade de probabilidade ϱ e a densidade de corrente conservada \mathbf{j} definidas através da equação de Dirac (2.13)

$$\varrho = \psi^\dagger\psi, \quad \mathbf{j} = \psi^\dagger\hat{\boldsymbol{\alpha}}\psi, \quad (2.40)$$

transformam-se como componentes de um quadrivetor. Tal fato fica claro quando tais quantidades são escritas em termos do espinor adjunto $\bar{\psi}$ definido por

$$\bar{\psi} = \psi^\dagger\hat{\gamma}^0 \quad (2.41)$$

transformando-se como $\bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}(\Lambda)$, de modo que ϱ e \mathbf{j} são dados por

$$\varrho = \bar{\psi}\hat{\gamma}^0\psi \quad \mathbf{j} = \bar{\psi}\hat{\boldsymbol{\gamma}}\psi, \quad (2.42)$$

compondo o objeto $j^\mu = \{\varrho, \mathbf{j}\}$ que é um quadrivetor diante de transformações de Lorentz. Em termos deste quadrivetor, a equação de continuidade (2.13) é escrita de maneira compacta como

$$\partial_\mu j^\mu = 0. \quad (2.43)$$

Com o espinor adjunto é possível formar bilineares construídos com dois espinores $\psi_a(x^\mu)$ e $\psi_b(x^\mu)$ que possuem leis de transformação específicas diante de transformações de Lorentz. São eles, juntamente com suas leis de transformação:

- Escalar

$$S(x) = \bar{\psi}_b(x)\psi_a(x) \longrightarrow S'(x') = \bar{\psi}'_b(x')\psi'_a(x') = \bar{\psi}_b(x)\psi_a(x) = S(x);$$

- Pseudo-escalar

$$S_P(x) = \bar{\psi}_b(x) \hat{\gamma}^5 \psi_a(x) \longrightarrow S'_P(x') = \bar{\psi}'_b(x') \hat{\gamma}^5 \psi'_a(x') = \bar{\psi}_b(x) \hat{\gamma}^5 \psi_a(x) = S_P(x);$$

- Vetor

$$\begin{aligned} V^\mu(x) = \bar{\psi}_b(x) \hat{\gamma}^\mu \psi_a(x) \longrightarrow V^{\mu'}(x') = \bar{\psi}'_b(x') \hat{\gamma}^\mu \psi'_a(x') &= \Lambda^\mu{}_{\nu} \bar{\psi}_b(x) \hat{\gamma}^\nu \psi_a(x) \\ &= \Lambda^\mu{}_{\nu} V^\nu(x); \end{aligned}$$

- Pseudo-vetor

$$\begin{aligned} A^\mu(x) = \bar{\psi}_b(x) \hat{\gamma}^\mu \hat{\gamma}^5 \psi_a(x) \longrightarrow A^{\mu'}(x') &= \bar{\psi}'_b(x') \hat{\gamma}^\mu \hat{\gamma}^5 \psi'_a(x') \\ &= \Lambda^\mu{}_{\nu} \bar{\psi}_b(x) \hat{\gamma}^\nu \hat{\gamma}^5 \psi_a(x) = \Lambda^\mu{}_{\nu} A^\nu(x); \end{aligned}$$

- Tensor (antissimétrico)

$$\begin{aligned} T^{\mu\nu}(x) = \bar{\psi}_b(x) \hat{\sigma}^{\mu\nu} \psi_a(x) \longrightarrow T'^{\mu\nu}(x') &= \bar{\psi}'_b(x') \hat{\sigma}^{\mu\nu} \psi'_a(x') \\ &= \Lambda^\mu{}_{\rho} \Lambda^\nu{}_{\kappa} \bar{\psi}_b(x) \hat{\sigma}^{\rho\kappa} \psi_a(x) = \Lambda^\mu{}_{\rho} \Lambda^\nu{}_{\kappa} T^{\rho\kappa}(x); \end{aligned}$$

2.2 Propriedades e caracterização dos biespinores de Dirac

As soluções da equação de Dirac são espinores de Dirac e pertencem a uma classe de objetos definidos com base em considerações advindas da teoria de grupos (FONDA; GHIRARDI, 1970; TUNG, 1993; WEINBERG, 1995). Discutiremos agora de maneira introdutória, as representações de grupo de Lorentz de modo a fornecer uma caracterização mais completa dos espinores de Dirac.

2.2.1 Espinores e as representações do grupo de Lorentz

Na discussão da covariância da equação de Dirac, foi introduzido o operador $\hat{S}(\Lambda)$, que descreve a ação de uma transformação de Lorentz no espaço das soluções da equação de Dirac. De maneira geral, uma representação do grupo de Lorentz é formada por objetos Ψ que se transformam como (TUNG, 1993; FONDA; GHIRARDI, 1970)

$$\Psi \rightarrow \Psi' = \hat{D}(\Lambda)\Psi, \quad (2.44)$$

onde $\hat{D}(\Lambda)$ é o operador que representa a ação da transformação de Lorentz Λ no espaço dos objetos Ψ . Para uma transformação infinitesimal

$$\hat{D}(1 + \epsilon\omega) = \hat{I}_4 + \frac{i}{2} \epsilon \omega_{\mu\nu} \hat{M}^{\mu\nu}, \quad (2.45)$$

onde ϵ é um infinitesimal, ω são os parâmetros da transformação e $\hat{M}^{\mu\nu} = -\hat{M}^{\nu\mu}$ são os geradores da transformação. Os operadores $\hat{\mathcal{D}}$ devem satisfazer a regra de composição de grupos

$$\hat{\mathcal{D}}(\Lambda_1)\hat{\mathcal{D}}(\Lambda_2) = \hat{\mathcal{D}}(\Lambda_1\Lambda_2), \quad (2.46)$$

de modo que de (2.46) e (2.45) os geradores devem satisfazer as relações de comutação

$$[\hat{M}^{\mu\nu}, \hat{M}^{\rho\kappa}] = i(\hat{M}^{\mu\rho}g^{\nu\kappa} - \hat{M}^{\nu\rho}g^{\mu\kappa} - \hat{M}^{\mu\kappa}g^{\nu\rho} + \hat{M}^{\nu\kappa}g^{\mu\rho}), \quad (2.47)$$

e a determinação das representações do grupo de Lorentz pode ser resumida (de maneira superficial) à definição dos operadores que satisfazem esta relação de comutação. Se os operadores \hat{M} são unitários, dizemos que a representação por eles definidas é unitária (TUNG, 1993; FONDA; GHIRARDI, 1970).

Para a representação de coordenadas, que é a representação que define as transformações de Lorentz, os geradores são dados por

$$\hat{M}^{\mu\nu} = i(x^\mu\partial^\nu - x^\nu\partial^\mu), \quad (2.48)$$

que podem ser divididos em dois tipos de geradores de transformações: os geradores de rotação

$$\hat{J}_i = \epsilon_{ijk}M^{jk} = -i\epsilon_{ijk}x^j\partial^k, \quad (2.49)$$

que são os operadores de *momentum* angular, e os geradores de *boosts*

$$\hat{K}_k = \delta_{kj}M^{0j}. \quad (2.50)$$

Estes operadores satisfazem as relações

$$[\hat{J}^i, \hat{K}^j] = \epsilon^{ijk}\hat{K}_k, \quad [\hat{J}^i, \hat{J}^j] = [\hat{K}^i, \hat{K}^j] = \epsilon^{ijk}\hat{J}_k, \quad (2.51)$$

das quais conclui-se que os operadores de *momentum* angular formam um grupo apesar de os operadores de *boost* não formarem. É possível combinar os operadores \hat{J} e \hat{K} de modo a formar um novo conjunto de operadores com relações de comutações características de uma álgebra de Lie, tais operadores e a álgebra por eles satisfeita são dados por

$$\hat{L}_j^\pm = \frac{(\hat{J}_j \pm i\hat{K}_j)}{2}, \quad [\hat{L}_i^\pm, \hat{L}_j^\pm] = i\epsilon_{ijk}\hat{L}_k^\pm. \quad (2.52)$$

Ao procurarmos outros conjuntos de operadores que satisfazem (2.52), encontramos dois subconjuntos do grupo $SU(2)$, sendo suas representações em dimensão finita designadas por (j_+, j_-) :

1. Representação $(\frac{1}{2}, 0)$ para a qual

$$\begin{aligned} \hat{L}_i^- &= 0, & \hat{L}_i^+ &= \frac{1}{2}\hat{\sigma}_i, \\ \hat{J}_i &= \frac{1}{2}\hat{\sigma}_i, & \hat{K}_i &= -i\frac{1}{2}\hat{\sigma}_i, \end{aligned} \quad (2.53)$$

com $\hat{\sigma}_i$ ($i = x, y, z$) as matrizes de Pauli. Os objetos de duas componentes ξ que pertencem à esta representação se transformam diante de rotações e *boosts*, respectivamente, como

$$\begin{aligned}\xi &\longrightarrow e^{i\theta \cdot \hat{\mathbf{J}}}\xi = \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \right] \xi, \\ \xi &\longrightarrow e^{i\omega \cdot \hat{\mathbf{K}}}\xi = \left[\cosh\left(\frac{\omega}{2}\right) + \sinh\left(\frac{\omega}{2}\right) \mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \right] \xi.\end{aligned}\quad (2.54)$$

2. Representação $(0, \frac{1}{2})$ para a qual

$$\begin{aligned}\hat{L}_i^+ &= 0, & \hat{L}_i^- &= \frac{1}{2}\hat{\sigma}_i, \\ \hat{J}_i &= \frac{1}{2}\hat{\sigma}_i, & \hat{K}_i &= i\frac{1}{2}\hat{\sigma}_i,\end{aligned}\quad (2.55)$$

Os objetos χ que pertencem à esta representação se transformam diante de rotações e *boosts*, respectivamente, como

$$\begin{aligned}\xi &\longrightarrow e^{i\theta \cdot \hat{\mathbf{J}}}\chi = \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \right] \chi, \\ \xi &\longrightarrow e^{i\omega \cdot \hat{\mathbf{K}}}\chi = \left[\cosh\left(\frac{\omega}{2}\right) - \sinh\left(\frac{\omega}{2}\right) \mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \right] \chi.\end{aligned}\quad (2.56)$$

As representações $(\frac{1}{2}, 0)$ e $(0, \frac{1}{2})$ são chamadas de *representações espinoriais* do grupo de Lorentz, e os objetos ξ e χ são chamados *espinores de Weyl* (FONDA; GHIRARDI, 1970). Ressaltamos que o grupo de Lorentz é não-compacto e, portanto, não possui representações unitárias de dimensão finita (TUNG, 1993; FONDA; GHIRARDI, 1970). Além disso, as representações espinoriais acima são representações irredutíveis do grupo, sendo os espinores de Weyl os blocos fundamentais, do ponto de vista matemático, utilizados para a construção geral das soluções da equação de Dirac, e importantes na descrição de férmions de massa nula (ITZYKSON; ZUBER, 1980; WEINBERG, 1995).

As soluções da equação de Dirac pertencem à representação redutível $(\frac{1}{2}, 0) \oplus (0, \frac{1}{2})$ obtida combinando-se os dois espinores de Weyl ξ e χ , de modo a comporem um objeto de 4 componentes

$$\psi = \begin{bmatrix} \xi \\ \tilde{\chi} \end{bmatrix}, \quad (2.57)$$

onde $\tilde{\chi} = -\hat{\sigma}_y \chi^*$. Sem entrar em muitos detalhes, é necessário combinar as duas representações espinoriais do grupo de Lorentz para descrever as soluções da equação de Dirac devido à reversão espacial (STREATER; WIGHTMAN, 1964; FONDA; GHIRARDI, 1970). Diante desta operação, as representações espinoriais não são invariantes, na realidade uma representação transforma-se na outra, de modo que, para incluir esta operação de simetria na teoria, é necessário combinar ambas para se obter um espaço invariante. Os espinores

construídos como (2.57) são chamados de espinores (ou biespinores) de Dirac. Diante de rotações em torno de um eixo \mathbf{n} os espinores de Dirac se transformam como

$$\psi \longrightarrow \exp \left[i\theta \mathbf{n} \cdot \frac{\hat{\Sigma}}{2} \right] \psi = \left[\cos \left(\frac{\theta}{2} \right) + i \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) \mathbf{n} \cdot \hat{\Sigma} \right] \psi, \quad (2.58)$$

com $\hat{\Sigma} = \text{diag}\{\hat{\sigma}, \hat{\sigma}\}$, e, diante de *boosts* na direção \mathbf{n}

$$\psi \longrightarrow \exp \left[i\omega \mathbf{n} \cdot \frac{\hat{\alpha}}{2} \right] \psi = \left[\cosh \left(\frac{\omega}{2} \right) + \sinh \left(\frac{\omega}{2} \right) \mathbf{n} \cdot \hat{\alpha} \right] \psi, \quad (2.59)$$

isto é, o operador que representa a ação dos *boosts* no espaço dos espinores de Dirac $\hat{S}(\Lambda_{boost})$ é dado explicitamente por

$$\hat{S}(\Lambda_{boost}) = \left[\cosh \left(\frac{\omega}{2} \right) + \sinh \left(\frac{\omega}{2} \right) \mathbf{n} \cdot \hat{\alpha} \right], \quad (2.60)$$

onde não está incluso um possível fator de normalização.

Por fim cabem algumas ressalvas. As considerações de teoria de grupos foram apresentadas aqui de maneira introdutória e os espinores foram introduzidos com base nas representações irredutíveis do grupo de Lorentz. É possível definir os espinores com base em propriedades puramente algébricas, sendo o formalismo dos espinores como objetos matemáticos um tema rico e complexo, constituindo uma área de estudos a parte da matemática (VAZ; ROCHA, 2016) (vide, por exemplo, o desenvolvimento de espinores exóticos na descrição de matéria escura (ROCHA; BERNARDINI.; VAZ, 2010; ROCHA; BERNARDINI; SILVA, 2011; ROCHA; SILVA; BERNARDINI, 2011; BERNARDINI; ROCHA, 2012), ou mesmo o formalismo de *very special relativity* com a descrição de neutrinos na forma espinorial (BERNARDINI, 2007; BERNARDINI; ROCHA, 2008; BERNARDINI; BERTOLAMI, 2008)). Outro comentário é relativo aos outros possíveis objetos construídos através da combinação das duas representações espinoriais irredutíveis do grupo de Lorentz. É possível, por exemplo, construir um biespinor η real, isto é $\eta^* = \eta$, a partir das representações $(\frac{1}{2}, 0)$ e $(0, \frac{1}{2})$. Tal espinor é solução da equação de Dirac para as matrizes de Dirac em uma representação na qual (2.34) é real. Este biespinor é chamado de espinor de Majorana (FONDA; GHIRARDI, 1970). Podemos entender os diferentes espinores através de vínculos impostos sob as soluções da equação de Dirac: espinores de Weyl surgem ao considerarmos soluções de massa nula; espinores de Majorana ao considerarmos soluções reais da equação de Dirac; os espinores de Dirac são soluções da equação de Dirac para partícula livre sem nenhum tipo de vínculo e que são autovetores do operador de paridade.

2.2.2 Soluções de onda plana da equação de Dirac

A equação de Dirac

$$(i\hat{\gamma}^\mu \partial_\mu - m)\psi(x^\mu) = 0. \quad (2.61)$$

possui soluções de onda plana

$$\psi_+(x^\mu) = u(p)e^{-ip^\mu x_\mu}, \quad \psi_-(x^\mu) = v(p)e^{ip^\mu x_\mu}, \quad (2.62)$$

com quadri vetor *momentum* dado por $p^\mu = (E, \mathbf{p})$ tal que $E^2 = p^2 + m^2$, e ψ_+ e ψ_- estão associadas, respectivamente, as energias $E = \sqrt{p^2 + m^2}$ e $E = -\sqrt{p^2 + m^2}$. Os espiniores $u(p)$ e $v(p)$ satisfazem

$$(\hat{\gamma}^\mu p_\mu - m)u(p) = (\hat{\gamma}^\mu p_\mu + m)v(p) = 0, \quad (2.63)$$

e, um modo de construí-los é através da lei de transformação sob *boosts* dada em (2.59) (ITZYKSON; ZUBER, 1980). Partindo da equação de Dirac no referencial de repouso da partícula, no qual $p^\mu = (m, \mathbf{0})$ tal que (2.63) serão

$$\begin{aligned} (m\hat{\gamma}^0 - m)u(0) &= 0, \\ (m\hat{\gamma}^0 + m)v(0) &= 0, \end{aligned} \quad (2.64)$$

e, portanto,

$$u_s(0) = \begin{bmatrix} \eta_s \\ 0 \end{bmatrix}, \quad v_s(0) = \begin{bmatrix} 0 \\ \eta_s \end{bmatrix}, \quad (2.65)$$

com $s = 1, 2$ um número quântico associado à degenerescência do espectro de energias. A equação de Dirac possui quatro soluções degeneradas duas a duas e isto se reflete na escolha do espinor de duas componentes η_s , que depende da polarização escolhida para descrever a partícula (GREINER, 2000) e são tais que $\eta_s^\dagger \eta_r = \delta_{sr}$. Os espiniores com relação ao referencial no qual $u(p)$ e $v(p)$ satisfazem as equações (2.63) são obtidos, então, aplicando-se um *boost* de Lorentz do referencial de repouso para o referencial no qual a partícula possui *quadrivmomentum* $p^\mu = (E, \mathbf{p})$, isto é aplicando-se o operador descrito em (2.60) com uma rapidez $\omega = \tanh^{-1} \left(\frac{p}{E} \right)$. Deste modo, as expressões para os espiniores u e v são

$$\begin{aligned} u_s(p) &= \hat{S}[\Lambda_{boost}]u_s(0) = \frac{\hat{\gamma}^\mu p_\mu + m}{\sqrt{2E(m+E)}}u_s(0) = \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{E+m}{2E}}\eta_s \\ \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p}}{\sqrt{2E(E+m)}}\eta_s \end{bmatrix} \\ v_s(p) &= \hat{S}[\Lambda_{boost}]v_s(0) = \frac{-\hat{\gamma}^\mu p_\mu + m}{\sqrt{2E(m+E)}}v_s(0) = \begin{bmatrix} \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p}}{\sqrt{2E(E+m)}}\eta_s \\ \sqrt{\frac{E+m}{2E}}\eta_s \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (2.66)$$

onde foi utilizada a representação de Dirac para as matrizes γ .

Os espiniores $u_s(p)$ e $v_s(p)$ dados em (2.66) satisfazem as seguintes relações de ortonormalização

$$\begin{aligned} u_s^\dagger(p)u_r(p) &= v_s^\dagger(p)v_r(p) = \frac{E}{m}\bar{u}_s(p)u_r(p) = -\frac{E}{m}\bar{v}_s(p)v_r(p) = \delta_{sr}, \\ v_s^\dagger(p)u_r(p) &= u_s^\dagger(p)v_r(p) = \bar{u}_s(p)v_r(p) = \bar{v}_s(p)u_r(p) = 0, \end{aligned} \quad (2.67)$$

e as relações de completudeza

$$\sum_{s=1,2} u_s(p)\bar{u}_s(p) = \frac{\hat{\gamma}^\mu p_\mu + m}{2E}, \quad \sum_{s=1,2} v_s(p)\bar{v}_s(p) = \frac{\hat{\gamma}^\mu p_\mu - m}{2E}. \quad (2.68)$$

Além disso, as componentes de energia positiva e negativa da equação de Dirac podem ser escritas de maneira genérica como

$$\begin{aligned} \psi_+(x^\mu) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \sum_{s=1,2} a_s(p) u_s(p) e^{-ip^\mu x_\mu}, \\ \psi_-(x^\mu) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \sum_{s=1,2} b_s^*(p) v_s(p) e^{ip^\mu x_\mu}, \end{aligned} \quad (2.69)$$

onde os coeficientes $a_s(p)$ e $b_s(p)$ podem ser usados para construir pacotes de onda e satisfazem a normalização

$$\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \sum_{s=1,2} [|a_s(p)|^2 + |b_s(p)|^2] = 1. \quad (2.70)$$

As soluções ψ_+ e ψ_- são interpretadas através do quadri-vetor $j^\mu = \bar{\psi}\hat{\gamma}^\mu\psi$. Analisando a dependência $e^{\pm iEt}$, e incluindo efeitos de um campo elétrico através de acoplamento minimal, $j_+^0 = \bar{\psi}_+\hat{\gamma}^0\psi_+$ é interpretado como uma densidade de corrente de partículas positivamente carregadas, com energia positiva, que se propagam no sentido positivo do tempo. O termo de energias negativas $j_-^0 = \bar{\psi}_-\hat{\gamma}^0\psi_-$ deve ser interpretado como um fluxo de cargas positivas, com energia positiva, se propagando no sentido negativo do tempo, o que fisicamente equivale à descrição de um fluxo de cargas negativas se propagando no sentido positivo do tempo. Tal interpretação pertence à mesma linha de pensamentos da teoria dos buracos, inicialmente proposta pelo próprio Dirac para explicar as energias negativas que surgem nas soluções da equação (2.34).

2.2.3 Spin e helicidade

As soluções de energia positiva e negativa da equação de Dirac possuem dupla degenerescência, isto é, são duas soluções de energia positiva (negativa), com a mesma energia. O número quântico adicional, que indicamos por s em (2.66) está associado à esta degenerescência. Escrevendo a equação de Dirac em sua forma Hamiltoniana

$$\hat{H}_D\psi = (\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} + \hat{\beta}m)\psi = E\psi, \quad (2.71)$$

o número quântico s poderia se referir a qualquer grau de liberdade adicional associado à uma quantidade representada por um operador que comuta com \hat{H}_D . Entretanto, uma escolha natural para este número quântico é o spin, que está naturalmente incorporado na dinâmica da equação de Dirac (GREINER, 2000; SAKURAI, 1967; BERNARDINI, 2017) e também está associado à considerações advindas da teoria de grupos (TUNG, 1993; FONDA; GHIRARDI, 1970) que iremos discutir de maneira preliminar.

Além das transformações de Lorentz descritas por (2.21), outra possível maneira de conectar dois referências inerciais é através de uma translação, descrita por

$$x^\mu \rightarrow x'^\mu = x^\mu + a^\mu, \quad (2.72)$$

sendo a transformação mais geral possível conectando dois referenciais inerciais descrita pela combinação de uma translação e uma transformação de Lorentz

$$x^\mu \rightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu + a^\mu, \quad (2.73)$$

que é chamada de *transformação de Poincaré* ou transformações de Lorentz não homogêneas. O conjunto deste tipo de transformação forma o grupo de Poincaré (FONDA; GHIRARDI, 1970).

Em adição aos geradores do grupo de Lorentz $\hat{M}^{\mu\nu}$, que satisfazem a relação de comutação (2.47), o grupo de Poincaré também inclui os operadores que geram as translações \hat{P}^μ , dados na representação de coordenadas por $\hat{P}^\mu = i\partial_\mu$ e que satisfazem as seguinte relações

$$\begin{aligned} [\hat{P}^\mu, \hat{M}^{\rho\sigma}] &= i(\hat{P}^\rho g^{\mu\sigma} - \hat{P}^\sigma g^{\mu\rho}), \\ [\hat{P}^\mu, \hat{P}^\nu] &= 0. \end{aligned} \quad (2.74)$$

A invariância diante transformações de Poincaré desempenha um papel central na descrição de propriedades de covariância e, assim como o estudo das diferentes representações do grupo de Lorentz levou à definição de espinores, as representações do grupo de Poincaré são utilizadas para definir e classificar os diferentes tipos de estados das partículas (WEINBERG, 1995). As diferentes representações do grupo de Poincaré são classificadas de acordo com os autovalores dos operadores de Casimir do grupo, que nada mais são que os operadores que comutam com todas as outras transformações do grupo. O grupo de Poincaré possui dois operadores de Casimir (TUNG, 1993; FONDA; GHIRARDI, 1970)

1. O operador $\hat{P}^\mu \hat{P}_\mu = \hat{P}^2$ cujos autovalores são $p^\mu p_\mu = E^2 - p^2 = m^2$ e definem três tipos de representações:
 - a) $p^\mu p_\mu = m^2 > 0$: partículas massivas;
 - b) $p^\mu p_\mu = m^2 = 0$: partículas de massa nula;
 - c) $p^\mu p_\mu = -m^2 < 0$: representação taquiônica;
2. O operador $\hat{W}^\mu \hat{W}_\mu$ construído com o operador de Pauli-Lubanski $\hat{W}^\mu = \frac{1}{2}\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \hat{P}_\nu \hat{M}_{\rho\sigma}$.

Desta maneira, um conjunto completo de operadores comutantes é composto por $\hat{P}^\mu \hat{P}_\mu$, as três componentes de $\hat{\mathbf{P}}$, $\hat{W}^\mu \hat{W}_\mu$ e as quatro componentes de \hat{W}^μ . As diferentes partículas são classificadas de acordo com os autovalores de $\hat{P}^\mu \hat{P}_\mu$ (a massa) e $\hat{W}^\mu \hat{W}_\mu$ (o spin s).

Para a representação de partículas massivas, podemos sem perda de generalidade trabalhar no referencial de repouso no qual $p^\mu = (m, 0, 0, 0)$ e tal que o operador de Pauli-Lubanski é dado em termos do operador de spin, incluso na parte angular dos geradores das transformações homogêneas de Lorentz \hat{J} , $\hat{\mathbf{S}}$ como

$$\hat{W}^0 = 0, \quad \hat{\mathbf{W}} = m\hat{\mathbf{S}}, \quad (2.75)$$

e, portanto neste caso o operador de Casimir do grupo será dado por $\hat{W}^\mu \hat{W}_\mu = -m^2 \hat{S}^2$ que, da teoria do spin da mecânica quântica, possui autovalores $w^2 = m^2 s(s+1)$. Podemos, então, obter a representação irredutível associada ao spin $s = 1/2$ para massa não nula que representam os estados de férmions massivos (WEINBERG, 1995).

Sob esta perspectiva o spin surge naturalmente na classificação das diferentes representações do grupo de Poincaré. Além do spin, dado a estrutura dos operadores de Casimir do grupo de Poincaré, é interessante e conveniente introduzir o operador de helicidade \hat{h} definido como a componente do spin na direção do *momentum*

$$\hat{h} = \frac{\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{S}}}{sP}, \quad (2.76)$$

que é proporcional à \hat{W}^0 , de modo que os diferentes estados de uma partícula de massa m e spin s podem ser diferenciados pelos autovalores do operador *momentum* $\hat{\mathbf{P}}$ e do operador helicidade \hat{h} (FONDA; GHIRARDI, 1970).

Dada esta estrutura da mecânica quântica relativística baseada nas representações do grupo de Poincaré, somos motivados a descrever as soluções da equação de Dirac $u_s(p)$ e $v_s(p)$ em termos do spin. De fato, para as soluções da equação de Dirac o operador de helicidade é dado por

$$\hat{h} = \frac{\hat{p} \cdot \hat{\Sigma}}{p}, \quad (2.77)$$

com $\hat{\Sigma} = \text{diag}\{\hat{\sigma}, \hat{\sigma}\}$ e é tal que

$$[\hat{h}, \hat{H}_D] = 0,$$

portanto podemos diagonalizar o Hamiltoniano de Dirac simultaneamente ao operador de helicidade. O número quântico $s = 1$ estará associado ao autovalor de helicidade $h = +1/2$ (helicidade positiva) enquanto $s = 2$ estará associado ao autovalor $h = -1/2$ (helicidade negativa). Como exemplo explicito temos o caso no qual a partícula descrita pela equação de Dirac se propaga com *momentum* \mathbf{p} tal que $p_x = p_y = 0$ e $p_z = p$. Neste caso o operador de helicidade será $\hat{h} = \frac{p_z \hat{\Sigma}_z}{p} = \hat{\Sigma}_z$, e para que $u_s(p)$ seja autoestado de helicidade

$$\hat{\Sigma}_z u_s(p) = (-1)^s u_s(p) \longrightarrow \hat{\sigma}_z \eta_s = (-1)^s \eta_s, \quad (2.78)$$

com η_s o espinor de duas componentes em (2.66). Para este caso

$$\eta_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \eta_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (2.79)$$

Apesar de definida com base em propriedades que definem as representações do grupo de Poincaré, a helicidade não é de maneira geral uma quantidade invariante. Tal fato pode ser constatado considerando um *boost* para um referencial que se move com velocidade maior que a velocidade da partícula. Neste caso o *momentum* da partícula será invertido, enquanto o spin se manterá invariante, de modo que a helicidade do estado irá mudar. De fato pode-se verificar que o operador de helicidade (2.77) e o operador que representa a ação do *boost* nos espinores de Dirac (2.60) não comutam.

2.2.4 Quiralidade

A quiralidade é um conceito, de certa maneira, complementar à helicidade. Definimos a quiralidade como o valor médio do operador $\hat{\gamma}^5$ (ITZYKSON; ZUBER, 1980) e, como $[\hat{H}_D, \hat{\gamma}^5] \neq 0$, a quiralidade não é uma quantidade conservada (BERNARDINI, 2006a; BERNARDINI, 2006c; BERNARDINI, 2006b). A matriz quiral possui dois autovalores distintos ± 1 e os projetores nos espaços associados a estes autovalores são dados por

$$\hat{\Pi}_C^\pm = \frac{\hat{I}_4 \pm \hat{\gamma}^5}{2}. \quad (2.80)$$

Como estes projetores são ortogonais entre si um espinor de Dirac ψ pode ser sempre decomposto em uma componente de quiralidade positiva (componente destra ou *right-handed*) e uma componente de quiralidade negativa (componente canhota ou *left-handed*), definidas por

$$\psi_R = \hat{\Pi}_C^+ \psi, \quad \psi_L = \hat{\Pi}_C^- \psi, \quad (2.81)$$

tais que $\hat{\gamma}^5 \psi_R = +\psi_R$ e $\hat{\gamma}^5 \psi_L = -\psi_L$ e, então, $\psi = \psi_R + \psi_L$.

Uma maneira de entender o conceito de quiralidade e como este está relacionado às representações irredutíveis do grupo de Lorentz é considerar a chamada representação quiral das matrizes de Dirac, na qual $\hat{\gamma}^5 = \text{diag}\{\hat{I}_2, -\hat{I}_2\}$ (THALLER, 1992). Nesta representação as matrizes de Dirac são dadas por

$$\hat{\alpha}_i = \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_i & 0 \\ 0 & -\hat{\sigma}_i \end{bmatrix}, \quad \hat{\beta} = \begin{bmatrix} 0 & \hat{I}_2 \\ \hat{I}_2 & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.82)$$

e, tendo em vista a forma da matriz quiral e dos operadores de projeção de quiralidade nesta representação, as componentes de quiralidade positiva e negativa são dadas por

$$\psi_R = \begin{bmatrix} \varphi_R \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \psi_L = \begin{bmatrix} 0 \\ \varphi_L \end{bmatrix}. \quad (2.83)$$

Além disso é possível provar que os espinores φ_R e φ_L pertencem, respectivamente, às representações $(\frac{1}{2}, 0)$ e $(0, \frac{1}{2})$ do grupo de Lorentz, ou seja, os espinores de Weyl são relacionados ao conceito de quiralidade (ITZYKSON; ZUBER, 1980; BERNARDINI, 2017).

Na representação quirial, de (2.83), um espinor de Dirac ψ é dado por

$$\psi = \begin{bmatrix} \varphi_R \\ \varphi_L \end{bmatrix}, \quad (2.84)$$

e a equação de Dirac pode ser reescrita como um conjunto de duas equações acopladas para as componentes quirais como

$$\begin{aligned} i\hat{\sigma}^\mu \partial_\mu \varphi_R &= -m\varphi_L, \\ i\hat{\sigma}^\mu \partial_\mu \varphi_L &= m\varphi_R, \end{aligned} \quad (2.85)$$

onde $\hat{\sigma}^\mu = (\hat{I}_2, \hat{\boldsymbol{\sigma}})$ e $\hat{\tilde{\sigma}}^\mu = (\hat{I}_2, -\hat{\boldsymbol{\sigma}})$. Concluimos que o termo de massa da equação de Dirac acopla as diferentes componentes quirais do espinor e, portanto, no caso $m = 0$, as duas equações (2.85) se desacoplam e as quiralidades podem ser tratadas de maneira completamente independente. Portanto, para massa nula não há necessidade de se considerar os espinores de Dirac, bastam os espinores de Weyl. Além disto, para este caso a quiralidade é igual a helicidade.

Apesar de não ser uma quantidade conservada no tempo, a quiralidade é um invariante de Lorentz e, neste sentido, ela é complementar à helicidade: enquanto a helicidade é conservada mas não invariante a quiralidade é invariante mas não conservada. O caráter oscilatório da quiralidade, associado à interferência entre as diferentes componentes quirais do espinor e ao fato da quiralidade não ser uma quantidade conservada, foi explorado em conexão com a oscilação de sabores em física de neutrinos (BERNARDINI, 2006c), quando estas partículas são descritas em termos da equação de Dirac no formalismo de pacotes de onda.

Por último ressaltamos que, do ponto de vista da teoria de campos, o conceito de quiralidade está relacionado com transformações de calibre (ITZYKSON; ZUBER, 1980). A Lagrangiana que descreve um campo fermiônico sem massa ψ é invariante diante transformações de calibre quirial $\psi \rightarrow e^{i\alpha\hat{\gamma}^5} \psi$ e, através do teorema de Noether, associamos esta invariância a conservação da densidade de corrente quirial $j^{5\mu} = \bar{\psi}\hat{\gamma}^\mu\hat{\gamma}^5\psi$ que, como vimos anteriormente, se transforma como um pseudo-vetor diante de transformações de Lorentz homogêneas. No caso de férmions massivos não há conservação desta corrente que satisfaz a equação

$$\partial_\mu j^{5\mu} = 2im\bar{\psi}\hat{\gamma}^5\psi.$$

3 Emaranhamento spin-paridade

As representações do grupo restrito de Lorentz são determinadas em conexão com sua cobertura dupla, que possui duas representações irredutíveis não equivalentes pertencentes ao $SU(2)$, cujos elementos são os espinores de Weyl. As soluções da equação de Dirac, os biespinores de Dirac, pertencem a uma representação redutível do grupo de Lorentz construída com as duas representações irredutíveis citadas acima e que pode ser obtida através de isomorfismos entre álgebras de Lie. A representação assim obtida, associada aos biespinores, é dada em termos de representações do $SU(2) \otimes SU(2)$ (VAZ; ROCHA, 2016; FONDA; GHIRARDI, 1970; TUNG, 1993), fato que pode ser diretamente apreciado escrevendo-se as matrizes $\hat{\alpha}_i$ e $\hat{\beta}$ (2.18) em termos de um produto tensorial entre operadores do $SU(2)$. Esta estrutura composta pode ser interpretada sob a luz da teoria da informação: uma partícula descrita pela equação de Dirac descreve dois bits quânticos codificados na partícula cuja dinâmica é descrita por uma variável contínua - a posição ou o *momentum* (MIZRAHI, 2011). Estes dois bits quânticos são associados aos graus de liberdade naturais à estrutura de grupo das soluções da equação de Dirac - o spin e a paridade intrínseca.

A estrutura composta da equação de Dirac tem uma consequência particular: os dois qubits carregados pelos biespinores estão, em geral, emaranhados (BERNARDINI; MIZRAHI, 2014). Ou seja, a dinâmica relativística da equação de Dirac gera uma correlação quântica intrínseca entre spin e paridade. Este capítulo é dedicado à caracterização deste emaranhamento intrínseco aos biespinores, em particular à descrição dos efeitos de potenciais externos no emaranhamento spin-paridade. Iremos também descrever as correlações entre spin e paridade intrínseca do ponto de vista das desigualdades de Bell (BRUNNER et al., 2014), em particular de sua versão devido a Clauser, Horne, Shimony e Holt (CLAUSER et al., 1969), investigando a possibilidade de modelos de variáveis escondidas para esta correlação em estados mistos de biespinores (BERNARDINI; BITTENCOURT; BLASONE, 2018). Por último, estudaremos o efeito de *boosts* de Lorentz no emaranhamento codificado em duas partículas biespinores com o foco nos efeitos da estrutura intrínseca $SU(2) \otimes SU(2)$ de cada uma das partículas no emaranhamento codificado no par (BITTENCOURT; BERNARDINI; BLASONE, 2018).

3.1 A estrutura tensorial da equação de Dirac

Como mostramos no capítulo anterior, as soluções da equação de Dirac pertencem a uma representação redutível do grupo de Lorentz sendo esta estrutura diretamente ligada aos requerimentos de invariância da teoria diante transformações entre referenciais

inerciais. A equação de Dirac é invariante diante inversão espacial (2.28) e, para acomodar esta operação de simetria, é necessário combinar as representações espinoriais $(\frac{1}{2}, 0)$ e $(0, \frac{1}{2})$ do grupo de Lorentz de modo a formar uma nova representação redutível cujos vetores são os espinores de Dirac (FONDA; GHIRARDI, 1970). O grupo formado desta maneira é obtido através do produto tensorial de duas representações de dimensão 2 do $SU(2)$, o $SU(2) \otimes SU(2)$. Tal fato pode ser apreciado de maneira direta reescrevendo as matrizes de Dirac $\hat{\alpha}_i$ e $\hat{\beta}$ em termos de produtos tensoriais

$$\hat{\beta} = \begin{bmatrix} \hat{I}_2 & 0 \\ 0 & -\hat{I}_2 \end{bmatrix} = \hat{\sigma}_z \otimes \hat{I}_2, \quad \hat{\alpha}_i = \begin{bmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ \hat{\sigma}_i & 0 \end{bmatrix} = \hat{\sigma}_x \otimes \hat{\sigma}_i. \quad (3.1)$$

Em termos da decomposição acima a equação de Dirac é

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left((\hat{\sigma}_x \otimes \hat{\sigma}_i) \cdot \hat{\mathbf{p}} + (\hat{\sigma}_z \otimes \hat{I}_2) m \right) \psi, \quad (3.2)$$

e o Hamiltoniano de Dirac (2.11) é dado por

$$\hat{H}_D = (\hat{\sigma}_x \otimes \hat{\sigma}_i) \cdot \hat{\mathbf{p}} + (\hat{\sigma}_z \otimes \hat{I}_2) m. \quad (3.3)$$

A dinâmica segundo a equação de Dirac é então descrita por um Hamiltoniano que atua em três espaços de Hilbert - dois deles de dimensão 2 associados à estrutura de grupos $SU(2) \otimes SU(2)$, \mathcal{H}_P e \mathcal{H}_S , e outro de dimensão infinita associado às coordenadas, \mathcal{H}_∞ . Na representação de *momentum*, $\hat{\mathbf{p}}$ é um número comutativo e o Hamiltoniano de Dirac é reescrito de maneira simplificada como

$$\hat{H}_D = (\hat{\sigma}_x^{(P)} \otimes \hat{\sigma}_i^{(S)}) \cdot \mathbf{p} + (\hat{\sigma}_z^{(P)} \otimes \hat{I}_2^{(S)}) m, \quad (3.4)$$

agora com $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z) \in \mathfrak{R}^3$ e onde foram indicados explicitamente os espaços de Hilbert sob o qual cada um dos operadores age através do sobrescrito correspondente. O Hamiltoniano de Dirac descreve então a dinâmica de dois graus de liberdade discretos, S e P , em termos de uma variável contínua, o *momentum* \mathbf{p} (MIZRAHI, 2011) e, de agora em diante, chamaremos (3.4) como forma $SU(2) \otimes SU(2)$.

O spin é um grau de liberdade intrínseco à equação de Dirac, que tem suas soluções classificadas de acordo com este grau de liberdade (ou equivalentemente de acordo com a helicidade). De fato, o operador de spin dos espinores de Dirac $\hat{\Sigma}$ é escrito na forma $SU(2) \otimes SU(2)$ como

$$\hat{\Sigma} = \begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{\sigma}} & 0 \\ 0 & \hat{\boldsymbol{\sigma}} \end{bmatrix} = \hat{I}_2^{(P)} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)}, \quad (3.5)$$

que leva naturalmente a identificação do espaço de Hilbert \mathcal{H}_S como o espaço associado ao spin. Com relação ao grau de liberdade associado ao espaço \mathcal{H}_P , notemos que a representação do operador de paridade (2.28) $\hat{\mathcal{P}}$ no espaço das soluções da equação de Dirac no espaço dos *momenta* $\psi(\mathbf{p})$ é (ITZYKSON; ZUBER, 1980)

$$\hat{\mathcal{P}}\psi(\mathbf{p}, t) = \hat{P}_{Int}\psi(-\mathbf{p}, t), \quad (3.6)$$

com $\hat{P}_{Int} = \hat{\beta}$ a parte intrínseca do operador de paridade. Por exemplo, os biespinores de Dirac $u_s(p)$ e $v_s(p)$ (2.66) possuem paridade total ± 1 :

$$\hat{P}u_s(p) = u_s(p), \quad \hat{P}v_s(p) = -v_s(p). \quad (3.7)$$

Em termos de decomposição $SU(2) \otimes SU(2)$, o operador de paridade intrínseca é dado por

$$\hat{P}_{Int} = \hat{\sigma}_z^{(P)} \otimes \hat{I}_2^{(S)}, \quad (3.8)$$

sugerindo a associação do espaço \mathcal{H}_P ao grau de liberdade associado ao operador \hat{P}_{Int} - a paridade intrínseca. Desta maneira, os dois graus de liberdade discretos, cuja dinâmica é descrita por \hat{H}_D são o spin e a paridade intrínseca.

Com a equação de Dirac é escrita na forma tensorial, os autoestados do Hamiltoniano de Dirac (3.4), que são os biespinores (2.66) são descritos no espaço de Hilbert composto $\mathcal{H}_P \otimes \mathcal{H}_S$. De fato, estes autoestados são escritos em termos de produtos tensoriais como

$$\begin{aligned} |u_s(p)\rangle &= N(p) \left[|+\rangle^{(P)} \otimes |\eta_s^{(S)}\rangle + \frac{1}{E_p + m} |-\rangle^{(P)} \otimes (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p} |\eta_s^{(S)}\rangle) \right], \\ |v_s(p)\rangle &= N(p) \left[\frac{1}{E_p + m} |+\rangle^{(P)} \otimes (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p} |\eta_s^{(S)}\rangle) + |-\rangle^{(P)} \otimes |\eta_s^{(S)}\rangle \right], \end{aligned} \quad (3.9)$$

com a normalização $N(p)$ dada por

$$N(p) = \sqrt{\frac{E_p + m}{2E_p}}$$

e $E_p = \sqrt{p^2 + m^2}$ sendo \mathbf{p} o *momentum* da partícula. Os vetores $|\pm\rangle^{(P)} \in \mathcal{H}_P$ são os autoestados do operador $\hat{\sigma}_z^{(P)}$, e os vetores $|\eta_s^{(S)}\rangle \in \mathcal{S}$ descrevem o estado de spin da partícula, ou seja de sua polarização. Por exemplo, no caso de estados de helicidade temos que

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p} |\eta_s^{(S)}\rangle = (-1)^s p |\eta_s^{(S)}\rangle. \quad (3.10)$$

Tanto a paridade intrínseca e o spin são graus de liberdade discretos binários, tornando possível a associação dos estados nos quais estes operadores agem a estados de bits quânticos. O bit quântico, ou *qubit*, é definido em analogia ao bit clássico (NIELSEN; CHUANG, 2000): enquanto o último assume os valores 0 ou 1, o princípio da superposição da mecânica quântica permite a definição de um bit como superposição dos dois, de modo que o estado mais geral que codifica um qubit é dado por

$$|\text{qubit}\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle, \quad (3.11)$$

com $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Um estado de um qubit é, então, descrito em um espaço de Hilbert discreto de dimensão 2, sendo em muitos casos implementados fisicamente por sistemas de dois níveis, como por exemplo dois níveis internos de um íon aprisionado (SCHMIDT-KALER et al., 2003a). O qubit é a unidade elementar de informação quântica, e o princípio

da superposição alinhado com o uso de outros princípios da mecânica quântica tornam possível o desenvolvimento de algoritmos quânticos mais eficientes que suas contra partes clássicas (NIELSEN; CHUANG, 2000), como por exemplo o algoritmo para fatoração de números de Shor (SHOR, 1997). Como os graus de liberdade discretos da equação de Dirac são descritos em espaços de Hilbert de dimensão 2, podemos interpretá-los como bits quânticos e, desta maneira, os autoestados do Hamiltoniano de Dirac, descartando o caráter de localização, são reinterpretados como estados de dois qubits.

Além disso, a dinâmica descrita pelo Hamiltoniano \hat{H}_D cria correlações entre os dois qubits de spin e paridade. Como podemos ver explicitamente de (3.9) é impossível escrever $|u_s(p)\rangle = |\phi^{(P)}\rangle \otimes |\phi^{(S)}\rangle$ com $|\phi^{(P,S)}\rangle \in \mathcal{H}_{P,S}$, e, portanto, os autoestados do Hamiltoniano de Dirac são, em geral, estados emaranhados (BERNARDINI; MIZRAHI, 2014).

Antes de caracterizarmos o emaranhamento entre spin e paridade intrínseca das soluções da equação de Dirac, iremos rever brevemente o conceito de emaranhamento, como quantificá-lo e como caracterizar outras correlações de natureza quântica.

3.2 Emaranhamento

O emaranhamento é um fenômeno que surge do princípio da superposição aplicado a sistemas quânticos compostos (HORODECKI et al., 2009) e iremos, no momento, focar nossa atenção à sistemas composto de duas partes – sistemas bipartite (*bipartite systems*). Um estado $|\psi\rangle$ que descreve um sistema S composto de dois subsistemas S_1 , associado ao espaço de Hilbert \mathcal{H}_1 , e S_2 , associado ao espaço de Hilbert \mathcal{H}_2 , pertence ao espaço de Hilbert composto $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ onde, por simplicidade, iremos assumir em toda esta seção que $\dim[\mathcal{H}_1] = \dim[\mathcal{H}_2]$. Segundo o teorema da decomposição de Schmidt (BREUER; PETRUCCIONE, 2002) dado um estado $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ existem duas bases ortonormais $|\phi_i^{(1)}\rangle \in \mathcal{H}_1$ e $|\phi_i^{(2)}\rangle \in \mathcal{H}_2$ tais que

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N \lambda_i |\phi_i^{(1)}\rangle \otimes |\phi_i^{(2)}\rangle. \quad (3.12)$$

Na expressão acima, os coeficientes complexos λ_i são chamados de coeficientes de Schmidt e o número N de coeficientes não nulos é chamado de número de Schmidt. Se $N = 1$ temos

$$|\psi\rangle = |\phi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle, \quad (3.13)$$

e o estado é dito separável. Por definição um estado que não é separável é emaranhado e, portanto, possui número de Schmidt $N > 1$. Se na decomposição (3.12) o módulo de todos os λ_i são iguais o estado é dito maximamente emaranhado (HORODECKI et al., 2009; BREUER; PETRUCCIONE, 2002).

A definição acima de separabilidade é válida apenas para estados puros, que são aqueles representados por um único vetor no espaço de Hilbert. Uma formulação mais

geral deve considerar também estados mistos, associados com a incerteza na preparação de um sistema. Um estado misto está associado a um *ensemble* de N sistemas, dos quais N_i sistemas são preparados no estado puro $|\psi_i\rangle$. O estado ρ associado a tal *ensemble* é dado por

$$\rho = \sum_i \frac{N_i}{N} |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \sum_i p_i \rho_i, \quad (3.14)$$

com $p_i = N_i/N$ e $\sum_i p_i = 1$. Se o sistema for puro, o *ensemble* contém apenas um possível estado e o seu operador densidade será dado simplesmente por $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$. Da definição de operador densidade temos as seguintes propriedades

- Hermicidade: $\rho^\dagger = \rho$;
- Normalização: $\text{Tr}[\rho] = 1$;
- $\text{Tr}[\rho^2] \leq 1$, com a igualdade válida apenas para estados puros;
- Positividade: $\langle\phi|\rho|\phi\rangle > 0$, para qualquer estado $|\phi\rangle$ pertencente ao espaço de Hilbert sob o qual ρ age;

Sem entrarmos em muitos detalhes iremos citar os principais pontos da formulação da mecânica quântica em termos de matrizes densidade. Dado um operador \hat{A} associado a um observável A , o valor médio de A é dado por

$$\langle\hat{A}\rangle = \text{Tr}[\hat{A}\rho], \quad (3.15)$$

sendo a energia média E de um estado ρ dada em termos do valor médio do Hamiltoniano \hat{H} que descreve a dinâmica do sistema

$$E = \langle\hat{H}\rangle = \text{Tr}[\hat{H}\rho]. \quad (3.16)$$

A evolução temporal de um operador densidade é dada através de

$$\rho(t_2) = \hat{U}(t_2, t_1)\rho(t_1)\hat{U}^\dagger(t_2, t_1), \quad (3.17)$$

com U o operador de evolução temporal dado por

$$\hat{U}(t_2, t_1) = T_{\leftarrow} \exp \left[-i \int_{t_1}^{t_2} ds \hat{H} \right], \quad (3.18)$$

com \hat{H} o Hamiltoniano do sistema e T_{\leftarrow} o operador de ordenação cronológica, definido de modo a ordenar os produtos de operadores dependentes do tempo de acordo com o aumento do tempo, no caso os produtos serão ordenados da direita para a esquerda. De (3.18) obtemos, considerando evoluções temporais infinitesimais, a equação de Liouville-von Neumann

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \frac{\hat{H}\rho - \rho\hat{H}}{i} = \frac{1}{i} [\hat{H}, \rho]. \quad (3.19)$$

Um operador densidade ρ que descreve um sistema composto de duas partes é separável se ele pode ser escrito como (BREUER; PETRUCCIONE, 2002)

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i^{(1)} \otimes \rho_i^{(2)}, \quad (3.20)$$

com os coeficientes p_i satisfazendo

$$p_i \geq 0, \quad \sum_i p_i = 1, \quad (3.21)$$

e os operadores $\rho_i^{(k)}$ atuando no espaço de Hilbert \mathcal{H}_k associado ao sistema S_k . Um estado que não é separável é emaranhado e, para estados puros, a definição acima é equivalente àquela dada em termos do vetor de estado $|\psi\rangle$.

Vejamos alguns exemplos ilustrativos para estados associados a sistemas biparte onde cada subsistema possui apenas dois graus de liberdade – estados de dois qubits. Para estes estados temos as bases para \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 dadas em termos dos estados de qubit $\{|1^{(1)}\rangle, |0^{(1)}\rangle\}$ e $\{|1^{(2)}\rangle, |0^{(2)}\rangle\}$ respectivamente. O primeiro exemplo é o estado

$$|\psi_C\rangle = \frac{|1^{(1)}\rangle \otimes |1^{(2)}\rangle + |0^{(1)}\rangle \otimes |0^{(2)}\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|11\rangle + |00\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (3.22)$$

o chamado estado de gato, em referência ao famoso *gedanken* do gato de Schrödinger. Por inspeção vemos que este estado não pode ser escrito na forma 3.13 e, portanto, é emaranhado. Este estado, junto com outros três, forma a base de Bell composta por estados maximamente emaranhados:

$$\begin{aligned} |\psi_{\pm}\rangle &= \frac{|01\rangle \pm |10\rangle}{\sqrt{2}}, \\ |\phi_{\pm}\rangle &= \frac{|11\rangle \pm |00\rangle}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Por outro lado, o estado misto

$$\rho = \frac{|11\rangle\langle 11| + |00\rangle\langle 00|}{2}, \quad (3.24)$$

está na forma (3.20) com coeficientes satisfazendo (3.21) e, portanto, é separável.

Estados de dois qubits, como os apresentados acima podem ser escritos em uma forma conveniente dada em termos de produtos tensoriais entre operadores agindo em cada um dos espaços de Hilbert. O operador densidade ρ de um estado genérico de dois qubits sempre pode ser escrito como

$$\rho = \frac{1}{4} \left[\hat{I}_4 + (\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(1)} \otimes \hat{I}_2^{(2)}) \cdot \mathbf{a}^{(1)} + (\hat{I}_2^{(1)} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(2)}) \cdot \mathbf{a}^{(2)} + \sum_{i,j=1}^3 t_{ij} (\hat{\sigma}_i^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_j^{(2)}) \right], \quad (3.25)$$

que é chamada decomposição de Fano de ρ . Os vetores $\mathbf{a}^{(1)}$ e $\mathbf{a}^{(2)}$ são chamados vetores de Bloch dos subsistemas 1 e 2 respectivamente, e a matriz formada pelos coeficientes t_{ij} , que será indicada por T , é chamada de matriz de correlações.

Antes de prosseguirmos, frisamos que a definição de emaranhamento apresentada aqui é para estados associados a sistemas compostos de duas partes. Para sistemas compostos de mais de duas partes (sistemas *multipartite*) a própria definição de emaranhamento não é bem estabelecida e a teoria deste tipo de emaranhamento ainda está em desenvolvimento.

3.2.1 Quantificadores de Emaranhamento

Apesar de inicialmente definido com base no teorema de Schmidt para sistemas compostos de duas partes e usualmente introduzido através da discussão da não-localidade na mecânica quântica, proposta inicialmente por Einstein, Podolsky e Rosen (EINSTEIN; PODOLSKY; ROSEN, 1935) e depois refinada por J. Bell (BELL, 1964), o emaranhamento pode ser também contextualizado como um recurso (PLENIO; VEDRAL, 1998). É possível provar que a implementação do protocolo de teletransporte quântico requer necessariamente a utilização de estados emaranhados sendo o emaranhamento então o recurso necessário a este procedimento (POPESCU, 1994). Historicamente esta contextualização em termos de uma teoria de recursos motivou o estudo de diferentes quantificadores de emaranhamento, isto é, de maneiras de se determinar o quanto um estado é emaranhado ou, em termos do teletransporte quântico, quantos estados pode-se teletransportar com um dado número de cópias do estado em questão (PLENIO; VEDRAL, 1998). Mais recentemente, com a aplicação do emaranhamento quântico na descrição de fenômenos físicos como transições de fase (OSTERLOH et al., 2002; VIDAL et al., 2003; AMICO et al., 2008) ou com sua associação à propriedades topológicas da matéria (LI; HALDANE, 2008; LAFLORENCIE, 2016), a quantificação do emaranhamento obteve uma interpretação não completamente relacionada à teoria da informação quântica.

Existem diversos *quantificadores de emaranhamento* definidos com base em diferentes contextos. Para um quantificador $E[\rho]$ ser aceito como um quantificador de emaranhamento, ele deve satisfazer as seguintes propriedades (HORODECKI et al., 2009)

- $E[\rho] \geq 0$, com a igualdade válida apenas se ρ for um estado separável;
- $E[\rho]$ possui o valor máximo para ρ um estado maximamente emaranhado;
- O quantificador $E[\rho]$ deve ser invariante diante transformações do tipo $\hat{U}_1 \otimes \hat{U}_2$, com \hat{U}_i operadores unitários. Isto é

$$E[(\hat{U}_1 \otimes \hat{U}_2) \rho (\hat{U}_1^\dagger \otimes \hat{U}_2^\dagger)] = E[\rho]. \quad (3.26)$$

Este tipo de operação é chamado de operação local unitária;

- $E[\rho]$ não pode crescer diante das chamadas operações locais assistidas por comunicação clássica (LOCC) representadas pela ação de um super-operador \hat{O}_{LOCC} :

$$E[\hat{O}_{LOCC}[\rho]] \leq E[\rho]; \quad (3.27)$$

- $E[\rho]$ deve ser contínuo no espaço das matrizes densidade:

$$\|\rho - \sigma\| \rightarrow 0 \implies E[\rho] - E[\sigma] \rightarrow 0, \quad (3.28)$$

com $\|\cdot\|$ uma norma do espaço das matrizes densidades.

Outras duas propriedades importantes, mas não requeridas, para um bom quantificador de emaranhamento é a aditividade:

$$E[\rho \otimes^N] = NE[\rho], \quad (3.29)$$

e a convexidade

$$E[\lambda\rho + (1 - \lambda)\sigma] \leq \lambda E[\rho] + (1 - \lambda)E[\sigma], \quad (3.30)$$

com $0 \leq \lambda \leq 1$.

Dentre os quantificadores de emaranhamento que satisfazem os critérios listados acima apenas alguns são práticos em termos de cálculo. Iremos agora apresentar os principais quantificadores utilizados ao longo desta tese e na maioria dos trabalhos que estudam emaranhamento bipartite nos mais diversos contextos.

3.2.1.1 Entropia Linear e a Entropia de von Neumann

Quantificar o emaranhamento em estados puros é uma tarefa simplificada com o auxílio do teorema de Schmidt. Todo estado puro $|\psi\rangle$ pode ser escrito como (3.12), desta maneira, o operador densidade ρ de um estado puro será dado por

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_i \sum_j \lambda_i \lambda_j^* (|\phi^{(i)}\rangle\langle\phi^{(j)}|)_1 \otimes (|\phi^{(i)}\rangle\langle\phi^{(j)}|)_2, \quad (3.31)$$

de modo que, o operador densidade reduzido ao subsistema 1 será dado através do traço parcial sob o sistema 2

$$\rho_1 = \text{Tr}_2[\rho] = \sum_i \sum_j \lambda_i \lambda_j^* (|\phi^{(i)}\rangle\langle\phi^{(j)}|)_1 \otimes \text{Tr}[(|\phi^{(i)}\rangle\langle\phi^{(j)}|)_2] = \sum_i |\lambda_i|^2 (|\phi^{(i)}\rangle\langle\phi^{(i)}|)_1. \quad (3.32)$$

Se ρ é emaranhado, então o operador densidade reduzido ρ_1 representa um estado misto e, intuitivamente, através da medida do grau de mistura do estado reduzido a um dos subsistemas, estaremos quantificando o emaranhamento do estado ρ . Definimos desta maneira a entropia linear E_L como (BREUER; PETRUCCIONE, 2002; HORODECKI et al., 2009)

$$E_L[\rho] = \frac{d}{d-1} (1 - \text{Tr}[\rho_1^2]) = \frac{d}{d-1} (1 - \text{Tr}[\rho_2^2]), \quad (3.33)$$

com $d = \dim[\mathcal{H}_1] = \dim[\mathcal{H}_2]$. Tal quantidade satisfaz todos os requerimentos mostrados na seção anterior e, portanto, é um quantificador de emaranhamento. Para estados puros

de dois qubits, a entropia linear de um subsistema é dada, em termos da decomposição de Fano (3.25) por

$$E_L[\rho] = 1 - \sum_{n=\{x,y,z\}} (a_n^{(1)})^2 = 1 - \sum_{n=\{x,y,z\}} (a_n^{(2)})^2. \quad (3.34)$$

Outra maneira de utilizar (3.32) para quantificar o emaranhamento é notando que o estado reduzido ρ_1 (ou equivalentemente ρ_2) representa um *ensemble* composto pelos estados puros $|\phi^{(i)}\rangle_1$, cada um associado a um peso estatístico $|\lambda_i|^2$. Quanto mais um estado é emaranhado mais os $|\lambda_i|^2$ possuem mesmo valor e, portanto, maior a incerteza sobre a realização de um estado puro em particular do *ensemble*. Deste modo, a incerteza da distribuição de probabilidades $F[\{|\lambda_i|^2 = p_i\}]$, composta pelos $|\lambda_i|^2$, quantifica o emaranhamento para estados puros. Tal incerteza é dada pela entropia de von-Neumann do estado associado a um dos subsistemas (NIELSEN; CHUANG, 2000)

$$S_{vN}[\rho_1] = -\text{Tr}[\rho_1 \ln(\rho_1)] = S_{vN}[\rho_2] = -\text{Tr}[\rho_2 \ln(\rho_2)],$$

e a entropia de emaranhamento do estado conjunto ρ , $S_E[\rho]$, é definida como (BREUER; PETRUCCIONE, 2002; HORODECKI et al., 2009)

$$S_E[\rho] = S_{vN}[\rho_1] = S_{vN}[\rho_2] \quad (3.35)$$

Além desta motivação em termos da incerteza da distribuição de probabilidades do estado reduzido, a entropia de emaranhamento está associada à chamada taxa de purificação (BENNETT et al., 1996). Dadas n cópias de um estado puro ρ , o número de estados maximamente emaranhados que se pode obter através do chamado protocolo de purificação de emaranhamento é dado por $nS_E[\rho]$.

Apesar da interpretação tanto em termos operacionais quanto em termos do teorema da decomposição de Schmidt, tanto a entropia de emaranhamento quanto a entropia linear só são quantificadores de emaranhamento válidos para estados puros. O estado reduzido de um estado misto não necessariamente está associado ao caráter emaranhado e, portanto, outros meios devem ser utilizados para quantificar o emaranhamento neste contexto. Veremos, a seguir, os dois métodos mais utilizados para o cálculo do emaranhamento em estados mistos.

3.2.1.2 Concorrência e o emaranhamento de Formação

Um dos quantificadores de emaranhamento para estados mistos é o chamado emaranhamento de formação (WOOTERS, 2001), que é definido em termos da quantidade de recursos necessários para a criação de um dado estado misto. Criar um estado misto, neste contexto, significa representar o estado como uma mistura estatística de estados puros, ou seja, escrever ρ como

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i, \quad (3.36)$$

onde os ρ_i são estados puros, não necessariamente os autoestados de ρ . Para que uma quantidade de emaranhamento seja associada a tal estado misto é necessário considerar todas as possíveis decomposições do estado misto em termos de estados puros e, se o emaranhamento dos estados puros for medido em termos da entropia de emaranhamento (3.35), o emaranhamento de formação será definido como (WOOTERS, 2001)

$$E_{EoF}[\rho] = \inf \left(\sum_i p_i S[\rho_i] \right), \quad (3.37)$$

onde o ínfimo é tomado sobre todas as decomposições de ρ em estados puros.

Devido ao cálculo de (3.37) requerer um processo de otimização, não existe fórmula fechada para o emaranhamento de formação, entretanto no caso mais simples o quantificador pode ser calculado de uma maneira simplificada (WOOTERS, 2001). Para um estado de dois qubits o emaranhamento de formação é dado por

$$E_{EoF}[\rho] = \mathcal{E}[C[\rho]], \quad (3.38)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[C] &= h \left(\frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2} \right), \\ h(x) &= -x \log_2 x - (1 - x) \log_2 (1 - x), \end{aligned} \quad (3.39)$$

e $C[\rho]$ é chamada de concorrência. A concorrência por si só é um quantificador de emaranhamento, e para o caso de estados de dois qubits é dada por

$$C[\rho] = \max\{0, \alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3 - \alpha_4\}, \quad (3.40)$$

com os $\alpha_i = \sqrt{\lambda_i}$, $\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3 > \lambda_4$, as raízes quadradas dos autovalores do operador $\rho \tilde{\rho}$, sendo

$$\tilde{\rho} = (\hat{\sigma}_y^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_y^{(2)}) \rho^* (\hat{\sigma}_y^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_y^{(2)}). \quad (3.41)$$

Para estados puros de dois qubits a concorrência possui a fórmula simplificada

$$C[\rho] = \sqrt{1 - (\mathbf{a}^{(1)})^2} = \sqrt{1 - (\mathbf{a}^{(2)})^2}, \quad (3.42)$$

com $\mathbf{a}^{(1)}$ e $\mathbf{a}^{(2)}$ os vetores de Bloch dos subsistemas de ρ .

3.2.1.3 Critério de Peres e a negatividade

O conceito de separabilidade é definido em termos do teorema de Schmidt, entretanto é possível mostrar que, para alguns casos, tal definição é equivalente à positividade da transposta parcial (PERES, 1996). Dado um estado ρ de um sistema composto de duas partes, definimos a matriz transposta parcial com relação ao subsistema 1, ρ^{T_1} , cujos elementos com relação a duas bases arbitrárias $|\mu_i^{(1)}\rangle$ e $|\nu_j^{(2)}\rangle$ de \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 são dados por

$$\langle \mu_i^{(1)} | \otimes \langle \nu_j^{(2)} | \rho | \mu_k^{(1)} \rangle \otimes | \nu_l^{(2)} \rangle = \langle \mu_k^{(1)} | \otimes \langle \nu_j^{(2)} | \rho^{T_1} | \mu_i^{(1)} \rangle \otimes | \nu_l^{(2)} \rangle. \quad (3.43)$$

Um estado ρ é dito positivo com relação à transposição parcial (PPT) se sua transposta parcial com relação a qualquer subsistema possuir apenas autovalores positivos.

No caso de estados de dois qubits, o critério de Peres estabelece a equivalência entre PPT e separabilidade tornando possível a definição de um quantificador de emaranhamento chamado negatividade $\mathcal{N}[\rho]$ dado por (VIDAL; WERNER, 2002)

$$\mathcal{N}[\rho] = \|\rho^{T_1}\|_1 = \left(\sum_i |\lambda_i| \right) - 1, \quad (3.44)$$

com $\|\rho^{T_1}\|_1 = \sum_i |\lambda_i|$ a norma traço do operador ρ^{T_1} , dada em termos de seus autovalores λ_i . Se ρ^{T_1} possuir apenas autovalores positivos, então $\sum_i |\lambda_i| = 1$ e a negatividade do estado será zero. Com a negatividade podemos definir também a negatividade logarítmica $E_{\mathcal{N}}[\rho]$ como

$$E_{\mathcal{N}}[\rho] = \log_2 [1 + 2\mathcal{N}[\rho]], \quad (3.45)$$

que é outro quantificador de emaranhamento recorrentemente considerado.

O critério PPT é equivalente ao conceito de separabilidade apenas em alguns casos (HORODECKI et al., 2009). Além do caso citado para estados de dois qubits, a equivalência é também válida para sistemas bipartite do tipo 2×3 , ou seja com um dos espaços de Hilbert de dimensão 2 e o outro de dimensão 3, e também para alguns estados definidos em espaços de dimensão infinita (WEEDBROOK et al., 2012). Neste último caso o critério de Peres é importante, por exemplo, para o cálculo do emaranhamento em estados gaussianos. Mesmo no caso em que é incerta a equivalência entre PPT e separabilidade, a positividade da transposta parcial é utilizada como modo de se estudar, ao menos em nível qualitativo, o emaranhamento, como é feito para diversos sistemas de muitas partes (AMICO et al., 2008).

3.2.1.4 Outras correlações quânticas e a discórdia

Além do emaranhamento, os estado mistos podem apresentar outros tipos correlações de natureza quântica (HENDERSON; VEDRAL, 2001). As correlações, clássicas e quânticas, codificadas em um estado de um sistema de duas partes são quantificadas em termos da informação mútua

$$\mathcal{I}[\rho] = S_{vN}[\rho_1] + S_{vN}[\rho_2] - S_{vN}[\rho], \quad (3.46)$$

com $S_{vN}[\rho] = -\text{Tr}[\rho \ln[\rho]]$ a entropia de von Neumann do operador densidade ρ , e $\rho_{1(2)} = \text{Tr}_{2(1)}[\rho]$.

Para quantificar apenas correlações quânticas, subtrai-se $\mathcal{I}[\rho]$ de um quantificador de correlações clássicas no sistema. Tal quantificador \mathcal{Q} pode ser definido como a informação máxima que pode ser obtida sobre o subsistemas 1 através de uma medida não seletiva

sobre o subsistema 2 (OLLIVIER; ZUREK, 2001):

$$\mathcal{Q}[\rho] = \max_{\{\hat{\Pi}_k^{(2)}\}} \left[S_{vN}[\rho_1] - \sum_k p_k S_{vN}[\rho_{1||k}] \right], \quad (3.47)$$

onde $\{\hat{\Pi}_k^{(2)}\}$ é um conjunto completo de projetores que atuam no subespaço 2, $p_k = \text{Tr}[(\hat{I}_2 \otimes \hat{\Pi}_k^{(2)})\rho]$ é a probabilidade de se medir o subsistema 2 no estado descrito pelo projetor $\hat{\Pi}_k$ e $\rho_{1||k}$ são os operadores densidade do subsistema 1 após o subsistema 2 ser medido pelo projetor $\hat{\Pi}_k$:

$$\rho_{1||k} = \frac{\text{Tr}_2[(\hat{I}_2 \otimes \hat{\Pi}_k^{(2)})\rho(\hat{I}_2 \otimes \hat{\Pi}_k^{(2)})]}{p_k}. \quad (3.48)$$

Desta maneira, a discórdia quântica é definida como

$$\mathcal{D}^{1||2}[\rho] = \mathcal{I}[\rho] - \mathcal{Q}[\rho]. \quad (3.49)$$

Para o cálculo da discórdia quântica é necessário, em geral, realizar um processo de extremização sobre todos os possíveis conjuntos de medidas parametrizados por projetores sobre um dos subsistemas, tornando a tarefa computacionalmente complicada mesmo para o caso mais simples dos estados de dois qubits (HUANG, 2014). É possível contornar este problema considerando a chamada discórdia geométrica \mathcal{D}_G (DAKIC; VEDRAL; BRUKNER, 2010), definida como a mínima distância (no espaço dos operadores densidade) entre a matriz densidade ρ estudada e o conjunto de operadores com discórdia quântica nula Ξ :

$$\mathcal{D}_G[\rho] = \min_{\xi \in \Xi} \|\rho - \xi\|. \quad (3.50)$$

A princípio esta quantidade também requer o cálculo de um processo de extremização, entretanto, se ρ é um estado de dois qubits a expressão (3.50) é dada em termos dos elementos da decomposição de Fano de ρ (3.25) por

$$\mathcal{D}_G^{1||2}[\rho] = \frac{1}{4} \left((a^{(1,2)})^2 + \|T\|^2 - k_{max} \right), \quad (3.51)$$

com $\|T\|^2 = \text{Tr}[TT^T]$ e k_{max} o maior autovalor da matriz $\mathbf{a}_{1(2)}\mathbf{a}_{1(2)}^T + TT^T$. Para estados de dois qubits a discórdia geométrica satisfaz a desigualdade

$$\mathcal{D}_G[\rho] \geq (\mathcal{N}[\rho])^2, \quad (3.52)$$

com \mathcal{N} a negatividade.

Ressaltamos que tanto a discórdia quântica quanto a discórdia geométrica são medidas assimétricas com relação aos sistemas medidos, isto é, em geral $\mathcal{D}_G^{1||2}[\rho] \neq \mathcal{D}_G^{2||1}[\rho]$. A discórdia é uma correlação presente em diversos estados mistos resultantes de uma evolução de um sistema aberto e foi mostrado que é possível utilizar a discórdia para realizar algoritmos quânticos com estados separáveis (DATTA; SHAJI; CAVES, 2008).

3.2.2 Desigualdade de Bell e a não-localidade

Inicialmente o emaranhamento foi relacionado com o conceito de não-localidade da mecânica quântica. A discussão da não-localidade foi iniciada por Einstein, Podolsky e Rosen em 1935 (EINSTEIN; PODOLSKY; ROSEN, 1935), e refinada por J. Bell em seu famoso artigo de 1964 (BELL, 1964). A descoberta mais relevante desta discussão é a incompatibilidade entre as predições da mecânica quântica e àquelas advindas de qualquer teoria física que satisfaz a noção de localidade.

Considera-se um experimento no qual dois sistemas 1 e 2, por exemplo dois spins, interagem e então são separados espacialmente (BRUNNER et al., 2014). Em seguida são feitas medidas sob os sistemas: no sistema 1 mede-se a quantidade x_1 com valor $a^{(1)}$, enquanto no sistema 2 se mede-se a quantidade x_2 com valor $a^{(2)}$. Após se repetir o experimento diversas vezes, será obtida uma distribuição de probabilidade $p(a^{(1)} a^{(2)}|x_1 x_2)$ que fornece a probabilidade de se medir a variável x_i com valor $a^{(i)}$. Espera-se que esta distribuição não seja favorável como

$$p(a^{(1)} a^{(2)}|x_1 x_2) \neq p(a^{(1)}|x_1)p(a^{(2)}|x_2), \quad (3.53)$$

havendo portanto uma dependência estatística entre as medidas x_1 e x_2 . Em uma teoria local esta correlação entre as variáveis deve estar relacionada a alguma dependência previamente estabelecida entre os dois sistemas não sendo associada à influência direta de um sistema sobre o outro (BRUNNER et al., 2014).

Matematicamente a localidade de uma teoria é expressa em termos de uma teoria de variáveis escondidas (BRUNNER et al., 2014). Os fatores que definem a correlação estatística entre as medidas x_1 e x_2 são descritos em termos de uma variável λ tal que a distribuição conjunta de probabilidades $p(a^{(1)} a^{(2)}|x_1 x_2, \lambda)$ seja favorável

$$p(a^{(1)} a^{(2)}|x_1 x_2, \lambda) = p(a^{(1)}|x_1, \lambda) p(a^{(2)}|x_2, \lambda), \quad (3.54)$$

e, desta maneira, a probabilidade de medida da variável $a^{(1)}$ dependerá apenas da medida local x_1 e de λ . Se os diferentes valores que λ assume em cada experimento são descritos pela distribuição de probabilidades $q(\lambda)$, então $p(a^{(1)} a^{(2)}|x_1 x_2)$ será dada por

$$p(a^{(1)} a^{(2)}|x_1 x_2) = \int d\lambda q(\lambda) p(a^{(1)}|x_1, \lambda) p(a^{(2)}|x_2, \lambda). \quad (3.55)$$

As correlações entre 1 e 2 são ditas locais se elas podem ser decompostas segundo (3.55), ou seja, se as correlações entre medidas realizadas nestes dois sistemas pode ser descritas em termos de uma variável escondida λ .

Uma desigualdade de Bell é uma desigualdade linear nas probabilidades dadas pelas distribuições $p(a^{(1)} a^{(2)}|x_1 x_2)$ satisfeita por correlações locais segundo a definição (3.55) (BRUNNER et al., 2014). Existem diversos tipos de desigualdades de Bell, a mais

famosa devido a Clauser-Horne-Shimony-Holt (desigualdade CHSH) (CLAUSER et al., 1969), que leva em conta medidas binárias, isto é $x_1, x_2 \in \{0, 1\}$ com possíveis resultados também binários $a^{(1)}, a^{(2)} \in \{-1, +1\}$. Seja o valor médio $\langle a_{x_1}^{(1)} a_{x_2}^{(1)} \rangle$ do produto $a^{(1)} a^{(2)}$ dadas as escolhas de medidas (x_1, x_2) :

$$\langle a_{x_1}^{(1)} a_{x_2}^{(1)} \rangle = \sum_{a^{(1)}, a^{(2)}} a^{(1)} a^{(2)} p(a^{(1)} a^{(2)} | x_1 x_2). \quad (3.56)$$

Se as probabilidades $p(a^{(1)} a^{(2)} | x_1 x_2)$ satisfazem (3.55), então (BRUNNER et al., 2014)

$$B = \langle a_0^{(1)} a_0^{(2)} \rangle + \langle a_0^{(1)} a_1^{(2)} \rangle + \langle a_1^{(1)} a_0^{(2)} \rangle - \langle a_1^{(1)} a_1^{(2)} \rangle \leq 2, \quad (3.57)$$

que é chamada de desigualdade CHSH.

Para predições de observáveis binários advindos da teoria quântica observa-se a possibilidade de violação da desigualdade CHSH (3.57). Um exemplo importante é para o estado de dois qubits

$$|\psi^-\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (3.58)$$

com $\hat{\sigma}_z|0\rangle = +1|0\rangle$ e $\hat{\sigma}_z|1\rangle = -1|1\rangle$. As medidas x_1 e x_2 são associada aos vetores \mathbf{x}_1 e \mathbf{x}_2 , tais que o primeiro qubit será medido de acordo com o operador $\hat{X}^{(1)} = \mathbf{x}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(1)}$ e o segundo qubit de acordo com $\hat{X}^{(2)} = \mathbf{x}_2 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(2)}$. O valor médio do operador $\hat{X}^{(1)} \otimes \hat{X}^{(2)}$ com relação ao estado (3.58) é, então,

$$\langle \hat{X}^{(1)} \otimes \hat{X}^{(2)} \rangle = \langle \psi^- | \hat{X}^{(1)} \otimes \hat{X}^{(2)} | \psi^- \rangle = -\mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_2, \quad (3.59)$$

e as duas possíveis medidas necessárias para o estudo da desigualdade CHSH são

$$\begin{aligned} \hat{X}_0^{(i)} &\rightarrow \mathbf{x}_i^{(0)} = -\frac{\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y}{\sqrt{2}}, \\ \hat{X}_1^{(i)} &\rightarrow \mathbf{x}_i^{(1)} = \frac{-\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Desta maneira, a quantidade B será dada por

$$B = \langle \hat{X}_0^{(1)} \otimes \hat{X}_0^{(2)} \rangle + \langle \hat{X}_0^{(1)} \otimes \hat{X}_1^{(2)} \rangle + \langle \hat{X}_1^{(1)} \otimes \hat{X}_0^{(2)} \rangle - \langle \hat{X}_1^{(1)} \otimes \hat{X}_1^{(2)} \rangle = 2\sqrt{2} > 2, \quad (3.61)$$

mostrando que as correlações entre os subsistemas do estado (3.58) são não locais.

Apesar do exemplo acima ser particular, para estados puros de dois qubits, não localidade e emaranhamento são equivalentes, ou seja, todo o estado puro que apresenta correlações não locais é emaranhado (BRUNNER et al., 2014). Entretanto para estados mistos separabilidade não implica em localidade, isto é, existem estados mistos que são emaranhados mas cuja a correlação pode ser descrita em termos de um modelo e variáveis escondidas.

De maneira generalizada podemos escrever a desigualdade CHSH para um estado bipartite como

$$|\langle \hat{B} \rangle| \leq 2, \quad (3.62)$$

com \hat{B} o operador

$$\hat{B} = \hat{A}_0^{(1)} \otimes \hat{A}_0^{(2)} + \hat{A}_0^{(1)} \otimes \hat{A}_1^{(2)} + \hat{A}_1^{(1)} \otimes \hat{A}_0^{(2)} - \hat{A}_1^{(1)} \otimes \hat{A}_1^{(2)}, \quad (3.63)$$

onde $\hat{A}_j^{(i)} = \mathbf{A}_j \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(i)}$. As correlações codificadas em um estado ρ são locais se, para ao menos um conjunto de operadores $\{\hat{A}_i^{(1)}, \hat{A}_i^{(2)}\}$

$$|\text{Tr}[\hat{B}\rho]| \leq 2. \quad (3.64)$$

Para se determinar se as correlações em ρ são locais ou não é necessário encontrar o conjunto de operadores $\{\hat{A}_i^{(1)}, \hat{A}_i^{(2)}\}$ que maximize $|\text{Tr}[\hat{B}\rho]|$. Se o valor máximo desta quantidade for maior do que 2, as correlações são não locais.

A extremização da função de Bell $|\text{Tr}[\hat{B}\rho]|$ é simplificado para estados de dois qubits. Neste caso temos explicitamente (HORODECKI; HORODECKI; HORODECKI, 1995)

$$\max_{\{\hat{A}_i^{(1)}, \hat{A}_i^{(2)}\}} [|\text{Tr}[\hat{B}\rho]|] = 2\sqrt{t_1 + t_2}, \quad (3.65)$$

com t_1 e t_2 os maiores autovalores da matriz $T^T T$, desta maneira o quantificador de não localidade é identificado como

$$M[\rho] = t_1 + t_2 \quad (3.66)$$

e a desigualdade CHSH (3.64) é equivalente à desigualdade

$$M[\rho] > 1. \quad (3.67)$$

Definindo a função de Bell como

$$\mathcal{B}[\rho] = M[\rho] - 1, \quad (3.68)$$

um estado de dois qubits violará a desigualdade CHSH se

$$\mathcal{B}[\rho] > 0. \quad (3.69)$$

3.3 Emaranhamento Spin-Paridade

Como é possível notar por inspeção direta, os autoestados do operador Hamiltoniano de Dirac (3.4)

$$\begin{aligned} |u_s(p)\rangle &= N(p) \left[|+\rangle^{(P)} \otimes |\eta_s^{(S)}\rangle + \frac{1}{E_p + m} |-\rangle^{(P)} \otimes (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p} |\eta_s^{(S)}\rangle) \right], \\ |v_s(p)\rangle &= N(p) \left[\frac{1}{E_p + m} |+\rangle^{(P)} \otimes (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p} |\eta_s^{(S)}\rangle) + |-\rangle^{(P)} \otimes |\eta_s^{(S)}\rangle \right], \end{aligned}$$

não são separáveis. As soluções da equação de Dirac descrevem, então, estados com emaranhamento entre spin e paridade intrínseca que, de agora em diante, chamaremos simplesmente de emaranhamento spin-paridade.

Diferente do emaranhamento usualmente considerado que de modo geral correlaciona graus de liberdade de duas partículas, por exemplo o emaranhamento entre spins de dois elétrons ou entre as polarizações de dois fótons, o emaranhamento entre spin e paridade intrínseca está codificado entre dois graus de liberdade da mesma partícula e é, portanto, um tipo de emaranhamento intrínseco. O emaranhamento intrínseco é presente em outros sistemas físicos. Em física de nêutrons, por exemplo, é possível projetar interferômetros de modo a emaranhar o spin de um nêutron com um número quântico associado ao possível caminho que a partícula percorre no aparato experimental (HASEGAWA et al., 2007; KLEPP; SPONAR; HASEGAWA, 2014). Esta correlação entre caminho e spin foi demonstrada experimentalmente e utilizada para o estudo da desigualdade de Bell (KLEPP; SPONAR; HASEGAWA, 2014). Outro interessante exemplo da física de partículas é a dos estados de sabor em física de neutrinos (BLASONE et al., 2008b; BLASONE et al., 2009; BLASONE et al., 2015). O fenômeno de oscilação de sabores sugere que um estado de sabor associado a um neutrino com característica eletrônica, muônica ou taônica bem definida deve ser descrito como uma superposição de estados com massa definida, os autoestados de massa (BERNARDINI; LEO, 2004; BERNARDINI; LEO, 2005; BERNARDINI; GUZZO, 2008; BERNARDINI; GUZZO; NISHI, 2011). Nesse *framework*, pode-se interpretar cada autoestado de massa como associado a um número de ocupação de modo que um estado de sabor é descrito como um estado emaranhado de modos de massa. Esta interpretação repagina o estudo da física da oscilação de sabores em termos de correlações quânticas e foi investigada inclusive no cenário dos neutrinos cosmológicos (BERNARDINI; BITTENCOURT, 2013; BERNARDINI, 2013b; BERNARDINI, 2013a; BITTENCOURT; VILLAS-BOAS; BERNARDINI, 2014). Em óptica quântica o emaranhamento intrínseco é utilizado em diversos contextos, da interferometria em um *setup* similar ao da física de nêutrons (WALTON et al., 2003), à implementação de portas lógicas quânticas, para a qual se usa o emaranhamento entre a polarização e *momentum* da partícula (FIORENTINO; WONG, 2004).

No caso das soluções da equação de Dirac livre, o caráter emaranhado dos autoestados (3.9) depende da polarização, resumida em $|\eta_s^{(S)}\rangle$. Para autoestados de helicidade $|\eta_s^{(S)}\rangle = |h_s^{(S)}\rangle$ tal que

$$\mathbf{p} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)} |h_s^{(S)}\rangle = (-1)^s p |h_s^{(S)}\rangle \quad (3.70)$$

e (3.9) são escritos de maneira simplificada como

$$\begin{aligned} |u_s(p)\rangle &= N(p) \left[|+\rangle^{(P)} + (-1)^s \frac{p}{E_p + m} |-\rangle^{(P)} \right] \otimes |h_s^{(S)}\rangle, \\ |v_s(p)\rangle &= N(p) \left[(-1)^s \frac{p}{E_p + m} |+\rangle^{(P)} + |-\rangle^{(P)} \right] \otimes |h_s^{(S)}\rangle, \end{aligned} \quad (3.71)$$

que são estados separáveis. Este caráter separável pode ser modificado devido a alguma influência externa, por exemplo, por um processo espalhamento por uma barreira de potencial conforme mostramos a seguir.

3.3.1 Emaranhamento spin-paridade sob espalhamento por uma barreira de potencial

Os autoestados de helicidade (3.71) são separáveis entre spin e paridade, entretanto um espalhamento por uma barreira de potencial bidimensional constante afeta esta característica das soluções da equação de Dirac. Neste exemplo, consideramos uma partícula descrita pela equação de Dirac incidindo obliquamente à uma barreira de potencial constante e mostraremos que apenas o processo de espalhamento é suficiente para criar emaranhamento entre spin e paridade nas ondas refletida e transmitida (BITTENCOURT S. S. MIZRAHI, 2015).

A barreira, neste exemplo, é incluída na equação de Dirac via acoplamento minimal (GREINER, 2000)

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\hat{H}_D + V(x, y) \hat{I}_4) \psi, \quad (3.72)$$

e as soluções estacionárias da equação de Dirac serão obtidas pela equação

$$\hat{H}_D \psi = (E - V) \psi, \quad (3.73)$$

de tal modo que a estrutura biespinorial das soluções ψ podem ser obtidas diretamente através das substituições $E \rightarrow E - V$ e $p = \sqrt{E^2 - m^2} \rightarrow \sqrt{(E - V)^2 - m^2} = 1$ em (2.66). A barreira de potencial esquematizada na Fig. 1 é dada pelo potencial

$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{para } x < 0, \quad (\text{Região A}) \\ V_0 & \text{para } x > 0, \quad (\text{Região B}) \end{cases} \quad (3.74)$$

e as soluções da equação de Dirac serão separadas nas duas regiões destacadas na Fig. 1. Os *momenta* incidente, refletido e transmitido serão dados respectivamente por

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_I &= p \cos(\theta) \mathbf{e}_x + p \sin(\theta) \mathbf{e}_y, \\ \mathbf{p}_R &= -p \cos(\theta) \mathbf{e}_x + p \sin(\theta) \mathbf{e}_y, \\ \mathbf{p}_T &= q \cos(\theta') \mathbf{e}_x + q \sin(\theta') \mathbf{e}_y. \end{aligned} \quad (3.75)$$

As soluções de onda plana com energias positivas de (3.72) para a barreira de potencial (3.74) terão a forma

$$|\psi\rangle = |u_s(p)\rangle e^{-i(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})}, \quad (3.76)$$

com $|u_s(p)\rangle$ os autoestados de energia positiva do Hamiltoniano de Dirac. Supondo que tais soluções descrevem autoestados de helicidade, a parte biespinorial de $|\psi\rangle$ será dada por (3.71) onde, para propagação bidimensional no plano $x - y$ com *momentum* $\mathbf{p} = p \cos(\theta) \mathbf{e}_x + p \sin(\theta) \mathbf{e}_y$ os biespinores serão dados em termos dos autoestados $|\pm^{(S)}\rangle$

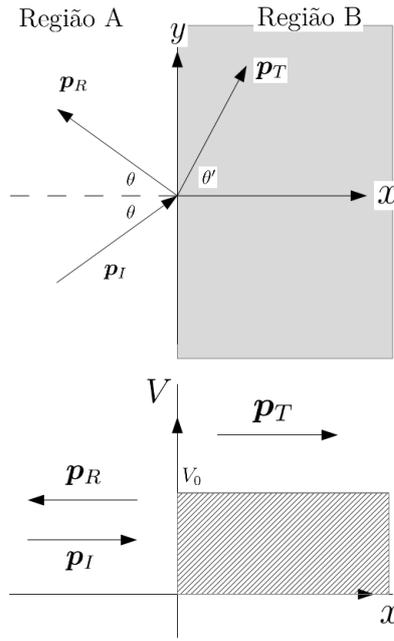


Figura 1 – Espalhamento por uma barreira de potencial bidimensional. Um biespinor de Dirac é espalhado pelo potencial em $x = 0$ com um *momentum* incidente \mathbf{p}_I que descreve um ângulo θ com a barreira. As ondas refletidas e transmitidas possuem *momenta* \mathbf{p}_R e \mathbf{p}_T respectivamente.

do operador $\hat{\sigma}_z^{(S)}$ por:

$$\begin{aligned}
 |u_s(p)\rangle &\equiv |\psi_s(E, m, \theta)\rangle \\
 &= \sqrt{\frac{E+m}{2E}} \left(|+\rangle^{(P)} + (-1)^s \sqrt{\frac{E-m}{E+m}} |-\rangle^{(P)} \right) \\
 &\quad \otimes \frac{\left((-1)^s |+\rangle^{(S)} + e^{i\theta} |-\rangle^{(S)} \right)}{\sqrt{2}}.
 \end{aligned} \tag{3.77}$$

Desta maneira, as soluções de (3.72) com energia positiva serão dadas por

$$\psi_s = \begin{cases} |\psi_s(E, m, \theta)\rangle \text{Exp}\left[-i(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})\right] & \text{para a Região A,} \\ |\psi_s(E - V_0, m, \theta')\rangle \text{Exp}\left[-i((E - V_0)t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{x})\right] & \text{para a Região B,} \end{cases} \tag{3.78}$$

com $q^2 = (E - V_0)^2 - m^2$.

Para a geometria do espalhamento bidimensional esquematizada na Figura 1, as ondas incidente, refletida e transmitida serão dadas, respectivamente, por

$$\begin{aligned}
 |\psi_I(x, y, t)\rangle &= (I_+ |\psi_+(E, m, \theta)\rangle + I_- |\psi_-(E, m, \theta)\rangle) \exp[-i(Et - \mathbf{p}_I \cdot \mathbf{x})], \\
 |\psi_R(x, y, t)\rangle &= (R_+ |\psi_+(E, m, \pi - \theta)\rangle + R_- |\psi_-(E, m, \pi - \theta)\rangle) \\
 &\quad \times \exp[-i(Et - \mathbf{p}_R \cdot \mathbf{x})], \\
 |\psi_T(x, y, t)\rangle &= (T_+ |\psi_+(E - V_0, m, \theta')\rangle + T_- |\psi_-(E - V_0, m, \theta')\rangle) \\
 &\quad \times \exp[-i((E - V_0)t - \mathbf{p}_T \cdot \mathbf{x})],
 \end{aligned} \tag{3.79}$$

com os coeficientes I_{\pm} , R_{\pm} e T_{\pm} descrevendo as amplitudes de helicidade positiva e negativa para as ondas incidente, refletida e transmitida.

A descontinuidade da barreira de potencial (3.74) ao longo do eixo x implica em

$$p \sin(\theta) = q \sin(\theta'), \quad (3.80)$$

e, como $p = \sqrt{E^2 - m^2}$ e $q = \sqrt{(E - V_0)^2 - m^2}$, o ângulo de incidência e o ângulo de transmissão satisfazem a seguinte relação

$$\sin \theta' = \sin(\theta) \sqrt{\frac{E^2 - m^2}{(E - V_0)^2 - m^2}} = \sin(\theta) \sqrt{\frac{1 - \mu^2}{(1 - \nu)^2 - \mu^2}}, \quad (3.81)$$

com $\mu = m/E$, $\nu = V_0/E$, e $0 < \theta < \pi/2$. A princípio, é possível classificar duas zonas energéticas para o problema: uma para $\nu \leq 1$, que corresponde ao regime de difusão, e outra para $\nu > 1$ que corresponde ao regime de Klein (GREINER, 2000). Outra maneira é separar as zonas energéticas de acordo com o comportamento oscilatório ou evanescente da onda transmitida. Na região B, a onda $|\psi_T(x, y, t)\rangle$ terá comportamento oscilatório se

$$\begin{aligned} 1 > \nu + \sqrt{(1 - \mu^2) \sin^2(\theta) + \mu^2} & \quad (\text{Zona de difusão}), \\ \mu < 1 < \nu - \sqrt{(1 - \mu^2) \sin^2(\theta) + \mu^2} & \quad (\text{Zona de Klein}), \end{aligned} \quad (3.82)$$

e evanescente se

$$|1 - \nu| < \sqrt{(1 - \mu^2) \sin^2(\theta) + \mu^2} \quad (\text{Zona de tunelamento}) \quad (3.83)$$

que também pode ser separado em duas partes: $\nu \leq 1$ e $\nu > 1$.

A zona energética de Klein está relacionada com o paradoxo de Klein (KLEIN, 1929), no qual a probabilidade de reflexão $|R_+|^2 + |R_-|^2$ é maior do que a probabilidade incidente $|I_+|^2 + |I_-|^2$ (BERNARDINI; LEO; ROTELLI, 2004; BERNARDINI, 2008b; BERNARDINI, 2008; BERNARDINI, 2008; BERNARDINI, 2008a; BERNARDINI, 2009). Este excesso de corrente de densidade de probabilidade não pode ser corretamente interpretado no escopo de uma teoria de uma partícula. No contexto de uma teoria de muitos corpos, ou seja da teoria quântica de campos, a probabilidade de reflexão é associada ao número de partículas refletidas pela barreira e seu excesso é compensado pela produção de antipartículas que se propagam na região da barreira (ITZYKSON; ZUBER, 1980).

Tanto para a zona de difusão quanto para a zona de Klein, o comportamento oscilatório da onda transmitida ocorre para ângulos de incidência tais que

$$\sin^2(\theta) < \frac{(1 - \nu)^2 - \mu^2}{1 - \mu^2} = \sin^2(\theta_c). \quad (3.84)$$

Para ângulos $\theta > \theta_c$, a onda transmitida exhibe comportamento evanescente e o ângulo θ_c é análogo ao ângulo de Brewster da lei de Snell da óptica geométrica.

A solução completa da equação de Dirac (3.72) será dada então em termos dos bispinores de (3.79) como

$$|\psi_A(x, y, t)\rangle = |\psi_I(x, y, t)\rangle + |\psi_R(x, y, t)\rangle, \quad (3.85)$$

para a região A e

$$|\psi_B(x, y, t)\rangle = |\psi_T(x, y, t)\rangle, \quad (3.86)$$

para a região B. A condição de continuidade na barreira

$$|\psi_A(0, y, t)\rangle = |\psi_B(0, y, t)\rangle, \quad (3.87)$$

relaciona os coeficientes I_{\pm} , R_{\pm} e T_{\pm} através do sistema linear de equações

$$\begin{cases} I_+ - I_- + R_+ - R_- = \sqrt{\frac{1-\nu-\mu}{(1-\nu)(1-\mu)}} (T_+ - T_-), \\ e^{i(\theta-\theta')}(I_+ + I_-) - e^{-i(\theta+\theta')}(R_+ + R_-) = \sqrt{\frac{1-\nu-\mu}{(1-\nu)(1-\mu)}} (T_+ + T_-), \\ I_+ + I_- + R_+ + R_- = \sqrt{\frac{1-\nu+\mu}{(1-\nu)(1+\mu)}} (T_+ + T_-), \\ e^{i(\theta-\theta')}(I_+ - I_-) - e^{-i(\theta+\theta')}(R_+ - R_-) = \sqrt{\frac{1-\nu+\mu}{(1-\nu)(1+\mu)}} (T_+ - T_-). \end{cases} \quad (3.88)$$

A solução do sistema linear acima é dada explicitamente por

$$R_{\pm} = \pm i \operatorname{Im}[A] I_{\pm} \mp \operatorname{Re}[A] I_{\mp}, \quad (3.89)$$

$$T_{\pm} = \operatorname{Re} \left[e^{i\frac{\theta-\theta'}{2}} + e^{i\frac{\theta+\theta'}{2}} A \right] I_{\pm} + i \operatorname{Im} \left[e^{i\frac{\theta-\theta'}{2}} - e^{i\frac{\theta+\theta'}{2}} A \right] I_{\mp}, \quad (3.90)$$

com A dado por

$$A = \frac{(\mu \cos(\theta) + i \sin(\theta)) \cos^2(\theta_c)}{\cos^2(\theta_c) - (1 \pm \sqrt{\mu^2 \cos^2(\theta_c) + \sin^2(\theta_c)}) (\cos^2(\theta) + \cos(\theta) \sqrt{\sin^2(\theta_c) - \sin^2(\theta)})}. \quad (3.91)$$

Os resultados apresentados em (3.88, 3.90) são para a zona (oscilatória e evanescente) de difusão, sendo o resultado para a zona de Klein obtido através da substituição $1-\nu \rightarrow \nu-1$ nestas expressões. Na fórmula para A (3.91), o sinal $+$ no denominador se refere à zona de difusão, e o sinal $-$ à zona de Klein, lembrando que θ e θ' estão relacionados através de (3.81). Ressaltamos que para a onda incidente normalizada $|I_+|^2 + |I_-|^2 = 1$, e as amplitudes de reflexão e transmissão satisfazem a equação da continuidade dada por

$$|R_+|^2 + |R_-|^2 + \frac{v_{q,x}}{v_{p,x}} [|T_+|^2 + |T_-|^2] = 1, \quad (3.92)$$

com $v_{q,x}$ e $v_{p,x}$ as componentes x das velocidades, i. e.

$$\begin{aligned} v_{q,x} &= v_q \cos(\theta') = \frac{q}{E-V} \cos(\theta') = \cos(\theta') \sqrt{\frac{(1-\nu)^2 - \mu^2}{(1-\nu)^2}}, \\ v_{p,x} &= v_p \cos(\theta) = \frac{p}{E} \cos(\theta) = \cos(\theta) \sqrt{1-\mu^2}. \end{aligned} \quad (3.93)$$

Com as expressões (3.90,3.91) podemos quantificar como a barreira afeta o emaranhamento entre paridade e spin codificado na onda incidente. O operador densidade que descreve o estado das ondas incidente, refletida e transmitida é dado por

$$\varrho_\alpha = |\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha|, \quad (3.94)$$

com $\alpha = I, R, T$, com a estrutura bispinorial das ondas resumida por

$$|\psi_\alpha(x, y, t)\rangle = |\psi_\alpha\rangle \exp[-i(Et - \mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{x})], \quad (3.95)$$

onde

$$|\psi_\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + \kappa_\alpha^2}} [|+\rangle^{(P)} \otimes (\alpha_+ |h_{\alpha,+}^{(S)}\rangle + \alpha_- |h_{\alpha,-}^{(S)}\rangle) + \kappa_\alpha |-\rangle^{(P)} \otimes (\alpha_+ |h_{\alpha,+}^{(S)}\rangle - \alpha_- |h_{\alpha,-}^{(S)}\rangle)], \quad (3.96)$$

e $|h_{\alpha,\pm}^{(S)}\rangle$ os autoestados de helicidade para a partícula com *momentum* \mathbf{p}_α

$$|h_{\alpha,\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[1 \pm \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \frac{\mathbf{p}_\alpha}{p_\alpha} \right] |\pm^{(S)}\rangle, \quad (3.97)$$

e as constantes κ_α dadas por

$$\kappa_I = \kappa_R = \sqrt{\frac{1 - \mu}{1 + \mu}}, \quad \text{and} \quad \kappa_T = \sqrt{\frac{1 - \nu - \mu}{1 - \nu + \mu}}, \quad (3.98)$$

onde μ é dado em termos de $\sin(\theta_c)$ e μ através da Eq. (3.84). Como

$$\text{Tr}[\rho_\alpha] = |\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2, \quad (3.99)$$

os operadores densidade associados às ondas refletida e transmitida não estão normalizados. De fato, de (3.92), os traços dos operadores densidade estão relacionados entre si através de

$$\text{Tr}[\rho_R] + \frac{v_{q,x}}{v_{p,x}} \text{Tr}[\rho_T] = 1, \quad (3.100)$$

de modo que devemos considerar as matrizes densidade normalizadas dadas por

$$\rho_\alpha^N = \frac{\rho_\alpha}{\text{Tr}[\rho_\alpha]} = \frac{\rho_\alpha}{|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2}. \quad (3.101)$$

Como os estados $\rho_{I,R,T}^N$ são puros, a entropia de emaranhamento (3.35) é um quantificador adequado e é dada em termos do estado reduzido a paridade (ou ao spin) $\rho_{\alpha,P(S)}^N = \text{Tr}_{P(S)}[\rho_\alpha^N]$ por

$$S_\alpha \equiv S_{vN}[\rho_{\alpha,P}] = S_{vN}[\rho_{\alpha,S}] = - \sum \lambda_k \log \lambda_k \quad (3.102)$$

com λ_k os autovalores de $\rho_{\alpha,P(S)}^N$. Os λ_k serão dados explicitamente por

$$\lambda_{\alpha,\pm} = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} - 4 \frac{\kappa_\alpha^2}{(1 + \kappa_\alpha^2)^2} \frac{|\alpha_+|^2 |\alpha_-|^2}{(|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2)^2}}, \quad (3.103)$$

e a entropia de emaranhamento para o estado $\alpha = I, R, T$ é calculada como

$$S_\alpha = -\lambda_{\alpha,+} \log_2 \lambda_{\alpha,+} - \lambda_{\alpha,-} \log_2 \lambda_{\alpha,-}. \quad (3.104)$$

Para um estado incidente com $I_+ = 1$ e $I_- = 0$, ou seja, com helicidade positiva e emaranhamento spin-paridade nulo, as ondas refletidas e transmitidas exibem emaranhamento spin-paridade conforme mostrado na Figura 2 que apresenta os gráficos da entropia de emaranhamento para a onda refletida S_R e para a onda transmitida S_T em função do ângulo de incidência θ , para $\mu = 0.5$ e $\sin^2(\theta_c) = 0.25$ (linha contínua), $\sin^2(\theta_c) = 0.5$ (linha tracejada) e $\sin^2(\theta_c) = 0.75$ (linha tracejada e pontilhada), tanto para a zona de difusão (linhas grossas) quanto para a zona de Klein (linhas finas). Para $\theta = \theta_c$ o quantificador de emaranhamento apresenta uma descontinuidade em sua derivada primeira, indicando o ponto de transição entre as zonas de difusão e de penetração da barreira. Esta descontinuidade ocorre pois, no denominador de A (3.91) o termo $\sqrt{\sin^2(\theta_c) - \sin^2(\theta)}$ é convertido em $i\sqrt{\sin^2(\theta) - \sin^2(\theta_c)}$ e a parte real e imaginária de A são transformadas de uma maneira não analítica. Para $\theta < \theta_c$ o comportamento de S_R para a zona de difusão é igual ao da zona de Klein, entretanto para $\theta > \theta_c$ a mudança acima citada em A é tal que os valores de emaranhamento são diferentes entre estas zonas.

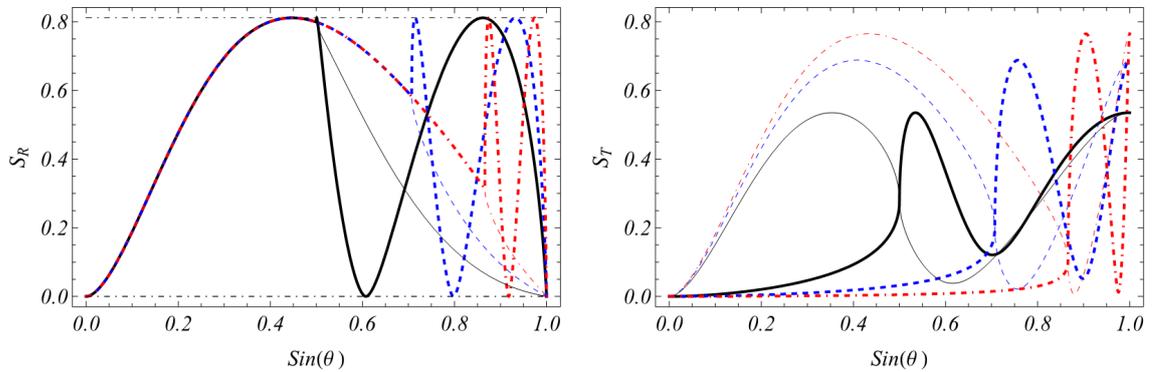


Figura 2 – Entropias de emaranhamento para a onda refletida S_R (gráfico da direita) e para a onda transmitida S_T (gráfico da esquerda). Os parâmetros utilizados são $\mu = 0.5$, $I_+ = 1$ e $\sin^2(\theta_c) = 0.25$ (linha contínua), $\sin^2(\theta_c) = 0.5$ (linha tracejada) e $\sin^2(\theta_c) = 0.75$ (linha tracejada e pontilhada) para as zonas energéticas de difusão (linhas grossas) e de Klein (linhas finas). Para $\theta = \theta_c$ há uma descontinuidade na primeira derivada do quantificador de emaranhamento, indicando a transição entre o comportamento oscilatório e o comportamento evanescente. Além disso, para $\theta < \theta_c$ o comportamento de S_R é independente do valor de θ_c . As duas linhas pontilhadas horizontais correspondem aos valores máximos de S_R .

Outro caso a ser considerado é o de uma onda incidente emaranhada no qual é possível avaliar os efeitos de uma fase relativa entre as amplitudes de incidência no emaranhamento dos estados refletido e transmitido. Consideram-se, então, amplitudes de

incidência complexas da forma

$$I_{\pm} = e^{i\omega_{\pm}} |I_{\pm}|, \quad (3.105)$$

com a diferença de fases dada por $\Delta\omega = \omega_+ - \omega_-$. A fase relativa não afeta os valores de $|R_+|^2 + |R_-|^2$ ou de $|T_+|^2 + |T_-|^2$, mudando apenas os valores dos produtos $|R_+|^2|R_-|^2$ e $|T_+|^2|T_-|^2$, como pode ser notado calculando explicitamente o produto entre as amplitudes de reflexão

$$\begin{aligned} |R_+|^2|R_-|^2 &= (\text{Im}[A]\text{Re}[A])^2 + [(\text{Im}[A])^2 - (\text{Re}[A])^2]^2 |I_+ I_-|^2 \\ &\quad - 2(\text{Im}[A]\text{Re}[A])[(\text{Im}[A])^2 - (\text{Re}[A])^2] \sin(\Delta\omega) |I_+ I_-| (|I_+|^2 - |I_-|^2) \\ &\quad - 4(\text{Im}[A]\text{Re}[A])^2 \sin^2(\Delta\omega) |I_+ I_-|^2. \end{aligned} \quad (3.106)$$

Como $|R_+|^2|R_-|^2$ depende explicitamente da fase relativa, o resultado do emaranhamento dado em termos da expressão (3.103) irá depender da diferença de fases $\Delta\omega$. Na Figura 3 apresentamos os gráficos de S_R e S_T para $|I_+| = |I_-| = 1/\sqrt{2}$ e diversos valores de $\Delta\omega$ com os outros parâmetros em correspondência com os da Figura 2. Notamos que a diferença de fases afeta o valor de mínimo do emaranhamento spin-paridade, em particular para $\Delta\omega = \pi/2$ (última linha), o ponto de mínimo corresponde ao emaranhamento nulo. Neste caso de superposição máxima entre helicidades positiva e negativa, o ângulo θ_0 que minimiza S_R é dado pela expressão

$$\sin \theta_0 = \frac{\mu}{\sqrt{1 + \mu^2}}, \quad (3.107)$$

e independe apenas do valor de μ .

Como último comentário desta seção ressaltamos que, apesar do estudo da barreira ser um exemplo didático de como o emaranhamento entre spin e paridade intrínseca pode ser modificado, existem várias situações físicas análogas à este contexto. A barreira de potencial da equação de Dirac, por exemplo, pode ser simulada por íons aprisionados (CASANOVA et al., 2010; LAMATA et al., 2011) de modo a tornar possível a medida dos efeitos descritos nessa seção, ao menos do ponto de vista simulacional. Outro interessante sistema que reproduz a dinâmica aqui descrita é o grafeno, para o qual foi medido o paradoxo de Klein (KATSNELSON; NOVOSELOV; GEIM, 2006). Iremos discutir mais a equação de Dirac no contexto da simulação com íons aprisionados e no comportamento do grafeno nos capítulos 4 e 5.

3.4 Emaranhamento spin-paridade sob potenciais externos globais

A equação de Dirac permite a inclusão de diferentes tipos de potenciais, classificados de acordo com suas propriedades de transformação sob transformações de Lorentz (THALLER, 1992), e, assim como os termos do Hamiltoniano \hat{H}_D , tais potenciais possuem uma estrutura composta associada ao grupo $SU(2) \otimes SU(2)$.

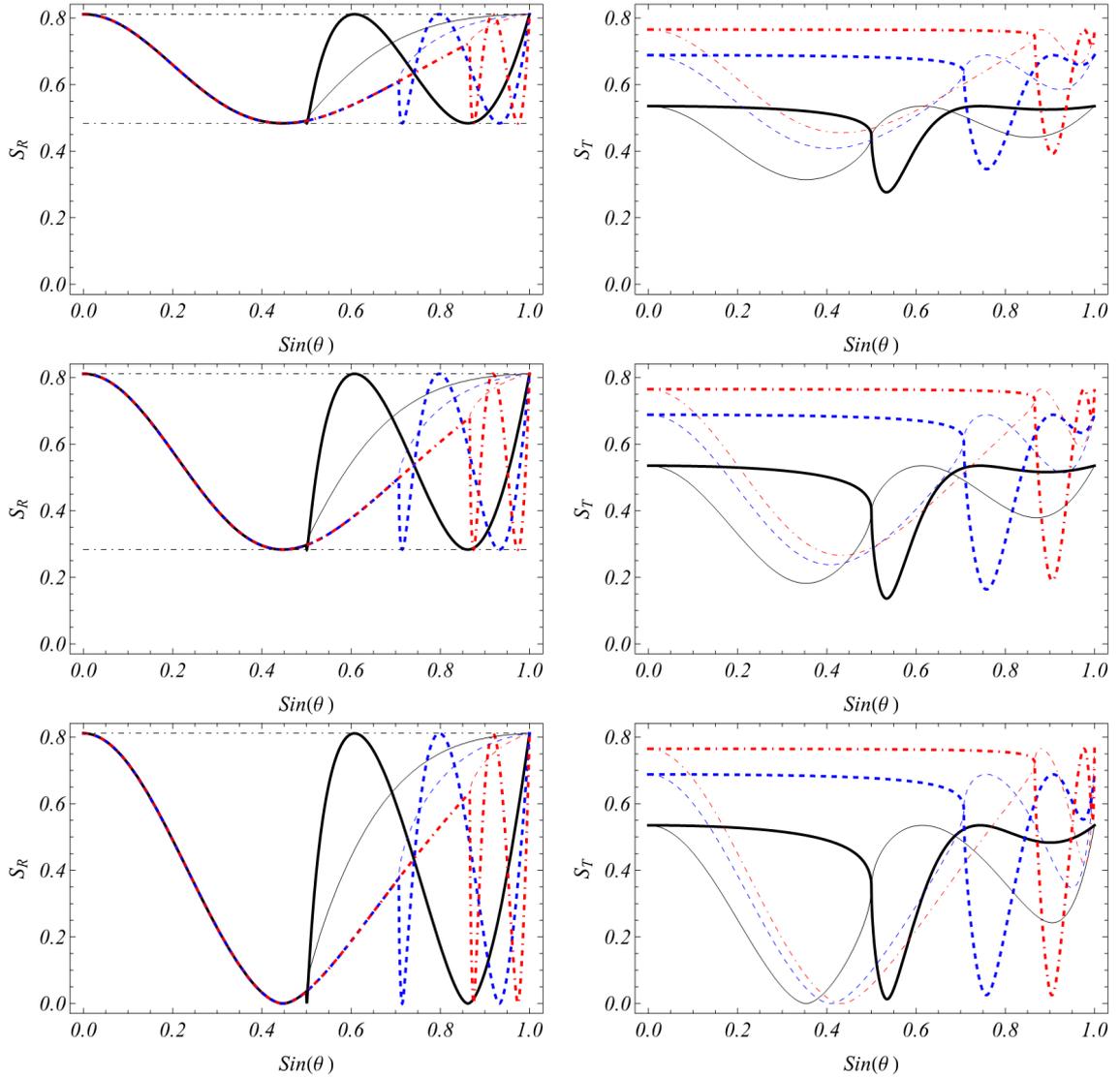


Figura 3 – S_R (coluna da direita) e S_T (coluna da esquerda) para $|I_+| = |I_-| = 1/\sqrt{2}$ e parâmetros e estilos de linha em correspondência com a Fig. 2. As fases relativas são $\Delta\omega = \pi/4$ (primeira linha), $\Delta\omega = \pi/3$ (segunda linha) e $\Delta\omega = \pi/2$ (terceira linha). Os valores de mínimo locais do emaranhamento spin-paridade quantificado por S_T decresce com o aumento da diferença de fases. Para $\Delta\omega = \pi/2$, $S_R = 0$ na zona de difusão para $\theta = \theta_0$, com $\sin(\theta_0) = \mu/\sqrt{1 + \mu^2}$.

O conteúdo correlacional dos autovetores de um Hamiltoniano de Dirac modificado, que inclui tais potenciais externos, é diferente daquele codificado nos bispinores livres, e conseqüentemente, o grau de emaranhamento entre spin-paridade de bispinores sujeitos à potenciais externos é diferente daquele dos bispinores livres. Na seção anterior vimos um simples exemplo, o de um espalhamento por uma barreira de potencial incluída no Hamiltoniano de Dirac da maneira mais simples: através do acoplamento minimal. Nesta seção descreveremos de uma maneira geral as propriedades de emaranhamento dos autoestados do Hamiltoniano modificado de Dirac incluindo os diferentes tipos de potenciais admitidos pela equação de Dirac. Como veremos nos próximos capítulos desta tese, combinações

específicas destes potenciais podem ser reproduzidas por íons aprisionados e também descrevem, de maneira efetiva, a dinâmica das excitações de baixa energia do grafeno de dupla camada de modo que a descrição generalista apresentada nesta seção poderá ser traduzida a sistemas físicos passíveis de medida experimental.

A inclusão de um potencial na equação de Dirac se dá de maneira análoga àquela da equação de Schrödinger, com a diferença de que o termo potencial não é uma função mas sim uma matriz 4×4 (THALLER, 1992). A equação de Dirac incluindo um termo de potencial é dada por

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = \hat{H} \psi(\mathbf{x}, t) = (\hat{H}_D + \hat{V}(\mathbf{x}, t)) \psi(\mathbf{x}, t), \quad (3.108)$$

com $\hat{V}(\mathbf{x}, t)$ a matriz que descreve os potenciais externos incluídos na dinâmica descrita pelo Hamiltoniano \hat{H} . Para que a covariância da equação de Dirac seja mantida, a matriz Hermitiana \hat{V} deve satisfazer determinadas propriedades de transformação que permitem a classificação dos diferentes potenciais admitidos pela equação (THALLER, 1992). A equação (3.108) é em sua forma covariante

$$(i \hat{\gamma}^\mu \partial_\mu - m \hat{I}_4 - \hat{U}(x^\mu)) \psi(x^\mu) = 0, \quad (3.109)$$

com $\hat{U}(x) = \hat{\gamma}_0 \hat{V}(\mathbf{x}, t)$ a matriz associada ao potencial covariante, que, diante transformações uma transformação de Poincaré (a^μ, Λ) , com $\Lambda \in \mathcal{L}_+^\uparrow$ se transforma como

$$(i \hat{\gamma}^\mu \partial_\mu - m \hat{I}_4 - \hat{U}'(x)) \hat{S} \psi(\Lambda^{-1}(x^\mu - a^\mu)) = 0. \quad (3.110)$$

Para que (3.109) seja invariante, \hat{U} deve satisfazer a seguinte lei de transformação,

$$\hat{U}'(\mathbf{x}, t) = \hat{S}[\Lambda] \hat{U}(\Lambda^{-1}(x^\mu - a^\mu)) \hat{S}^{-1}, \quad (3.111)$$

e, dado que $\hat{\gamma}_0 \hat{S} \hat{\gamma}_0 = \hat{S}^{*-1}$, a matriz de potencial \hat{V} deve se transformar como

$$\hat{V}'(x^\mu) = \hat{S}^{*-1} \hat{V}(\Lambda^{-1}(x^\mu - a^\mu)) \hat{S}^{-1}. \quad (3.112)$$

Seis tipos de potenciais satisfazem a lei de transformação acima e, portanto, mantêm o caráter invariante da equação de Dirac. No que segue, chamaremos \hat{U} de potencial covariante e \hat{V} de potencial Hermitiano.

Para uma função real $\phi_S(x^\mu)$ que se transforma sob simetria de Poincaré como $\phi_S(x^\mu) \rightarrow \phi_S(\Lambda^{-1}(x^\mu - a^\mu))$, o *potencial escalar* é definido por

$$\hat{U}_S = \phi_S(x^\mu) \hat{I}_4 \longrightarrow \hat{V}_S = \hat{\gamma}_0 \phi_S(x^\mu), \quad (3.113)$$

e pode ser considerado, por exemplo, para a inclusão do termo de massa no Hamiltoniano de Dirac.

A função real $\mu(x)$ define o *potencial pseudo-escalar* como

$$\hat{U}_{PS} = i\hat{\gamma}_5 \mu(x) \longrightarrow \hat{V}_{PS} = i\hat{\gamma}_0 \hat{\gamma}_5 \mu(x). \quad (3.114)$$

Apesar de $\mu(x)$ se comportar como um escalar diante transformações de Poincaré, para que a equação de Dirac seja invariante diante paridade total ela deve satisfazer $\mu(x) = -\mu(\Lambda_{Paridade} x)$.

O *potencial vetorial* é dado por

$$\hat{U}_V = \hat{\gamma}^\mu A_\mu(x) \longrightarrow \hat{V}_V = A^0(\mathbf{x}, t) - \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}, t), \quad (3.115)$$

onde $A^\mu(x^\rho) = g^{\mu\nu} A_\nu(x^\rho)$ se transforma como um vetor, i.e. $A^\mu(x^\nu) \rightarrow (A^\nu)'(x^\nu) = \Lambda_\mu^\nu A^\mu(\Lambda^{-1}(x^\nu - a^\nu))$. Tal termo de interação vetorial é incluído no Hamiltoniano via acoplamento minimal, ou seja, através das substituições $\hat{H} \rightarrow \hat{\hat{H}} = \hat{H} - A^0 \hat{I}_4$ e $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{P} = \mathbf{p} - \mathbf{A}$. O mais importante exemplo de potencial vetorial é a interação eletromagnética descrita por campos elétricos e magnéticos dados por $\mathbf{E} = -\nabla A^0(\mathbf{x}, t) - \partial_t \mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ e $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$.

O *potencial pseudo-vetorial* é definido através de quatro funções reais $W_\mu = (q(\mathbf{x}, t), \mathbf{W}(\mathbf{x}, t))$ como

$$\hat{U}_{PV} = \hat{\gamma}^5 \hat{\gamma}^\mu W_\mu(x^\nu) \longrightarrow \hat{V}_{PV}(\mathbf{x}, t) = -\hat{\gamma}^5 q(\mathbf{x}, t) + \hat{\gamma}^5 \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{W}(\mathbf{x}, t), \quad (3.116)$$

que se transforma como um vetor diante simetrias de Poincaré. Como no caso do potencial pseudo-escalar, para que a equação de Dirac seja invariante diante paridade, W_μ deve se transformar como $W_\mu(x) = -\Lambda_{Paridade} W_\mu(\Lambda_{Paridade} x)$.

Seja um campo tensorial que se transforma como $C_{\mu\nu}(x) \rightarrow \Lambda_\mu^e \Lambda_\nu^\tau C_{e\tau}(\Lambda^{-1}(x^\nu - a^\nu))$, o *potencial tensorial*

$$\hat{U}_T = \frac{\kappa_a}{2} \hat{\sigma}^{\mu\nu} C_{\mu\nu}(x), \quad (3.117)$$

com $\hat{\sigma}^{\mu\nu} = i\hat{\gamma}^\mu \hat{\gamma}^\nu$, é invariante diante transformações de Poincaré. Pode-se identificar $C_{\mu\nu}$ como o tensor eletromagnético $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$, que descreve, por exemplo, a interação entre o campo de Dirac e um campo eletromagnético através do acoplamento via momento magnético κ_a (ITZYKSON; ZUBER, 1980). Também pode ser aplicado no estudo de interações spin-órbita em núcleos atômicos (GINOCCHIO, 2004; MAO, 2003; FURNSTAHL; RUSNAK; SEROT, 1998). As componentes tensoriais do potencial Hermitiano são escritas em termos do campo elétrico e magnético como

$$\hat{V}_T = \kappa_a (i\hat{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) + \hat{\gamma}^5 \hat{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x})). \quad (3.118)$$

Novamente através de um tensor antissimétrico $D_{\mu\nu}$, o *potencial pseudo-tensorial* é definido por

$$\hat{U}_{PT} = -i \frac{\chi_a}{2} \hat{\gamma}^5 \hat{\sigma}^{\mu\nu} D_{\mu\nu}(x). \quad (3.119)$$

Similar aos potenciais pseudo-escalar e pseudo-vetorial, a invariância da equação de Dirac diante paridade total restringe $D_{\mu\nu}$ a se transformar como um pseudo-tensor. Se $D_{\mu\nu}(x)$ for dado em termos do tensor eletromagnético, o potencial Hermitiano correspondente é escrito como

$$\hat{V}_{PT} = \chi_a(i\hat{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) - \hat{\gamma}^5 \hat{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}, t)), \quad (3.120)$$

e descreve a interação com um campo eletromagnético através de um momento elétrico χ_a . Neste caso, entretanto, a equação de Dirac não é invariante diante paridade espacial, uma vez que o tensor eletromagnético não tem seu sinal invertido diante reflexões espaciais.

A tabela 1 resume as matrizes potenciais em sua forma covariante $U(x)$, Hermitiana $V(x) = \gamma^0 U(x)$ e na decomposição $SU(2) \otimes SU(2)$ (para as matrizes de Dirac em sua representação usual) e, em particular, com potenciais tensorial e pseudo-tensorial são dados em termos do tensor eletromagnético $F_{\mu\nu}(x)$.

Potencial	$\hat{U}(x)$	$\hat{V}(\mathbf{x}, t)$	Forma $SU(2) \otimes SU(2)$
Escalar	$\phi_S(x)$	$\hat{\gamma}^0 \phi_S(x)$	$[\hat{\sigma}_z^{(P)} \otimes \hat{I}_2^{(S)}] \phi_S(x)$
Pseudo-escalar	$i\hat{\gamma}^5 \mu(x)$	$i\hat{\gamma}_0 \hat{\gamma}^5 \mu(x)$	$-\hat{\sigma}_y^{(P)} \otimes \hat{I}_2^{(S)} \mu(x)$
Vetorial	$\hat{\gamma}^\mu A_\mu(x)$	$A_0(x) \hat{I}_4 - \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \mathbf{A}(x)$	$[\hat{I}_2^{(P)} \otimes \hat{I}_2^{(S)}] A_0(x) - [\hat{\sigma}_x^{(P)} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)}] \cdot \mathbf{A}(x)$
Pseudo-vetorial	$\hat{\gamma}^5 \hat{\gamma}^\mu W_\mu(x)$	$-\hat{\gamma}^5 q(x) + \hat{\gamma}^5 \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \mathbf{W}(x)$	$-(\hat{\sigma}_x^{(P)} \otimes \hat{I}_2^{(S)}) q(x) + [\hat{I}_2^{(P)} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)}] \cdot \mathbf{W}(x)$
Tensorial	$\frac{\kappa_a}{2} \hat{\sigma}^{\mu\nu} F_{\mu\nu}(x)$	$\kappa_a (i\hat{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \mathbf{E}(x) + \hat{\gamma}^5 \hat{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \mathbf{B}(x))$	$-\kappa_a (\hat{\sigma}_y^{(P)} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)}) \cdot \mathbf{E}(x) - \kappa_a (\hat{\sigma}_z^{(P)} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)}) \cdot \mathbf{B}(x)$
Pseudo-tensorial	$-i\frac{\chi_a}{2} \hat{\gamma}^5 \hat{\sigma}^{\mu\nu} F_{\mu\nu}(x)$	$\chi_a (i\hat{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \mathbf{B}(x) - \hat{\gamma}^5 \hat{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \mathbf{E}(x))$	$-\chi_a (\hat{\sigma}_y^{(P)} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)}) \cdot \mathbf{B}(x) + \chi_a (\hat{\sigma}_z^{(P)} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)}) \cdot \mathbf{E}(x)$

Tabela 1 – Classificação das matrizes de potencial para a equação de Dirac.

Com a inclusão de todos os possíveis potenciais descritos acima, o Hamiltoniano de Dirac completo é dado por

$$\begin{aligned} \hat{H} = & A^0(x) \hat{I}_4 + \hat{\gamma}_0(m + \phi_S(x)) + \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \mathbf{P} + i\hat{\gamma}_0 \hat{\gamma}_5 \mu(x) - \hat{\gamma}_5 q(x) + \hat{\gamma}_5 \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \mathbf{W}(x) \\ & + i\hat{\boldsymbol{\gamma}} \cdot [\chi_a \mathbf{B}(x) + \kappa_a \mathbf{E}(x)] + \hat{\gamma}_5 \hat{\boldsymbol{\gamma}} \cdot [\kappa_a \mathbf{B}(x) - \chi_a \mathbf{E}(x)], \end{aligned} \quad (3.121)$$

ou, na forma $SU(2) \otimes SU(2)$

$$\begin{aligned} \hat{H} = & (\hat{\sigma}_z^{(P)} \otimes \hat{I}_2^{(S)}) m + (\hat{\sigma}_x^{(P)} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)}) \cdot \hat{\mathbf{P}} \\ & - (\hat{\sigma}_y^{(P)} \otimes \hat{I}_2^{(S)}) \mu(x) - (\hat{\sigma}_x^{(P)} \otimes \hat{I}_2^{(S)}) q(x) + (\hat{I}_2^{(P)} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)}) \cdot \mathbf{W}(x) \\ & - (\hat{\sigma}_y^{(P)} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)}) \cdot [\chi_a \mathbf{B}(x) + \kappa_a \mathbf{E}(x)] - (\hat{\sigma}_z^{(P)} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)}) \cdot [\kappa_a \mathbf{B}(x) - \chi_a \mathbf{E}(x)]. \end{aligned} \quad (3.122)$$

3.4.1 Ansatz para a matriz densidade sob potenciais constantes e propriedades de emaranhamento

O Hamiltoniano completo acima possui termos que acoplam spin e paridade, desta maneira, espera-se que os potenciais incluídos no Hamiltoniano livre de Dirac modifique o conteúdo correlacional dos autoestados. O cálculo dos autoestados de (3.121) depende das diversas funções que o compõe e, de maneira geral, é necessário resolver a equação de Dirac $\hat{H}\psi = E\psi$, que são 4 equações diferenciais acopladas. Entretanto, se todos os termos de (3.121) são constante é possível, para determinadas combinações de potenciais,

obter uma fórmula para os autoestados através de um método que utiliza as propriedades algébricas do Hamiltoniano. Uma vez que os autoestados estiverem construídos, o estudo das propriedades de emaranhamento segue como o de qualquer estado puro de dois qubits, através do cálculo dos vetores de Bloch.

Para todos os potenciais constantes, determinar dos autoestados de \hat{H} é equivalente a determinar os autoestados do operador

$$\hat{H} = \hat{H} - A^0 \hat{I}_4 = \hat{\gamma}_0 m + \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \mathcal{P} + i\hat{\gamma}_0 \hat{\gamma}_5 \mu - \hat{\gamma}_5 q + \hat{\gamma}_5 \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \mathbf{W} + i\chi_a \hat{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \mathbf{B} + \kappa_a \hat{\gamma}_5 \hat{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \mathbf{B}, \quad (3.123)$$

no qual, sem perda de generalidade, escolhemos $\mathbf{E} = 0$ na Eq. (3.121). As potências de \hat{H} satisfazem

$$\begin{aligned} \hat{H}^2 &= g_1 \hat{I}_4 + 2\hat{\mathcal{O}}, \\ \frac{(\hat{H}^2 - g_1 \hat{I}_4)^2}{4} &= \hat{\mathcal{O}}^2 = g_2 \hat{I}_4 + 2[(\mu\chi_a - m\kappa_a)(\mathbf{W} \cdot \mathbf{B}) - q(\mathcal{P} \cdot \mathbf{W})]\hat{H}, \end{aligned} \quad (3.124)$$

onde

$$\begin{aligned} g_1 &= \frac{1}{4} \text{Tr}[\hat{H}^2], \\ g_2 &= \frac{1}{16} \text{Tr} \left[\left(\hat{H}^2 - \frac{1}{4} \text{Tr}[\hat{H}^2] \right)^2 \right], \end{aligned} \quad (3.125)$$

e $\hat{\mathcal{O}}$ é um operador de traço nulo dado por

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{O}} &= \hat{\boldsymbol{\Sigma}} \cdot [(\mu\chi_a - m\kappa_a)\mathbf{B} - q\mathcal{P}] + \hat{\gamma}_0 \hat{\boldsymbol{\Sigma}} \cdot [m\mathbf{W} + \chi_a \boldsymbol{\omega}_B] + i\hat{\gamma}_0 \hat{\gamma}_5 \hat{\boldsymbol{\Sigma}} \cdot [\mu\mathbf{W} + \kappa_a \boldsymbol{\omega}_B] \\ &- q\hat{\gamma}_5 \hat{\boldsymbol{\Sigma}} \cdot \mathbf{W} + (\mathcal{P} \cdot \mathbf{W})\hat{\gamma}_5 - \kappa_a (\mathbf{W} \cdot \mathbf{B})\hat{\gamma}_0 + i\chi_a (\mathbf{W} \cdot \mathbf{B})\hat{\gamma}_0 \hat{\gamma}_5, \end{aligned} \quad (3.126)$$

com

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\omega}_B &= \mathcal{P} \times \mathbf{B} \\ \hat{\boldsymbol{\Sigma}} &= \text{diag}\{\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma}\} \\ g_1 &= \mathcal{P}^2 + m^2 + \mu^2 + q^2 + W^2 + (\kappa_a^2 + \chi_a^2)B^2, \\ g_2 &= [(\mu\chi_a - m\kappa_a)\mathbf{B} - q\mathcal{P}]^2 + [m\mathbf{W} + \chi_a \boldsymbol{\omega}_B]^2 + [\mu\mathbf{W} + \kappa_a \boldsymbol{\omega}_B]^2 + \\ &+ q^2 W^2 + (\mathcal{P} \cdot \mathbf{W})^2 + (\kappa_a^2 + \chi_a^2)(\mathbf{W} \cdot \mathbf{B})^2. \end{aligned} \quad (3.127)$$

Os autovalores $\lambda_{n,s}$ e os autoestados $|\psi_{n,s}\rangle$ do Hamiltoniano \hat{H} são dados pela equação $\hat{H}|\psi_{n,s}\rangle = \lambda_{n,s}|\psi_{n,s}\rangle$ ou, em termos do operador densidade $\varrho_{n,s} = |\psi_{n,s}\rangle\langle\psi_{n,s}|$

$$\hat{H}\varrho_{n,s} = \lambda_{n,s}\varrho_{n,s}.$$

Além disso, a matriz densidade associada a um autoestado de \hat{H} é uma solução estacionária da equação de Liouville $[\hat{H}, \varrho_{n,s}] = 0$. Desta maneira, como

$$\frac{(\hat{H}^2 - g_1 \hat{I}_4)^2}{4} = \hat{\mathcal{O}}^2$$

a ação de $\hat{\mathcal{O}}^2$ em $\varrho_{n,s}$ será

$$\hat{\mathcal{O}}^2 \varrho_{n,s} = \frac{1}{4}(\lambda_{n,s}^2 - g_1)^2 \varrho_{n,s}, \quad (3.128)$$

e, se

$$\hat{\mathcal{O}}^2 = g_2 \hat{I}_4, \quad (3.129)$$

então o traço de (3.128) fornecerá a equação característica para os autovalores $\lambda_{n,s}$

$$\lambda_{n,s} = (-1)^n \sqrt{g_1 + 2(-1)^s \sqrt{g_2}}. \quad (3.130)$$

A condição imposta sobre $\hat{\mathcal{O}}$ pode ser satisfeita através de uma escolha adequada de parâmetros, tal como a identificação de uma orientação relativa específica entre os vetores \mathcal{P} , \mathcal{W} e \mathcal{B} .

Para recuperar as matrizes densidade associadas aos autoestados de \hat{H} , inicialmente utiliza-se que $[\hat{H}, \varrho_{n,s}] = 0$, e o fato de que, para $g_2 \neq 0$ os autovalores $\lambda_{n,s}$ são não-degenerados, de modo que podemos escrever os autoestados como polinômios do Hamiltoniano

$$\varrho_{n,s} = \sum_{i=0}^N \xi_i \hat{H}^i,$$

onde os ξ_i são números reais. Como foi imposta a condição (3.129), as potências do Hamiltoniano satisfazem:

$$\begin{aligned} \hat{H}^3 &= g_1 \hat{H} + 2\hat{\mathcal{O}}\hat{H} \\ \hat{H}^4 &= (4g_2 - g_1^2)\hat{I}_4 + 2g_1 \hat{H}^2 \\ &\dots \end{aligned} \quad (3.131)$$

e, portanto, a matriz densidade é um polinômio de terceiro grau de \hat{H} :

$$\varrho_{n,s} = \xi_0 \hat{I}_4 + \xi_1 \hat{H} + \xi_2 \hat{H}^2 + \xi_3 \hat{H}^3. \quad (3.132)$$

Através do cálculo dos traços $\text{Tr}[\hat{H}^i \varrho_{n,s}] = \lambda_{n,s}^i$, para $i = 0, 1, 2, 3$, e usando que $\text{Tr}[\hat{H}^{2i+1}] = 0$, obtêm-se o sistema linear para os coeficientes $\{\xi_0, \xi_1, \xi_2, \xi_3\}$:

$$\begin{cases} 4\xi_0 + 4g_1\xi_2 = 1 \\ 4g_1\xi_0 + 4(4g_2 + g_1^2)\xi_2 = \lambda_{n,s}^2 \\ 4g_1\xi_1 + 4(4g_2 + g_1^2)\xi_3 = \lambda_{n,s} \\ 4(4g_2 + g_1^2)\xi_1 + 4[g_1(4g_2 - g_1^2) + 2g_1(4g_2 + g_1^2)]\xi_3 = \lambda_{n,s}^3 \end{cases}, \quad (3.133)$$

cujas soluções são

$$\begin{aligned} \xi_0 &= \frac{1}{4} \left[1 + \frac{g_1(-1)^s}{2\sqrt{g_2}} \right], & \xi_1 &= \frac{1}{4} \left[\frac{(-1)^n}{|\lambda_{n,s}|} - \frac{g_1(-1)^{s+n}}{2(-1)^s \sqrt{g_2} |\lambda_{n,s}|} \right], \\ \xi_2 &= \frac{(-1)^s}{8\sqrt{g_2}}, & \xi_3 &= \frac{(-1)^{s+n}}{8\sqrt{g_2} |\lambda_{n,s}|}. \end{aligned} \quad (3.134)$$

Substituindo estas soluções em (3.132), e usando as propriedades (3.124) é possível escrever $\varrho_{n,s}$ pela fórmula simplificada

$$\varrho_{n,s} = \frac{1}{4} \left(\hat{I}_4 + \frac{(-1)^s \hat{\mathcal{O}}}{\sqrt{g_2}} \right) \left(\hat{I}_4 + \frac{(-1)^n \hat{H}}{|\lambda_{n,s}|} \right), \quad (3.135)$$

com $n, s = \{1, 2\}$.

Ressaltamos que se $\hat{\mathcal{O}} = 0$, os autovalores de \hat{H} (3.130) não irão depender de s e serão degenerados. Mesmo nesse caso a expressão (3.135) fornece um operador densidade com valor médio de energia $\lambda_{n,s}$, mas que representa um estado misto como pode ser constatado através do cálculo de

$$\text{Tr}[\varrho_{n,s}^2] = \frac{1}{4} \left(1 + \frac{g_1}{\lambda_{n,s}^2} \right).$$

Uma vez determinado o operador densidade associado aos autoestados o Hamiltoniano genérico (3.123), o cálculo das propriedades de emaranhamento são dadas em termos dos vetores de Bloch $\mathbf{a}_{n,s}^{(P,S)}$. Se $\hat{\mathcal{O}} = g_2 \hat{I}_4$ então, pelas fórmulas (3.127,3.135) e utilizando as formas $SU(2) \otimes SU(2)$ dos potenciais externos dadas em (1) obtêm-se

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_{n,s}^{(S)} &= \frac{(-1)^s}{\sqrt{g_2}} [(\mu\chi_a - m\kappa_a)\mathbf{B} - q\mathbf{P}] + \frac{(-1)^n}{|\lambda_{n,s}|} \mathbf{W} + \frac{(-1)^{s+n}}{|\lambda_{n,s}|\sqrt{g_2}} [m(m\mathbf{W} + \chi_a\boldsymbol{\omega}_B) \\ &+ \mu(\mu\mathbf{W} + \kappa_a\mathbf{B}) + (\mathbf{P} \cdot \mathbf{W})\mathbf{P} + q^2\mathbf{W} + (\kappa_a^2 + \chi_a^2)(\mathbf{W} \cdot \mathbf{B})\mathbf{B}], \end{aligned} \quad (3.136)$$

e a concorrência será dada por $C[\varrho_{n,s}] = \sqrt{1 - (a^{(S)})^2} = \sqrt{1 - (a^{(P)})^2}$. Com isto, as propriedades de emaranhamento dos autoestados da equação de Dirac modificada, incluindo potenciais externos constantes tais que (3.129) é satisfeita, estão completamente caracterizadas. Vale ressaltar que, caso a condição imposta sobre $\hat{\mathcal{O}}$ não for satisfeita, ainda assim é possível seguir o procedimento apresentado acima. Os autoestados ainda serão descritos como polinômios de terceiro grau do Hamiltoniano, entretanto o sistema de equação para os coeficientes (3.133) possuirá soluções mais complicadas, e os autoestados $\lambda_{n,s}$ serão dados em termos de uma equação de quarto grau incluindo o termo linear.

As fórmulas obtidas acima são as mais gerais possíveis, dentro das condições estabelecidas, e o estudo do efeito de cada um dos potenciais requer a especificação de situações físicas ou de valores numéricos para os parâmetros de \hat{H} : m , μ e q , e o módulo dos vetores \mathbf{P} , \mathbf{B} , \mathbf{W} bem como suas orientações relativas. A título ilustrativo apresentaremos duas combinações de parâmetros, sem especificar nenhuma situação física, nas quais, por simplicidade, as componentes temporal e espacial do potencial vetorial (A^0 e \mathbf{A}) serão implicitamente incluídas nas respectivas definições de \hat{H} e \mathbf{P} .

Caso $\mathbf{W} = \mathbf{B} = 0$ e $q = 0$.

Para esta combinação de parâmetros o Hamiltoniano será

$$\hat{H} = \hat{\gamma}_0 m + \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \mathbf{P} + i\hat{\gamma}_0 \hat{\gamma}_5 \mu, \quad (3.137)$$

que é o Hamiltoniano da partícula livre incluindo um termo pseudo-escalar constante.

Neste caso, o operador \mathcal{O} é nulo e o estado obtido através da fórmula (3.135), ϱ_{PS} , é uma mistura separável para quaisquer valores de μ , m and \mathcal{P} . Outras correlações quânticas codificadas neste estado são dadas em termos da discórdia geométrica calculada por (3.51) como

$$\mathcal{D}^{(P||S)}[\varrho_{PS}] = \frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{\mu^2 \mathcal{P}^2}{\lambda_{PS}^4}}, \quad (3.138)$$

onde as autoenergias são dadas por

$$\lambda_{PS} = (-1)^n \sqrt{\mathcal{P}^2 + m^2 + \mu^2}. \quad (3.139)$$

A Figura 4 apresenta o gráfico de $\mathcal{D}[\varrho_{PS}]$ em função de \mathcal{P}/m . A discórdia geométrica é nula para $\mu = 0$, i.e. para partículas livres, e possui valor máximo para $\mathcal{P} = \sqrt{m^2 + \mu^2}$, se anulando se $\mathcal{P}/\mu \ll 1$ ou $\mathcal{P}/\mu \gg 1$. As correlações quânticas não se anulam no limite $\mathcal{P} \gg m$ se o potencial pseudo-escalar for suficientemente forte.

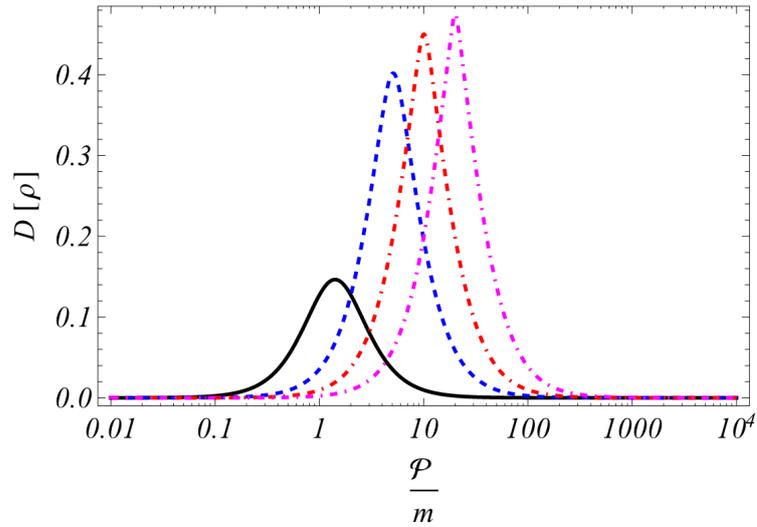


Figura 4 – Discórdia geométrica para o estado misto obtido pela fórmula (3.135) para o Hamiltoniano incluindo um potencial pseudo-escalar constante, em função de \mathcal{P}/m para $\mu/m = 1$ (linha contínua), 5 (linha tracejada), 10 (linha pontilhada e tracejada) e 20 (linha pontilhada). A discórdia geométrica atinge seu valor de máximo para $\mathcal{P}^2 = m^2 + \mu^2$. Mesmo para altos valores de \mathcal{P}/m as correlações quânticas estão presentes se μ/m for suficientemente grande.

Para $\mu = 0$ o Hamiltoniano é de uma partícula livre $\hat{H} = \hat{H}_0 = \mathcal{P} \cdot \hat{\alpha} + m\hat{\beta}$ e o operador densidade obtido de (3.135) é

$$\varrho_0^{\{n\}}(\mathcal{P}, m) = \frac{1}{4} \left[1 + \frac{(-1)^n}{\sqrt{\mathcal{P}^2 + m^2}} (\mathcal{P} \cdot \hat{\alpha} + m\hat{\beta}) \right]. \quad (3.140)$$

Esta matriz densidade pode ser relacionada aos spins polarizados $u_s(\mathcal{P})$ e $v_s(\mathcal{P})$ (com $s = \{1, 2\}$) (WIGHTMAN; SCHWEBER, 1955) através da ação de operadores de projeção

sobre ϱ_0 nos estados polarizados,

$$\begin{aligned} v_s(\mathcal{P})v_s^\dagger(\mathcal{P}) &= -2\sqrt{\mathcal{P}^2 + m^2}(\hat{I}_4 - s\hat{\gamma}_5 z_\mu \hat{\gamma}^\mu) \varrho_0^{\{0\}}(-\mathcal{P}, m), \\ u_s(\mathcal{P})u_s^\dagger(\mathcal{P}) &= -2\sqrt{\mathcal{P}^2 + m^2}(\hat{I}_4 - s\hat{\gamma}_5 z_\mu \hat{\gamma}^\mu) \varrho_0^{\{1\}}(-\mathcal{P}, m). \end{aligned} \quad (3.141)$$

O estado $\varrho_0^{\{n\}}$ corresponde, então, a um estado não polarizado que pode ser convertido em um estado polarizado na direção z_μ , através da inclusão do operador de projeção $(\hat{I}_4 - s\hat{\gamma}_5 z_\mu \hat{\gamma}^\mu)$.

Caso $\chi_a = 0$.

O Hamiltoniano obtido incluindo os potenciais pseudo-vetorial e tensorial no Hamiltoniano de partícula livre é dado por

$$\hat{H} = \hat{\gamma}_0 m + \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathcal{P} + i\hat{\gamma}_0 \hat{\gamma}_5 \mu - \hat{\gamma}_5 q + \hat{\gamma}_5 \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{W} + \hat{\gamma}_5 \hat{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \mathbf{B}, \quad (3.142)$$

onde, sem perder a generalidade, foi fixado $\kappa_a = 1$. Os parâmetros relevantes ao cálculo dos autoestados (3.135) são

$$\begin{aligned} g_1 &= \mathcal{P}^2 + m^2 + \mu^2 + q^2 + W^2 + B^2, \\ g_2 &= (m\mathbf{B} + q\mathcal{P})^2 + (m^2 + \mu^2 + q^2)W^2 \\ &\quad + 2\mu\mathbf{W} \cdot \boldsymbol{\omega}_B + \omega_B^2 + (\mathcal{P} \cdot \mathbf{W})^2 + (\mathbf{W} \cdot \mathbf{B})^2, \\ \mathbf{a} &= \frac{(-1)^{s+1}}{\sqrt{g_2}} (m\mathbf{B} + q\mathcal{P}) + \frac{(-1)^n}{|\lambda_{a\delta}|} \mathbf{W} \\ &\quad + \frac{(-1)^{s+n}}{|\lambda_{a\delta}| \sqrt{g_2}} [(m^2 + \mu^2 + q^2)\mathbf{W} + \boldsymbol{\omega}_B + (\mathcal{P} \cdot \mathbf{W})\mathcal{P} + (\mathbf{W} \cdot \mathbf{B})\mathbf{B}], \end{aligned} \quad (3.143)$$

com

$$\begin{aligned} \lambda_{a\delta} &= (-1)^n \left[\mathcal{P}^2 + m^2 + \mu^2 + q^2 + W^2 + B^2 \right. \\ &\quad \left. + 2(-1)^s \sqrt{m^2 B^2 + (m^2 + \mu^2 + q^2)W^2 + 2\mu(\mathbf{W} \cdot \boldsymbol{\omega}_B) + (\mathcal{P} \cdot \mathbf{W})^2 + (\mathbf{W} \cdot \mathbf{B})^2} \right]^{1/2}, \end{aligned} \quad (3.144)$$

expressão obtida sob a condição

$$m\mathbf{W} \cdot \mathbf{B} + q\mathcal{P} \cdot \mathbf{W} = 0, \quad (3.145)$$

de modo a satisfazer (3.129).

Uma maneira de satisfazer a condição acima é escolhendo $q = 0$ e $m = 0$. Este simples caso descreve um férmion de massa nula sob a influência de um campo tensorial e de um campo pseudo-vetorial externo de componente tipo tempo nula. Neste caso as propriedades de emaranhamento são obtidas em termos dos coeficientes

$$\begin{aligned} g_1 &= \mathcal{P}^2 + \mu^2 + W^2 + B^2, \\ g_2 &= (\mu\mathbf{W} + \boldsymbol{\omega}_B)^2 + (\mathcal{P} \cdot \mathbf{W})^2 + (\mathbf{W} \cdot \mathbf{B})^2, \end{aligned} \quad (3.146)$$

e do vetor de Bloch (3.136)

$$\mathbf{a}^{(s)} = \frac{(-1)^n}{|\lambda_{a\delta}|} \left[\mathbf{W} + \frac{(-1)^s}{\sqrt{g_2}} (\mu(\mu\mathbf{W} + \boldsymbol{\omega}_B) + (\mathcal{P} \cdot \mathbf{W})\mathcal{P} + (\mathbf{W} \cdot \mathbf{B})\mathbf{B}) \right]. \quad (3.147)$$

Para \mathbf{B} e \mathcal{P} perpendiculares a \mathbf{W} , as expressões de g_1 e g_2 se simplificam a

$$\begin{aligned} g_1 &= \mu^2 + \mathcal{P}^2 + W^2 + B^2, \\ g_2 &= (\mu W \pm \mathcal{P}B \sin(\theta))^2, \end{aligned} \quad (3.148)$$

onde o sinal negativo (positivo) indica que \mathbf{W} é (anti)paralelo a $\boldsymbol{\omega}_B$. O módulo do vetor de Bloch é

$$(a^{(s)})^2 = \frac{1}{\lambda_{a\delta}^2} \left[\mu^2 + W^2 + 2(-1)^s \mu W \text{sign}(\mu W \pm \mathcal{P}B \sin(\theta)) \right], \quad (3.149)$$

com

$$\lambda_{a\delta} = (-1)^n \left[\mathcal{P}^2 + \mu^2 + W^2 + B^2 + 2(-1)^s |\mu W \pm \mathcal{P}B \sin(\theta)| \right]^{1/2}, \quad (3.150)$$

e se $\mu W < \mathcal{P}B$ esta expressão exhibe uma mudança abrupta de comportamento para $\sin(\theta_c) = \mu W / \mathcal{P}B$, tal que, em termos desta quantidade

$$a^2 = \frac{1}{\lambda_{a\delta}^2} (W + (-1)^s \text{sign}[\sin(\theta_c) \pm \sin(\theta)] \mu)^2, \quad (3.151)$$

com

$$\lambda_{a\delta} = (-1)^n \left[\mathcal{P}^2 + \mu^2 + W^2 + B^2 + 2(-1)^s \mathcal{P}B |\sin(\theta_c) \pm \sin(\theta)| \right]^{1/2}. \quad (3.152)$$

De (3.148), conclui-se que para \mathbf{W} antiparalelo a $\boldsymbol{\omega}_B$, a transição entre os dois comportamentos corresponde a substituir θ por $-\theta$. Para \mathbf{W} paralelo a $\boldsymbol{\omega}_B$, a expressão (3.151) é dada por

$$\begin{aligned} (a^{(s)})^2 &= \frac{1}{\lambda_{a\delta}^2} \left[W + (-1)^{s+1} \mu \right]^2 \quad \text{para } x < -x_c, \\ &= \frac{1}{\lambda_{a\delta}^2} \left[W + (-1)^s \mu \right]^2 \quad \text{para } x > -x_c, \end{aligned} \quad (3.153)$$

e, portanto, se $W/\mu = 1$ o estado é maximamente emaranhado para $s = 1$ se $x > -x_c$, e para $s = 2$ se $x < -x_c$.

O gráfico da concorrência para $W/\mu = 1$ e quatro valores de \mathcal{P}/μ é mostrado na Fig. 5. O emaranhamento em função de $\sin(\theta)$ exhibe uma descontinuidade em $\sin(\theta) = -\sin(\theta_c)$ para o qual ocorre uma transição abrupta para um estado maximamente emaranhado. O mesmo comportamento é esperado para \mathbf{W} antiparalelo a $\boldsymbol{\omega}_B$ mas com $\theta \rightarrow -\theta$. Neste caso, o emaranhamento é uma função decrescente de $\sin(\theta)$, conforme mostrado na segunda linha da Figura 5.

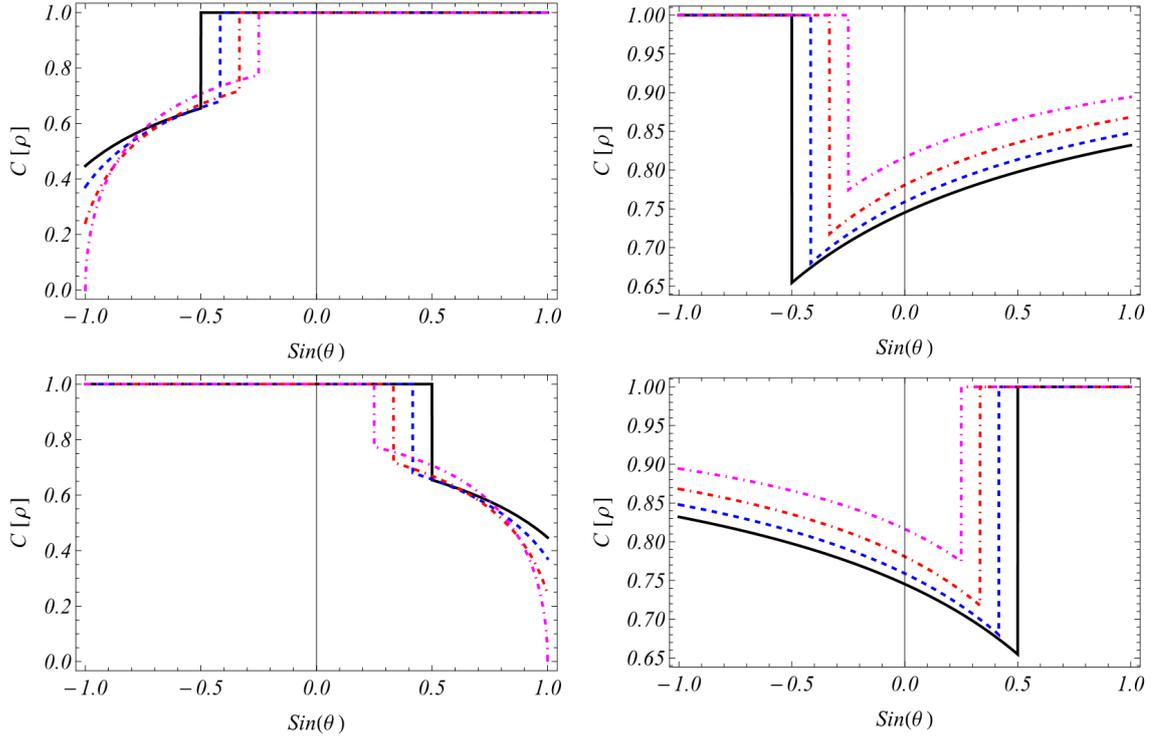


Figura 5 – Concorrência para o estado associado aos potenciais pseudo-escalar, tensorial e pseudo-vetorial em função de $\sin(\theta)$, com θ o ângulo entre \mathbf{B} e \mathcal{P} , para \mathbf{W} paralelo a ω_B (primeira linha) e para \mathbf{W} antiparalelo a ω_B (segunda linha). A coluna da esquerda corresponde a $s = 1$, a coluna da direita a $s = 2$ e os gráficos são para $\mathcal{P}/\mu = 1$ (linha contínua), 1.2 (linha tracejada), 1.5 (linha tracejada e pontilhada) e 2 (linha pontilhada), e para $W/\mu = 1$ em todos os casos. A primeira derivada da concorrência é descontínua para $|\sin(\theta)| = |\sin(\theta_c)| = \mu W/\mathcal{P}B$, correspondendo a uma transição para uma estado maximamente emaranhado.

Outra maneira de satisfazer (3.145) é considerando $\mathbf{B} \cdot \mathcal{P} = \mathbf{W} \cdot \mathbf{B} = 0$, i. e. para \mathbf{B} ortogonal a \mathcal{P} e a \mathbf{W} . Neste caso a expressão para g_1 não é modificada enquanto g_2 e o vetor de Bloch são reescritos como

$$\begin{aligned}
 g_2 &= (\mu\mathbf{W} + \omega_B)^2 + (\mathcal{P} \cdot \mathbf{W})^2, \\
 \mathbf{a}^{(s)} &= \frac{(-1)^n}{|\lambda_{a\delta}|} \left[\mathbf{W} + \frac{(-1)^s}{\sqrt{g_2}} (\mu(\mu\mathbf{W} + \omega_B) + (\mathcal{P} \cdot \mathbf{W})\mathcal{P}) \right].
 \end{aligned} \quad (3.154)$$

O emaranhamento depende da orientação de \mathbf{B} relativa ao plano definido por \mathcal{P} e \mathbf{W} . A Figura 6 mostra a concorrência em função de $\sin(\theta)$, para θ o ângulo entre \mathbf{W} e \mathcal{P} , para \mathbf{B} paralelo e antiparalelo a ω_W . Para os valores utilizados neste grafo o emaranhamento se anula em dois pontos para $s = 1$ e apresenta um ponto de mínimo para $s = 2$.

No limite UR o emaranhamento não se anula e não tende ao seu valor máximo. Para este caso

$$(a^{(s)})^2(\mathcal{P}/\mu \rightarrow \infty) = \frac{W^2(1 - \sin^2(\theta))}{B^2 + W^2(1 - \sin^2(\theta))}, \quad (3.155)$$

e o estado é maximamente emaranhado apenas se $\theta = \pi/2$.

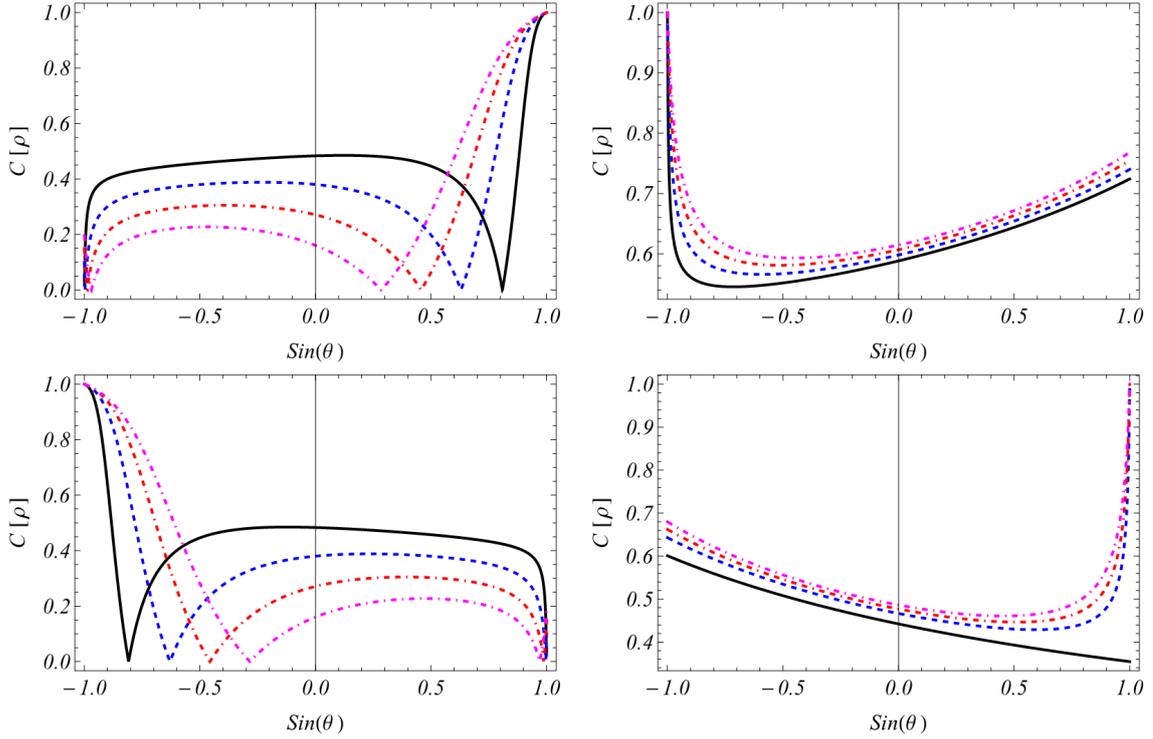


Figura 6 – Concorrência entre spin e paridade intrínseca do estado associado aos potenciais pseudo-escalar, tensorial e pseudo-vetorial em função de $\sin(\theta)$, onde θ é o ângulo entre \mathbf{W} e \mathcal{P} , para \mathbf{B} paralelo a $\boldsymbol{\omega}_W$ (primeira linha) e para \mathbf{B} antiparalelo a $\boldsymbol{\omega}_W$ (segunda linha). Os gráficos são para $s = 1$ (coluna da esquerda) e $s = 2$ (coluna da direita). Os valores de \mathcal{P}/μ e o estilo de linha estão em correspondência com aqueles da Fig. 5. Fixando $W/\mu = 1$, para $s = 1$, o estado possui dois pontos de emaranhamento nulo que depende da relação entre \mathcal{P}/μ e W/μ .

Por último, para $\kappa_a = 0$ e $\mu = 0$ resultados análogos são obtidos substituindo μ por m , e as mesmas propriedades de emaranhamento e comportamento geral das correlações são observados.

3.5 Localidade das correlações codificadas em estados mistos sob potenciais constantes

Após descrever o conteúdo de emaranhamento dos biespinores de uma maneira genérica o próximo passo é estudar a característica de localidade das correlações entre spin e paridade intrínseca presentes nos estados da equação de Dirac. Como comentado anteriormente, para estados puros, emaranhamento e não-localidade são conceitos equivalentes (BENNETT et al., 1999; BRUNNER et al., 2014). Para estados mistos, emaranhamento e não localidade não são equivalentes e, desta maneira, esta seção é devotada ao estudo da localidade das correlações spin-paridade em estados mistos de biespinores.

O foco será em estados mistos de helicidade, construídos com (3.71), e estados mistos construídos com os autoestados do Hamiltoniano de Dirac incluindo os potenciais tensorial e pseudo-tensorial. Enquanto o primeiro caso corresponde a estados livres polarizados, o segundo caso descreve partículas neutras que interagem com um campo eletromagnético constante através de um momento magnético anômalo um cenário que, como será apresentado no próximo capítulo, pode ser simulado com íons aprisionados (TENEV; IVANOV; VITANOV, 2013).

Como serão considerados estados mistos, não é possível descrever as propriedades de emaranhamento apenas com os vetores de Bloch. Desta maneira nesta seção o emaranhamento será calculado através da negatividade (3.44). Também será calculada a discórdia geométrica como quantificador de correlações quânticas. As propriedades de localidade das correlações spin-paridade serão quantificadas em termos de (3.66,3.68), uma vez que os estados aqui considerados são todos estados de dois qubits.

3.5.1 Estados mistos de helicidade

A partir das soluções da equação de Dirac os autoestados de helicidade associados aos autovalores ± 1 são dados por (vide eq. 3.71)

$$\begin{aligned} |u_s(p)\rangle &= N(p) \left[|+\rangle^{(P)} + (-1)^s \frac{p}{E_p + m} |-\rangle^{(P)} \right] \otimes |h_s^{(S)}\rangle, \\ |v_s(p)\rangle &= N(p) \left[(-1)^s \frac{p}{E_p + m} |+\rangle^{(P)} + |-\rangle^{(P)} \right] \otimes |h_s^{(S)}\rangle, \end{aligned}$$

que, conforme visto na seção 3.3, são estados separáveis. Sem perda de generalidade serão considerados nesta seção estados se propagando na direção \mathbf{e}_z , tais que o *momentum* será dado por $\mathbf{p} = p\mathbf{e}_z$, de modo que as correspondentes soluções da equação de Dirac serão dadas por

$$|\psi(z, t)_s\rangle = |u_s(p)\rangle \text{Exp}\left(-i(E_p t - z p)\right). \quad (3.156)$$

Um estado misto de energia positiva é construído como $\rho_{\text{free}} = A |\psi_+(z, t)\rangle \langle \psi_+(z, t)| + (1 - A) |\psi_-(z, t)\rangle \langle \psi_-(z, t)|$ e explicitamente dado por

$$\rho_{\text{free}} = \begin{bmatrix} (1 - A) \frac{E_p^2 - m^2}{2E_p} & 0 & -(1 - A) \frac{\sqrt{E_p^2 - m^2}}{2E_p} & 0 \\ 0 & A \frac{E_p + m}{2E_p} & 0 & A \frac{\sqrt{E_p^2 - m^2}}{2E_p} \\ -(1 - A) \frac{\sqrt{E_p^2 - m^2}}{2E_p} & 0 & (1 - A) \frac{E_p - m}{2E_p} & 0 \\ 0 & A \frac{\sqrt{E_p^2 - m^2}}{2E_p} & 0 & A \frac{E_p - m}{2E_p} \end{bmatrix}. \quad (3.157)$$

Da expressão acima, a transposta parcial com relação ao subsistema de paridade intrínseca é

$$\rho_{\text{free}}^{T_P} = \rho_{\text{free}},$$

e, portanto, pelo critério de Peres o estado é sempre separável. Apesar de não apresentar emaranhamento, (3.157) exhibe correlações quânticas codificadas entre spin e paridade intrínseca quantificadas em termos da discórdia geométrica dada explicitamente por

$$\mathcal{D}[\rho_{\text{free}}] = \frac{1}{4} \left[\left(1 + (1 - 2A)^2 \frac{m^2}{E_p^2} \right) - \sqrt{\left(1 + (1 - 2A)^2 \frac{m^2}{E_p^2} \right)^2 - 4 \left(1 - \frac{m^2}{E_p^2} \right) \frac{m^2}{E_p^2}} \right], \quad (3.158)$$

que se anula apenas para $A = 0$ e para $m/E_p = 0$ ou 1 (nos limites UR e não-relativístico).

Apesar da natureza quântica, as correlações entre spin e paridade são locais, isto é, podem ser reproduzidas por um modelo de variáveis escondidas. O quantificador de não-localidade (3.68) é dado por

$$\mathcal{B}[\rho_{\text{free}}] = \left(1 - 4A(1 - A) \frac{m^2}{E_p^2} \right)^2 - 1, \quad (3.159)$$

e, portanto, se $\mathcal{D}[\rho_{\text{free}}] \neq 0$, então $\mathcal{B}[\rho_{\text{free}}] < 0$ e (3.157) não viola a desigualdade CHSH para todos os possíveis valores dos parâmetros envolvidos. As correlações quânticas quantificadas pela discórdia geométrica \mathcal{D} são, portanto, locais. Além disso, a discórdia geométrica (3.158) é maximizada para estados com massa m_{max} dada por

$$m_{\text{max}} = \sqrt{\frac{2(1 - A)}{5 - 8A + 4A^2}}.$$

Para misturas maximais entre helicidade positiva e negativa, ou seja para $A = 0.5$, \mathcal{D} possui um cúspide (sua primeira derivada é descontínua) como mostrado na Figura 7.

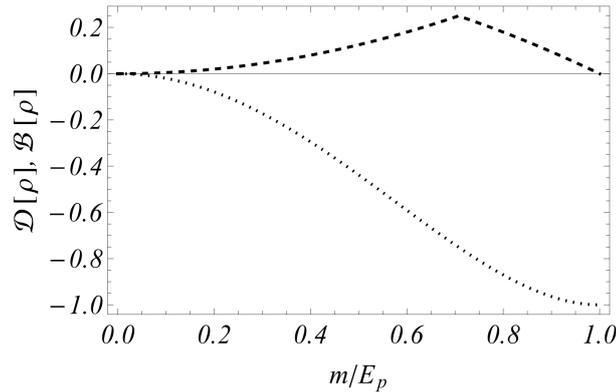


Figura 7 – Discórdia geométrica (linha tracejada) e função de Bell (linha pontilhada) para uma mistura maximal de estados separáveis de helicidade (3.157) em função de m/E_p . Apesar da discórdia geométrica não se anular (linha tracejada), o conteúdo correlacional spin-paridade codificado em ρ_{free} é sempre local, uma vez que a função de Bell (linha pontilhada) é sempre negativa. As correlações quânticas quantificadas pela discórdia geométrica podem, neste caso, serem reproduzidas por uma teoria de variáveis escondidas.

3.5.2 Inclusão dos acoplamentos tensorial e pseudo-tensorial

O Hamiltoniano de Dirac com os potenciais tensorial e pseudo-tensorial descreve o acoplamento não-minimal com campos elétricos e magnéticos constantes. O Hamiltoniano para uma partícula neutra acoplada não-minimalmente com um campo magnético externo \mathbf{B} é obtido através da expressão geral (3.123) fazendo $A^0 = \mathbf{A} = \mu = q = \mathbf{W} = 0$:

$$\hat{H} = \hat{\beta} m + \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \mathbf{p} + i\chi_a \hat{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \mathbf{B} + \kappa_a \hat{\boldsymbol{\gamma}}_5 \hat{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \mathbf{B}, \quad (3.160)$$

com a correspondente estrutura $SU(2) \otimes SU(2)$ dada por

$$\hat{H} = (\sigma_z^{(1)} \otimes \hat{I}_2^{(2)}) m + (\sigma_x^{(1)} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(2)}) \cdot \mathbf{p} + \kappa_a (\sigma_z^{(1)} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(2)}) \cdot \mathbf{B} - \chi_a (\sigma_y^{(1)} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(2)}) \cdot \mathbf{B}. \quad (3.161)$$

Naturalmente os autoestados deste Hamiltoniano apresentam emaranhamento entre spin e paridade intrínseca como pode ser calculado através da metodologia introduzida na seção anterior que será explorado mais detalhadamente no próximo capítulo.

O Hamiltoniano (3.161) possui as propriedades algébricas

$$\begin{aligned} \hat{H}^2 &= g_1 \hat{I}_4 + 2\hat{\mathcal{O}}, \\ \hat{\mathcal{O}}^2 &= \frac{1}{4} (\hat{H}^2 - g_1 \hat{I}_4)^2 = g_2 \hat{I}_4, \end{aligned} \quad (3.162)$$

com

$$\begin{aligned} g_1 &= \frac{1}{4} \text{Tr}[\hat{H}] = p^2 + m^2 + B^2(\kappa_a^2 + \chi_a^2) \\ g_2 &= \frac{1}{16} \text{Tr}[(\text{Tr}[\hat{H}^2] - \frac{1}{4} \text{Tr}[\hat{H}^2])] = m^2 \kappa_a^2 B^2 + (\kappa_a^2 + \chi_a^2)(\mathbf{p} \times \mathbf{B})^2, \end{aligned} \quad (3.163)$$

e

$$\hat{\mathcal{O}} = \frac{1}{2} (\hat{H}^2 - g_1 \hat{I}_4) = m \kappa_a \hat{\boldsymbol{\Sigma}} \cdot \mathbf{B} + \chi_a \hat{\beta} \hat{\boldsymbol{\Sigma}} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{B}) - i\kappa_a \hat{\beta} \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{B}), \quad (3.164)$$

de modo que as autoenergias são dadas por $\lambda_{n,s} = (-1)^n \sqrt{g_1 + 2(-1)^s \sqrt{g_2}}$, e os autoestados podem ser recuperados através da fórmula (3.135).

Um estado genérico misto composto pelos autoestados de (3.161) é dado por

$$\rho = \sum_{n,s} A_{n,s} \rho_{n,s}, \quad (3.165)$$

com $\sum_{n,s} A_{n,s} = 1$ e $A_{n,s} > 0$, e os vetores de Bloch e elementos da matriz de correlação são dados explicitamente por

$$\begin{aligned} \mathbf{a}^{(P)} &= (-c_3 m \kappa_a \mathbf{p} \cdot \mathbf{B}, c_3 m \chi_a \kappa_a B^2, c_1 m + c_3 m \kappa_a^2 B^2), \\ \mathbf{a}^{(S)} &= c_3 \chi_a m \boldsymbol{\omega} - c_2 m \kappa_a \mathbf{B}, \\ t_{xi} &= c_3 (\chi_a^2 + \kappa_a^2) (\mathbf{B} \times \boldsymbol{\omega})_i, \\ t_{yi} &= c_3 \chi_a (\mathbf{p} \times \boldsymbol{\omega})_i - c_2 \kappa_a \omega_i - c_1 \chi_a B_i, \\ t_{zi} &= c_3 \kappa_a ((\mathbf{p} \times \boldsymbol{\omega})_i - m^2 B_i) + c_2 \chi_a \omega_i - c_1 \kappa_a B_i, \end{aligned} \quad (3.166)$$

onde $\boldsymbol{\omega} = \mathbf{p} \times \mathbf{B}$ e os coeficientes $c_{1,2,3}$ são dados por

$$c_1 = \sum_{n,s} \frac{A_{n,s}}{\lambda_{n,s}}; \quad c_2 = \frac{1}{\sqrt{c_2}} \sum_{n,s} (-1)^s A_{n,s}; \quad c_3 = \frac{1}{\sqrt{c_2}} \sum_{n,s} \frac{(-1)^s A_{n,s}}{\lambda_{n,s}}. \quad (3.167)$$

Sem perda de generalidade, será fixado $\mathbf{p} = p \mathbf{e}_x$ e $\mathbf{B} = B \cos(\theta) \mathbf{e}_x + B \sin(\theta) \mathbf{e}_y$ e, como os valores θ não alteram a interpretação dos resultados a serem obtidos, será fixado $\theta = \pi/4$. Com as expressões acima calcula-se a negatividade, a discórdia geométrica e o quantificador de não-localidade.

A Figura 8 mostra a negatividade $\mathcal{N}[\rho]$ (linhas sólidas), a discórdia geométrica $\mathcal{D}[\rho]$ (linhas tracejadas) e o quantificador de não-localidade $\mathcal{B}[\rho]$ (linhas pontilhadas) para misturas entre autoestados de energia positiva, dados por $A\rho_{00} + (1-A)\rho_{01}$ (primeira linha) e para misturas entre autoestados de energia positiva e negativa, dados por $A\rho_{00} + (1-A)\rho_{11}$ (segunda linha) em função de m/p . Para estados não relativísticos, i.e. para $m \gg p$, as misturas são separáveis, locais e não exibem nenhum tipo de correlação quântica. Entretanto, para o *momentum* de mesma magnitude da massa, o estado pode ser emaranhado e não-local ou emaranhado e local. Como no caso da partícula livre, o estado é local mas exhibe correlações quânticas concentradas em torno de um valor de máximo, para o qual a discórdia geométrica $\mathcal{D}[\rho]$ apresenta descontinuidade na primeira derivada (para misturas de energia positiva). Estados mistos compostos por autoestados de energia positiva e negativa exibem um caráter não local crescente. Em particular para $A = 0.1$, a mistura sempre viola a desigualdade CHSH.

3.5.3 Inclusão de efeitos térmicos

No contexto desta seção é possível estudar como a temperatura afeta as correlações entre spin e paridade. Em um cenário simplificado no qual o sistema, inicialmente descrito por um estado arbitrário, interage com um banho térmico de temperatura $T = \beta^{(-1)}$, na ausência de campos externos que dependem do tempo, pode-se provar que o estado térmico (estado de Gibbs)

$$\rho_{\text{Gibbs}} = e^{-\beta \hat{H}} / \text{Tr}[e^{-\beta \hat{H}}],$$

é uma solução estacionária da equação mestra que descreve a evolução do sistema sob a ação de tal ambiente. Se o semigrupo quântico que descreve essa evolução de sistema aberto é ergódico, então todo o estado inicial irá evoluir para o estado térmico sob a ação de um banho térmico (BREUER; PETRUCCIONE, 2002).

O estado térmico de (3.161) é dado por

$$\rho_{\text{Thermal}} = \left(\sum_{\{k,l\}} e^{-\beta \lambda_{k,l}} \right)^{-1} \sum_{\{n,s\}} e^{-\beta \lambda_{n,s}} \rho_{n,s}, \quad (3.168)$$

que corresponde a uma mistura genérica que possui propriedades correlacionais dependentes da temperatura. No limite de altas temperaturas ($\beta \rightarrow 0$), o estado térmico tende ao

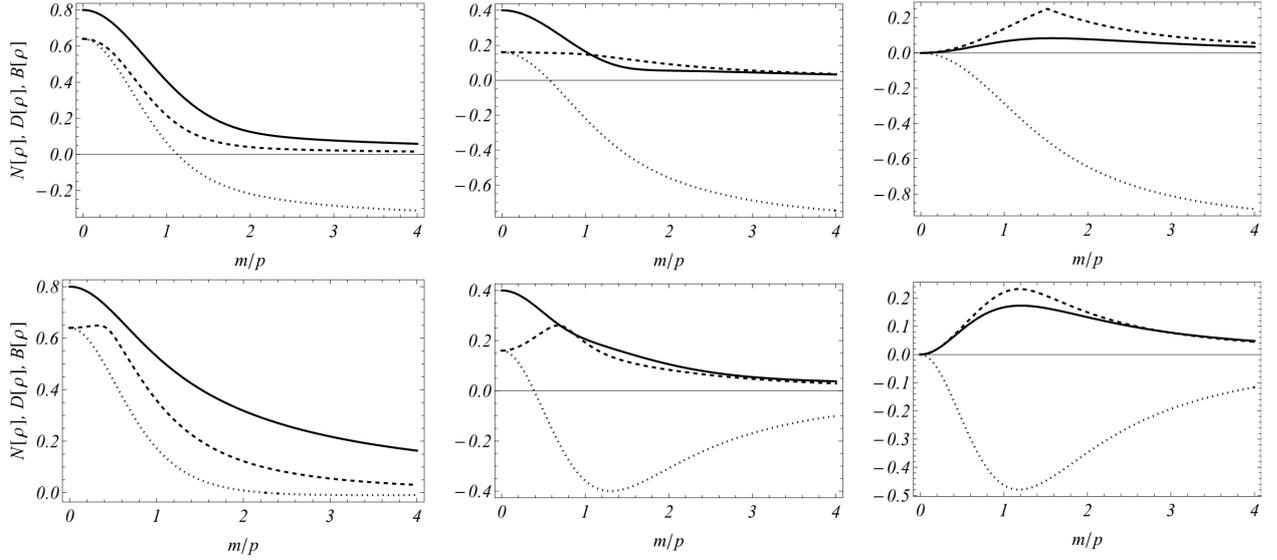


Figura 8 – Negatividade (linhas sólidas), discórdia geométrica (linhas tracejadas) e função de Bell (linhas pontilhadas), em função de m/p para misturas (c.f. Eq. (3.165)) dadas por $A\rho_{00} + (1 - A)\rho_{01}$ (primeira linha) e $A\rho_{00} + (1 - A)\rho_{11}$ (segunda linha), para $A = 0.1$ (primeira coluna), 0.3 (segunda coluna) e 0.5 (terceira coluna). Os gráficos são para $B/p = \chi_a = \kappa_a = 1$ e $\theta = \pi/4$. No limite não-relativístico ($m \gg p$) o estado é separável com correlações spin-paridade locais. Para $m \sim p$ o estado é emaranhado, mas as correlações codificadas entre spin e paridade intrínseca podem ser locais ou não-locais dependendo do valor de A . Para a mistura maximal, ambos os estados são locais para qualquer valor de m/p . Neste caso, os estados são emaranhados e exibem correlações quânticas concentradas em tronco de um valor de máximo. Superposições envolvendo autoestados de energia positiva e negativa são mais não locais que os estados mistos de energia positiva .

estado maximamente misto $\hat{I}_4/4$, e, no limite de baixas temperaturas ($\beta \gg \lambda_{n,s}$), para o autoestado com menor energia.

Para o estado térmico (3.168), a Figura 9 apresenta a negatividade (linhas sólidas), discórdia geométrica (linhas tracejadas) e não-localidade (linhas pontilhadas) em função da temperatura inversa β para $m/p = 0$ (primeira coluna), 1 (segunda coluna) e 10 (terceira coluna), com todos os outros parâmetros em correspondência com os da Figura 8. As correlações quânticas são destruídas pela temperatura. Em particular, o emaranhamento se anula abruptamente para um valor bem definido da temperatura que depende de m/p . A característica não-local das correlações são ainda mais afetadas pela temperatura: com o aumento da temperatura as correlações se tornam locais antes do estado se tornar separável. No limite de baixas temperaturas todos os quantificadores tendem a valores constantes que depende de m/p , e tanto \mathcal{B} e \mathcal{D} tendem ao mesmo valor. A dependência geral em função de m/p é a mesma mostrada pela Figura 8, tal que para $m \gg p$, as correlações quânticas são pequenas.

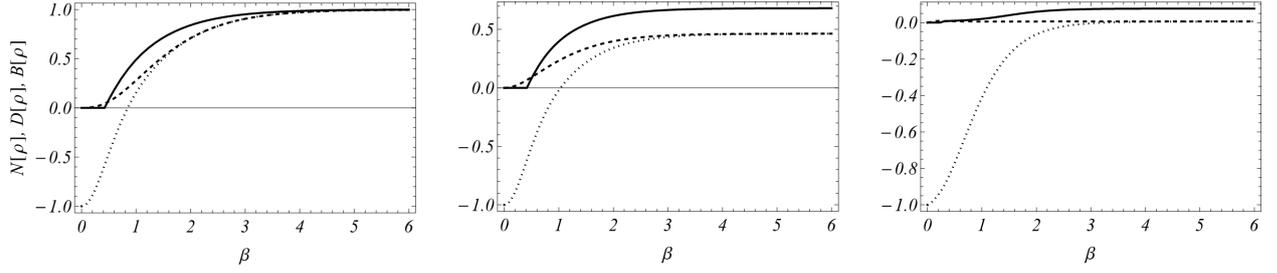


Figura 9 – Negatividade (linha sólida), discórdia geométrica (linha tracejada) e função de Bell (linha pontilhada) em função de $\beta = 1/T$ para o estado térmico construído com os autoestados do Hamiltoniano de Dirac incluindo acoplamento não minimal, com $m/p = 0$ (primeira coluna), 1 (segunda coluna) e 10 (terceira coluna). Todos os outros parâmetros estão em correspondência com a Figura 8. Para altas temperaturas, o estado tende a mistura maximal que não exibe correlações quânticas. Conforme a temperatura decresce, as correlações quânticas gradualmente aumentam. Em particular, o emaranhamento quântico aparece subitamente em uma temperatura específica que depende de m/p . Para baixas temperaturas, o emaranhamento quântico, as correlações quânticas e o quantificador de não-localidade, tendem a um valor constante. No limite de massa nula e baixas temperaturas, a mistura tende ao estado maximamente emaranhado.

3.5.4 Papel das transformações de simetria CP

As simetrias discretas são importantes na formulação da teoria quântica de campos e na interpretação de diversos fenômenos na mecânica quântica relativista. Em particular, na discussão de sistemas fermiônicos descritos pela equação de Dirac, a paridade total P e a conjugação de carga C , que transforma um estado de partícula em um estado de antipartícula, bem como a operação conjunta CP são importantes (HALZEN; MARTIN, 1984; GRIFFITHS, 1987; GIUNTI; KIM, 2007). Por exemplo, o fenômeno de oscilação de partículas e as taxas de decaimento são fenomenologicamente afetadas pela transformação CP e eventualmente produzem resultados assimétricos passíveis de detecção experimental (GIUNTI; KIM, 2007). A transformação CP age como um operador unitário tanto no spin quanto na paridade intrínseca de modo que, neste ponto, é relevante investigar como esta operação de simetria afeta as correlações intrínseca dos bispinores.

Para o estudo do efeito das transformações CP no conteúdo correlacional dos bispinores, é conveniente introduzir um espaço auxiliar \mathcal{X} que denotará os parâmetros do bispinor. Para o estado de partícula livre $\mathcal{X} = (m, E_p)$, e para os estados que descrevem interações não-minimais com um campo magnético $\mathcal{X} = (m, \mathbf{p}, \mathbf{B}, \kappa_a, \chi_a)$. A transformação de paridade aplicada a um bispinor $|\psi(\mathcal{X})\rangle$ é implementada através da transformação unitária $\hat{\mathcal{P}}$ dada por

$$\hat{\mathcal{P}}|\psi(\mathcal{X})\rangle = i\gamma_0|\psi(\tilde{\mathcal{X}})\rangle, \quad (3.169)$$

onde $\tilde{\mathcal{X}}$ é obtido através da inversão de todas as quantidades vetoriais de \mathcal{X} , i.e. $\tilde{\mathcal{X}} = \mathcal{X} = (m, E_p)$, para os estados de partícula livre, e $\tilde{\mathcal{X}} = (m, -\mathbf{p}, \mathbf{B}, \kappa_a, \chi_a)$, para os estados de acoplamento não-minimal, onde é importante ressaltar que $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ se transforma como um vetor axial.

De (3.169), a transformação do operador densidade ρ sob paridade total é implementado pela transformação unitária $\rho^{\mathcal{P}}(\mathcal{X}) = \hat{\mathcal{P}}\rho(\tilde{\mathcal{X}})\hat{\mathcal{P}}^{-1}$, que, em termos da decomposição de Fano (3.25) é dada por

$$\begin{aligned} \rho^{\mathcal{P}}(\mathcal{X}) &= (\hat{\sigma}_z^{(P)} \otimes \hat{I}_2^{(S)})\rho(\mathcal{X})(\hat{\sigma}_z^{(P)} \otimes \hat{I}_2^{(S)}) \\ &= \frac{1}{4} \left[\hat{I}_4 + (\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(P)} \otimes \hat{I}_2^{(S)}) \cdot (\mathbf{a}^{(P)})^{\mathcal{P}}(\tilde{\mathcal{X}}) + (\hat{I}_2^{(P)} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)}) \cdot (\mathbf{a}^{(S)})^{\mathcal{P}}(\tilde{\mathcal{X}}) + \sum_{i=\{x,y,z\}} (\hat{\sigma}_i^{(P)} \otimes \hat{\sigma}_j^{(S)}) t_{ij}^{\mathcal{P}}(\tilde{\mathcal{X}}) \right], \end{aligned} \quad (3.170)$$

onde os vetores de Bloch $(\mathbf{a}^{(P,S)})^{\mathcal{P}}$ e a matriz de correlação $T^{\mathcal{P}}$ transformados são dados em termos das quantidades originais como

$$\begin{aligned} (\mathbf{a}^{(P)})^{\mathcal{P}}(\mathcal{X}) &= (-a_x^{(P)}(\tilde{\mathcal{X}}), -a_y^{(P)}(\tilde{\mathcal{X}}), +a_z^{(P)}(\tilde{\mathcal{X}})), \\ (\mathbf{a}^{(S)})^{\mathcal{P}}(\mathcal{X}) &= \mathbf{a}^{(S)}(\tilde{\mathcal{X}}), \\ T^{\mathcal{P}}(\mathcal{X}) &= \text{Diag}\{-1, -1, +1\} T(\tilde{\mathcal{X}}). \end{aligned} \quad (3.171)$$

Analogamente, a conjugação de carga age nos biespinores como (GIUNTI; KIM, 2007; ITZYKSON; ZUBER, 1980)

$$\hat{C}|\psi(\mathcal{X})\rangle = i\gamma_y|\psi(\mathcal{X})\rangle^*, \quad (3.172)$$

onde “*” indica a operação de conjugação complexa. Em termos de operadores densidade, a transformação C é dada por

$$\begin{aligned} \rho^{\mathcal{C}}(\mathcal{X}) &= (\hat{\sigma}_y^{(P)} \otimes \hat{\sigma}_y^{(S)})\rho^*(x)(\hat{\sigma}_y^{(P)} \otimes \hat{\sigma}_y^{(S)}) = \\ &= \frac{1}{4} \left[\hat{I}_4 + (\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(P)} \otimes \hat{I}_2^{(S)}) \cdot (\mathbf{a}^{(P)})^{\mathcal{C}}(\mathcal{X}) + (\hat{I}_2^{(P)} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)}) \cdot (\mathbf{a}^{(S)})^{\mathcal{C}}(\mathcal{X}) + \sum_{i=\{x,y,z\}} (\hat{\sigma}_i^{(P)} \otimes \hat{\sigma}_j^{(S)}) t_{ij}^{\mathcal{C}}(\mathcal{X}) \right], \end{aligned} \quad (3.173)$$

com os vetores de Bloch e matriz de correlação dados por

$$\begin{aligned} (\mathbf{a}^{(P)})^{\mathcal{C}}(\mathcal{X}) &= -\mathbf{a}^{(P)}(\mathcal{X}), \\ (\mathbf{a}^{(S)})^{\mathcal{C}}(\mathcal{X}) &= -\mathbf{a}^{(S)}(\mathcal{X}), \\ T^{\mathcal{C}}(\mathcal{X}) &= T(\mathcal{X}). \end{aligned} \quad (3.174)$$

A conjugação de carga (3.173) é exatamente a operação de *spin-flip* que apenas inverte os vetores de Bloch e não modifica nenhuma correlação local inerte ao estado.

A combinação de conjugação de carga e paridade é dada por

$$\rho^{\mathcal{C}\mathcal{P}}(x) = \hat{\alpha}_y \rho^*(\tilde{x}) \hat{\alpha}_y = (\hat{\sigma}_x^{(P)} \otimes \hat{\sigma}_y^{(S)}) \rho^*(\tilde{x}) (\hat{\sigma}_x^{(P)} \otimes \hat{\sigma}_y^{(S)}), \quad (3.175)$$

e as correspondentes leis de transformação para os vetores de Bloch e matriz de correlação são dados pela composição de (3.171) e (3.174) como

$$\begin{aligned}(\mathbf{a}^{(P)})^{\mathcal{CP}}(\mathcal{X}) &= (+a_x^{(P)}(\tilde{\mathcal{X}}), +a_y^{(P)}(\tilde{\mathcal{X}}), -a_z^{(P)}(\tilde{\mathcal{X}})) \\(\mathbf{a}^{(S)})^{\mathcal{CP}}(\mathcal{X}) &= -\mathbf{a}^{(S)}(\tilde{\mathcal{X}}) \\T^{\mathcal{CP}}(\mathcal{X}) &= \text{Diag}\{-1, -1, +1\} T(\tilde{\mathcal{X}}).\end{aligned}\tag{3.176}$$

As transformações C, P e CP agem não trivialmente nos subsistemas internos associados aos biespinores de Dirac. Conforme a interpretação dos biespinores como estados de dois qubits, C, P e CP são necessariamente operações de dois qubits que afetam as propriedades correlacionais de um dado estado. Quando estados biespinoriais puros são considerados, por exemplo no caso de (3.165) com apenas um termo, todas as propriedades de correlação são dadas em termos dos módulos dos vetores de Bloch. Para tais estados, a paridade modifica o emaranhamento apenas através da dependência do quantificador em termos dos parâmetros \mathcal{X} do sistema. Para qualquer quantificador de emaranhamento para estados puros \mathcal{E} , $\mathcal{E}^{\mathcal{CP}}(\mathcal{X}) = \mathcal{E}(\tilde{\mathcal{X}})$.

Por outro lado, para estados mistos, a transformação das correlações diante CP é mais complexa, uma vez que a quantificação depende da determinação de autovalores máximos específicos (c.f. Eqs. (3.44), (3.50) e (3.68)). Entretanto, a ação da transformação CP na característica não-local das correlações quânticas de um estado de biespinores pode ser sistematicamente calculada. A característica não-local, quantificada por (3.68), depende dos autovalores de $M = T^T T$. De (3.176), conclui-se que

$$M^{\mathcal{CP}}(\mathcal{X}) = (T^{\mathcal{CP}}(\mathcal{X}))^T T^{\mathcal{CP}}(\mathcal{X}) = (T(\tilde{\mathcal{X}}))^T T(\tilde{\mathcal{X}}) = M(\tilde{\mathcal{X}}).\tag{3.177}$$

A mudança na características locais das correlações intrínsecas dos biespinores de Dirac é, portanto, determinada unicamente pela mudança dos parâmetros do estado diante reflexões espaciais. Qualquer mudança nos subsistemas internos devido à transformação CP não afeta a característica (não)local das correlações quânticas em estados mistos de biespinores. Um exemplo trivial é o de estados mistos de partícula livre que dependem apenas de dois parâmetros: $E_p = \sqrt{p^2 + m^2}$ e m , onde $\mathcal{X} = \tilde{\mathcal{X}}$. Tal estado é invariante diante transformações CP, uma vez que ρ_{free} é completamente invariante, i.e. $\rho_{\text{free}}^{\mathcal{CP}} = \rho_{\text{free}}$, apesar do Hamiltoniano da partícula livre não ser invariante devido ao termo de massa.

Estados mistos interagentes, descritos através de autoestados do Hamiltoniano generalizado (3.122) possuem uma estrutura mais complexa. Para os estados associados à interação não-minimal (3.165), a transformação CP dos vetores de Bloch e da matriz de

correlação (3.166) são dados por

$$\begin{aligned} (\mathbf{a}^{(P)})^{\mathcal{CP}} &= (-a_x^{(P)}(\mathcal{X}), a_y^{(P)}(\mathcal{X}), a_z^{(P)}(\mathcal{X})), \\ (\mathbf{a}^{(S)})^{\mathcal{CP}} &= (-a_x^{(S)}(\mathcal{X}), -a_y^{(S)}(\mathcal{X}), a_z^{(S)}(\mathcal{X})), \\ T^{\mathcal{CP}} &= \begin{bmatrix} t_{xx}(\mathcal{X}) & -t_{xy}(\mathcal{X}) & 0 \\ t_{yx}(\mathcal{X}) & -t_{yy}(\mathcal{X}) & -t_{yz}(\mathcal{X}) \\ t_{zx}(\mathcal{X}) & t_{zy}(\mathcal{X}) & -t_{zz}(\mathcal{X}) \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (3.178)$$

Com estas fórmulas, conclui-se que $M^{\mathcal{CP}}$ possui os mesmo autovalores de M e portanto o quantificador de não-localidade (3.68) possui mesmo valor para os dois estados. Além disso, $\mathcal{N}[\rho^{\mathcal{CP}}] = \mathcal{N}[\rho]$, i.e. o emaranhamento é invariante diante CP para este caso. A transformação CP se manifesta, na realidade, na discórdia geométrica. A Figura 10 mostra a diferença $|\mathcal{D}[\rho^{\mathcal{CP}}] - \mathcal{D}[\rho]|$ em função do regime cinético m/p para as misturas $A\rho_{00} + (1-A)\rho_{01}$ (esquerda) e $A\rho_{00} + (1-A)\rho_{11}$ (direita), para o mesmo conjunto de parâmetros utilizado na Figura 8. Estados mistos compostos por autoestados de energia positiva e negativa exibem correlações quânticas mais robustas diante transformações CP quando comparados aos estados mistos compostos apenas por autoestados de energia positiva. Para misturas maximais, a transformação CP não altera as correlações quânticas (linha pontilhada).

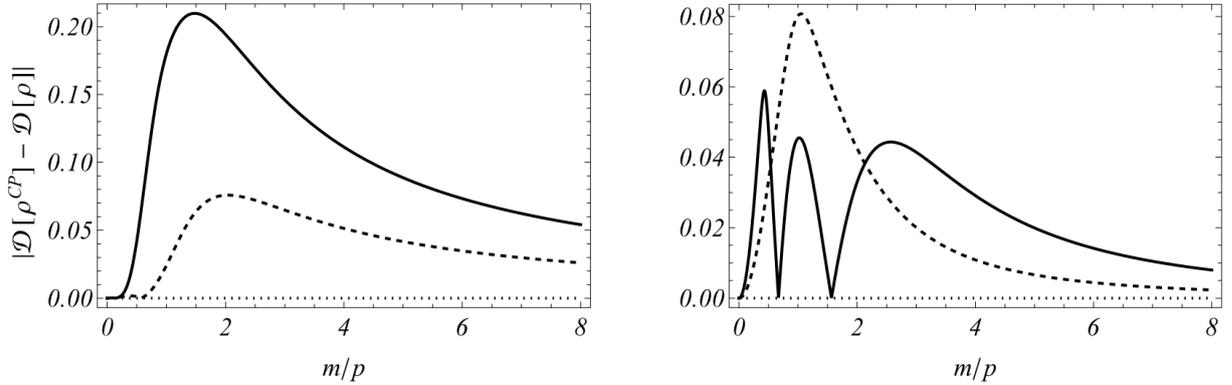


Figura 10 – Valor absoluto da diferença entre a discórdia geométrica do estado original e a discórdia geométrica do estado transformado CP para estados mistos (c.f. Eq. (3.165)), para misturas dadas por $A\rho_{00} + (1-A)\rho_{01}$ (gráfico da esquerda) e por $A\rho_{00} + (1-A)\rho_{11}$ (gráfico da direita). Os gráficos são para $A = 0.1$ (linhas sólidas), 0.3 (linhas tracejadas) e 0.5 (linhas pontilhadas). Todos os outros parâmetros estão em correspondência com os da Figura 8. As correlações quânticas das misturas entre autoestados de energia positiva e negativa são mais robustas diante transformações CP. Para misturas maximais, $\rho^{\mathcal{CP}}$ possui a mesma quantidade de correlações quânticas que o estado original.

Para um Hamiltoniano incluindo um acoplamento não minimal com um campo elétrico externo \mathbf{E} , a análise apresentada nesta seção é válida com as substituições

$$\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{E}, \quad \chi_a \rightarrow \kappa_a, \quad \kappa_a \rightarrow -\chi_a. \quad (3.179)$$

Como \mathbf{E} é uma quantidade vetorial, ela é invertida diante paridade de modo que o efeito nos parâmetros do estado é dado por $(x, \mathbf{p}, \mathbf{E}) \rightarrow (x, -\mathbf{p}, -\mathbf{E})$. Utilizando o mesmo procedimento sistemático acima é possível constatar que para interações não-minimais com um campo elétrico constante não apenas a negatividade e o quantificador de não-localidade, mas também a discórdia geométrica é invariante CP. Para estados mistos que descrevem tais sistemas todas as correlações quânticas são invariantes diante CP apesar de nem o Hamiltoniano nem o estado serem invariantes.

Para concluir esta seção, os efeitos da transformação CP no estado térmico considerado anteriormente (3.168) modifica as correlações quânticas do estado original. Tais efeitos são destacados para temperaturas baixas, conforme mostra a Figura 11 para $|\mathcal{D}^{\text{CP}}[\rho_{\text{Thermal}}] - \mathcal{D}[\rho_{\text{Thermal}}]|$ em função de β , para $m/p = 1$ (linhas sólidas), 5 (linhas tracejadas) e 10 (linhas pontilhadas). Para baixos valores de m/p , $|\mathcal{D}^{\text{CP}}[\rho_{\text{Thermal}}] - \mathcal{D}[\rho_{\text{Thermal}}]|$ não aumenta monotonicamente e exibe um valor de máximo. Portanto, o estado CP e o estado original são mais distinguíveis (do ponto de vista da discórdia geométrica) para um valor específico de temperatura. O comportamento amortecido que segue m/p mostrado na Fig. 10 também é presente no estado térmico.

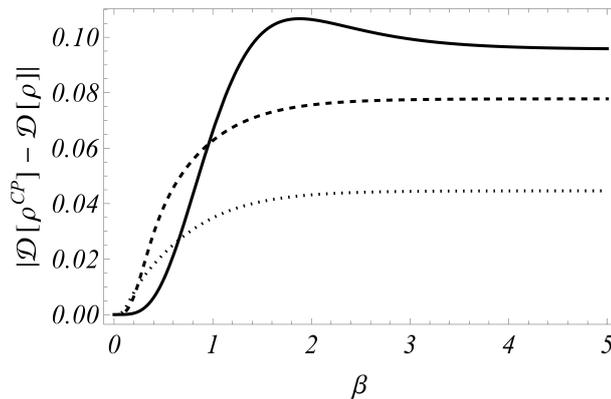


Figura 11 – Valor absoluto da diferença entre a discórdia geométrica do estado térmico e de sua transformada CP para $m/p = 1$ (linha sólida), 5 (linha tracejada) e 10 (linha pontilhada) em função de $\beta = 1/T$. Como genericamente notado na Fig. 10, os efeitos de assimetria diante CP são amortecidos para $m \gg p$.

Em resumo, as transformações CP modificam as correlações quânticas em estados mistos de bispinores, mas o caráter não local pode ser modificado apenas por uma mudança nos parâmetros do estado. Em termos de operadores de dois qubits, a transformação C é apenas uma operação de *spin-flip* aplicada nos espaços internos do bispinor e, por si só, não muda as correlações do estado. Além disso, o emaranhamento é invariante diante CP, uma vez que esta operação é unitária. Em geral, assimetrias CP se manifestam através da discórdia geométrica e, de maneira geral, tal quantidade é o único quantificador de correlações afetado por transformações CP.

3.6 Emaranhamento codificado em pares de biespinores sob *boosts* de Lorentz

Nas últimas décadas uma discussão recorrente na literatura é relacionada às propriedades de transformação do emaranhamento codificado em estados que descrevem sistemas compostos sob transformações relativísticas (CZACHOR, 1997; PERES; SCUDO; TERNO, 2002; GINGRICH; ADAMI, 2002; TERASHIMA; UEDA, 2003; BARTLETT; TERNO, 2005; CABAN, 2005; JORDAN, 2007; CABAN; REMBIELINSKI; WŁODARCZYK, 2009; FRIIS; BERTLMANN; HUBER, 2010). Em particular, o emaranhamento entre pares de spins é um *framework* popularmente considerado principalmente devido à sua aplicabilidade em protocolos de comunicação quântica nos quais efeitos relativísticos são importantes, como o GPS quânticos (JOZSA et al., 2000; GIOVANNETTI; LLOYD; MACCONE, 2001; KENT; MUNRO; SPILLER, 2011), e também por ser uma questão de cunho fundamental na descrição das correlações quânticas em um cenário relativístico (PERES; TERNO, 2004).

Como discutido preliminarmente na seção 2.2.3 o spin surge como número quântico ao se considerar as representações irredutíveis do grupo de Poincaré, sendo associado a um dos invariantes de Casimir do grupo. Do ponto de vista cinemático, o efeito de *boosts* de Lorentz em estados de spins 1/2 envolve sua descrição em termos das representações irredutíveis do grupo de Poincaré (TUNG, 1993). Por exemplo, para uma partícula com *momentum* \mathbf{p} , em um referencial inercial \mathcal{S} , descrita por um estado quântico $|\phi_s(\mathbf{p})\rangle$, com $s = 1, 2$ indicando o estado de spin, a ação de um *boost* de Lorentz Λ , dado em termos gerais na representação de coordenadas por (2.59), descrevendo a mudança de \mathcal{S} para um referencial \mathcal{S}' , é dada pela transformação unitária (FONDA; GHIRARDI, 1970; WEINBERG, 1995; WIGNER, 1939)

$$|\phi_s(\mathbf{p})\rangle \rightarrow \hat{D}[\Lambda]|\phi_s(\mathbf{p})\rangle = \sum_r c_{sr}(\Lambda, \mathbf{p})|\phi_r(\mathbf{p}')\rangle, \quad (3.180)$$

onde o operador unitário $\hat{D}[\Lambda]$, e suas componentes c_{sr} , são determinadas de acordo com a representação do grupo de Poincaré ao qual pertence o estado quântico $|\phi_s(\mathbf{p})\rangle$. O estado pode ser, por exemplo, um espinor de duas componentes (como um férmio de Weyl), um vetor (em uma representação de tripleto, como o positrônio 3S_1 ou os fótons), biespinores (na representação de doubleto-doubleto, como elétrons e pósitrons descritos como férmions de Dirac), ou mesmo escalar (como em uma representação de singleto).

De maneira geral o efeito de transformações de Lorentz em estados de spin é uma rotação que depende do *momentum* da partícula (WIGNER, 1939) – rotação de Wigner – que possui implicações particulares no cálculo de correlações quânticas. Por exemplo, foi mostrado que a entropia do estado de spin de uma única partícula, obtido através do traço sobre o *momentum* do estado, é uma quantidade não invariante diante

boosts de Lorentz (PERES; SCUDO; TERNO, 2002), indicando que tais transformações emaranham o *momentum* e o spin de uma partícula e, além disso, levantando a questão de como definir corretamente um operador densidade para spins (CABAN; REMBIELINSKI; WLODARCZYK, 2013; BAUKE et al., 2014). Ao se considerar pares de partículas, efeitos mais peculiares resultam das rotações de Wigner. A ação de um *boost* de Lorentz, por exemplo, degrada o emaranhamento codificado em pares de spin $1/2$, podendo anular abruptamente o emaranhamento entre spins quando um caráter de localização é considerado (GINGRICH; ADAMI, 2002).

Todos os efeitos acima citados foram observados considerando representações irreduzíveis associadas ao spin $1/2$ que, neste caso, são relacionadas ao grupo $SU(2)$. Entretanto a consideração da paridade total como simetria da teoria requer a utilização da representação $(\frac{1}{2}, 0) \oplus (0, \frac{1}{2})$ redutível do grupo de Lorentz que, para partículas de spin $1/2$ é associada a estrutura de grupos $SU(2) \otimes SU(2)$. Neste caso, o spin é codificado nos bispinores de Dirac que pertencem a uma representação irreduzível do *grupo de Lorentz completo* (TUNG, 1993), que é composto pelo grupo de Lorentz próprio mais paridade espacial.

Estados construídos com a equação de Dirac foram considerados anteriormente em um contexto informacional em escopos não exatamente relacionados ao estudo das propriedades de transformação do emaranhamento. A estrutura bispinorial foi considerada, por exemplo, no estudo das desigualdade de Bell (CABAN; REMBIELINSKI, 2006), para a obtenção de um operador densidade covariante para spins e na discussão da definição de operadores de posição no contexto da mecânica quântica relativística (SALDANHA; VEDRAL, 2012; CABAN; REMBIELINSKI; WLODARCZYK, 2013; BAUKE et al., 2014). Os efeitos de *boosts* no emaranhamento codificado em bispinores foi descrito principalmente em conexão com as rotações de Wigner para uma classe específica de estados (ALSING; MILBURN, 2002), e no contexto do operador de spin de Foldy-Wouthuysen (FW) (GREINER, 2000), com um foco especial nas propriedades de transformação do emaranhamento entre spins de autoestados do operador FW (CHOI; HUR; KIM, 2011; CHOI, 2013). Apesar da vasta literatura no assunto, a estrutura intrínseca $SU(2) \otimes SU(2)$ dos bispinores não foi considerada neste contexto.

O objetivo desta seção, que completa a descrição geral do emaranhamento spin-paridade, é descrever os efeitos gerais da estrutura $SU(2) \otimes SU(2)$ no emaranhamento codificado em pares de partículas bispinoriais, em particular sob *boosts* de Lorentz. A lei de transformação dos bispinores é dada pelo operador \hat{S} (2.60) e cada partícula é descrita por um bispinor de Dirac, cada um associado a dois qubits de modo que o estado conjunto de duas partículas é um estado de 4 qubits: paridade intrínseca e spin de cada uma das partículas. A descrição do emaranhamento neste cenário é mais complexa uma vez que as correlações são codificadas em mais de dois graus de liberdade. Tal emaranhamento

multipartite será quantificado de maneira simplificada em termos do emaranhamento global de Meyer-Wallach (MEYER; WALLACH, 2002) e o foco será nos efeitos dos *boosts* de Lorentz neste quantificador global de emaranhamento e no emaranhamento codificado apenas entre os spins da partícula. Como a quiralidade é uma quantidade invariante, neste cenário de *boosts* torna-se interessante investigar o comportamento de correlações presentes em estados quirais. Para este caso algumas propriedades de invariância do emaranhamento serão obtidas.

3.6.1 Estados de duas partículas biespinoriais

Com os biespinores normalizados Eq. (3.9), um estado geral de duas partículas, A e B com *momenta* (e energia) \mathbf{p} (E_p) e \mathbf{q} (E_q) respectivamente, é construído em termos da superposição de M -termos

$$|\Psi^{AB}(\mathbf{p}, \mathbf{q})\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^M c_i |u_{s_i}(\mathbf{p})\rangle^A \otimes |u_{r_i}(\mathbf{q})\rangle^B, \quad (3.181)$$

com normalização dada por $\sum_{i=1}^M |c_i|^2 = N$. Tais estados podem ser gerados, por exemplo, em espalhamentos elásticos da eletrodinâmica quântica (PACHOS; SOLANO, 2003). Como anteriormente, por conveniência os biespinores $u_{s_i}(\mathbf{p})$ (bem como $u_{r_i}(\mathbf{q})$) serão descritos como autoestados de helicidade (3.71) e, para \mathbf{e}_p na direção z , $\mathbf{e}_p \equiv \mathbf{e}_z$, e, portanto $|h_1^{(S)}\rangle \equiv |\chi_1(\mathbf{p})\rangle = |z_+\rangle$ e $|h_2^{(S)}\rangle \equiv |\chi_2(\mathbf{p})\rangle = |z_-\rangle$ (com $\hat{\sigma}_z|z_\pm\rangle = \pm|z_\pm\rangle$), tal que, nesta seção, os índices s_i (e r_i), quando iguais a 1 e 2, correspondem respectivamente a helicidades positiva e negativa.

O operador densidade da superposição genérica (3.181) é escrito como

$$\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} c_i c_j^* \rho_{s_i s_j}^A(\mathbf{p}) \otimes \rho_{r_i r_j}^B(\mathbf{q}), \quad (3.182)$$

onde

$$\begin{aligned} \rho_{s_i s_j}^A(\mathbf{p}) &= (|u_{s_i}(\mathbf{p})\rangle\langle u_{s_j}(\mathbf{p})|)^A \\ &= \frac{1}{2E_p} \left[(E_p \delta_{s_i s_j} + m \delta_{s_i s_j + 1}) \hat{I}_2^{(P)A} + (E_p \delta_{s_i s_j + 1} + m \delta_{s_i s_j}) \hat{\sigma}_z^{(P)A} + \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{E_p^2 - m^2} \left((-1)^{s_j} \hat{\sigma}_+^{(P)A} + (-1)^{s_i} \hat{\sigma}_-^{(P)A} \right) \right] \otimes \Xi_{s_i s_j}^{(S)A}(\mathbf{p}), \end{aligned} \quad (3.183)$$

com $\hat{\sigma}_\pm = \hat{\sigma}_x \pm i\hat{\sigma}_y$ e a dependência da direção do *momentum* é fatorizada no termo

$$\Xi_{s_i s_j}^{(S)A}(\mathbf{p}) = (|\chi_{s_i}(\mathbf{p})\rangle\langle \chi_{s_j}(\mathbf{p})|)^A, \quad (3.184)$$

com uma expressão análoga para $\rho_{r_i r_j}^B(\mathbf{q})$ obtida através da substituição de $\{\mathbf{p}; s_{i(j)}\}$ por $\{\mathbf{q}; r_{i(j)}\}$ e A por B . Como cada uma das componentes do estado (3.182) é um estado de dois qubits, o estado $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ descreve um sistema de quatro qubits. Diferente do caso de um

sistema composto por dois subsistemas, para o qual o teorema de Schmidt ou o critério de Peres podem ser utilizados para a classificação e para o cálculo do emaranhamento, a descrição das correlações codificadas em estados multipartite ainda é um problema em aberto (AMICO et al., 2008; HORODECKI et al., 2009). O emaranhamento entre os diferentes subsistemas de um estado multipartite podem estar distribuídos de diversas maneiras não equivalentes, sendo a caracterização deste tipo de correlação podendo ser descrita sob diversas perspectivas. Como o estado (3.182) é puro, o emaranhamento multipartite correspondente pode ser calculado de maneira simplificada através do emaranhamento global de Meyer-Wallach, $E_G[\rho]$, dado em termos das entropias lineares dos subsistemas como, $E_L[\rho]$, como (MEYER; WALLACH, 2002)

$$E_G[\rho] = \bar{E}[\rho^{\{\alpha_k\}}] = \frac{1}{4} [E_L[\rho^{(S)A}] + E_L[\rho^{(P)A}] + E_L[\rho^{(S)B}] + E_L[\rho^{(P)B}]], \quad (3.185)$$

com $E_L[\rho]$ a entropia linear dada em termos do traço de ρ por (3.33).

Os subsistemas considerados aqui correspondem ao spin e paridade intrínseca, S e P , para as partículas A e B , i.e. $\{\alpha_k\} \equiv \{(S)A, (S)B, (P)A, (P)B\}$. De maneira qualitativa, quanto mais os subsistemas de um dado estado puro são mistos, mais emaranhamento está codificado entre eles e a medida global $E_G[\rho]$ quantifica de maneira simplificada as correlações quânticas distribuídas entre os quatro graus de liberdade envolvidos.

A entropia linear de um subsistema ρ^{α_k} de (3.181), que é um estado de dois qubits, é calculada em termos das componentes de seu vetor de Bloch $a_n^{\alpha_k} = \text{Tr}[\hat{\sigma}_n^{\alpha_k} \rho^{\alpha_k}]$ como

$$E_L[\rho^{\alpha_k}] = 1 - \sum_{n=\{x,y,z\}} (a_n^{\alpha_k})^2, \quad (3.186)$$

de modo que a medida global da Eq. (3.185) se simplifica em

$$E_G[\rho] = 1 - \frac{1}{4} \sum_{\alpha=\{\alpha_k\}} \sum_{n=\{x,y,z\}} (a_n^\alpha)^2, \quad (3.187)$$

com $\{\alpha_k\} \equiv \{(S)A, (S)B, (P)A, (P)B\}$. Os vetores de Bloch dos subsistemas associados a A são explicitamente dados por

$$a_n^{(S)A} = \frac{1}{N} \sum_{i,j}^M c_i c_j^* \mathcal{M}_{r_i r_j}(\mathbf{q}) \frac{1}{E_p} (E_p \delta_{s_i s_j} + m \delta_{s_i s_{j+1}}) \text{Tr}[\hat{\sigma}_n^{(S)A} \Xi_{s_i s_j}^{(S)A}(\mathbf{p})], \quad (3.188)$$

para o subsistema spin, e

$$\begin{aligned} a_x^{(P)A} &= \frac{1}{N} \sum_i^M (-1)^{s_i} |c_i|^2 \frac{\sqrt{E_p^2 - m^2}}{E_p}, \\ a_y^{(P)A} &= 0, \\ a_z^{(P)A} &= \frac{1}{N} \sum_{i,j}^M c_i c_j^* \mathcal{M}_{r_i r_j}(\mathbf{q}) \text{Tr}[\Xi_{s_i s_j}^{(S)A}(\mathbf{p})] \frac{1}{E_p} (E_p \delta_{s_i s_{j+1}} + m \delta_{s_i s_j}), \end{aligned} \quad (3.189)$$

para o subsistema paridade intrínseca, onde

$$\mathcal{M}_{r_i r_j}(\mathbf{q}) = \text{Tr}[\rho_{r_i r_j}^B(\mathbf{q})] = \frac{1}{E_q} (E_q \delta_{r_i r_j} + m \delta_{r_i r_j + 1}) \text{Tr}[\Xi_{r_i r_j}^{(S)B}(\mathbf{q})]. \quad (3.190)$$

Expressões similares para os vetores de Bloch dos subsistemas de B são dadas exatamente por (3.188) e (3.190) com as substituições $\{\mathbf{p}; s_{i(j)}\} \leftrightarrow \{\mathbf{q}; r_{i(j)}\}$ e $A \leftrightarrow B$.

Para calcular o emaranhamento codificado apenas entre os spins de (3.182), deve-se considerar a matriz densidade reduzida aos spins

$$\begin{aligned} \rho^{(S)A, (S)B}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \text{Tr}_{(P)A, (P)B} [\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q})] \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i,j} c_i c_j^* \frac{(E_p \delta_{s_i s_j} + m \delta_{s_i s_j + 1}) (E_q \delta_{r_i r_j} + m \delta_{r_i r_j + 1})}{E_p E_q} \Xi_{s_i s_j}^{(S)A}(\mathbf{p}) \otimes \Xi_{r_i r_j}^{(S)B}(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (3.191)$$

que, em geral, é um estado misto não sendo possível quantificar o emaranhamento apenas entre os spins com a entropia linear (ou com a entropia de von Neumann). O emaranhamento spin-spin será quantificado em termos da negatividade (3.44) $\mathcal{N}[\rho^{(S)A, (S)B}]$ calculada com os autovalores da transposta parcial de (3.191) com respeito ao subsistema $(S)A$, dada por

$$\begin{aligned} (\rho^{(S)A, (S)B})^{T_A}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= (\text{Tr}_{(P)A, (P)B} [\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q})])^{T_A} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i,j} c_i c_j^* \frac{(E_p \delta_{s_i s_j} + m \delta_{s_i s_j + 1}) (E_q \delta_{r_i r_j} + m \delta_{r_i r_j + 1})}{E_p E_q} \Xi_{s_j s_i}^{(S)A}(\mathbf{p}) \otimes \Xi_{r_i r_j}^{(S)B}(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (3.192)$$

na qual a mudança com relação a (3.191) é resumida na troca dos sub-índices de $\Xi^{(S)A}$.

3.6.2 Efeitos dos *boosts* de Lorentz

Com o operador densidade geral construído e suas características de emaranhamento caracterizadas, é possível investigar os efeitos de um *boost* de Lorentz. Conforme apresentado na Seção 2.2.1 a ação desta em um bispinor é dada pelo operador

$$\hat{S}[\Lambda(\omega)] = \cosh\left(\frac{\omega}{2}\right) \hat{I}_4 - \sinh\left(\frac{\omega}{2}\right) \mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\alpha}}, \quad (3.193)$$

com \mathbf{n} a direção do *boost*. Na forma $SU(2) \otimes SU(2)$, o operador de *boost* (3.193) é escrito como

$$\hat{S}[\Lambda(\omega)] = \cosh\left(\frac{\omega}{2}\right) \hat{I}_2^{(P)} \otimes \hat{I}_2^{(S)} - \sinh\left(\frac{\omega}{2}\right) \mathbf{n} \cdot (\hat{\boldsymbol{\sigma}}_x^{(P)} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)}), \quad (3.194)$$

no qual é explícito os efeitos dos *boosts* nos subsistemas de spin e paridade intrínseca. Por exemplo, indicando o *quadrimentum* por p , o operador densidade de um único bispinor descrito como autoestado de helicidade se transforma sob *boosts* como

$$\rho_s(p) \rightarrow \rho'_s(p') = \frac{1}{\cosh(\omega)} \hat{S}[\Lambda(\omega)] \rho_s(\Lambda^{-1} p') \hat{S}^\dagger[\Lambda(\omega)], \quad (3.195)$$

onde o termo $(\cosh(\omega))^{-1}$ foi incluído de modo a manter a normalização do bispinor. A eq. (3.194) é então utilizada para descrever a lei de transformação do subsistema de spins,

cujo estado é dado por $\rho_s^{(S)}(p) = \text{Tr}_{(P)}[\rho_s(p)]$, como

$$\rho_s^{(S)}(p) \rightarrow \rho_s'^{(S)}(p') = \frac{1}{\cosh(\omega)} \left[\cosh^2\left(\frac{\omega}{2}\right) \rho_s^{(S)}(p) + \sinh^2\left(\frac{\omega}{2}\right) (\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \rho_s^{(S)}(p) (\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) - (-1)^s \sinh(\omega) \frac{E_p - m}{E_p} \{ \mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \rho_s^{(S)}(p) \} \right] \quad (3.196)$$

No limite $E_p - m \simeq E_p$, a expressão acima se simplifica para a fora $\rho_s'^{(S)}(p') = \hat{O} \rho_s^{(S)}(p) \hat{O}^\dagger$, com \hat{O} o operador unitário

$$\hat{O} = \frac{1}{\sqrt{\cosh(\omega)}} \left[\cosh\left(\frac{\omega}{2}\right) \hat{I}_2 - \sinh\left(\frac{\omega}{2}\right) (\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) (\mathbf{e}_p \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \right]. \quad (3.197)$$

Tal lei de transformação sob *boosts* de Lorentz é a mesma obtida para estados pertencentes à representação irredutível $(0, \frac{1}{2})$ que pode ser descrita em termos de uma rotação dependente do *momentum* e que é a base de diversos resultados na área da teoria da informação quântica relativística (PERES; TERNO, 2004; FRIIS; BERTLMANN; HUBER, 2010).

Para o estado genérico de duas partículas (3.182) descrito em um referencial inercial \mathcal{S} , a matriz densidade transformada que descreve o estado do sistema em um referencial inercial \mathcal{S}' , relacionado a \mathcal{S} por um *boost*, Λ , é dada por

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \rightarrow \rho'(\mathbf{p}', \mathbf{q}') &= \frac{1}{\nu} \left(\hat{S}^A[\Lambda] \otimes \hat{S}^B[\Lambda] \right) \rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \left((\hat{S}^A[\Lambda])^\dagger \otimes (\hat{S}^B[\Lambda])^\dagger \right) \\ &= \frac{1}{\nu} \sum_{i,j}^M c_i c_j^* \varrho_{s_i s_j}^A(\mathbf{p}) \otimes \varrho_{r_i r_j}^B(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (3.198)$$

onde $\nu = \text{Tr} \left[\left(\hat{S}^A[\Lambda] \otimes \hat{S}^B[\Lambda] \right)^2 \rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \right]$ e os termos transformados $\varrho_{s_i s_j}^A(\mathbf{p})$ são dados explicitamente por

$$\begin{aligned} \varrho_{s_i s_j}^A(\mathbf{p}) &= \cosh^2\left(\frac{\omega}{2}\right) \rho_{s_i s_j}^A(\mathbf{p}) - \frac{\sinh(\omega)}{2} \{ \rho_{s_i s_j}^A(\mathbf{p}), (\hat{\sigma}_x^{(P)A} \otimes \mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)A}) \} \\ &\quad + \sinh^2\left(\frac{\omega}{2}\right) (\hat{\sigma}_x^{(P)A} \otimes \mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)A}) \rho_{s_i s_j}^A(\mathbf{p}) (\hat{\sigma}_x^{(P)A} \otimes \mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)A}). \end{aligned} \quad (3.199)$$

Expressões similares são obtidas para $\varrho_{r_i r_j}^B(\mathbf{q})$. A diferença entre o emaranhamento global em \mathcal{S}' e \mathcal{S} ,

$$\Delta E_G = E_G[\rho'(\mathbf{p}', \mathbf{q}')] - E_G[\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q})], \quad (3.200)$$

é dada em termos das expressões (3.187) e (3.188) utilizando as expressões para os vetores de Bloch transformados, ou seja fazendo $\mathbf{a} \rightarrow \mathcal{A}$, que são dados por

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_k^{(S)A} &= \frac{1}{\nu} \sum_{i,j}^M c_i c_j^* \mu_{r_i r_j} \frac{1}{E_p} \left[\text{Tr}[\hat{\sigma}_k^{(S)A} \Xi_{s_i s_j}^{(S)A}] \cosh^2\left(\frac{\omega}{2}\right) (E_p \delta_{s_i s_j} + m \delta_{s_i s_j + 1}) \right. \\ &\quad \left. - 2(-1)^{s_i} n_k \text{Tr}[\Xi_{s_i s_j}^{(S)A}] \sinh(\omega) \sqrt{E_p^2 - m^2} \delta_{s_i s_j} \right. \\ &\quad \left. + \text{Tr}[\hat{\sigma}_k^{(S)A} (\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)A}) \Xi_{s_i s_j}^{(S)A} (\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)A})] \sinh^2\left(\frac{\omega}{2}\right) (E_p \delta_{s_i s_j} + m \delta_{s_i s_j + 1}) \right], \end{aligned} \quad (3.201)$$

para o subsistema de spin de A , e

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_x^{(P)A} &= \frac{1}{\nu} \sum_{i,j}^M c_i c_j^* \mu_{r_i r_j} \frac{1}{E_p} \left[(-1)^{s_i} \text{Tr} [\Xi_{s_i s_j}^{(S)A}] \cosh(\omega) \sqrt{E_p^2 - m^2} \delta_{s_i s_j} \right. \\ &\quad \left. - \sinh(\omega) \text{Tr} [(\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)A}) \Xi_{s_i s_j}^{(S)A}] (E_p \delta_{s_i s_j} + m \delta_{s_i s_j + 1}) \right], \\ \mathcal{A}_z^{(P)A} &= \frac{1}{\nu} \sum_{i,j}^M c_i c_j^* \mu_{r_i r_j} \frac{E_p \delta_{s_i s_j + 1} + m \delta_{s_i s_j}}{E_p} \text{Tr} [\Xi_{s_i s_j}^{(S)A}],\end{aligned}\quad (3.202)$$

para o subsistema de paridade, onde

$$\begin{aligned}\mu_{r_i r_j} &= \text{Tr} [\varrho_{r_i r_j}^B] \\ &= \frac{1}{E_p} \left[\cosh(\omega) (E_q \delta_{r_i r_j} + m \delta_{r_i r_j + 1}) \text{Tr} [\Xi_{r_i r_j}^{(S)B}] \right. \\ &\quad \left. - (-1)^{r_i} \sinh(\omega) \delta_{r_i r_j} \sqrt{E_q^2 - m^2} \text{Tr} [\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)B} \Xi_{r_i r_j}^{(S)B}] \right],\end{aligned}\quad (3.203)$$

e, para simplificar a notação em todas as expressões acima, a dependência explícita nos *momenta* \mathbf{p} e \mathbf{q} não foi indicada. Destas expressões os vetores de Bloch transformados para os subsistemas de B são obtidos fazendo-se $\{\mathbf{p}; s_{i(j)}\} \leftrightarrow \{\mathbf{q}; r_{i(j)}\}$ e $A \leftrightarrow B$ nas Eqs. (3.201)-(3.203). Além disso, para qualquer *boost* $\mathcal{A}_y^{(P)A} = \mathcal{A}_y^{(P)B} = 0$.

Os efeitos do *boost* no emaranhamento spin-spin, por outro lado, são descritos pela mudança na negatividade

$$\Delta \mathcal{N}^{(S)A, (S)B} = \mathcal{N}[\varrho^{(S)A, (S)B}] - \mathcal{N}[\rho^{(S)A, (S)B}], \quad (3.204)$$

com operador densidade reduzido ao espaço dos spins no referencial \mathcal{S}' dado por

$$\varrho^{(S)A, (S)B} = \frac{1}{\nu} \sum_{i,j}^M c_i c_j^* \varrho_{s_i s_j}^{(S)A} \otimes \varrho_{r_i r_j}^{(S)B}, \quad (3.205)$$

onde

$$\begin{aligned}\varrho_{s_i s_j}^{(S)A} &= \cosh^2 \left(\frac{\omega}{2} \right) \frac{E_p \delta_{s_i s_j} + m \delta_{s_i s_j + 1}}{E_p} \Xi_{s_i s_j}^{(S)A} \\ &\quad - (-1)^{s_i} \frac{\sinh(\omega)}{2} \frac{\sqrt{E_p^2 - m^2}}{E_p} \delta_{s_i s_j} \{ \Xi_{s_i s_j}^{(S)A}, \mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)A} \} \\ &\quad + \sinh^2 \left(\frac{\omega}{2} \right) \frac{E_p \delta_{s_i s_j} + m \delta_{s_i s_j + 1}}{E_p} (\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)A}) \Xi_{s_i s_j}^{(S)A} (\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)A}),\end{aligned}\quad (3.206)$$

e com expressões correspondentes para $\varrho_{r_i r_j}^{(S)B}$. Da expressão acima conclui-se que se a direção do *boost* \mathbf{n} é tal que $\{ \Xi_{s_i s_j}^{(S)A}, \mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)A} \} = \{ \Xi_{r_i r_j}^{(S)B}, \mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)B} \} = 0$, então o operador densidade reduzido aos spins (3.205) é invariante.

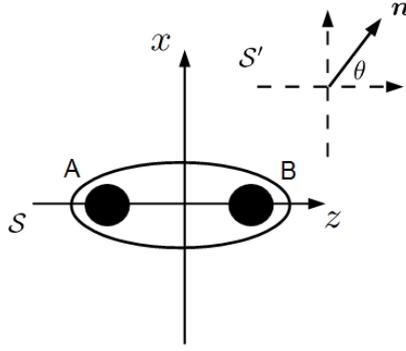


Figura 12 – Representação esquemática do cenário de *boost* considerado. O estado conjunto das partículas A e B é descrito por uma superposição antissimétrica de bispinores (3.207) com *momenta* $\mathbf{p} = -\mathbf{q} = p\mathbf{e}_z$ em \mathcal{S} . O referencial \mathcal{S}' , que se move com respeito a \mathcal{S} na direção $\mathbf{n} = \sin(\theta)\mathbf{e}_x + \cos(\theta)\mathbf{e}_z$, é relacionado ao referencial \mathcal{S} através de um *boost* de Lorentz com rapidez ω .

3.6.3 Estados antissimétricos sob *boosts* de Lorentz

O *framework* geral introduzido nas últimas seções descreve quantitativamente as mudanças nas correlações globais, quantificadas por E_G , e no emaranhamento spin-spin induzidas por *boosts* de Lorentz agindo em uma superposição genérica de estados de duas partículas descritas com bispinores autoestados de helicidade. Os resultados gerais obtidos podem ser especializados para qualquer tipo de superposição e, em particular, como a natureza das partículas fermiônicas requer a descrição através de funções de onda antissimétricas (ITZYKSON; ZUBER, 1980), superposições antissimétricas da forma

$$|\Psi_{sr}^{odd}(\mathbf{p}, \mathbf{q})\rangle = \frac{|u_s(\mathbf{p})\rangle^A \otimes |u_r(\mathbf{q})\rangle^B - |u_r(\mathbf{q})\rangle^A \otimes |u_s(\mathbf{p})\rangle^B}{\sqrt{2}} \quad (3.207)$$

serão agora consideradas. Vale ressaltar que para partículas de Dirac, como elétrons, quarks e neutrinos, algumas das configurações da forma acima são muito difíceis de serem produzidas fenomenologicamente e, portanto, alguns exemplos que serão considerados a seguir serão ilustrativos.

No referencial \mathcal{S} tal que $\mathbf{p} = -\mathbf{q}$, no centro de *momentum*, os autoestados de helicidade positiva e negativa são dados por

$$\begin{aligned} |\chi_1(\mathbf{p})\rangle &= |\chi_2(\mathbf{q})\rangle = |z_+\rangle, \\ |\chi_2(\mathbf{p})\rangle &= |\chi_1(\mathbf{q})\rangle = |z_-\rangle, \end{aligned} \quad (3.208)$$

e, no referencial não transformado \mathcal{S} , os autoestados são também autoestados o operador de spin de Pauli, $\hat{\Sigma}_z$. Para estados se propagando ao longo da direção z é suficiente considerar *boosts* na direção \mathbf{n} no plano $x - z$, ou seja $\mathbf{n} = \sin(\theta)\mathbf{e}_x + \cos(\theta)\mathbf{e}_z$ como esquematizado na Figura 12.

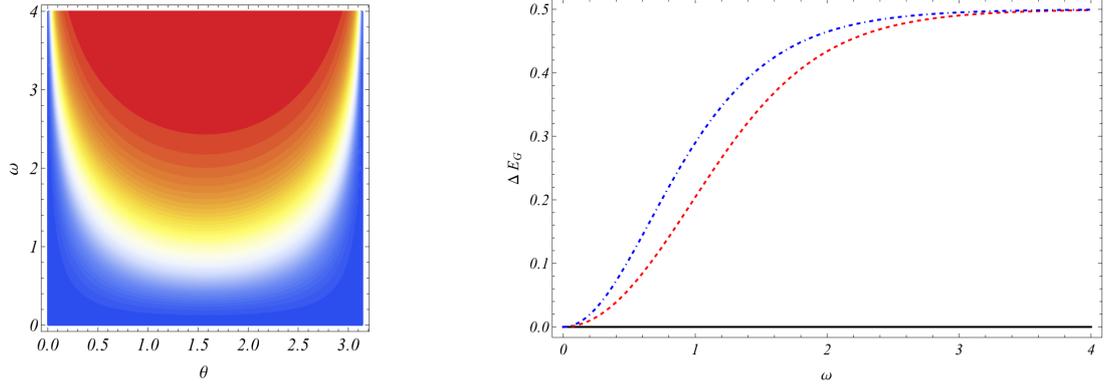


Figura 13 – Variação do emaranhamento global para o estado (3.209) em função da rapidez ω e da direção θ do *boost* (esquerda) e em função apenas da rapidez do *boost* (direita) para $\theta = 0$ (linha sólida e preta), $\pi/4$ (linha tracejada e vermelha) e $\pi/2$ (linha tracejada e pontilhada e azul). A escala de cores vai do azul (0) ao vermelho (1). A rapidez inicial dos biespinores no referencial \mathcal{S} é $\omega_0 = \text{arccosh}(E_p/m) = 1$. O emaranhamento global codificado nos graus de liberdade do par de biespinores (3.209) sempre aumenta para *boosts* não paralelos aos *momenta* \mathbf{p} e \mathbf{q} (com respeito a \mathcal{S}). Para *boosts* de alta rapidez, E_G tende ao seu valor máximo 1, uma vez que para o estado em \mathcal{S} $E_G[\rho] = 1/2$. O emaranhamento entre os spins é nulo em todos os referenciais $\mathcal{N}^{(S)A,(S)B}[\psi_1] = 0$.

Adaptando a notação para levar em conta as simplificações introduzidas quando se considera (3.208), o estado antissimétrico é dado por

$$|\psi_1\rangle = \frac{|u_1(\mathbf{p})\rangle^A \otimes |u_2(\mathbf{q})\rangle^B - |u_2(\mathbf{q})\rangle^A \otimes |u_1(\mathbf{p})\rangle^B}{\sqrt{2}}, \quad (3.209)$$

que é uma superposição de helicidades, apesar dos spins serem separáveis. Como $\Xi_{sr}^{(S)A} = \Xi_{sr}^{(S)B} = |z_+\rangle\langle z_+|$ para quaisquer s e r , o operador densidade reduzido aos spins, dado pela Eq. (3.205), é invariante diante de transposição parcial com respeito a qualquer um de seus subsistemas e, portanto, um *boost* de Lorentz não cria emaranhamento entre os spins deste estado. Entretanto, o emaranhamento global E_G não é invariante, como mostra a Figura. 13 que apresenta o gráfico de ΔE_G em função da rapidez ω e do ângulo θ do *boost*. Boosts paralelos aos *momenta* em \mathcal{S} não aumentam o emaranhamento total no estado. Por outro lado, qualquer *boost* não paralelo aos *momenta* aumenta E_G devido a um aumento nas entropias reduzidas tanto das paridades quanto dos spins. Para *boosts* de alta rapidez, E_G tende a seu valor máximo (~ 1).

Um estado maximamente emaranhado entre os spins, em \mathcal{S} , é construído com a superposição antissimétrica entre helicidades positivas

$$|\psi_2\rangle = \frac{|u_1(\mathbf{p})\rangle^A \otimes |u_1(\mathbf{q})\rangle^B - |u_1(\mathbf{q})\rangle^A \otimes |u_1(\mathbf{p})\rangle^B}{\sqrt{2}}, \quad (3.210)$$

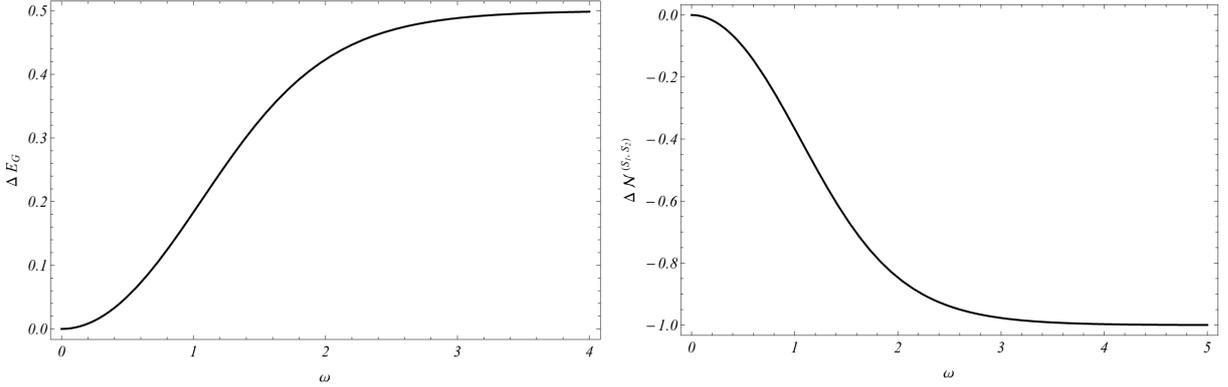


Figura 14 – Variação do emaranhamento global (esquerda) e do emaranhamento entre os spins (direita) em função da rapidez do *boost* ω para o estado (3.211). A transformação das correlações neste estado são independentes do ângulo do *boost* θ e, apesar do emaranhamento global aumentar devido ao *boost*, com comportamento similar ao mostrado na Fig. (13), o emaranhamento entre os spins é degradado. No limite de *boosts* de alta velocidade, S_{AB} é separável de todos os outros graus de liberdade, e o emaranhamento spin-spin se anula. Neste limite todo o emaranhamento está concentrado apenas entre as paridades intrínsecas.

que, de acordo com a correspondência (3.208), pode ser reescrito como

$$|\psi_2\rangle = \frac{|u_1(\mathbf{p})\rangle^A \otimes |u_1(\mathbf{q})\rangle^B - |u_2(\mathbf{p})\rangle^A \otimes |u_2(\mathbf{q})\rangle^B}{\sqrt{2}}, \quad (3.211)$$

que corresponde a uma configuração mais realista, uma vez que as partículas A e B possuem *momenta* bem definidos, \mathbf{p} e \mathbf{q} , respectivamente. A Fig. 14 apresenta os gráficos da variação do emaranhamento global e do emaranhamento spin-spin de $|\psi_2\rangle$ em função da rapidez do *boost* ω . Neste caso, tanto a variação de E_G quanto de \mathcal{N} é independente do ângulo do *boost* e, como no caso do estado (3.209), o emaranhamento global aumenta diante *boosts* de Lorentz. Por outro lado, o emaranhamento entre os spins é degradado pelo *boost* e, para *boosts* de alta velocidade, o estado reduzido aos spins é completamente separável.

O terceiro estado antissimétrico considerado é dado por

$$|\psi_3\rangle = \frac{|u_1(\mathbf{p})\rangle^A \otimes |u_2(\mathbf{p})\rangle^B - |u_2(\mathbf{p})\rangle^A \otimes |u_1(\mathbf{p})\rangle^B}{\sqrt{2}}, \quad (3.212)$$

que descreve uma superposição de duas partículas se movendo na direção \mathbf{e}_z com *momenta* iguais. Este caso é fenomenologicamente interessante pois $\Delta v = 0$ é um invariante de Lorentz, ou seja, dois elétrons que possuem um referencial de repouso em comum possuem $\Delta v = 0$ em todos os referenciais. Neste caso, o emaranhamento entre os spins depende do *momentum* p mesmo no referencial \mathcal{S} . Diferente dos outros exemplos, tanto o emaranhamento global, mostrado na Figura 15, quanto o emaranhamento entre os spins, mostrado

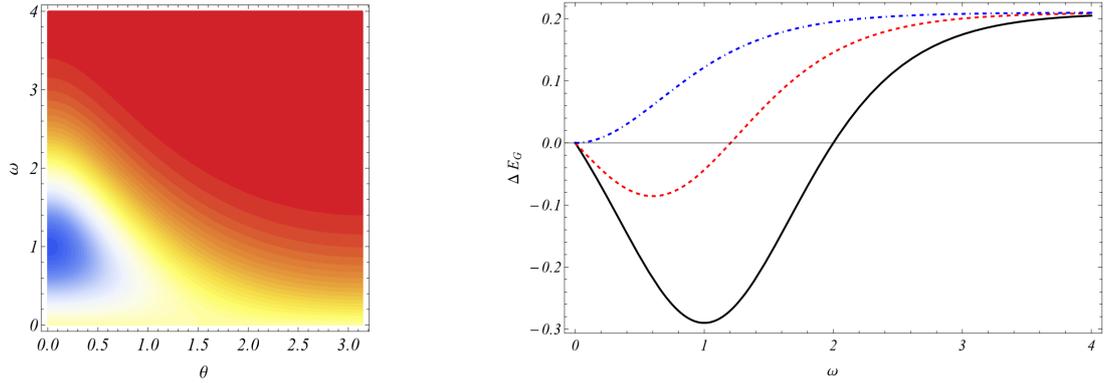


Figura 15 – Variação do emaranhamento global sob *boosts* de Lorentz para o estado (3.212). As curvas no gráfico da esquerda estão em correspondência com as apresentadas na Fig. 13. Diferente das Figuras 14 e 15, o emaranhamento global exibe um comportamento não monótono para $\theta < \pi/2$. Para *boosts* paralelos ao *momentum* em \mathcal{S} , $\theta = 0$ (curva sólida), o emaranhamento global atinge seu mínimo para $\omega = 1$, que corresponde ao referencial no qual os biespinores estão em repouso: neste caso todas as correlações quânticas correspondem apenas ao emaranhamento entre os spins.

na Figura 16, exibem um comportamento não monótono sob *boosts*. Em particular, para *boosts* paralelos ao *momentum* \mathbf{p} com rapidez $\text{arccosh}(E_p/m)$, o emaranhamento global é mínimo, uma vez que este referencial corresponde ao referencial de repouso das partículas no qual há apenas emaranhamento spin-spin. Para *boosts* de alta rapidez o emaranhamento distribuído entre os graus de liberdade do estado aumenta, apesar do emaranhamento entre os spins, como no caso do estados (3.211), ser completamente degradado.

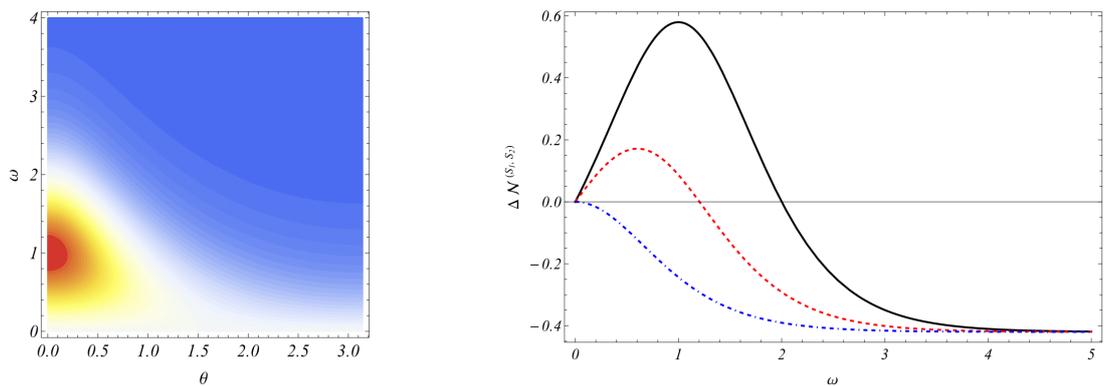


Figura 16 – Variação do emaranhamento entre spins sob *boosts* de Lorentz para o estado (3.212). O comportamento das correlações quânticas codificadas entre os graus de liberdade de spin é complementar ao exibido pelo emaranhamento global mostrado na Fig. 15. Para $\theta < \pi/2$ o comportamento é não-monótono com um ponto de máximo local correspondente ao referencial de repouso dos biespinores e com uma completa degradação para *boosts* de alta velocidade.

Por último é importante mencionar que, apesar da medida (3.185) ter sido considerada, o emaranhamento em estados de 4 qubits pode ser calculado através de outro quantificador global definido de maneira similar a E_G , mas dado em termos das entropias reduzidas de subsistemas compostos de pares de qubits (RIGOLIN; OLIVEIRA; OLIVEIRA, 2006). Esta quantidade é calculada com termos da forma $\text{Tr}[\hat{\sigma}_i^{\alpha_k} \hat{\sigma}_j^{\beta_l} \rho^{\{\alpha_k; \beta_l\}}]$ e contém, além da informação dada por E_G , correlações entre pares de subsistemas. Para o caso dos estados antissimétricos considerados aqui, o comportamento desta quantidade é similar aos mostrados nas Figs. 14 - 15 e não contém nenhuma informação extra sobre a variação do emaranhamento dos biespinores sob *boosts* de Lorentz. Outro ponto de vista para o emaranhamento multipartite é obtido ao se considerar a geometria do espaço de Hilbert composto e estudando as distâncias entre um dado estado e o conjunto dos chamados estados K -separáveis (BLASONE et al., 2008a). Neste caso, a quantificação do emaranhamento multipartite captura mais informações sobre as diferentes componentes que contribuem para o emaranhamento total.

3.6.4 Transformação do emaranhamento em estados quirais

Superposições dos autoestados do operador quiral $\hat{\gamma}_5 = \hat{\sigma}_x^{(P)} \otimes \hat{I}_2^{(S)}$ são definidos em termos dos biespinores livres $u_s(\mathbf{p})$ como

$$u_s^f(\mathbf{p}) = \frac{\hat{I}_4 + (-1)^f \hat{\gamma}_5}{2} u_s(\mathbf{p}), \quad (3.213)$$

com $f = 0, 1$, e podem também ser investigados no presente contexto. Diferente da helicidade, a quiralidade é um invariante de Lorentz, como visto na seção 2.2.4, apesar de, para partículas massivas, a quiralidade não ser uma quantidade conservada (BERNARDINI, 2006c; BERNARDINI, 2006b). Esta propriedade de invariância tem implicações para as leis de transformação do emaranhamento de superposições de estados quirais

$$\psi^{Chiral}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_i^M c_i |u_{s_i}^{f_i}(\mathbf{p})\rangle^A \otimes |u_{r_i}^{g_i}(\mathbf{q})\rangle^B, \quad (3.214)$$

onde f_i é a quiralidade do biespinor $|u_{s_i}^{f_i}(\mathbf{p})\rangle^A$ e g_i é a quiralidade de $|u_{r_i}^{g_i}(\mathbf{q})\rangle^A$. Estados quirais construídos através da projeção de estados de helicidade são escritos de maneira simplificada como

$$|u_s^f(\mathbf{p})\rangle = |f^{(P)}\rangle \otimes |\chi_s^{(S)}(\mathbf{p})\rangle \quad (3.215)$$

com $|f\rangle = (|+^{(P)}\rangle + (-1)^f |-^{(P)}\rangle)/2$ os autoestados do operador $\hat{\sigma}_x$, de modo que a matriz densidade de (3.214) é dada por

$$\rho^{Chiral} = \frac{1}{N} \sum_{i,j}^M c_i c_j^* (|f_i\rangle\langle f_j|)^A \otimes \Xi_{s_i s_j}^{(S)A} \otimes (|g_i\rangle\langle g_j|)^B \otimes \Xi_{r_i r_j}^{(S)B}. \quad (3.216)$$

Como os autoestados quirais são invariantes diante de *boosts*, o operador densidade (3.216) se transforma como

$$\rho'_{Chiral} = \frac{1}{N} \sum_{i,j}^M c_i c_j^* (|f_i\rangle\langle f_j|)^A \otimes \Xi'_{s_i s_j (S)A} \otimes (|g_i\rangle\langle g_j|)^B \otimes \Xi'_{r_i r_j (S)B}, \quad (3.217)$$

onde $\Xi'_{ij (S)A} = \hat{O}_{f_i} \Xi_{s_i s_j (S)A} \hat{O}_{f_j}$, com

$$\hat{O}_{f_i} = \cosh\left(\frac{\omega}{2}\right) \hat{I}_2^{(S)A} - (-1)^{(f_i)} \sinh\left(\frac{\omega}{2}\right) \mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(S)A}, \quad (3.218)$$

e as mudanças no emaranhamento global são exclusivamente devido as mudanças nos termos de spin $\Xi_{s_i s_j (S)A}$. Uma situação particular para $f_i = f$ e $g_i = g$ é tal que $\Xi'_{ij (S)A} = \hat{O}_f \Xi_{s_i s_j (S)A} \hat{O}_f$, e

$$\rho'_{Chiral} = \frac{1}{N} \sum_{i,j}^M c_i c_j^* (|f\rangle\langle f|)^A \otimes \Xi'_{ij (S)A} \otimes (|g\rangle\langle g|)^B \otimes \Xi'_{ij (S)B},$$

que possui correlações quânticas invariantes quando estados antissimétricos como os das Eqs. (3.211)-(3.212) são considerados. Na realidade, os estados quirais

$$|\psi_{2(3)}^{Chiral}\rangle = \left(\frac{\hat{I}_4 + (-1)^f \hat{\gamma}_5}{2}\right)^A \otimes \left(\frac{\hat{I}_4 + (-1)^g \hat{\gamma}_5}{2}\right)^B |\psi_{2(3)}\rangle, \quad (3.219)$$

com $f, g = 0, 1$, são tais que, para um *boosts* na direção $\mathbf{n} = (\sin(\theta), 0, \cos(\theta))$,

$$\rho_{2(3)}^{Chiral} \rightarrow \rho'_{2(3)}^{Chiral} = \rho_{2(3)}^{Chiral},$$

e os estados são completamente invariantes.

4 Emaranhamento spin-paridade na simulação da equação de Dirac com íons aprisionados

A mecânica quântica relativística da equação de Dirac têm como consequência diversos fenômenos únicos. Os dois exemplos mais conhecidos são o paradoxo de Klein e o efeito *zitterbewegung* (GREINER, 2000; ITZYKSON; ZUBER, 1980). Como descrito parcialmente na seção anterior, o paradoxo de Klein ocorre, em sua versão mais simples, no estudo de espalhamento por barreiras de potencial. Devido à relação de dispersão energia-momentum da partícula livre e da descrição da barreira como um potencial escalar, sob condições específicas há maior corrente de partículas espalhadas do que incidentes, contradizendo o esperado no problema não-relativístico. Já o efeito *zitterbewegung* está associado à descrição de estados de biespinores com pacotes de onda: mesmo livre da influência de potenciais externos, o valor médio da posição de um pacote de ondas solução da equação de Dirac, oscila com o tempo. Em ambos os casos os efeitos estão associados com as soluções de energia negativa da equação de Dirac.

Diferente de outras predições da equação de Dirac, como por exemplo as correções hiperfinas dos níveis de energia do átomo de hidrogênio, tanto o paradoxo de Klein quanto o efeito *zitterbewegung* são fenômenos de altas energias associados a parâmetros dificilmente mensuráveis em laboratório. Por exemplo, a frequência de oscilação associada ao efeito *zitterbewegung* é da ordem de 10^{21} Hz (LAMATA et al., 2007), fora do alcance de qualquer aparato experimental. Um modo de contornar esta limitação natural é através da *simulação quântica* (GEORGESCU; ASHHAB; NORI, 2014): utilizar um sistema quântico controlável (simulador quântico) e mensurável para emular o comportamento de um sistema quântico sob o qual medidas são muito difíceis de serem realizadas, conforme esquematizado na Fig. 17.

Dentre os diversos efeitos e sistemas que foram implementados através de protocolos de simulação quântica podemos citar a simulação do efeito Unruh com íons aprisionados (ALSING; DOWLING; MILBURN, 2005), da radiação de Hawking com circuitos supercondutores (NATION et al., 2009) e da expansão do universo com condensados de Bose-Einstein (FISCHER; SCHÜTZHOLD, 2004). Mesmo sistemas de matéria condensada possuem análogos utilizados para simular fenômenos como transições de fase quânticas (GIORGI; PAGANELLI; GALVE, 2010) e supercondutividade a altas temperaturas (YAMAGUCHI; YAMAMOTO, 2002). Um sistema controlável muito utilizado como simulador, não apenas da equação de Dirac mas de outros sistemas citados acima,

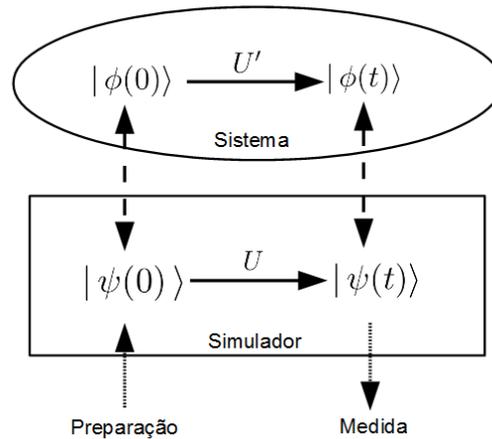


Figura 17 – Representação esquemática do conceito de simulação quântica. O simulador quântico é pensado de modo a haver um mapa entre o simulador e o sistema. Deve haver uma correspondência entre os estados inicial do sistema $|\phi(0)\rangle$ e do simulador $|\psi(0)\rangle$, entre os estados finais $|\phi(t)\rangle$ e $|\psi(t)\rangle$, e entre os operadores de evolução temporal U' do sistema e U do simulador. Apesar de o sistema quântico a ser simulado não é completamente controlável, mensurável ou acessível experimentalmente, o sistema utilizado como simulador é controlável no sentido de ser possível preparar o estado inicial, de se controlar a evolução temporal e de medir o estado final. Desta maneira, através da do simulador se obtém informações sobre o simulado. Figura adaptada de (GEORGESCU; ASHHAB; NORI, 2014)

são os íons aprisionados (GEORGESCU; ASHHAB; NORI, 2014).

Os íons aprisionados já foram propostos e utilizados experimentalmente para a simulação de diversas facetas da dinâmica de Dirac (LAMATA et al., 2011). Desde a simulação do paradoxo de Klein e do efeito *zitterbewegung* (LAMATA et al., 2007; CASANOVA et al., 2010; GERRITSMA et al., 2011), que foram implementados experimentalmente, até a proposta de protocolos para simular o oscilador de Dirac (BERMUDEZ; MARTIN-DELGADO; LUIS, 2008) e efeitos de potenciais externos. É possível, por exemplo, utilizar um íon de quatro níveis internos para simular os efeitos de um campo magnético (ou elétrico) externo constante em uma partícula neutra (TENEV; IVANOV; VITANOV, 2013). Neste último caso, o Hamiltoniano simulado é tal que as soluções irão apresentar emaranhamento entre spin e paridade intrínseca (BITTENCOURT; BERNARDINI; BLASONE, 2016).

Este capítulo é dedicado à descrição do emaranhamento intrínseco dos biespinores de Dirac no contexto da simulação quântica com íons aprisionados. O Hamiltoniano do simulador quântico, neste caso, é composto de três termos: o Hamiltoniano de banda lateral vermelha, formalmente equivalente ao Hamiltoniano de Jaynes-Cummings, o Hamiltoniano de banda lateral azul, chamado de anti Jaynes-Cummings, e o Hamiltoniano de *carrier*. Através de uma escolha conveniente de parâmetros é possível estabelecer uma relação

entre o Hamiltoniano que descreve a dinâmica do íon aprisionado com o Hamiltoniano de Dirac. Em particular, considerando um íon de quatro níveis é possível simular os efeitos de acoplamento não-minimal com campo externo constante (TENEV; IVANOV; VITANOV, 2013). Neste caso, examinando a relação entre simulador e sistema é possível identificar a correspondência entre a correlação intrínseca dos biespinores e o emaranhamento no sistema de íons aprisionados e, utilizando o ferramental introduzido no capítulo 3, é possível estudar não apenas essas correlações mas também a evolução temporal de qualquer estado inicial. Desta maneira, será descrita a relação entre as correlações nos dois sistemas tornando possíveis, dado o grau de controlabilidade do simulador, as medidas do emaranhamento entre spin e paridade intrínseca através de íons aprisionados. Por último, o formalismo utilizado pode ser estendido de modo a incluir efeitos de ruídos externos, o que será feito na última seção deste capítulo de maneira simplificada.

4.1 O Hamiltoniano de Jaynes-Cummings

Um sistema quântico utilizado na simulação da equação de Dirac é um íon aprisionado em uma armadilha harmônica de radio-frequência (GEORGESCU; ASHHAB; NORI, 2014). Independente da geometria da armadilha, em geral cilíndrica ou linear (LEIBFRIED et al., 2003), o funcionamento do dispositivo consiste em confinar um íon, ou um conjunto de íons, a uma região restrita através da utilização de um potencial harmônico. O estado interno e de movimento da partícula é, então, manipulado através da aplicação de um laser. Uma aproximação para este cenário, amplamente considerada tanto do ponto de vista teórico quanto do ponto de vista experimental, consiste em considerar apenas dois níveis de energia para os estados internos do íon, conforme esquematizado na Fig. 18.

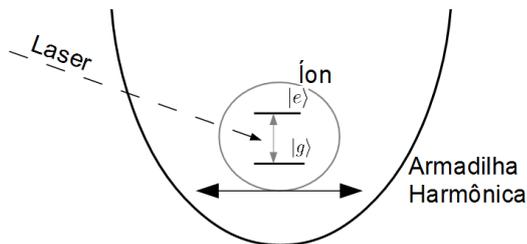


Figura 18 – Representação esquemática de um íon de dois níveis internos aprisionado em uma armadilha harmônica. O potencial harmônico confina o íon a um espaço restrito na armadilha, sendo seu estado de movimento descrito como um oscilador harmônico simples. A interação entre o íon aprisionado e um laser é então utilizada para manipular tanto o estado interno quanto o estado de movimento.

O Hamiltoniano completo do íon aprisionado de dois níveis é dado por (LEIBFRIED et al., 2003)

$$\hat{H}_{Ion} = \hat{H}_{Movimento} + \hat{H}_{Interno} + \hat{H}_{Ion-Laser} \quad (4.1)$$

onde

$$\hat{H}_{Movimento} = \frac{\hat{p}}{2\tilde{m}} + \frac{\tilde{m}}{2} W(t) \hat{x}$$

descreve a dinâmica do estado de movimento do íon de massa \tilde{m} aprisionado pelo potencial harmônico $W(t)$ da armadilha e

$$\hat{H}_{Interno} = \frac{\hbar\omega_{ge}}{2} (|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|),$$

o Hamiltoniano associado aos níveis internos com $\hbar\omega_{ge}$ a diferença de energia entre os níveis g e e do íon. O último termo de (4.1) descreve a interação entre o laser e o íon:

$$\hat{H}_{Ion-Laser} = \frac{\hbar}{2} \Omega (|g\rangle\langle e| + |e\rangle\langle g|) \times (e^{i(k\hat{x}-\omega t+\phi)} + e^{-i(k\hat{x}-\omega t+\phi)}),$$

onde k e ω são, respectivamente, o número de onda e a frequência efetivos do laser, ϕ é a fase do laser, Ω descreve os elementos de matriz do acoplamento entre o campo eletromagnético e os níveis internos do íon¹ e \hat{x} é o operador de posição do íon aprisionado. Na expressão acima supõe-se que o íon se move apenas em uma direção, sendo direta a generalização para o caso tridimensional. No Hamiltoniano $\hat{H}_{Ion-Laser}$ o campo eletromagnético do laser não é quantizado, sendo descrito através de uma onda plana e considerando os termos de menor ordem da aproximação multipolar que geram transições entre os estados eletrônicos.

A dinâmica de interação com o laser é melhor descrita na representação de interação, na qual o Hamiltoniano do sistema será dado por

$$\hat{\hat{H}}_{Ion} = \hat{U}_0^\dagger \hat{H}_{Ion-Laser} \hat{U}_0, \quad (4.2)$$

com $\hat{U}_0 = \exp\left[-(it/\hbar)(\hat{H}_{Movimento} + \hat{H}_{Interno})\right]$, para o qual

$$\begin{aligned} \hat{\hat{H}}_{Ion} = & \frac{\hbar}{2} \Omega (\hat{\sigma}_+^{ge} e^{i\omega_{ge}t} + \hat{\sigma}_-^{ge} e^{-i\omega_{ge}t}) \times \\ & \times e^{(it/\hbar)\hat{H}_{Movimento}} \left[e^{i(k\hat{x}-\omega t+\phi)} + e^{-i(k\hat{x}-\omega t+\phi)} \right] e^{-(it/\hbar)\hat{H}_{Movimento}}, \quad (4.3) \end{aligned}$$

com $\hat{\sigma}_+^{ge} = (\hat{\sigma}_-^{ge})^\dagger = |e\rangle\langle g|$ o operador de elevação para o sistema de dois níveis descrito no espaço $\{|g\rangle, |e\rangle\}$. As exponenciais dependentes do tempo se combinarão em termos da forma $\exp[\pm i(\omega_{ge} \pm \omega)t]$, e os termos proporcionais a $\omega_{ge} + \omega$ irão oscilar rápido em comparação com a frequência livre ω_{ge} sendo descartados na chama aproximação de onda rotativa (*rotating wave approximation* - RWA). Deste modo os termos exponenciais a serem considerados são da forma $\exp[\pm i\tilde{\omega}t]$, com $\tilde{\omega} = \omega_{ge} - \omega$ o *detuning* entre as frequências.

A transformação para a representação de interação da parte associada ao movimento, o último termo de (4.3), equivale a substituir o operador posição \hat{x} pelo seu equivalente na

¹ Por exemplo, para um acoplamento dipolar com um elétron da camada exterior do íon

$$\frac{\hbar}{2} \Omega = e_- \langle g | \mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{x} | e \rangle,$$

com e_- a carga do elétron e \mathbf{E}_0 o campo elétrico.

representação de Heisenberg $\hat{x}(t)$. Em termos dos operadores de criação e aniquilação, \hat{a}^\dagger e \hat{a} , do oscilador harmônico que descreve o movimento do íon, $\hat{x}(t)$ é dado por (LEIBFRIED et al., 2003)

$$\hat{x}(t) = \frac{\eta}{k} [\hat{a}u^*(t) + \hat{a}^\dagger u(t)],$$

onde $u(t)$ é uma função associada à solução da equação de Schrödinger com potencial harmônico dependente do tempo $W(t)$, e η é o parâmetro de Lamb-Dicke dado por

$$\eta = k\sqrt{\frac{\hbar}{2\tilde{m}\nu}} = k\Delta, \quad (4.4)$$

com ν a frequência de oscilação do íon na armadilha e Δ a extensão da função de onda para o estado fundamental do oscilador harmônico. Em uma primeira aproximação, válida na maior parte das situações experimentais, $u(t) \simeq e^{i\nu t}$ e o Hamiltoniano na representação de interação (4.3) será dado por (LEIBFRIED et al., 2003)

$$\hat{H}_{Ion} = \frac{\hbar}{2}\Omega_0\hat{\sigma}_+^{ge}\exp\{i\eta(\hat{a}e^{-i\nu t} + \hat{a}^\dagger e^{i\nu t})\}e^{i(\phi-\tilde{\omega}t)} + \text{H. c.}, \quad (4.5)$$

onde Ω_0 é uma frequência corrigida levando em conta as aproximações utilizadas para se obter (4.5). Se a extensão da função de onda associada ao estado de movimento do íon for muito menor que o comprimento de onda do laser - o chamado regime de Lamb-Dicke - então $\eta\sqrt{\langle\hat{a} + \hat{a}^\dagger\rangle} \ll 1$ e (4.5) é simplificado para

$$\hat{H}_{LD} = \frac{\hbar}{2}\Omega_0\hat{\sigma}_+^{ge}\left[1 + i\eta(\hat{a}e^{-i\nu t} + \hat{a}^\dagger e^{i\nu t})\right]e^{i(\phi-\tilde{\omega}t)} + \text{H. c.}. \quad (4.6)$$

Dependendo dos valores de $\tilde{\omega}$, o Hamiltoniano \hat{H}_{LD} acopla diferentes estados internos e de movimento do íon. São apenas três as ressonâncias do Hamiltoniano simplificado (4.6) (LEIBFRIED et al., 2003):

- $\tilde{\omega} = 0$ para a qual

$$\hat{H}_{LD} \rightarrow \hat{H}^C = \frac{\hbar}{2}\Omega_0(\hat{\sigma}_+^{ge}e^{i\phi} + \hat{\sigma}_-^{ge}e^{-i\phi}) \quad (4.7)$$

que é chamada de ressonância de *carrier*. Este termo gera a transição $|g\rangle \leftrightarrow |e\rangle$ com frequência Ω_0 sem modificar o estado de movimento do íon;

- $\tilde{\omega} = -\nu$ para a qual

$$\hat{H}^{JC} = \frac{\hbar}{2}\Omega_0\eta(\hat{a}\hat{\sigma}_+^{ge}e^{i\phi} + \hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_-^{ge}e^{-i\phi}), \quad (4.8)$$

que é a ressonância de banda lateral vermelha (*red sideband*), formalmente igual ao Hamiltoniano de Jaynes-Cummings importante em óptica quântica na descrição da luz com átomos (SHORE; KNIGHT, 1993). Este Hamiltoniano gera transições do tipo $|n\rangle|g\rangle \leftrightarrow |n-1\rangle|e\rangle$, com $|n\rangle$ o autoestado do oscilador harmônico que descreve o movimento do íon ($a^\dagger|n\rangle = |n+1\rangle$);

- $\tilde{\omega} = \nu$ para a qual

$$\hat{H}_{LD} \rightarrow \hat{H}^{AJC} = \frac{\hbar}{2} \Omega_0 \eta \left(\hat{a}^\dagger \hat{\sigma}_+^{ge} e^{i\phi} + \hat{a} \hat{\sigma}_-^{ge} e^{-i\phi} \right), \quad (4.9)$$

a ressonância de banda lateral azul (*blue sideband*), uma contraparte da ressonância anterior, comumente chamada de Hamiltoniano anti Jaynes-Cummings. Este termo promove transições do tipo $|n\rangle|g\rangle \leftrightarrow |n+1\rangle|e\rangle$;

As três principais ressonâncias de (4.6) estão esquematizadas na Fig. 19. Em particular, como comentado acima, a ressonância de banda vermelha é formalmente igual ao Hamiltoniano de Jaynes-Cummings, comum ao campo da óptica quântica. Esta similaridade foi o tema de diversas analogias entre os dois sistemas tendo como consequência diversos resultados interessantes na física de íons aprisionados (LEIBFRIED et al., 2003). A ressonância de banda azul não possui um similar no campo da óptica quântica, tal processo violaria a conservação de energia para o sistema átomo-fóton e é chamada de anti Jaynes-Cummings devido a sua forma ser, de certa maneira, um contraponto à ressonância de banda vermelha. De agora em diante, a ressonância de *carrier* será chamada por *C*, a ressonância de banda lateral vermelha será chamada de Hamiltoniano de Jaynes-Cummings (JC) e a ressonância de banda lateral azul de Hamiltoniano de anti Jaynes-Cummings (AJC).

Na maioria dos experimentos de íons aprisionados, as aproximações utilizadas para obtenção do Hamiltoniano (4.6) são válidas (LEIBFRIED et al., 2003), e os Hamiltonianos C, JC e AJC são os principais termos a serem considerados, sendo o *toolbox* dos íons aprisionados. De fato, a combinação dos termos acima foi utilizada, por exemplo, para a implementação de portas quânticas (CIRAC; ZOLLER, 1995; SCHMIDT-KALER et al., 2003b) e em diversos protocolos de simulação quântica (GEORGESCU; ASHHAB; NORI, 2014), em particular, para a simulação da equação de Dirac, conforme será mostrado a seguir.

4.2 Simulação quântica da equação de Dirac com um íon aprisionado

Combinando os termos C, JC e AJC que descrevem a dinâmica de um íon aprisionado com lasers é possível simular a equação de Dirac. A ideia básica do protocolo de simulação é codificar cada uma das componentes do biespinor em um estado interno do íon e utilizar os termos descritos na seção anterior para simular a dinâmica relativística. Como os biespinores possuem 4 componentes, para que o protocolo de simulação seja implementado, deve ser considerado um íon de 4 estados internos $\{|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle, |d\rangle\}$ acoplados em pares, e ao estado de movimento do íon, através de \hat{H}^C , \hat{H}^{JC} e \hat{H}^{AJC} . Experimentalmente,

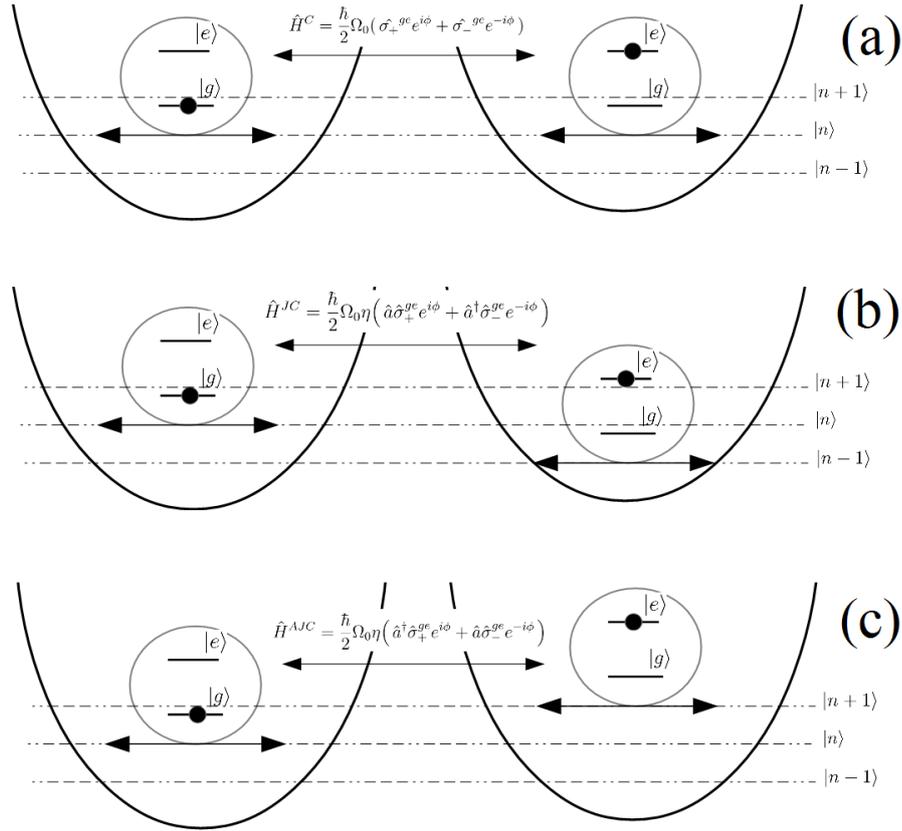


Figura 19 – Representação das transições geradas pelo Hamiltoniano (4.6) que descreve um íon de dois níveis internos aprisionado interagente com um laser. (a) transição tipo *carrier* $|n\rangle|g\rangle \leftrightarrow |n\rangle|e\rangle$; (b) transição de banda lateral vermelha $|n\rangle|g\rangle \leftrightarrow |n-1\rangle|e\rangle$; (c) transição de banda lateral azul $|n\rangle|g\rangle \leftrightarrow |n+1\rangle|e\rangle$.

os níveis hiperfinos de íons alcalino terrosos, como o $^{25}\text{Mg}^+$ em conjunto com um campo magnético externo adicional possuem a estrutura necessária para a implementação do protocolo de simulação da equação de Dirac (LAMATA et al., 2007).

Os Hamiltonianos JC e AJC (4.8,4.9) que descrevem um íon oscilante na direção $j = x, y, z$ e com dois níveis internos k e l são dados por

$$\begin{aligned}\hat{H}_j^{JC}(\phi_R) &= \frac{\hbar}{2}\tilde{\Omega}_j\eta_j(\hat{a}_j^\dagger\hat{\sigma}_+^{kl}e^{i\phi_R} + \hat{a}_j\hat{\sigma}_-^{kl}e^{-i\phi_R}) + \hbar\delta_j\hat{\sigma}_z^{kl} \\ \hat{H}_j^{AJC}(\phi_B) &= \frac{\hbar}{2}\tilde{\Omega}_j\eta_j(\hat{a}_j^\dagger\hat{\sigma}_+^{kl}e^{i\phi_B} + \hat{a}_j\hat{\sigma}_-^{kl}e^{-i\phi_B}) + \hbar\delta_j\hat{\sigma}_z^{kl},\end{aligned}\quad (4.10)$$

com $\tilde{\Omega}_j$ a frequência de Rabi associada à direção j e $\eta_j = k\sqrt{\frac{\hbar}{2m\nu_j}} = k\Delta_j$, sendo ν_j a frequência da armadilha na direção j e Δ_j a extensão do pacote de onda no estado fundamental de movimento do íon. Além dos termos usuais (A)JC, os Hamiltonianos acima também incluem um deslocamento de níveis $\hbar\delta_j\hat{\sigma}_z^{kl}$, que depende do parâmetro de detuning δ_j . Para a simulação da equação de Dirac livre este parâmetro é feito nulo $\delta_j = 0$ e através da combinação dos Hamiltonianos (4.10) com escolha conveniente das fases ϕ_R e ϕ_B é possível reproduzir cada termo do Hamiltoniano livre de Dirac (2.9). Por exemplo,

para a direção x

$$\hat{H}_j^{JC}(\pi/2) + \hat{H}_j^{AJC}(\pi/2) = i\hbar\eta_x\tilde{\Omega}_x\hat{\sigma}_x^{kl}(\hat{a}_x^\dagger - \hat{a}_x), \quad (4.11)$$

de modo que, definindo

$$\frac{i(\hat{a}_x^\dagger - \hat{a}_x)}{2} = \frac{\Delta_x p_x}{\hbar} \quad (4.12)$$

a expressão (4.11) será dada por

$$\hat{H}_j^{JC}(\pi/2) + \hat{H}_j^{AJC}(\pi/2) = 2\eta_x\Delta_x\tilde{\Omega}_x\hat{\sigma}_x^{kl}\hat{p}_x = \hat{H}_{p_x}. \quad (4.13)$$

Este Hamiltoniano gera um deslocamento dependente do estado interno do sistema que pode ser utilizada para a produção de estados de gato (SOLANO; AGARWAL; WALTHER, 2003). Combinando os termos JC e AJC com fases convenientes é possível implementar os Hamiltonianos

$$\begin{aligned} \hat{H}_{p_y} &= 2\eta_y\Delta_y\tilde{\Omega}_y\hat{\sigma}_y^{kl}\hat{p}_y \\ \hat{H}_{p_z} &= 2\eta_z\Delta_z\tilde{\Omega}_z\hat{\sigma}_z^{kl}\hat{p}_z. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Os Hamiltonianos (4.13,4.14) são lineares com relação aos "momenta" \hat{p}_j , sugerindo que através da escolha conveniente dos níveis internos envolvidos é possível reproduzir o termo de *momentum* da equação de Dirac $\hat{H}_p = c\hat{\alpha} \cdot \hat{p}$.

Para um íon de quatro níveis, considera-se que as transições são sempre entre pares de íons, geradas pelos Hamiltoniano (A)JC e C. Para descrever esta dinâmica, definimos maneira análoga aos operadores $\hat{\sigma}_\pm^{ge}$ da seção anterior, os operadores de Pauli no espaço de dois níveis arbitrários $\{|k\rangle, |l\rangle\}$,

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_x^{kl} &= |k\rangle\langle l| + |l\rangle\langle k|, \\ \hat{\sigma}_y^{kl} &= -i|k\rangle\langle l| + i|l\rangle\langle k|, \\ \hat{\sigma}_z^{kl} &= |k\rangle\langle k| - |l\rangle\langle l|, \end{aligned} \quad (4.15)$$

tais que, no espaço dos estados internos do íon de quatro níveis $\{|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle, |d\rangle\}$, por exemplo

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_x^{ad} &= |a\rangle\langle d| + |d\rangle\langle a| = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \\ \hat{\sigma}_x^{ab} &= |a\rangle\langle b| + |b\rangle\langle a| = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_x & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Para pulsos de laser tais que $\eta_x = \eta_y = \eta_z = \eta$, $\Delta_x = \Delta_y = \Delta_z = \Delta$ e $\tilde{\Omega}_x = \tilde{\Omega}_y = \tilde{\Omega}_z = \tilde{\Omega}$ temos que a combinação dos Hamiltonianos (4.13,4.14) entre os quatro níveis dada por

$$\hat{H}_p = 2\eta\Delta\tilde{\Omega}(\hat{\sigma}_x^{ad} + \hat{\sigma}_x^{bc})p_x + 2\eta\Delta\tilde{\Omega}(\hat{\sigma}_y^{ad} - \hat{\sigma}_y^{bc})p_y + 2\eta\Delta\tilde{\Omega}(\hat{\sigma}_x^{ac} - \hat{\sigma}_x^{bd})p_z \quad (4.17)$$

é escrita em forma matricial na base $\{|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle, |d\rangle\}$ como

$$\hat{H}_p = \begin{bmatrix} 0 & 2\eta\Delta\tilde{\Omega}\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p} \\ 2\eta\Delta\tilde{\Omega}\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p} & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.18)$$

que é formalmente igual ao termo de *momentum* do Hamiltoniano de Dirac para as matrizes $\hat{\alpha}_i$ e $\hat{\beta}$ representadas na sua forma super-simétrica

$$\hat{\alpha}_i = \begin{bmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ \hat{\sigma}_i & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{\beta} = \begin{bmatrix} 0 & -i\hat{I}_2 \\ i\hat{I}_2 & 0 \end{bmatrix}. \quad (4.19)$$

Similar ao termo de *momentum*, os Hamiltonianos de *carrier* (4.7) são combinados para implementar o termo de massa:

$$\hat{H}_m = \hbar\Omega(\hat{\sigma}_y^{ac} + \hat{\sigma}_y^{bd}) = \begin{bmatrix} 0 & -i\hbar\Omega \\ i\hbar\Omega & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.20)$$

de tal modo que o Hamiltoniano

$$\hat{H}_D = \hat{H}_p + \hat{H}_m = \begin{bmatrix} 0 & 2\eta\Delta\tilde{\Omega}\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p} - i\hbar\Omega \\ 2\eta\Delta\tilde{\Omega}\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p} + i\hbar\Omega & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.21)$$

é formalmente igual ao Hamiltoniano de Dirac para as matrizes representadas na forma (4.19).

Traçando a seguinte relação entre parâmetros de Dirac e parâmetros iônicos

$$c \leftrightarrow 2\eta\Delta\tilde{\Omega}, \quad mc^2 \leftrightarrow \hbar\Omega, \quad (4.22)$$

o Hamiltoniano (4.21) é escrito como

$$\hat{H}_D = c\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \mathbf{p} + mc^2\hat{\beta}, \quad (4.23)$$

e a equação de Schrödinger para o íon aprisionado incluindo todos os termos acima citados $i\hbar\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}_D|\psi\rangle$ com

$$|\psi\rangle = M_a|a\rangle + M_b|b\rangle + M_c|c\rangle + M_d|d\rangle, \quad (4.24)$$

simula exatamente a dinâmica da equação de Dirac. O protocolo apresentado aqui foi o primeiro protocolo de simulação da equação de Dirac proposto (LAMATA et al., 2007) e pode ser simplificado para descrição de partículas se propagando em apenas uma dimensão. Inicialmente este protocolo foi proposto visando a reprodução do paradoxo de Klein

(CASANOVA et al., 2010), sendo implementado experimentalmente (GERRITSMA et al., 2011). Devido à possibilidade de manipular os valores dos parâmetros c e m da equação de Dirac através da escolha dos parâmetros iônicos (4.22), é possível tornar a frequência de *zitterbewegung* mensurável (LAMATA et al., 2007; GERRITSMA et al., 2011). No caso do paradoxo de Klein a barreira de potencial é simulada com um íon adicional, e medidas considerando pacotes de onda foram implementadas experimentalmente. O protocolo foi também estendido de modo a descrever alguns potenciais dependentes da posição para o estudo, por exemplo, do oscilador de Dirac e de transições de fase quirais (BERMUDEZ; MARTIN-DELGADO; LUIS, 2008).

Apesar de considerar a representação supersimétrica das matrizes de Dirac, é possível adaptar o protocolo acima apresentado para descrição em outras representações e, em particular, incluindo efeitos de potenciais externos constantes (TENEV; IVANOV; VITANOV, 2013). No caso do Hamiltoniano Livre de Dirac, a simulação na representação usual requer a utilização do termo de deslocamento de níveis $\sim \hat{\sigma}_z$ dos termos (4.10), conforme será apresentado na próxima seção.

4.3 Simulação quântica do Hamiltoniano de Dirac com acoplamento não-minimal e o emaranhamento spin-paridade

Uma outra situação física que pode ser simulada com um protocolo similar ao da seção anterior é a equação de Dirac incluindo um acoplamento não-minimal com um campo eletrostático constante (TENEV; IVANOV; VITANOV, 2013), dada em termos do Hamiltoniano:

$$\hat{\mathcal{H}} = c \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \mathbf{p} + \hat{\beta} mc^2 + \kappa \hat{\beta} \hat{\boldsymbol{\Sigma}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}} + i\mu \hat{\beta} \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \frac{\boldsymbol{\mathcal{E}}}{c}, \quad (4.25)$$

onde $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ é o campo elétrico e κ e μ são, respectivamente, os momentos de dipolo elétrico e magnético. O Hamiltoniano (4.25) descreve a interação entre uma partícula fermiônica neutra e um campo elétrico através de um acoplamento não-minimal. A simulação deste Hamiltoniano pode ser utilizada, por exemplo, para a medida de frequências de precessão de spins de partículas neutras (TENEV; IVANOV; VITANOV, 2013), fenômeno fora do alcance experimental das medidas na física de altas energias mas que pode ser observado no simulador. Mais do que isso, a estrutura $SU(2) \otimes SU(2)$ das matrizes de Dirac geram emaranhamento entre o spin e paridade interna dos autoestados de (4.25), de modo que o protocolo de simulação deste Hamiltoniano é também conveniente para uma possível observação desta correlação intrínseca e uma possível relação com o conceito de quiralidade.

Assim como no caso do Hamiltoniano livre, o ponto de partida do protocolo de simulação são os Hamiltonianos (4.10, 4.7), entretanto, devido aos termos que aparecem em (4.25) será necessário também utilizar o termo de deslocamento $\hbar\delta\hat{\sigma}_z$. Considerando as matrizes de Dirac na representação usual (2.18), o termo de massa da equação de Dirac

$mc^2\hat{\beta}$ é simulado por termos de deslocamento de níveis

$$mc^2\hat{\beta} \rightarrow 2\hbar\delta(\hat{\sigma}_z^{ad} + \hat{\sigma}_z^{bc}) = \begin{bmatrix} 2\hbar\delta\hat{I}_2 & 0 \\ 0 & -2\hbar\delta\hat{I}_2 \end{bmatrix}. \quad (4.26)$$

Como as matrizes $\hat{\alpha}$ possuem mesma forma na representação usual e na supersimétrica, o termo de *momentum* da equação de Dirac será simulado da mesma forma, através da combinação dos Hamiltoniano \hat{H}^{JC} e \hat{H}^{AJC} de modo a produzir o termo (4.17):

$$\begin{aligned} c\hat{\alpha} \cdot \mathbf{p} &\rightarrow 2\eta\Delta\tilde{\Omega}(\hat{\sigma}_x^{ad} + \hat{\sigma}_x^{bc})p_x + 2\eta\Delta\tilde{\Omega}(\hat{\sigma}_y^{ad} - \hat{\sigma}_y^{bc})p_y + 2\eta\Delta\tilde{\Omega}(\hat{\sigma}_x^{ac} - \hat{\sigma}_x^{bd})p_z \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 2\eta\Delta\tilde{\Omega}\hat{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ 2\eta\Delta\tilde{\Omega}\hat{\sigma} \cdot \mathbf{p} & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Os termos de interação tensorial e pseudo-tensorial $\kappa\hat{\beta}\hat{\Sigma} \cdot \mathcal{E} + i\mu\hat{\beta}\hat{\alpha} \cdot \frac{\mathcal{E}}{c}$ são implementados através de termos de *carrier* (4.7) com frequências $\Omega_j^{(1)}$ e $\Omega_j^{(2)}$. Ajustando-se as fases ϕ e considerando um campo elétrico \mathcal{E} no plano $x - y$, estes termos são implementados por:

$$\begin{aligned} \hat{\beta}\hat{\Sigma} \cdot (\kappa\mathcal{E}) &\rightarrow 2\hbar\Omega_x^{(1)}(\hat{\sigma}_x^{ab} - \hat{\sigma}_x^{cd}) + 2\hbar\Omega_y^{(1)}(\hat{\sigma}_y^{ab} - \hat{\sigma}_y^{cd}) \\ &= \begin{bmatrix} 2\hbar\Omega_x^{(1)}\hat{\sigma}_x + 2\hbar\Omega_y^{(1)}\hat{\sigma}_y & 0 \\ 0 & -2\hbar\Omega_x^{(1)}\hat{\sigma}_y - 2\hbar\Omega_x^{(1)}\hat{\sigma}_y \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (4.28)$$

$$\begin{aligned} i\hat{\beta}\hat{\alpha} \cdot \left(\mu\frac{\mathcal{E}}{c}\right) &\rightarrow 2\hbar\Omega_x^{(2)}(-\hat{\sigma}_y^{ad} - \hat{\sigma}_y^{bc}) + 2\hbar\Omega_y^{(2)}(\hat{\sigma}_x^{bc} - \hat{\sigma}_x^{ad}) \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 2i\hbar\Omega_x^{(2)}\hat{\sigma}_x + 2i\hbar\Omega_y^{(2)}\hat{\sigma}_y \\ -2i\hbar\Omega_x^{(2)}\hat{\sigma}_x - 2i\hbar\Omega_y^{(2)}\hat{\sigma}_y & 0 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (4.29)$$

Comparando cada um dos termos do Hamiltoniano de Dirac considerado (4.25) com os termos (4.26, 4.27, 4.28, 4.29), estabelece-se a seguinte relação entre os parâmetros de Dirac e os parâmetros iônicos

$$\begin{aligned} \frac{\mu\mathcal{E}_j}{c} &= 2\hbar\Omega_j^{(2)}, & \kappa\mathcal{E}_j &= 2\hbar\Omega_j^{(1)} \\ c &= 2\eta\Delta\tilde{\Omega}, & mc^2 &= 2\hbar\delta. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Com o protocolo de simulação e a correspondência entre parâmetros e correlações estabelecidos focamos a atenção, agora, nas propriedades de emaranhamento dos estados simulados e sua relação com variáveis no sistema iônico. Os estados espinoriais $|\psi_{n,s}\rangle$, com $n, s = 0, 1$, que são autoestados do Hamiltoniano simulado (4.25), são codificados por uma superposição entre os estados iônicos internos

$$|\psi_{n,s}\rangle \rightarrow M_{n,s}^a|a\rangle + M_{n,s}^b|b\rangle + M_{n,s}^c|c\rangle + M_{n,s}^d|d\rangle. \quad (4.31)$$

Deste modo, com os Hamiltonianos JC, AJC (4.9) e C (4.7) a dinâmica do Hamiltoniano relativístico (4.25) é reproduzida no sistema de íons aprisionados, em particular a interpretação dos biespinores de Dirac como descrevendo sistemas compostos pode também ser traduzida para o sistema de íons aprisionados. Os níveis internos utilizados na simulação são nos casos práticos, níveis hiperfinos de íons alcalinos (ROWE et al., 2002), como Mg^+ , Ca^+ e Sr^+ , com degenerescência quebrada pela aplicação de um campo magnético adicional ao da armadilha. A figura Fig. 20 ilustra a estrutura típica de tais níveis para o estado fundamental $2s^2 S_{1/2}$ de um íon alcalino típico. Dois graus de liberdade internos podem ser identificados neste conjunto de níveis: o *momentum* angular total \mathbf{F} e sua projeção na direção do campo magnético auxiliar \mathbf{M} . O estado iônico que simula o biespinor é, então, interpretado como um estado de dois qubits e no restante deste capítulo, será adotada a correspondência entre níveis internos e qubits dada por

$$\begin{aligned} |a\rangle &\equiv |00\rangle, & |b\rangle &\equiv |01\rangle, \\ |c\rangle &\equiv |10\rangle, & |d\rangle &\equiv |11\rangle. \end{aligned} \quad (4.32)$$

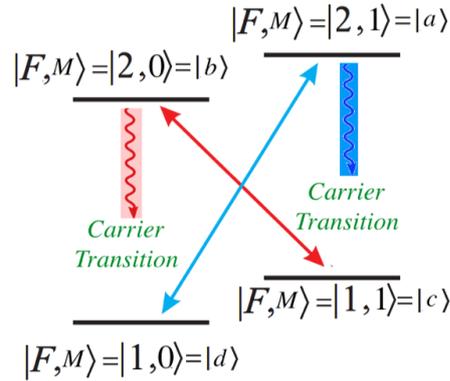


Figura 20 – Esquema dos níveis hiperfinos, típicos dos íons alcalinos utilizados na simulação da equação de Dirac e as correspondentes transições geradas pelos Hamiltonianos JC, AJC e *carrier*. Os níveis de energia são designados por $|F, M\rangle$, com F o número quântico associado ao *momentum* angular total e M sua projeção na direção de um campo magnético auxiliar utilizado para quebrar a degenerescência dos níveis internos. Esta configuração sugere o uso da correspondência entre níveis internos e qubits introduzida em (4.32) para a simulação do Hamiltoniano (4.25).

Os autoestados $|\psi_{n,s}\rangle$ (4.31) do Hamiltoniano simulado são construídos através do método introduzido na seção 3.4.1. O Hamiltoniano (4.25) satisfaz

$$\hat{\mathcal{H}}^2 = g_1 \hat{I}_4 + 2\hat{\mathcal{O}}, \quad (4.33)$$

com $\hat{\mathcal{O}}$ dado por

$$\hat{\mathcal{O}} = m\kappa \hat{\Sigma} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}} + \mu \hat{\beta} \hat{\Sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \boldsymbol{\mathcal{E}}) - i\kappa \hat{\beta} \hat{\alpha} \cdot (\mathbf{p} \times \boldsymbol{\mathcal{E}}), \quad (4.34)$$

tal que

$$\hat{\mathcal{O}}^2 = \frac{1}{4}(\hat{\mathcal{H}}^2 - g_1 \hat{I}_4)^2 = g_2 \hat{I}_4, \quad (4.35)$$

e

$$\begin{aligned} g_1 &= \frac{1}{4} \text{Tr}[\hat{\mathcal{H}}^2] = p^2 + m^2 + (\kappa^2 + \mu^2) \mathcal{E}^2, \\ g_2 &= \frac{1}{16} \text{Tr} \left[\left(\hat{\mathcal{H}}^2 - \frac{1}{4} \text{Tr}[\hat{\mathcal{H}}^2] \right)^2 \right] = m^2 \kappa^2 \mathcal{E}^2 + (\mu^2 + \kappa^2) (\mathbf{p} \times \boldsymbol{\mathcal{E}})^2. \end{aligned} \quad (4.36)$$

As relações (4.33,4.35) são justamente as necessárias para a aplicação do método deduzido na seção 3.4.1, sendo os autoestados dados em termos do operador densidade (3.135)

$$\varrho_{n,s} = \frac{1}{4} \left(\hat{I}_4 + \frac{(-1)^s}{\sqrt{g_2}} \hat{\mathcal{O}} \right) \left(\hat{I}_4 + \frac{(-1)^n}{|\lambda_{n,s}|} \hat{\mathcal{H}} \right), \quad (4.37)$$

e as autoenergias são dadas por

$$\lambda_{n,s} = (-1)^n \sqrt{g_1 + 2(-1)^s \sqrt{g_2}}. \quad (4.38)$$

Como os $\varrho_{n,s}$ são estados puros, o emaranhamento contido no estado é calculado em termos dos vetores de Bloch do estado, em particular o vetor de Bloch do subsistema associado ao spin é dado por

$$\mathbf{a}^{(S)} = \text{Tr}_P[\hat{\Sigma} \varrho_{n,s}] = \frac{(-1)^s m}{\sqrt{g_2}} \left[\kappa \boldsymbol{\mathcal{E}} + \frac{(-1)^n \mu (\mathbf{p} \times \boldsymbol{\mathcal{E}})}{|\lambda_{n,s}|} \right], \quad (4.39)$$

de modo que a concorrência (3.40), utilizada nesta seção para quantificar o emaranhamento, é dada por

$$C[\varrho_{n,s}] = \sqrt{1 - (a^{(S)})^2}. \quad (4.40)$$

Como última caracterização dos autoestados $\varrho_{n,s}$, a quiralidade média, definida como valor médio do operador $\hat{\gamma}_5 = \hat{\sigma}_x^{(P)} \otimes \hat{I}_2^{(S)}$ é dada por

$$\langle \hat{\gamma}_5 \rangle = \text{Tr}[\hat{\gamma}_5 \varrho_{n,s}]. \quad (4.41)$$

Seguindo as relações entre o sistema simulado e o simulador estabelecidas por (4.26, 4.27, 4.28, 4.29), em termos de estados iônicos o operador de quiralidade é dado por $\hat{\gamma}_5 = |a\rangle\langle d| + |d\rangle\langle a| + |b\rangle\langle c| + |c\rangle\langle b|$, e a quiralidade média para um estado puro arbitrário pode ser escrita em termos de probabilidades de transição. A probabilidade de medir um estado puro $|\psi\rangle$ como a superposição maximal $(|a\rangle + |d\rangle)/\sqrt{2}$ é dada por

$$P_{ad} = \left| \left(\frac{\langle a| + \langle d|}{\sqrt{2}} \right) |\psi\rangle \right|^2, \quad (4.42)$$

(com uma definição análoga para P_{cb}), após manipulações matemáticas e, usando a relação

$\sum_{i=a,\dots,d} |\langle i|\psi\rangle|^2 = 1$, o valor médio do operador de quiralidade para um estado arbitrário $|\psi\rangle$ é escrito como

$$\langle \hat{\gamma}_5 \rangle = 2(P_{ad} + P_{cb}) - 1. \quad (4.43)$$

A quiralidade média, portanto, está associada à medida do sistema em uma superposição maximal entre $\{|a\rangle, |d\rangle\}$ e $\{|b\rangle, |c\rangle\}$. Em particular, se o estado quântico é tal que $\langle \hat{\gamma}_5 \rangle = -1$, então $P_{ad} = P_{cb} = 0$ e tal estado é uma superposição entre os estados maximamente emaranhados $(|a\rangle - |d\rangle)/\sqrt{2}$, e $(|c\rangle - |b\rangle)/\sqrt{2}$ (c. f. Eq. (4.32)).

Seguindo o protocolo de simulação, para uma partícula se propagando unidimensionalmente ao longo do eixo x com campo elétrico no plano $x - y$ dado por

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}(\cos(\theta) \mathbf{e}_x + \sin(\theta) \mathbf{e}_y), \quad (4.44)$$

e *momentum* $\mathbf{p} = p \mathbf{e}_x$, as expressões simplificadas para g_2 , $\lambda_{n,s}$, e para o módulo do vetor de Bloch são dadas por

$$g_2 = \mathcal{E}^2 [m^2 \kappa^2 + (\mu^2 + \kappa^2) p^2 \sin^2(\theta)], \quad (4.45a)$$

$$\lambda_{n,s} = (-1)^n \left[p^2 + m^2 + (\kappa^2 + \mu^2) \mathcal{E}^2 + 2(-1)^s \mathcal{E} \sqrt{m^2 \kappa^2 + (\mu^2 + \kappa^2) p^2 \sin^2(\theta)} \right]^{1/2} \quad (4.45b)$$

$$a_2^2 = \frac{m^2}{m^2 \kappa^2 + (\mu^2 + \kappa^2) p^2 \sin^2(\theta)} \left[\kappa^2 + \frac{\mu^2 p^2 \sin^2(\theta)}{\lambda_{n,s}^2} \right], \quad (4.45c)$$

e a quiralidade média do autoestado $\varrho_{n,s}$

$$\langle \hat{\gamma}_5 \rangle = \frac{(-1)^{n+s} m p \kappa \cos(\theta)}{|\lambda_{n,s}| \sqrt{m^2 \kappa^2 + (\mu^2 + \kappa^2) p^2 \sin^2(\theta)}}. \quad (4.46)$$

A Figura 21 mostra os gráficos do valor absoluto de (4.46) e da concorrência em função de m/p (coluna da esquerda) e θ (coluna da direita) para $(\kappa, \mu) = (0, 1)$, $(1, 0)$ e $(1, 1)$. Tais combinações de parâmetros são realizadas no sistema iônico através dos termos de *carrier* utilizados, ou seja, através das frequências $\Omega_j^{(1,2)}$ das equações (4.28, 4.29). A concorrência é uma função decrescente de m/p e o estado é separável no limite não-relativístico, i. e. para $m/p \rightarrow \infty$. Por outro lado, para $m \ll p$, i. e. no regime UR, o estado é maximamente emaranhado. Em termos de variáveis iônicas, das relações (4.32), os limites UR e NR podem ser atingidos na simulação mantendo o valor médio do *momentum* (4.12) fixo e variando-se o parâmetro de detuning δ . A quiralidade média possui um ponto de máximo que corresponde a um ponto de inflexão da concorrência. Para $\kappa = 0$, $\langle \hat{\gamma}_5 \rangle$ se anula e, portanto, um valor não nulo de quiralidade está associado à presença da interação pseudo-tensorial. A concorrência possui um valor extremo local para $\theta = \pi/2$, tal que para $\kappa = 0$ o estado é separável. Para este valor de θ , a quiralidade sempre é nula conforme se conclui da Eq. (4.46).

4.3.1 Evolução temporal de um estado arbitrário

Uma vez que as propriedades dos autoestados $\varrho_{n,s}$ foram descritas, é possível obter a conexão com a dinâmica de estados iônicos arbitrários. Para tanto é necessário obter

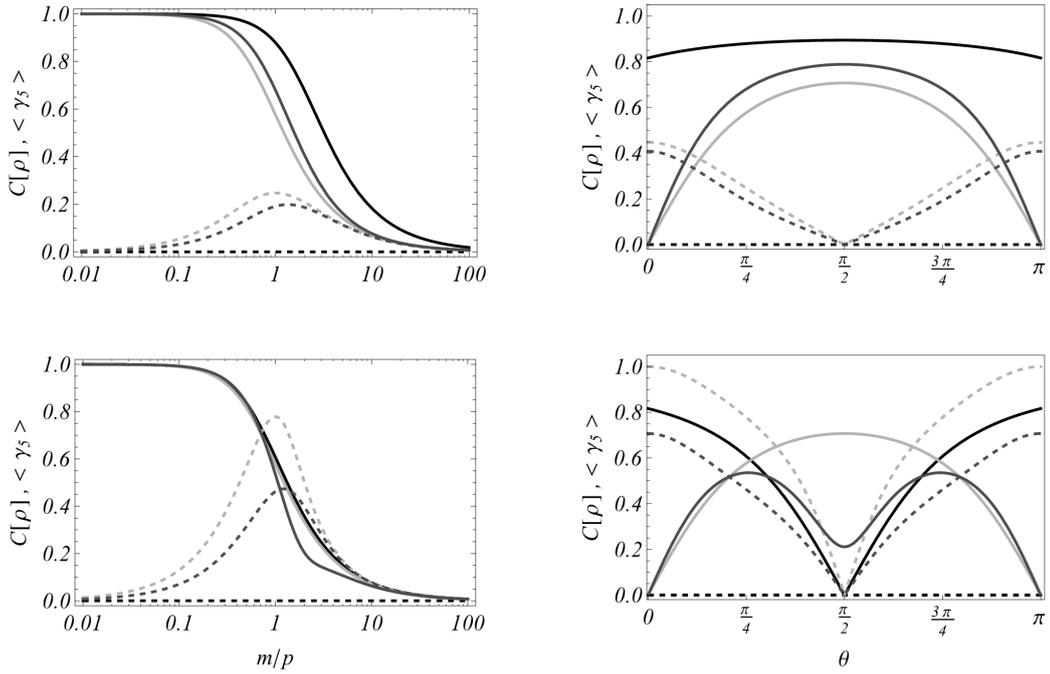


Figura 21 – Concorrência $C[\rho]$ (linhas sólidas), e módulo da quiralidade média $|\langle \hat{\gamma}_5 \rangle|$ (linhas tracejadas), para a matriz densidade dada por (4.37) (para propagação unidimensional (4.44)) em função de m/p para $\theta = \pi/4$ (coluna esquerda), e em função de θ para $m/p = 1$ (coluna direita). A primeira linha corresponde a $s = 0$ e a segunda linha a $s = 1$. Os gráficos são para $(\kappa, \mu) = (0, 1)$ (linhas negras), $(1, 0)$ (linhas cinza-escuro), e $(1, 1)$ (linhas cinza-claro). Nota-se que o emaranhamento é uma função estritamente decrescente de m/p que se anula para $m/p \rightarrow \infty$ (limite NR). Se $p \gg m$ o estado é maximamente emaranhado. Para $\kappa = 0$, a quiralidade média do estado é nula e, no caso contrário, o ponto máximo de $|\langle \hat{\gamma}_5 \rangle|$ corresponde a um ponto de inflexão da concorrência. Em função de θ , a quiralidade média é nula para $\theta = \pi/2$, que também corresponde a um ponto crítico local da concorrência. Por exemplo, o estado é separável para $\kappa = 1$, $\mu = 1$ e $\theta = \pi/2$.

os coeficientes da superposição (4.31), $M_{n,s}^i$ ($i = a, b, c, d$), que compõe a matriz M que conecta a base dos bispinores, $\{|\psi_{n,s}\rangle\}$ ($n, s = 0, 1$), à base dos estados iônicos, $\{|i\rangle\}$. As expressões para $|M_{n,s}^i|$ são obtidas através dos elementos diagonais do operador densidade $\varrho_{n,s}$,

$$|M_{n,s}^i| = \sqrt{\text{Tr}[\varrho_{n,s}|i\rangle\langle i|]}. \quad (4.47)$$

As fases relativas entre $|i\rangle$ e $|j\rangle$, $e^{i\Delta\phi_{n,s}^{ij}}$, são dadas pelos elementos fora da diagonal do operador densidade,

$$e^{i\Delta\phi_{n,s}^{ij}} = \frac{\text{Tr}[\varrho_{n,s}|i\rangle\langle j|]}{|M_{n,s}^i| |M_{n,s}^j|}. \quad (4.48)$$

A menos de uma fase global, suposta $e^{i\phi_a}$, os autoestados do Hamiltoniano (4.25) $|\psi_{n,s}\rangle$ são dados por

$$|\psi_{n,s}\rangle = e^{i\phi_a} \left[|M_{n,s}^a\rangle |a\rangle + |M_{n,s}^b\rangle e^{-i\Delta\phi_{n,s}^{ab}} |b\rangle + |M_{n,s}^c\rangle e^{-i\Delta\phi_{n,s}^{ac}} |c\rangle + |M_{n,s}^d\rangle e^{-i\Delta\phi_{n,s}^{ad}} |d\rangle \right]. \quad (4.49)$$

Introduzindo os vínculos (4.44)-(4.46), as expressões explícitas para os coeficientes são

$$|M_{n,s}^a| = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{(-1)^n m}{|\lambda_{n,s}|} + \frac{(-1)^s p \mu \mathcal{E} \sin \theta}{\sqrt{g_2}} + \frac{(-1)^{n+s} m (p \mu \mathcal{E} \sin \theta + \kappa^2 \mathcal{E}^2)}{\sqrt{g_2} |\lambda_{n,s}|} \right]^{1/2}, \quad (4.50a)$$

$$|M_{n,s}^b| = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{(-1)^n m}{|\lambda_{n,s}|} - \frac{(-1)^s p \mu \mathcal{E} \sin \theta}{\sqrt{g_2}} + \frac{(-1)^{n+s} m (p \mu \mathcal{E} \sin \theta + \kappa^2 \mathcal{E}^2)}{\sqrt{g_2} |\lambda_{n,s}|} \right]^{1/2}, \quad (4.50b)$$

$$|M_{n,s}^c| = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{(-1)^n m}{|\lambda_{n,s}|} - \frac{(-1)^s p \mu \mathcal{E} \sin \theta}{\sqrt{g_2}} + \frac{(-1)^{n+s} m (p \mu \mathcal{E} \sin \theta + \kappa^2 \mathcal{E}^2)}{\sqrt{g_2} |\lambda_{n,s}|} \right]^{1/2}, \quad (4.50c)$$

$$|M_{n,s}^d| = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{(-1)^n m}{|\lambda_{n,s}|} + \frac{(-1)^s p \mu \mathcal{E} \sin \theta}{\sqrt{g_2}} + \frac{(-1)^{n+s} m (p \mu \mathcal{E} \sin \theta + \kappa^2 \mathcal{E}^2)}{\sqrt{g_2} |\lambda_{n,s}|} \right]^{1/2}, \quad (4.50d)$$

e as fases relativas são dadas por

$$e^{-i\Delta\phi_{n,s}^{ab}} = \frac{\kappa \mathcal{E}}{4 |M_{n,s}^a| |M_{n,s}^b|} \left[\frac{(-1)^n e^{i\theta}}{|\lambda_{n,s}|} + \frac{(-1)^s m e^{i\theta}}{\sqrt{g_2}} + \frac{(-1)^{n+s} (p \sin \theta (\mu \mathcal{E} e^{i\theta} + ip) + e^{i\theta} (m^2 - p \mu \mathcal{E} \sin \theta))}{\sqrt{g_2} |\lambda_{n,s}|} \right] \quad (4.51a)$$

$$e^{-i\Delta\phi_{n,s}^{ac}} = \frac{i \kappa \mathcal{E}}{4 \sqrt{g_2} |M_{n,s}^a| |M_{n,s}^c|} \left[(-1)^s p \sin \theta + \frac{(-1)^{n+s} m (p \sin \theta - e^{-i\theta} (\mu \mathcal{E} e^{i\theta} + ip))}{|\lambda_{n,s}|} \right], \quad (4.51b)$$

$$e^{-i\Delta\phi_{n,s}^{ad}} = -\frac{i}{4 |\lambda_{n,s}| |M_{n,s}^a| |M_{n,s}^d|} \left[(-1)^n (\mu \mathcal{E} e^{i\theta} + ip) + \frac{(-1)^{n+s} \mathcal{E} (p \kappa^2 \mathcal{E} \sin \theta e^{i\theta} + p \mu \sin \theta (\mu \mathcal{E} e^{i\theta} + ip))}{\sqrt{g_2} |\lambda_{n,s}|} \right]. \quad (4.51c)$$

Como esperado, as expressões acima satisfazem

$$\sum_{i=a, \dots, d} |M_{n,s}^i|^2 = 1,$$

e, portanto, os estados $|\psi_{n,s}\rangle$ são de fato normalizados.

Os estados $|\psi_{n,s}\rangle$ são autoestados de $\hat{\mathcal{H}}$, e portanto sua evolução temporal é dada trivialmente por (para $|\psi_{n,s}(t=0)\rangle \equiv |\psi_{n,s}\rangle$)

$$|\psi_{n,s}(t)\rangle = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}|\psi_{n,s}\rangle = e^{-i\lambda_{n,s}t}|\psi_{n,s}\rangle. \quad (4.52)$$

Analogamente, para descrever a dinâmica de um estado preparado em um nível iônico interno, $|j\rangle$, basta decompô-lo na base dos biespinores de modo que

$$|j\rangle = \sum_{(n,s)=0,1} W_{n,s}^j |\psi_{n,s}\rangle, \quad (4.53)$$

onde os elementos $W_{n,s}^j$ formam a matriz $W = M^{-1}$ tal que

$$\sum_{(n,s)=0,1} |W_{n,s}^i|^2 = 1.$$

O estado $|j\rangle$ não é um autoestado do Hamiltoniano e sua evolução temporal é dada por

$$|j(t)\rangle = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}|j\rangle = \sum_{(n,s)=0,1} W_{n,s}^j e^{-i\lambda_{n,s}t} |\psi_{n,s}\rangle, \quad (4.54)$$

que, para $|j(t=0)\rangle \equiv |j\rangle$, reproduz o comportamento típico do fenômeno de oscilação quântica para um sistema de quatro níveis. Um estado inicialmente preparado como $|j\rangle$ oscila e pode ser convertido em outro estado, $|k\rangle \neq |j\rangle$. Definindo o projetor $\hat{P}_k = |k\rangle\langle k|$ em um estado iônico genérico $|k\rangle$, a probabilidade de medida do íon em tal estado é dada por

$$\begin{aligned} P_{j \rightarrow k}(t) &= \text{Tr}[|j(t)\rangle\langle j(t)| P_k] \\ &= \sum_{(n,s)=0,1} \sum_{(m,l)=0,1} W_{n,s}^j W_{m,l}^k (W_{m,l}^j)^* (W_{n,s}^k)^* e^{-i(\lambda_{n,s} - \lambda_{m,l})t}. \end{aligned} \quad (4.55)$$

A Figura 22 apresenta os gráficos das probabilidades de sobrevivência $P_{a \rightarrow a}$ e de transição $P_{a \rightarrow b,c,d}$ para o estado $|a(t)\rangle$, em função do parâmetro adimensional pt para $\theta = \pi/4$. A escolha de θ é arbitrária e não afeta o comportamento qualitativo dos resultados. Como as razões entre as autoenergias do Hamiltoniano não é um número racional, o sistema oscila no tempo sem uma periodicidade definida. Em particular, para $\kappa = 0$ as fases relativas $e^{-i\Delta\phi_{n,s}^{ab}}$ e $e^{-i\Delta\phi_{n,s}^{ac}}$ se anulam (veja as Eqs. (4.51a) e (4.51b)), portanto $P_{a \rightarrow c} = P_{a \rightarrow d} = 0$. As probabilidades de sobrevivência $P_{b \rightarrow b}$, $P_{c \rightarrow c}$ e $P_{d \rightarrow d}$ possuem exatamente o mesmo valor da probabilidade de sobrevivência de $|a(t)\rangle$, com exceção do caso no qual κ e μ não são simultaneamente nulos. Neste caso, $P_{a \rightarrow a} = P_{b \rightarrow b} = P_{c \rightarrow c}$ como mostrado na Fig. 23.

Uma vez que os estado biespinoriais são emaranhados, os estados iônicos $|j\rangle$ também devem exibir emaranhamento.

Os níveis de energia representados na Fig. 20 e a correspondência com qubits (4.32) sugerem a identificação de dois subsistemas: *momentum* angular total, \mathbf{F} (\mathcal{S}_F), e sua

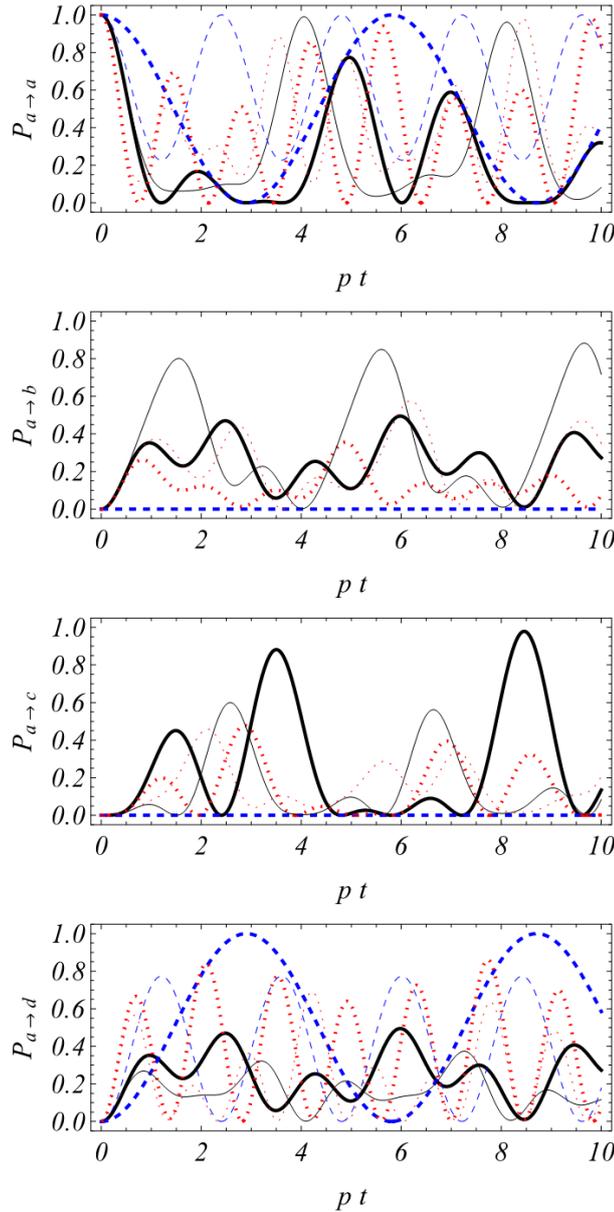


Figura 22 – Probabilidades de transição, $P_{a \rightarrow a,b,c,d}$ em função de pt . As linhas grossas correspondem a $m = 0$, e as linhas finas a $m = 1$. Os gráficos são para $(\kappa, \mu) = (1, 0)$ (linhas sólidas), $(0, 1)$ (linhas tracejadas) e $(1, 1)$ (linhas pontilhadas). Como as probabilidades de transição dependem de uma combinação de funções harmônicas com diferentes frequências, elas geralmente não possuem periodicidade identificável. Nota-se também que para $\kappa = 0$ (linha tracejada), as probabilidades $P_{a \rightarrow b}$ e $P_{a \rightarrow c}$ são sempre nulas (conforme se obtém das Eqs. (4.51a)-(4.51b)), e apenas os estados $|a\rangle$ e $|d\rangle$ são relevantes para a dinâmica.

projeção na direção do campo magnético auxiliar, \mathbf{M} (\mathcal{S}_M). Neste contexto, um estado iônico interno $|j\rangle$ irá evoluir para uma superposição entre os quatro estados iônicos e irá exibir emaranhamento entre \mathcal{S}_F e \mathcal{S}_M . Para identificar e quantificar esta correlação ao

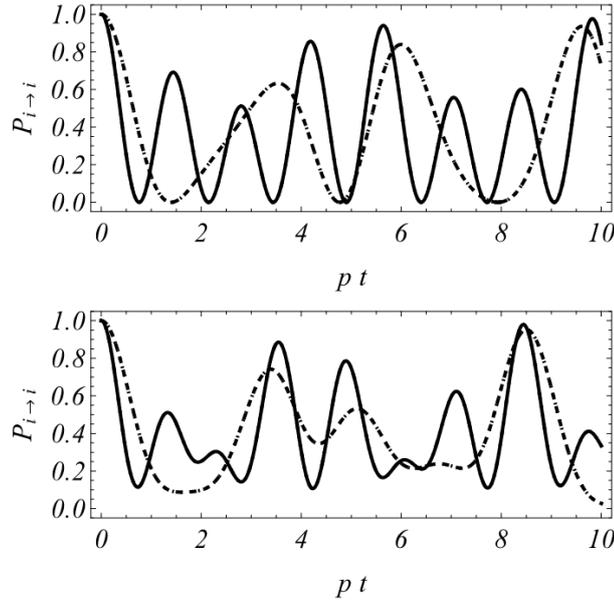


Figura 23 – Probabilidades de sobrevivência, $P_{i \rightarrow i}$, para estados iniciais $|i\rangle = |a\rangle$ (linha sólida) e $|i\rangle = |d\rangle$ (linha tracejada e pontilhada), em função de $p t$. Os gráficos são para $m = 0$ (primeiro gráfico), que corresponde à supressão do termo de deslocamento descrito pelo parâmetro iônico δ , e para $m = 1$ (segundo gráfico), com $\kappa = \mu = 1$.

longo da evolução temporal do sistema o estado quântico deve ser reescrito na base iônica,

$$|j(t)\rangle = \sum_{k=a, \dots, d} \left[\sum_{(n,s)=0,1} W_{n,s}^j M_{n,s}^k e^{-i\lambda_{n,s} t} \right] |k\rangle, \quad (4.56)$$

tal que o vetor de Bloch $\mathbf{a}_j(t) = \text{Tr}[|j(t)\rangle\langle j(t)| (\hat{I}_2^{(1)} \otimes \hat{\sigma}^{(2)})]$ pode ser calculado diretamente e a concorrência, $C[\rho]$, através da equação (4.40). O cálculo do operador $\hat{\gamma}_5$ é dado na base de biespinores por

$$\hat{\gamma}_5 = \sum_{(n,s)=0,1} \sum_{(m,l)=0,1} \left[W_{n,s}^a (W_{m,l}^d)^* + W_{n,s}^d (W_{m,l}^a)^* + W_{n,s}^b (W_{m,l}^c)^* + W_{n,s}^c (W_{m,l}^b)^* \right] |\psi_{n,s}\rangle\langle\psi_{m,l}|, \quad (4.57)$$

e seu valor médio é associado a medidas de superposições entre $|a\rangle$ e $|d\rangle$, e entre $|b\rangle$ e $|c\rangle$ (c. f. Eq. (4.43)).

A quiralidade média $\langle\hat{\gamma}_5\rangle(t) = \text{Tr}[\hat{\gamma}_5 |a(t)\rangle\langle a(t)|]$ e a concorrência $C[\rho(t)]$ são mostradas na Figura 24 para o estado $|a(t)\rangle$. O emaranhamento oscila em função de $p t$ e, para simulação de um momento de dipolo elétrico nulo, $\kappa = 0$ (linhas tracejadas), o estado é uma superposição entre $|a\rangle$ e $|d\rangle$, e sua concorrência varia entre 0, indicando um estado separável, ou $|a\rangle$ ou $|d\rangle$, e 1, indicando que o estado é maximamente emaranhado, $|\psi_{\text{max}}\rangle$, dado por

$$|\psi_{\text{max}}\rangle = \frac{|a\rangle + e^{i\varphi} |d\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (4.58)$$

Diferente das probabilidades de transição, a concorrência apresenta um período bem definido de oscilação, uma vez que para o seu cálculo um dos subsistemas é descartado. Por outro lado, a quiralidade média não apresenta um padrão de oscilações bem definido e se anula para determinados valores de pt . A quiralidade não atinge seu valor máximo de modo que o estado iônico sempre tem uma componente em $(|a\rangle + |d\rangle)/\sqrt{2}$ ou em $(|c\rangle + |b\rangle)/\sqrt{2}$. Quando comparada com a concorrência para um momento de dipolo elétrico nulo, os pontos nos quais a concorrência se anula são exatamente os pontos para os quais a quiralidade se anula, uma vez que para tais valores de pt o estado é ou $|a\rangle$ ou $|d\rangle$, para o qual $P_{ad} = 1/2$ (c. f. Eq. (4.43)). Os valores extremos da quiralidade, por outro lado, correspondem aos pontos para os quais $C[\rho] = 1$, uma vez que para estes pontos o estado é da forma (4.58), para o qual P_{ad} possui um extremo.

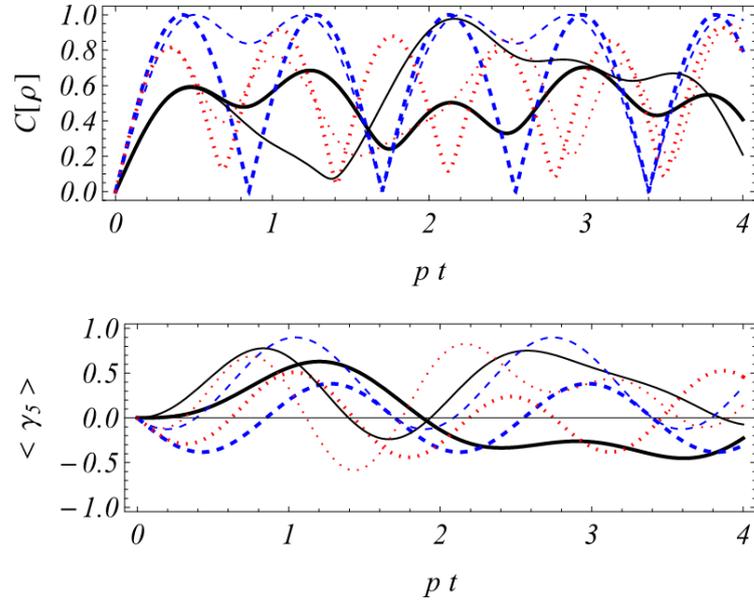


Figura 24 – Concorrência, $C[\rho]$, e quiralidade média, $\langle \hat{\gamma}_5 \rangle$, em função de pt para o mesmo conjunto de parâmetros considerados na Fig. (22). Os estilos de linha também estão em correspondência com aqueles da Fig. (22). Como o estado é inicialmente preparado como $|a\rangle$, para $t = 0$, o estado é separável. O emaranhamento oscila e, para $\kappa = 0$, o estado é sempre uma superposição entre $|a\rangle$ e $|d\rangle$, e a concorrência varia entre 0 e 1 (que indica que o estado é maximamente emaranhado). A quiralidade média também exhibe um padrão de oscilação e não atinge seu valor máximo possível 1.

4.4 Introdução de efeitos de ruído

Em experimentos reais, o sistema utilizado em protocolos de simulação não é, em geral, um sistema fechado. Diversos fatores podem influenciar a dinâmica de um sistema quântico, causando, por exemplo, decoerência. No sistema de íons aprisionados, interações com o ambiente podem surgir por exemplo, devido à flutuações aleatórias do campo

magnético auxiliar utilizado para quebrar a degenerescência dos níveis internos de energia, gerando decoerência e degradação de correlações entre os subsistemas (WINELAND et al., 1998; KIELPINSKI; MONROE; WINELAND, 2002; LEIBFRIED et al., 2003). Nesta seção serão considerados efeitos de ruídos na dinâmica descrita na seção anterior. Do ponto de vista da equação de Dirac, tais efeitos podem surgir como flutuações aleatórias dos potenciais externos presentes no Hamiltoniano considerado de outros potenciais externos aleatório e a relação com a dinâmica no sistema de íons aprisionados pode, então, ser utilizada para simular efeitos de decoerência em estados de biespinores (BITTENCOURT; BERNARDINI, 2017a; BITTENCOURT; BERNARDINI, 2017c).

Uma maneira simples de incluir efeitos de ambiente no contexto considerado é através de um modelo de ruídos, inserido na dinâmica através de um Hamiltoniano efetivo \hat{H}_{Env} , tal que a dinâmica do sistema será descrita por um Hamiltoniano total

$$\hat{H}_{Tot} = \hat{H} + \hat{H}_{Env}, \quad (4.59)$$

onde a dinâmica livre é descrita em termos do operador \hat{H} . No presente contexto a dinâmica livre do estado biespinorial é dada por (4.25) ou, no caso do simulador iônico, pela combinação de interações JC, AJC e Carrier que simula o Hamiltoniano de Dirac. Dado um estado inicial arbitrário descrito pelo operador densidade $\rho(0)$, sua evolução na representação de interação associada à (4.59) é dada por (YU; EBERLY, 2003; YU; EBERLY, 2004; YU; EBERLY, 2006)

$$\tilde{\rho}(t) = e^{i \int_0^t \hat{H}_{Env}(s) ds} \rho(0) e^{-i \int_0^t \hat{H}_{Env} ds}, \quad (4.60)$$

que pode ser obtida como solução de uma equação mestra ou em termos de operadores de Kraus (NIELSEN; CHUANG, 2000; KRAUS, 1983; WÓDKIEWICZ, 2001; DAFFER; WÓDKIEWICZ; MCIVER, 2003). A representação de Kraus permite a inclusão de efeitos de ruído e subsequente descrição das correlações no estado. Se as flutuações clássicas que geram o Hamiltoniano associado ao ruído \hat{H}_{Env} são Markovianas, a solução para a evolução dinâmica do operador densidade pode ser implementada através de uma representação de soma sob operadores que é, então, especializada para descrever a ação do processo estocástico em estados de qubits (WÓDKIEWICZ, 2001; DAFFER; WÓDKIEWICZ; MCIVER, 2003; YU; EBERLY, 2003; YU; EBERLY, 2004; YU; EBERLY, 2006). Tomando a média estatística de (4.60) seguindo o procedimento de (YU; EBERLY, 2003; YU; EBERLY, 2004; YU; EBERLY, 2006), se as flutuações presentes em \hat{H}_{Env} possuem propriedades Markovianas, é possível expressar o comportamento de $\tilde{\rho}(t)$ como

$$\tilde{\rho}(t) = \mathcal{E}_K(\rho(0)) = \sum_{\mu} K_{\mu}^{\dagger}(t) \rho(0) K_{\mu}(t), \quad (4.61)$$

com $\{K_{\mu}(t)\}$ os operadores de Kraus associados ao ruído descrito por \hat{H}_{Env} .

A evolução completa do operador densidade $\rho(t)$ na representação de Schrödinger é então obtida utilizando-se a relação de completeza dos autoestados $\varrho_{n,s}$, que para o

Hamiltoniano de interesse (4.25), não são degenerados, de modo a se obter

$$\begin{aligned}\rho(t) = e^{i\hat{H}_D t} \tilde{\rho}(t) e^{-i\hat{H}_D t} &= \sum_{n,s=0}^1 \sum_{m,l=0}^1 e^{-i(\lambda_{n,s}-\lambda_{m,l})t} \rho_{n,s} \tilde{\rho}(t) \varrho_{m,l} \\ &= \sum_{n,s=0}^1 \sum_{m,l=0}^1 \sum_{\mu} e^{-i(\lambda_{n,s}-\lambda_{m,l})t} \varrho_{n,s} K_{\mu}^{\dagger}(t) \rho(0) K_{\mu}(t) \varrho_{m,l}\end{aligned}\quad (4.62)$$

com o qual é possível se calcular o emaranhamento e outras quantidades de interesse. Em particular, a probabilidade de sobrevivência do estado i. e. a probabilidade de medida do estado em sua configuração inicial, $\mathcal{P}_{\rho(0)}(t)$ é dada por

$$\mathcal{P}_{\rho_0}(t) = \text{Tr}[\rho(0)\rho(t)] = \sum_{n,s=0}^1 \sum_{m,l=0}^1 \sum_{\mu} e^{-i(\lambda_{n,s}-\lambda_{m,l})t} \text{Tr}[\rho(0)\varrho_{n,s} K_{\mu}^{\dagger}(t) \rho(0) K_{\mu}(t) \varrho_{m,l}]. \quad (4.63)$$

Como não há certeza que o estado $\rho(t)$ é puro, mesmo $\rho(0)$ sendo preparado como um estado puro, para o cálculo do emaranhamento será utilizada, nesta seção, a negatividade $\mathcal{N}[\rho]$ (3.44).

Serão considerados a seguir dois modelos de ruídos: ruído local e o ruído global (YU; EBERLY, 2006). Além disso, para destacar os efeitos destas dinâmicas sobre o emaranhamento spin-paridade dos biespinores, ou no caso dos íons aprisionados sobre o emaranhamento $F-M$, serão considerados como estados iniciais dois estados maximamente emaranhados $\rho_C(0) = |\psi_C\rangle\langle\psi_C|$ e $\rho_W(0) = |\psi_W\rangle\langle\psi_W|$ que, em termos dos estados iônicos (4.32), são dados por

$$|\psi_C\rangle = \frac{|a\rangle + |d\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |\psi_W\rangle = \frac{|b\rangle + |c\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (4.64)$$

4.4.1 Efeitos de ruído global

O ruído global afeta coletivamente os subsistemas e, para um sistema de dois qubits, é descrito pelo Hamiltoniano (YU; EBERLY, 2006)

$$\begin{aligned}\hat{H}_{Env}^{Global} &= -\frac{1}{2}\mu B(t) \left(\hat{\sigma}_z^{(1)} \otimes \hat{I}_2^{(2)} + \hat{I}_2^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_z^{(2)} \right) \\ &= -\mu B(t) \text{Diag}\{1 \quad 0 \quad 0 \quad -1\}.\end{aligned}\quad (4.65)$$

Neste modelo, a função $B(t)$ representa flutuações estocásticas do ambiente que agem igualmente nos dois subsistemas, no caso dos íons aprisionados nos subsistemas associados aos números quânticos \mathbf{F} e \mathbf{M} e no caso do sistema simulado, nos subsistemas de paridade intrínseca e spin, através de uma interação tipo Zeeman descrita pela ação do operador $\hat{\sigma}_z$ no subsistema correspondente.

Este tipo de ruído é gerado pelo acoplamento com um ambiente bosônico causando uma defasagem global dos qubits e afetando suas propriedades de coerência (YU; EBERLY, 2003; YU; EBERLY, 2004; YU; EBERLY, 2006). Por exemplo, em óptica quântica é possível

preparar um par de fótons polarizados que se propagam através de fibras parcialmente sobrepostas. Neste cenário o ruído global surge devido a uma birrefringência aleatória e causa uma depolarização gradual dos fótons que pode ser utilizada em alguns protocolos de informação específicos (SHENG; DENG, 2010).

No contexto dos íons aprisionados, o ruído (4.65) é uma das principais fontes de efeitos de ambiente (DORNER, 2012; KIELPINSKI et al., 2001; MONS et al., 2011; ROSS et al., 2006; LANGER et al., 2005), sendo gerado por flutuações aleatórias no campo magnético auxiliar utilizado para quebrar a degenerescência dos estados internos dos íons (MONS et al., 2011). O campo magnético estocástico $B(t)$ é clássico e caracterizado pelas condições Markovianas

$$\begin{aligned}\langle B(t) \rangle &= 0 \\ \langle B(t)B(t') \rangle &= \frac{\Gamma}{\mu^2} \delta(t - t'),\end{aligned}\quad (4.66)$$

com $\langle \cdot \rangle$ representando a média por *ensemble* e Γ representando a fase de relaxação gerada pela interação coletiva $B(t)$. Os operadores de Kraus $\{D_\mu\}$ associados ao Hamiltoniano (4.65) são dados por (YU; EBERLY, 2006)

$$D_1 = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix}, \quad D_2 = \begin{pmatrix} \omega_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega_2 \end{pmatrix}, \quad D_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega_3 \end{pmatrix}, \quad (4.67)$$

com $\gamma = e^{-\Gamma t/2}$, $\omega_1 = \sqrt{1 - e^{-\Gamma t}}$, $\omega_2 = -\omega_1 e^{-\Gamma t}$, e $\omega_3 = \omega_1^2 \sqrt{1 + e^{-\Gamma t}}$. A evolução temporal de um estado inicial arbitrário será dada por

$$\begin{aligned}\rho(t) = e^{i\hat{H}t} \tilde{\rho}(t) e^{-i\hat{H}t} &= \sum_{n,s=0}^1 \sum_{m,l=0}^1 e^{-i(\lambda_{n,s} - \lambda_{m,l})t} \rho_{n,s} \tilde{\rho}(t) \varrho_{m,l} \\ &= \sum_{n,s=0}^1 \sum_{m,l=0}^1 \sum_{\mu=1}^3 e^{-i(\lambda_{n,s} - \lambda_{m,l})t} \varrho_{n,s} D_\mu^\dagger(t) \rho(0) D_\mu(t) \varrho_{m,l},\end{aligned}\quad (4.68)$$

A evolução dos estados iniciais (4.64) são obtidas de Eq. (4.68), da qual se obtém as probabilidades de sobrevivência $\mathcal{P}_C(t) = \text{Tr}[\rho_C(0)\rho_C(t)]$ e $\mathcal{P}_W(t) = \text{Tr}[\rho_W(0)\rho_W(t)]$ Eq. (4.63), mostradas na Fig. 25, em função do parâmetro adimensional pt . Os estados iniciais ρ_C são transformados de sua superposição inicial através da interação com o ambiente. Para $t > 0$, a probabilidade de sobrevivência $\mathcal{P}_C(t)$ é sempre menor do que 1. Por outro lado, o estado $\rho_W(t)$ oscila entre $\rho_W(0)$ e uma superposição ortogonal ao estado inicial. Assim como nos casos da seção anterior, como as autoenergias $\lambda_{n,s}$ (4.45a) não definem números racionais, o estado oscila sem frequência definida. Percebe-se que para menores valores de m/p ($\sim \tilde{m}\delta/(k\Omega)$) em termos de variáveis iônicas, os efeitos de decoerência são mais evidentes, suprimindo o padrão de oscilação para ambos os estados.

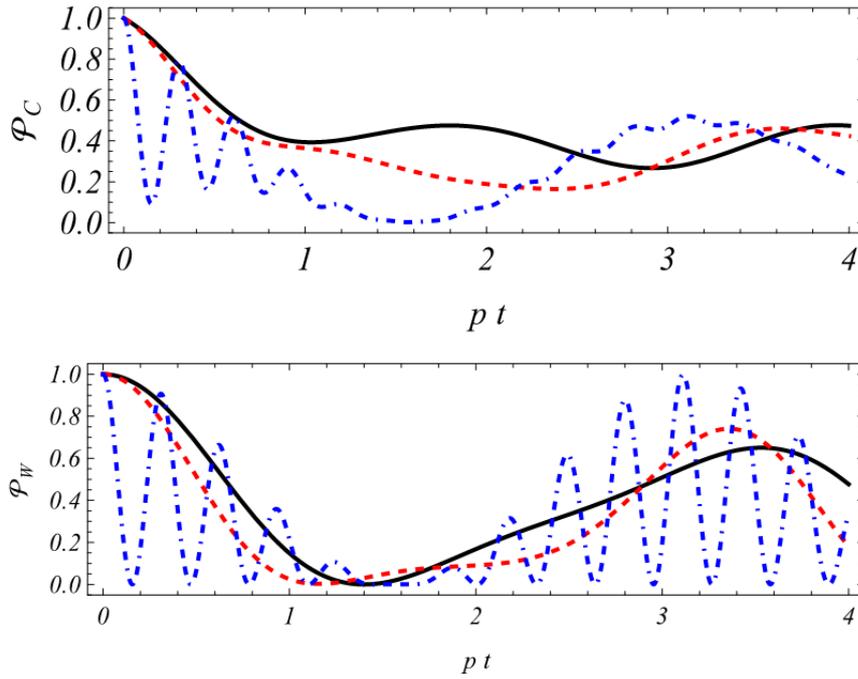


Figura 25 – Probabilidades de sobrevivência para os estados (4.64) sob ação do ruído global descrito pelos operadores de Kraus (4.67), \mathcal{P}_C (primeiro gráfico) e \mathcal{P}_W (segundo gráfico), como função do parâmetro adimensional pt . Os gráficos são para $\kappa = \mu = 1$, $\mathcal{E}/p = 1$, $\Gamma/p = 1/2$ e para $m/p = 0$ (linhas sólidas), 1 (linhas tracejadas), 10 (linhas tracejadas e pontilhadas).

A negatividade de $\rho_W(t)$ e de $\rho_C(t)$ é apresentada na Fig. 26. Os estados do tipo ρ_W são insensíveis ao ruído coletivo, como pode ser observado através do cálculo explícito $\sum_{\mu=1}^3 D_{\mu}^{\dagger}(t)\rho_W(0)D_{\mu}(t) = \rho_W(0)$, e, portanto, $\tilde{\rho}_W(t) = \rho_W(0)$. O emaranhamento (segundo gráfico da Fig. 26) e a respectiva probabilidade de sobrevivência deste estado não são afetados por este ruído, exibindo oscilações similares àquelas apresentadas para os níveis internos iônicos apresentadas na seção 4.3.1. Os estados ρ_C , por outro lado, sofrem decoerência, e seu emaranhamento se anula para $t \gg \Gamma$, sem a presença de morte súbita de emaranhamento. Mesmo exibindo um comportamento não-monotônico, com o emaranhamento crescendo em alguns intervalos, o estado se separa assintoticamente e tende a um estado misto maximal (primeiro gráfico da Fig. 26).

Como o estado ρ_C perde emaranhamento como consequência da dinâmica com ruído é interessante verificar como as correlações quânticas em geral, quantificadas pela discórdia geométrica \mathcal{D} (3.50) evoluem no tempo. Para este estado, o gráfico de \mathcal{D} é apresentado na Fig. 27. Apesar das correlações quânticas serem mais robustas diante dos efeitos do ruído coletivo, elas também se anulam para $t \gg 1/\Gamma$. Entretanto, um comportamento característico é identificado durante a evolução da discórdia geométrica do estado: a existência da descontinuidade na sua primeira derivada para valores altos de m/p , como pode ser notado na Fig. 27, para $m/p = 20$ (linha cinza, que possui um cúspide,

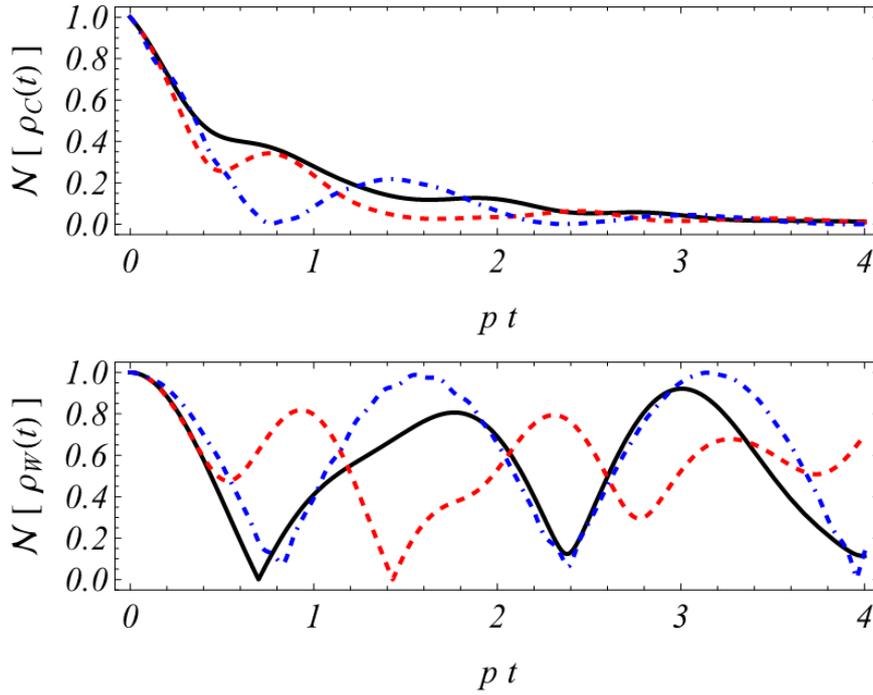


Figura 26 – Negatividade dos estados iniciais ρ_C e ρ_W sob ruído global, $\mathcal{N}[\rho_C(t)]$ (direita) e $\mathcal{N}[\rho_W(t)]$ (esquerda), em função de pt para o mesmo conjunto de parâmetros considerados na Fig. 25. Apenas o estado ρ_C exhibe um perfil de decoerência.

em correspondência com o segundo gráfico da Fig. 27). Diferente do emaranhamento, a discórdia geométrica não pode se anular abruptamente, uma vez que o conjunto de estados de discórdia zero é um conjunto de medida nula (FERRARO et al., 2010). O decaimento das correlações quânticas medidas pela discórdia podem ser descritas por diferentes taxas, associadas a regimes de decaimentos clássicos ou quânticos. Quando a transição entre estes dois regimes é abrupta, a discórdia apresenta uma descontinuidade em sua primeira derivada como ocorre, por exemplo, quando um ruído do tipo *bit-phase flip* é considerado em canais de comunicação quântica (MAZIERO et al., 2009; MAZZOLA; PILO; MANISCALCO, 2010; ROSZAK; CYWIŃSKI, 2015).

4.4.2 Efeitos de ruído local

Outro modelo simples de ruído é o local é descrito pelo Hamiltoniano (YU; EBERLY, 2006)

$$\hat{H}_{Env}^{Loc} = -\frac{1}{2}\mu \left(b_1(t) (\hat{\sigma}_z^{(1)} \otimes \hat{I}_2^{(2)}) + b_2(t) (\hat{I}_2^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_z^{(2)}) \right). \quad (4.69)$$

Neste modelo, flutuações separadas agem em cada um dos subsistemas e os campos $b_i(t)$ são caracterizados pelas condições Markovianas

$$\langle b_i(t) \rangle = 0, \quad \langle b_i(t)b_i(t') \rangle = \frac{\Gamma_i}{\mu^2} \delta(t - t'), \quad (4.70)$$

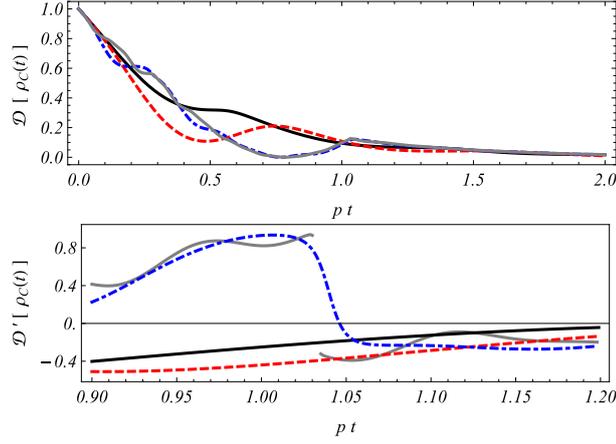


Figura 27 – Discórdia geométrica para o estado inicial ρ_C sob ruído global, $\mathcal{D}[\rho_C(t)]$ (primeiro gráfico), e sua primeira derivada $\mathcal{D}'[\rho_C(t)]$ (segundo gráfico) em função de pt para $m/p = 0$ (curva sólida), $m/p = 1$ (curva tracejada), $m/p = 10$ (curva tracejada e pontilhada) e $m/p = 20$ (curva sólida cinza). Todos os outros parâmetros estão em correspondência com os adotados nas Figs. 25 e 26. A discórdia geométrica é mais robusta aos efeitos de ambiente descritos pelo ruído global, mas, como o emaranhamento, também se anula para $t \gg 1/\Gamma$. Para valores altos de m/p , a derivada da discórdia geométrica é descontínua, indicando uma transição entre comportamentos de decaimento clássicos e quânticos (MAZIERO et al., 2009; MAZZOLA; PILO; MANISCALCO, 2010; ROSZAK; CYWIŃSKI, 2015).

onde Γ_i são as fases de relaxação devido às interações locais. Este tipo de ruído foi considerado no estudo da decoerência em estados de fônons (YU; EBERLY, 2002), para protocolos de medida do gradiente de campos magnéticos com íons aprisionados (NG; KIM, 2014), e na investigação de propriedades de transporte em cadeias de íons (CORMICK; SCHMIEGELOW, 2016). Aqui é suposto que as flutuações afetam cada grau de liberdade individualmente. Assim como no caso anterior, neste caso estas flutuações são, no caso dos íons aprisionados, flutuações aleatórias do campo magnético auxiliar.

Os operadores de Kraus para o ruído local são dados em termos dos operadores (YU; EBERLY, 2006)

$$\begin{aligned}
 E_1 &= \text{diag}\{1, \gamma_1\} \otimes \hat{I}_2^{(2)}, & E_2 &= \text{diag}\{0, \omega_1\} \otimes \hat{I} - 2^{(2)}, \\
 F_1 &= \hat{I}_2^{(1)} \otimes \text{diag}\{1, \gamma_2\}, & F_2 &= \hat{I}_2^{(1)} \otimes \text{diag}\{0, \omega_2\},
 \end{aligned} \quad (4.71)$$

com $\gamma_i = e^{-\Gamma_i t/2}$ e $\omega_i = \sqrt{1 - e^{-\Gamma_i t}}$. Por simplicidade serão consideradas fases de relaxação iguais para ambos os subsistemas, i.e. $\Gamma_1 = \Gamma_2 = \Gamma$. Com estes operadores de Kraus a evolução temporal de um estado arbitrário é dada por (4.62) com $\{K_\mu\} \rightarrow \{E_\mu F_\nu\}$ de modo que

$$\begin{aligned}
 \rho(t) &= e^{i\hat{H}_D t} \tilde{\rho}(t) e^{-i\hat{H}_D t} \\
 &= \sum_{n,s=0}^1 \sum_{m,l=0}^1 \sum_{\mu,\nu=1}^2 e^{-i(\lambda_{n,s} - \lambda_{m,l})t} \varrho_{n,s} E_\mu^\dagger(t) F_\nu^\dagger(t) \rho(0) F_\nu(t) E_\mu(t) \varrho_{m,l}.
 \end{aligned} \quad (4.72)$$

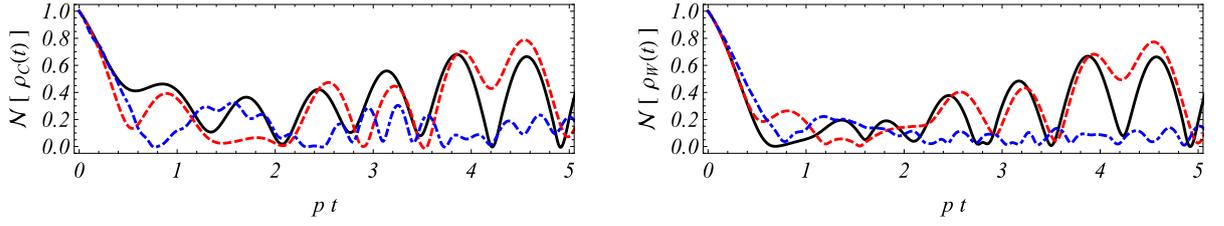


Figura 28 – Emaranhamento para o estado inicial ρ_W (direita) e ρ_C (esquerda) sob o ruído local em função de pt . Os parâmetros e estilos das curvas estão em correspondência com os da Fig. 25. O ruído local dissipa o emaranhamento em ambos os estados, mas para baixos valores de m/p oscilações ainda são presentes. Para $t \gg 1/\Gamma$, tanto ρ_W quanto ρ_C são estados puros, sendo misturas apenas para valores intermediários de pt .

Ambos os estados iniciais (4.64) sofrem decoerência diante o ruído local, conforme mostrado na figura 28. Assim como nos casos anteriores o emaranhamento oscila sem uma periodicidade definida, entretanto mesmo para $t \gg 1/\Gamma$, os estados são emaranhados. Valores intermediários de m/p caracterizam uma influência mais evidente do ruído local nas propriedades de emaranhamento dos estados, conforme pode ser inferido das curvas azuis da Fig. 28, que correspondem a $m/p = 10$. Os estados são afetados de maneira similar pelo ruído local e para $t \gg 1/\Gamma$ ambos são estados puros. O comportamento das probabilidades de sobrevivência são análogos aos mostrados anteriormente para os estados iônicos internos, ou seja, oscilantes sem periodicidade definida.

4.5 Considerações finais

Em resumo neste capítulo foi tratada a simulação da equação de Dirac com íons aprisionados, com foco particular na simulação do Hamiltoniano incluindo acoplamento não minimal (4.25) e suas propriedades de emaranhamento intrínseco. Os principais pontos do capítulo são

- Combinando os Hamiltonianos de Jaynes-Cummings, anti Jaynes-Cummings e Carrier (4.8, 4.9, 4.7), com parâmetros escolhidos convenientemente, é possível simular o Hamiltoniano de Dirac;
- O Hamiltoniano de Dirac incluindo acoplamento não-minimal com campo elétrico externo (4.25) pode ser simulado com um protocolo similar ao apresentado para partícula livre;
- Os autoestados do Hamiltoniano simulado, e suas propriedades de emaranhamento intrínseca, são recuperados através da metodologia introduzida no capítulo 3;
- O emaranhamento entre spin e paridade intrínseca dos biespinores (sistema simulado) correspondem ao emaranhamento entre subsistemas associados ao *momentum* angular

total e sua componente na direção do campo magnético auxiliar utilizado para quebrar degenerescência dos níveis internos do íons (simulador);

- A evolução temporal livre de um estado inicial qualquer pode ser recuperada, uma vez que os autoestados forem construídos e todas as propriedades consideradas podem ser diretamente calculadas;
- Foi observada uma relação qualitativa entre quiralidade e emaranhamento - a primeira pode ser escrita em termos da probabilidade de medida de estados maximamente emaranhados;
- O formalismo pode ser estendido de modo a incluir ruídos, em particular foram considerados os efeitos dos ruídos local e global, associados a flutuações aleatórias do campo magnético auxiliar, na dinâmica de estados maximamente emaranhados;
- Para o ruído global observou-se uma transição no regime de decaimento das correlações quânticas, indicado por um ponto de descontinuidade da primeira derivada da discórdia geométrica do estado.

Apesar do foco desta tese não ser experimental cabem alguns comentários com relação às técnicas experimentais adjacentes ao cenário estudado. A preparação e medida dos protocolos apresentados neste capítulo são realizadas através de técnicas experimentais amplamente utilizadas. Uma vez que o estado vibracional do íon é preparado por resfriamento a laser, o estado interno iônico é inicializado via bombeamento óptico com uma probabilidade maior do que 99% (WINELAND et al., 1980). A ideia do bombeamento óptico é conduzir o átomo a um estado no qual não há interação com a bomba óptica. Luz polarizada circularmente é utilizada para bombear o íon a um de seus níveis, e a fidelidade da inicialização é limitada pela qualidade da polarização do laser (LEIBFRIED et al., 2003). A detecção dos estados iônicos internos pode ser realizada por meio do método de *elétron shelving*, que consiste em detectar a fluorescência induzida por laser em uma transição de dipolo (LEIBFRIED et al., 2003). Esta técnica foi utilizada, por exemplo, para a medida do operador de posição $\langle \hat{x} \rangle$ na simulação quântica do efeito *zitterbewegung* com um íon aprisionado através do mapeamento da posição do estado para um dos níveis internos do íon (GERRITSMA et al., 2010).

Os quantificadores de emaranhamento considerados não podem ser diretamente medidos, uma vez que eles envolvem operações não físicas (como a transposição parcial). Apesar do emaranhamento poder ser detectado através de propriedades específicas de um dado estado (SACKETT et al., 2000; MYATT et al., 2000), o cálculo do grau de emaranhamento requer uma informação completa do operador densidade do estado. Esta medida pode ser realizada através do protocolo de tomografia quântica (LEONHARDT, 1995; HRADIL, 1997), i.e. a reconstrução de uma matriz densidade através da medida

em grande número de cópias de um sistema. A tomografia quântica foi implementada em diversas situações envolvendo íons aprisionados (HÄFFNER; ROOS; BLATT, 2008; ROOS et al., 2004; HÄFFNER et al., 2005; LEIBFRIED et al., 1996; POYATOS et al., 1996; RIEBE et al., 2006; HÄFFNER et al., 2004), incluindo a medida do estado de movimento de um íon (LEIBFRIED et al., 1996; POYATOS et al., 1996), detecção de emaranhamento multipartite (HÄFFNER et al., 2004) e a caracterização do emaranhamento para computação quântica (RIEBE et al., 2006). Apesar de a tomografia quântica reconstruir todos os elementos da matriz densidade, uma informação parcial da dinâmica do estado, como a caracterização necessária para o cálculo da quiralidade média, pode ser realizada através da caracterização direta da dinâmica (MOHSENI; LIDAR, 2006).

5 Emaranhamento rede-camada no grafeno bicamada

As propriedades físicas do grafeno se tornaram o foco de diversas investigações teóricas e experimentais, principalmente após o desenvolvimento de técnicas para a produção e caracterização de folhas de grafeno em laboratório (NOVOSELOV et al., 2004). A estrutura única das bandas de energia do grafeno, que apresentam um comportamento linear para baixas energias (dependendo do nível de Fermi) é descrita efetivamente em termos da equação de Dirac com termo de massa nula, gerando diversas implicações para as propriedades eletrônicas do material (CASTRO-NETO et al., 2009). A dinâmica similar à relativística tem, entre suas implicações, a formação de níveis modificados de Landau diante aplicação de um campo magnético, gerando um comportamento anômalo da condutância (NOVOSELOV et al., 2006; ZHANG et al., 2005). Diferente do grafeno monocamada, o grafeno bicamada apresenta bandas de energia com comportamento hiperbólico nas proximidades da primeira zona de Brillouin, similar à relação de dispersão relativística dos férmions massivos livres (NILSSON et al., 2006).

A descrição do grafeno com o modelo *tight-binding* deixa clara a correspondência entre o grafeno e a equação de Dirac. Considerando excitações de baixas energias é possível, a partir do Hamiltoniano *tight-binding*, obter o comportamento relativístico da equação de Dirac. Esta correspondência foi utilizada, por exemplo, na investigação dos correspondentes ao efeito *zitterbewegung* e ao do paradoxo de Klein tanto no grafeno monocamada como no grafeno bicamada (RUSIN; ZAWADZKI, 2008; MCCANN; KOSHINO, 2013).

Diferente do íon aprisionado, onde a dinâmica relativística é construída através de combinações convenientes dos termos (anti) Jaynes-Cummings e Carrier, o comportamento relativístico é emergente no grafeno: é consequência do arranjo geométrico do material. Desta maneira, a dinâmica da equação de Dirac, quando traduzida ao grafeno, revela diversas características intrínsecas ao material, como é o caso dos já citados níveis de Landau e de outras propriedades eletrônicas do material.

Assim como no caso dos íons aprisionados, a descrição pela equação de Dirac trás consigo também o emaranhamento intrínseco relacionado à estrutura $SU(2) \otimes SU(2)$ da dinâmica de Dirac. No caso do grafeno monocamada tal emaranhamento é sempre nulo uma vez que a descrição é através do Hamiltoniano de Dirac para partícula livre de massa nula. No caso do grafeno bicamada, entretanto, os diferentes termos de acoplamento entre as camadas são traduzidos a um Hamiltoniano de Dirac modificado incluindo termos de potenciais externos (BITTENCOURT; BERNARDINI, 2017b). Neste caso, conforme descrito na seção 3.4, espera-se que os autoestados do Hamiltoniano sejam emaranhados,

sendo a correlação entre spin e paridade, intrínseca aos biespinores de Dirac, traduzida em correlações entre rede e camada no grafeno.

O emaranhamento foi recentemente considerado no contexto da física de grafeno em diversos cenários, de investigações relacionando a correlação quântica com o efeito Hall (LI; HALDANE, 2008; LÄUCHLI et al., 2010; THOMALE; AROVAS; BERNEVIG, 2010) a possíveis aplicações em computação quântica (CORDOURIER-MARURI et al., 2014; RAHMAN et al., 2013; WU; LUE; CHANG, 2011; WU; LUE, 2012). Em particular, quando relacionado ao efeito Hall, o espectro de emaranhamento (LI; HALDANE, 2008) possui relação com propriedades topológicas do material (CHANDRAN et al., 2011; DOUÇOT et al., 2008). Para a implementação de protocolos de computação quântica, o emaranhamento gerado através de acoplamentos spin-órbita podem ser utilizados para construir portas lógicas quânticas entre um ponto quântico no grafeno e um qubit móvel (CORDOURIER-MARURI et al., 2014), ou mesmo através de interações entre diferentes vales (WU; LUE; CHANG, 2011; WU; LUE, 2012).

Neste capítulo serão descritas as propriedades de emaranhamento entre rede e camada no grafeno bicamada em sua geometria mais estável, o empilhamento Bernal (ou AB). Após uma introdução ilustrativa do modelo *tight-binding* para o grafeno monocamada, e sua relação com a equação de Dirac, será apresentado o modelo para o grafeno bicamada e, a partir dele, será deduzida a dinâmica relativística em termos do Hamiltoniano de Dirac modificado, incluindo termos de potenciais tensorial e pseudo-vetorial (BITTENCOURT; BERNARDINI, 2017b). Assim como no caso dos íons aprisionados do capítulo anterior, o método introduzido na seção 4.3.1 será utilizado para a construção dos autoestados e subsequente estudo de suas propriedades de emaranhamento. Em particular, será investigada uma possível relação entre energia e emaranhamento. Por último, será considerado um *framework* com a inclusão de efeitos de ruído e sua influência em estados maximamente emaranhados de rede-camada. Diferente dos casos abordados no último capítulo, será utilizado um modelo não-Markoviano de ruído clássico (KUBO; TODA; HASHITSUME, 1991; YU, 2010), associado à possíveis flutuações aleatórias dos termos de massa e voltagem do modelo *tight-binding*

5.1 Modelo *tight-binding* para o grafeno monocamada e sua relação com a equação de Dirac

O grafeno é um material composto de átomos de carbono dispostos em uma geometria de favo-de-mel, conforme mostra a Figura 29 (CASTRO-NETO et al., 2009). A rede favo-de-mel é construída através da superposição de duas redes A e B, sendo os vetores de rede \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 , que ligam dois sítios da mesma rede, dados por

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}), \quad (5.1)$$

com a a distância entre carbonos ~ 1.42 Å. Os vetores que conectam os primeiros vizinhos $\delta_{1,2,3}$ são

$$\delta_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \delta_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}), \quad \delta_3 = -a(1, 0), \quad (5.2)$$

e os vetores que conectam os segundos vizinhos são $\delta'_1 = \pm\mathbf{a}_1$, $\delta'_2 = \pm\mathbf{a}_2$ e $\delta'_3 = \pm(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1)$. A rede recíproca desta rede cristalina é também uma rede do hexagonal, e os cantos da primeira zona de Brillouin, chamados K e K' são dados em termos dos vetores

$$\mathbf{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3a\sqrt{3}} \right), \quad \mathbf{K}' = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3a\sqrt{3}} \right). \quad (5.3)$$

Os vetores da rede recíproca $\mathbf{b}_{1,2}$ são dados por

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}) \quad (5.4)$$

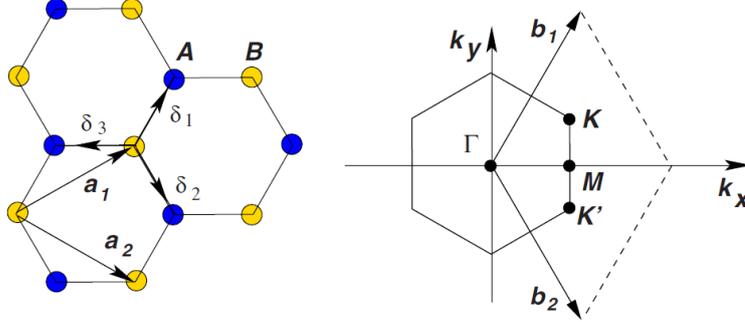


Figura 29 – Rede favo-de-mel (esquerda) composta de duas subredes A e B sobrepostas. Os vetores $\mathbf{a}_{1,2}$ conectam átomos da mesma rede, enquanto os vetores $\delta_{1,2,3}$ conectam um átomo ao seu vizinho mais próximo. Primeira zona de Brillouin da rede favo-de-mel (direita) também é hexagonal. Os pontos K e K' correspondem aos cantos da zona de Brillouin e são importantes na discussão do comportamento relativístico do grafeno. Figura retirada de (CASTRO-NETO et al., 2009)

O modelo *tight-binding* para os elétrons no grafeno é construído considerando a possibilidade de salto para primeiros e segundos vizinhos e o Hamiltoniano associado é dado por (em unidades $\hbar = 1$)

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (\hat{a}_{\sigma,i}^\dagger \hat{b}_{\sigma,j} + \text{H.c.}) - t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} (\hat{a}_{\sigma,i}^\dagger \hat{a}_{\sigma,j} + \hat{b}_{\sigma,i}^\dagger \hat{b}_{\sigma,j} + \text{H.c.}), \quad (5.5)$$

com $\hat{a}_{\sigma,i}$ ($\hat{a}_{\sigma,i}^\dagger$) o operador de criação (aniquilação) de um elétron de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ no sítio \mathbf{R}_i na subrede A , e a definição equivalente para os operadores associados a subrede B , $\hat{b}_{\sigma,i}$. Neste Hamiltoniano *tight-binding* o parâmetro t descreve a amplitude de salto entre vizinhos mais próximos enquanto a amplitude t' está associada ao salto entre segundos vizinhos, portanto, salto entre sítios da mesma subrede, seus valores experimentais são

$$t \sim 2.8 \text{ eV}, \quad 0.02t \leq t' \leq 0.2t.$$

Devido à invariância translacional da rede, o *quasi-momentum* \mathbf{k} é um bom número quântico para o problema. Desta maneira, para diagonalizar o Hamiltoniano do modelo *tigh-binding*, escreve-se os operadores de criação e aniquilação em termos de suas contrapartidas na rede recíproca (de agora em diante suprimindo o índice associado ao spin):

$$\hat{a}_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \hat{a}(\mathbf{k}), \quad (5.6)$$

com uma expressão semelhante para \hat{b}_i , de modo que o Hamiltoniano (5.5) é escrito como

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \psi^\dagger \hat{H}(\mathbf{k}) \psi, \quad (5.7)$$

com \mathbf{k} restrito à primeira zona de Brillouin,

$$\psi = \begin{bmatrix} \hat{a}(\mathbf{k}) \\ \hat{b}(\mathbf{k}) \end{bmatrix},$$

e

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = t \operatorname{Re}[\Gamma(\mathbf{k})] \hat{\sigma}_x + t \operatorname{Im}[\Gamma(\mathbf{k})] \hat{\sigma}_y + 2t' \operatorname{Re}[\Gamma'(\mathbf{k})] \hat{I}_4 + 2t' \operatorname{Im}[\Gamma'(\mathbf{k})] \hat{\sigma}_z, \quad (5.8)$$

onde

$$\Gamma(\mathbf{k}) = \sum_j \exp[i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_j] \quad \Gamma'(\mathbf{k}) = \sum_j \exp[i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}'_j]. \quad (5.9)$$

Os autovalores de energia são obtidos da diagonalização de (5.8), e são dados por (CASTRO-NETO et al., 2009)

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm t \sqrt{3 + f(\mathbf{k})} - t' f(\mathbf{k}), \quad (5.10)$$

com

$$f(\mathbf{k}) = 2 \cos(k_y a \sqrt{3}) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2} k_x a\right). \quad (5.11)$$

Esta relação de dispersão descreve duas bandas, uma associada ao sinal positivo e outra ao sinal negativo de $E_{\pm}(\mathbf{k})$. A estrutura completa destas bandas é mostrada na Figura 30 para $t' = 0.2t$, que está de acordo com valores experimentais (CASTRO-NETO et al., 2009).

As bandas de energia se tocam nos cantos da primeira zona de Brillouin, conforme mostra a figura 31. Para vetores de onda \mathbf{k} próximos à \mathbf{K} ou \mathbf{K}' a relação de dispersão é aproximadamente linear, como é possível inferir diretamente expandindo (5.10) em torno de \mathbf{K} (ou de \mathbf{K}')

$$E_{\pm}(\mathbf{q}) \simeq \pm v_f |\mathbf{q}| + O[(q/K)^2], \quad (5.12)$$

com $\mathbf{q} = \mathbf{K} - \mathbf{k}$, tal que $|\mathbf{q}| \ll |\mathbf{K}|$, e v_f a velocidade de Fermi dada em termos dos parâmetros do Hamiltoniano por

$$v_f = \frac{3}{2} t a \sim 10^6 \text{ m/s}.$$

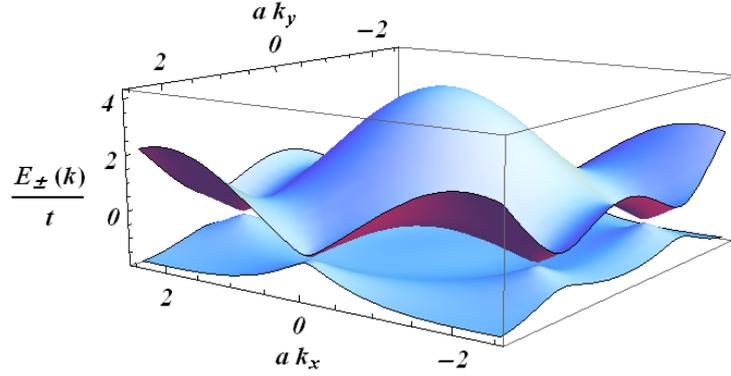


Figura 30 – Bandas de energia obtidas do Hamiltoniano *tight-binding* para o grafeno monocamada (5.5) em função dos vetores de onda \mathbf{k} . O modelo prevê duas bandas de energia que são assimétricas para $t' \neq 0$.

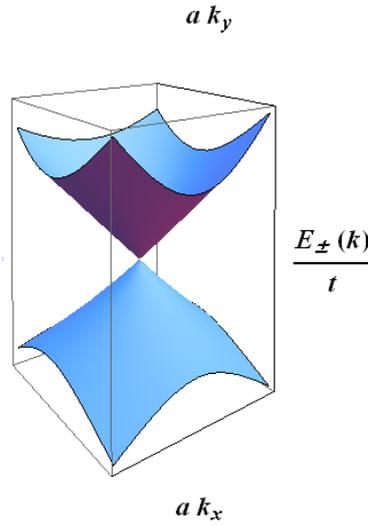


Figura 31 – Bandas de energia obtidas do Hamiltoniano *tight-binding* para momenta \mathbf{k} próximos ao ponto de Dirac \mathbf{K} . Neste ponto, chamado de ponto de Dirac, as bandas de energia se tocam e em seus entornos a relação de dispersão (5.12) é aproximadamente linear, sendo similar a dos férmions de massa nula. O mesmo comportamento é obtido em torno do outro ponto de Dirac \mathbf{K}'

A relação de dispersão (5.12) é linear com relação ao *momentum* \mathbf{q} sendo, portanto, similar àquela obtida através da equação de Dirac com termo de massa nulo.

De fato é possível, a partir do Hamiltoniano, obter uma descrição efetiva que possui a mesma forma da equação de Dirac com massa nula. Voltando à expansão de Fourier (5.6), aproximando os \hat{a} e \hat{b} em torno do dos pontos de Dirac \mathbf{K} e \mathbf{K}' :

$$\begin{aligned}\hat{a}_i &\simeq e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_i}\hat{a}_1(\mathbf{q}) + e^{-i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{R}_i}\hat{a}_2(\mathbf{q}), \\ \hat{b}_i &\simeq e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_i}\hat{b}_1(\mathbf{q}) + e^{-i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{R}_i}\hat{b}_2(\mathbf{q}),\end{aligned}\quad (5.13)$$

com o índice 1,2 associado aos pontos \mathbf{K} e \mathbf{K}' respectivamente. Após manipulações

algébricas, o Hamiltoniano (5.5) para $t' = 0$ é escrito como

$$\hat{H} \rightarrow \hat{H}_{eff} = v_f \sum_{\mathbf{q}} \left[\psi_1^\dagger(\mathbf{q}) \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{q} \psi_1(\mathbf{q}) + \psi_2^\dagger(\mathbf{q}) \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{q} \psi_2(\mathbf{q}) \right], \quad (5.14)$$

com $\psi_i^\dagger(\mathbf{q}) = (\hat{a}_i^\dagger(\mathbf{q}), \hat{b}_i^\dagger(\mathbf{q}))$. O Hamiltoniano efetivo acima é composto de duas cópias do Hamiltoniano de Dirac, uma para $\mathbf{q} \sim \mathbf{K}$ e outra para $\mathbf{q} \sim \mathbf{K}'$, de modo que, na linguagem da primeira quantização, a função de onda (no espaço dos *momenta*) de duas componentes do elétron satisfaz a equação de Dirac bidimensional sem massa

$$v_f \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{q} \psi(\mathbf{q}) = E \psi(\mathbf{q}). \quad (5.15)$$

A relação entre o grafeno e a dinâmica relativística é apreciada através do Hamiltoniano *tight-binding* e consequência das simetrias da rede considerada. O procedimento apresentado aqui é o ponto de partida de diversas investigações de propriedades eletrônicas do grafeno nas mais diversas situações, desde a inclusão de campos magnéticos externos (CASTRO-NETO et al., 2009; GOERBIG, 2011), e consequente estudo dos níveis de Landau anômalos e do efeito Hall no material, até a descrição de estados superficiais e de borda para redes finitas do material (FUJITA et al., 1996) e a medida de fenômenos tipicamente relativísticos, como o efeito *zitterbewegung* e o paradoxo de Klein (RUSIN; ZAWADZKI, 2008; KATSNELSON; NOVOSELOV; GEIM, 2006). Apesar da formulação não incluir termo de massa é interessante ressaltar que em alguns cenários outros termos podem surgir na descrição efetiva (5.14). Distorções mecânicas, por exemplo, são inseridas nesta descrição efetiva através de potenciais de calibre e podem acoplar os termos associados aos dois pontos de Dirac (LOW; GUINEA; KATSNELSON, 2011). A presença de impurezas e defeitos de rede também podem gerar este tipo de acoplamento e requerem uma descrição mais complexa da dinâmica efetiva apresentada aqui (CASTRO-NETO et al., 2009).

5.2 Relação entre a equação de Dirac com potenciais externos e o grafeno bicamada

O grafeno bicamada possui também uma dinâmica efetiva descrita em termos da equação de Dirac, entretanto no caso do de duas camadas a relação de dispersão para baixas energias possui um comportamento parabólico, similar ao da equação de Dirac com um termo de massa. Além disso, é possível traçar uma relação completa entre o Hamiltoniano do modelo *tight-binding* para o grafeno e um Hamiltoniano modificado de Dirac incluindo potenciais externos.

O grafeno bicamada possui diversas configurações diferentes definidas pela orientação relativa entre as camadas. A geometria mais estável é o chamado empilhamento AB

(ou Bernal) (MCCANN; KOSHINO, 2013) no qual as duas camadas são arranjadas de tal modo que metade dos átomos da camada superior estão localizados acima de metade dos átomos da camada inferior (sítios *dimer*), enquanto a outra metade dos átomos está localizada exatamente sobre o centro dos favos-de-mel inferiores (sítios não-*dimer*) (MCCANN; KOSHINO, 2013; ROZHKOV et al., 2016), conforme mostrado na Figura 32.

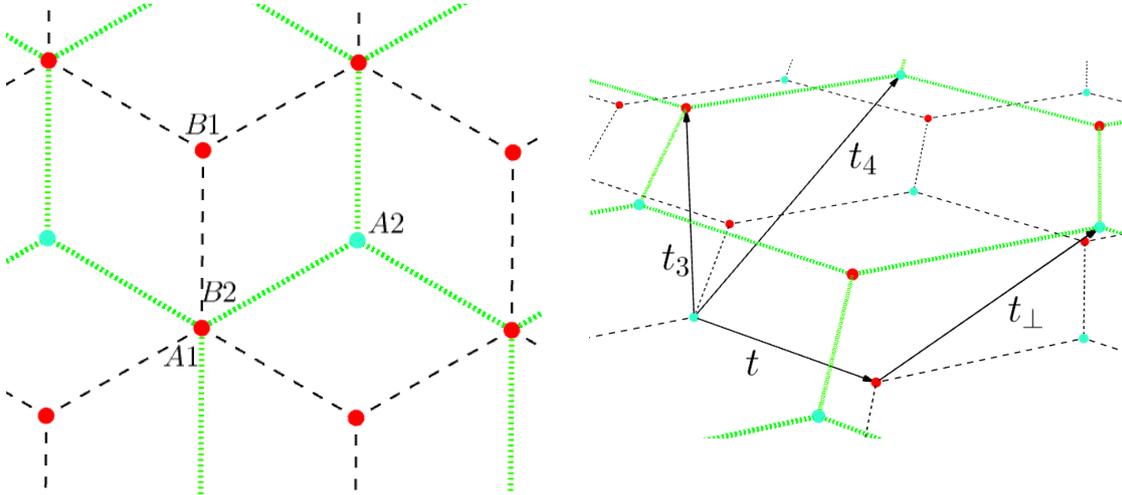


Figura 32 – (Esquerda) Vista superior da configuração geométrica do empilhamento AB (Bernal). Metado dos átomos da camada superior (ligados por linhas pontilhadas) estão exatamente acima de metade dos átomos da camada inferior (ligados por linhas tracejadas). Sítios localizados exatamente sobre outros sítios são chamaos sítios *dimer* (sítios pertencentes às redes A1 e B2), enquanto sítios localizados sobre os centros dos favos-de-mel inferior são chamados sítios não-dimer (sítios pertencentes às redes A2 e B1). (Direita) Representação esquemática das amplitudes de salto do modelo *tight-binding* para o grafeno bicamada. O parâmetro t descreve o salto entre primeiros vizinhos na mesma camada; t_{\perp} é o parâmetro de salto de um sítio não-dimer para o sítio não-dimer mais próximo; t_3 é o parâmetro descrevendo o salto entre um sítio dimer e outro sítio dimer mais próximo, e t_4 é o parâmetro de salto entre um sítio dimer e seu sítio não-dimer.

Nomeando as subredes da camada 1 como $A1$ e $B1$, e as subredes da camada 2 como $A2$ e $B2$ (veja a Fig. 32) o Hamiltoniano *tight-binding*, no espaço dos momenta \mathbf{k} , é dado por (WALLACE, 1947; SLONCZEWSKIT, 1958; MCCANN; KOSHINO, 2013; ROZHKOV et al., 2016)

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathcal{H}}_{AB} = & - t \sum_{\mathbf{k}} \left[\Gamma(\mathbf{k}) \hat{a}_{1\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{1\mathbf{k}} + \Gamma(\mathbf{k}) \hat{a}_{2\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{2\mathbf{k}} + \text{h.c.} \right] \\
 & + t_{\perp} \sum_{\mathbf{k}} \left[\hat{b}_{1\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{2\mathbf{k}} + \hat{a}_{2\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{1\mathbf{k}} \right] - t_3 \sum_{\mathbf{k}} \left[\Gamma(\mathbf{k}) \hat{b}_{2\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{1\mathbf{k}} + \Gamma^*(\mathbf{k}) \hat{a}_{1\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{2\mathbf{k}} \right] \\
 & + t_4 \sum_{\mathbf{k}} \left[\Gamma(\mathbf{k}) (\hat{a}_{1\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{2\mathbf{k}} + \hat{b}_{1\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{2\mathbf{k}}) + \text{h.c.} \right], \tag{5.16}
 \end{aligned}$$

com $\hat{a}_{i\mathbf{k}}^{\dagger}$ o operador de criação de uma excitação na rede α da camada i com vetor de

onda \mathbf{k} , e $\Gamma(\mathbf{k}) = \sum_{j=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_j}$ é dada em termos dos vetores que conectam os vizinhos mais próximos

$$\boldsymbol{\delta}_{1,2} = \left(-a/2, \pm a\sqrt{3}/2\right), \quad \boldsymbol{\delta}_3 = (a, 0).$$

As amplitudes de salto t , t_{\perp} , t_3 e t_4 do Hamiltoniano (5.16) estão representadas na Fig. 32. Os valores experimentais destes parâmetros, obtidos via espectroscopia no infravermelho, são dados por (KUZMENKO et al., 2009)

$$\begin{aligned} t &= 3.16 \pm 0.03 \text{ eV}, & t_{\perp} &= 0.381 \pm 0.003 \text{ eV}, \\ t_3 &= 0.38 \pm 0.06 \text{ eV}, & t_4 &= 0.14 \pm 0.03 \text{ eV}, \end{aligned} \quad (5.17)$$

que, com exceção do parâmetro t , são aproximadamente iguais aos valores obtidos via cálculo por DFT (CHARLIER; GONZE; MICHENAUD, 1991).

O Hamiltoniano (5.16) é uma descrição efetiva da dinâmica do grafeno bicamada no empilhamento AB e é frequentemente utilizado no estudo de suas propriedades ópticas e eletrônicas do material (MCCANN; KOSHINO, 2013; ROZHKOV et al., 2016). Em contraste a relação de dispersão do grafeno monocamada, que é totalmente simétrica ao redor dos pontos de Dirac, o modelo (5.16) prediz uma distorção nas linhas de iso-energia ao redor dos pontos de Dirac, uma consequência da inclusão da amplitude entre camadas t_3 – a chamada deformação trigonal (CSERTI; CSORDÁS; DÁVID, 2007; KECHEDZHI et al., 2007; PREDIN; WENK; SCHLIEMANN, 2016).

No restante deste capítulo será suposto $t_4 = 0$, uma vez que este termo é o menos significativo quando comparado com as outras amplitudes (5.17). No espaço \mathbf{k} , o Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_{AB}$ é escrito na base $\{|A1(\mathbf{k})\rangle, |B1(\mathbf{k})\rangle, |A2(\mathbf{k})\rangle, |B2(\mathbf{k})\rangle\}$ ($|\alpha_i(\mathbf{k})\rangle = \hat{a}_{i\mathbf{k}}^{\dagger}|0\rangle$), como

$$\hat{\mathcal{H}}_{AB} = \begin{bmatrix} 0 & -t\Gamma(\mathbf{k}) & 0 & -t_3\Gamma^*(\mathbf{k}) \\ -t\Gamma^*(\mathbf{k}) & 0 & t_{\perp} & 0 \\ 0 & t_{\perp} & 0 & -t\Gamma(\mathbf{k}) \\ -t_3\Gamma(\mathbf{k}) & 0 & -t\Gamma^*(\mathbf{k}) & 0 \end{bmatrix}. \quad (5.18)$$

Além das amplitudes advindas da geometria da rede, dois termos adicionais podem ser incluídos na dinâmica, ambos associadas à abertura de um *gap* entre as bandas de energia do material (MCCANN; KOSHINO, 2013; PREDIN; WENK; SCHLIEMANN, 2016) – o termo de massa, $\hat{\mathcal{H}}_m$, e o termo de voltagem, $\hat{\mathcal{H}}_{\Lambda}$, dados por

$$\hat{\mathcal{H}}_m = \text{diag}\{m, -m, m, -m\}, \quad (5.19)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\Lambda} = \text{diag}\left\{\frac{\Lambda}{2}, \frac{\Lambda}{2}, -\frac{\Lambda}{2}, -\frac{\Lambda}{2}\right\}. \quad (5.20)$$

Enquanto o primeiro Hamiltoniano abre o *gap* de energia através de uma quebra de simetria entre as redes, o Hamiltoniano de voltagem quebra a simetria entre as camadas do material. O Hamiltoniano total é dado por

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{AB} + \hat{\mathcal{H}}_m + \hat{\mathcal{H}}_\Lambda = \begin{bmatrix} \frac{\Lambda}{2} + m & -t\Gamma(\mathbf{k}) & 0 & -t_3\Gamma^*(\mathbf{k}) \\ -t\Gamma^*(\mathbf{k}) & \frac{\Lambda}{2} - m & t_\perp & 0 \\ 0 & t_\perp & -\frac{\Lambda}{2} + m & -t\Gamma(\mathbf{k}) \\ -t_3\Gamma(\mathbf{k}) & -\frac{\Lambda}{2} - m & -t\Gamma^*(\mathbf{k}) & -\frac{\Lambda}{2} - m \end{bmatrix}. \quad (5.21)$$

Assim como as interações do íon aprisionado com lasers, apresentadas no capítulo anterior, podem ser manipuladas de modo a reproduzir a dinâmica da equação de Dirac, é possível construir um mapa entre o Hamiltoniano (5.21) do grafeno bicamada incluindo os termos de massa e voltagem e um Hamiltoniano modificado de Dirac, de tal modo que a dinâmica das excitações no material, em todo o espaço \mathbf{k} , reproduzirão a dinâmica relativística. Neste caso, como já comentado anteriormente, a descrição relativística é intrínseca ao sistema físico, e não manipulada como no caso dos íons aprisionados. Para obter a relação entre $\hat{\mathcal{H}}$ e um Hamiltoniano de Dirac no espaço dos *momenta*, escreve-se cada um dos termos de $\hat{\mathcal{H}}_{AB}$ como

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_\perp & 0 \\ 0 & t_\perp & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \frac{t_\perp}{2} (\hat{\alpha}_x - i\hat{\gamma}_y), \quad (5.22)$$

$$-t \begin{bmatrix} 0 & \Gamma(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ \Gamma^*(\mathbf{k}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Gamma(\mathbf{k}) \\ 0 & 0 & \Gamma^*(\mathbf{k}) & 0 \end{bmatrix} = -t \{ \text{Re}[\Gamma(\mathbf{k})] \hat{\gamma}_5 \hat{\alpha}_x - \text{Im}[\Gamma(\mathbf{k})] \hat{\gamma}_5 \hat{\alpha}_y \}, \quad (5.23)$$

$$-t_3 \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \Gamma^*(\mathbf{k}) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Gamma(\mathbf{k}) & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = -\frac{t_3}{2} \{ \text{Re}[\Gamma(\mathbf{k})] (\hat{\alpha}_x + i\hat{\gamma}_y) + \text{Im}[\Gamma(\mathbf{k})] (\hat{\alpha}_y - i\hat{\gamma}_x) \}, \quad (5.24)$$

e os termos de massa e voltagem como

$$\hat{\mathcal{H}}_m = m\hat{\gamma}_5\hat{\alpha}_z, \quad \hat{\mathcal{H}}_\Lambda = \frac{\Lambda}{2}\hat{\beta}. \quad (5.25)$$

As relações (5.22) - (5.25) permitem a construção do mapa entre o Hamiltoniano total $\hat{\mathcal{H}}$ e o Hamiltoniano de Dirac modificado (em unidades naturais $\hbar = c = 1$)

$$\hat{\mathcal{H}} = \mathbf{p} \cdot \hat{\boldsymbol{\alpha}} + M\hat{\beta} + \mathbf{W} \cdot \hat{\gamma}_5 \hat{\boldsymbol{\alpha}} + i\boldsymbol{\mathcal{E}} \cdot \hat{\boldsymbol{\gamma}}, \quad (5.26)$$

que, além dos termos de partícula livre $\mathbf{p} \cdot \hat{\boldsymbol{\alpha}} + M\hat{\beta}$, contém contribuições devido a um potencial pseudo-vetorial e tensorial (vide Tabela 1 do capítulo 3), $\mathbf{W} \cdot \hat{\gamma}_5 \hat{\boldsymbol{\alpha}}$ e $i\boldsymbol{\mathcal{E}} \cdot \hat{\boldsymbol{\gamma}}$. Comparando as Eqs. (5.22) - (5.25) com Eq. (5.26) identifica-se a seguinte correspondência entre parâmetros de Dirac e parâmetros do grafeno,

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &\leftrightarrow \frac{t_{\perp} - t_3 \text{Re}[\Gamma(\mathbf{k})]}{2} \mathbf{e}_x - \frac{t_3 \text{Im}[\Gamma(\mathbf{k})]}{2} \mathbf{e}_y, & M &\leftrightarrow \frac{\Lambda}{2}, \\ \mathbf{W} &\leftrightarrow -t \text{Re}[\Gamma(\mathbf{k})] \mathbf{e}_x + t \text{Im}[\Gamma(\mathbf{k})] \mathbf{e}_y + m \mathbf{e}_z, \\ \boldsymbol{\mathcal{E}} &\leftrightarrow \frac{t_3 \text{Im}[\Gamma(\mathbf{k})]}{2} \mathbf{e}_x - \frac{t_{\perp} + t_3 \text{Re}[\Gamma(\mathbf{k})]}{2} \mathbf{e}_y, \end{aligned} \quad (5.27)$$

Neste contexto, o Hamiltoniano *tight-binding* (5.21) simula o Hamiltoniano de Dirac em potenciais externos (5.26).

5.2.1 Autoestados e autoenergias do Hamiltoniano do grafeno bicamada

Os autoestados e autoenergias do Hamiltoniano (5.21) do grafeno bicamada podem ser determinados de uma maneira simples e eficaz através de seu mapa com o Hamiltoniano de Dirac modificado (5.26). Das propriedades das matrizes de Dirac, $\hat{\mathcal{H}}$ satisfaz a seguinte propriedade algébrica

$$\hat{\mathcal{H}}^2 = g_1 \hat{I}_4 + 2\hat{\mathcal{O}}, \quad (5.28)$$

onde $\hat{\mathcal{O}}$ é um operador de traço nulo dado por

$$\hat{\mathcal{O}} = (\mathbf{p} \cdot \mathbf{W}) \hat{\gamma}_5 + i(\mathbf{W} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}) \hat{\beta} \hat{\gamma}_5 - [M\mathbf{W} + (\mathbf{p} \times \boldsymbol{\mathcal{E}})] \cdot \hat{\gamma}_5 \hat{\boldsymbol{\gamma}}, \quad (5.29)$$

que satisfaz

$$\hat{\mathcal{O}}^2 = \frac{1}{4} (\hat{\mathcal{H}}^2 - g_1 \hat{I}_4)^2 = g_2 \hat{I}_4, \quad (5.30)$$

com

$$g_1 = \frac{1}{4} \text{Tr}[\hat{\mathcal{H}}^2] = p^2 + M^2 + W^2 + \boldsymbol{\mathcal{E}}^2, \quad (5.31)$$

e

$$\begin{aligned} g_2 &= \frac{1}{16} \text{Tr} \left[\left(\hat{\mathcal{H}}^2 - \frac{1}{4} \text{Tr}[\hat{\mathcal{H}}^2] \hat{I}_4 \right)^2 \right] = \\ &= M^2 W^2 + 2M\mathbf{W} \cdot (\mathbf{p} \times \boldsymbol{\mathcal{E}}) + |\mathbf{p} \times \boldsymbol{\mathcal{E}}|^2 + (\mathbf{p} \cdot \mathbf{W})^2 + (\mathbf{W} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}})^2. \end{aligned} \quad (5.32)$$

Tais propriedades são exatamente as necessárias para o emprego do método apresentado na seção 3.4.1. As matrizes densidade dos autoestados $\rho_{n,s} = |\psi_{n,s}\rangle \langle \psi_{n,s}|$ são dadas por

$$\rho_{n,s} = \frac{1}{4} \left[\hat{I}_4 + \frac{(-1)^n}{|\lambda_{n,s}|} \hat{\mathcal{H}} \right] \left[\hat{I}_4 + \frac{(-1)^s}{\sqrt{g_2}} \hat{\mathcal{O}} \right], \quad (5.33)$$

e a energia média do estado (5.33) corresponde aos autovalores $\lambda_{n,s}$ associados a $\rho_{n,s}$, calculados como soluções da equação $(\lambda_{n,s} - g_1)^2 = 4g_2$, i. e.

$$\lambda_{n,s} = \text{Tr}[\hat{\mathcal{H}}\rho_{n,s}] = (-1)^n \sqrt{g_1 + 2(-1)^s \sqrt{g_2}}. \quad (5.34)$$

Desta maneira, o espectro de energia de um estado de uma única excitação no espaço \mathbf{k} é obtido através do mapa (5.27), tal que os autovalores de energia (5.34) são dados explicitamente por (para $\Gamma(\mathbf{k}) = |\Gamma(\mathbf{k})|e^{i\phi(\mathbf{k})}$)

$$\begin{aligned} \lambda_{n,s}(\mathbf{k}) = & (-1)^n \left[\frac{1}{2} \left(2t^2 |\Gamma(\mathbf{k})|^2 + t_{\perp}^2 + t_3 |\Gamma(\mathbf{k})|^2 + 2m^2 + \frac{\Lambda^2}{2} \right. \right. \\ & \left. \left. + (-1)^s [4t^2 |\Gamma(\mathbf{k})|^2 (t_{\perp}^2 + \Lambda^2 + t_3^2 |\Gamma(\mathbf{k})|^2 - 2t_{\perp} t_3 \cos(3\phi(\mathbf{k}))) \right. \right. \\ & \left. \left. + (t_3 |\Gamma(\mathbf{k})|^2 - t_{\perp}^2 + 2m\Lambda)^2 \right]^{1/2}. \quad (5.35) \end{aligned}$$

Os dois valores inequivalentes de s (0 e 1) definem dois ramos energéticos compostos por duas bandas de energia, que correspondem a $n = 0$ e $n = 1$. Os autovalores de energia (5.35) apresentam pontos de extremo para valores específicos dos vetores de onda \mathbf{k} , conforme mostra o quadro esquerdo da Fig. 33 para o ramo $s = 1$, $t/t_{\perp} = 8.29$, and $t_3/t_{\perp} = 0.99$, valores em correspondência com os valores experimentais (5.17) (neste gráfico $m/t_{\perp} = \Lambda/t_{\perp} = 0$). Dois pontos extremos de energia ocorrem para $\Gamma(\mathbf{k}) = 0$, que correspondem aos dois pontos de Dirac $\mathbf{K}_{\pm} = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} (\sqrt{3}, \pm 1)$. Ao redor dos pontos de Dirac, as linhas de energia constante são distorcidas (gráfico da direita da Fig. 33), e para altos valores do parâmetro t_3/t_{\perp} pontos adicionais de mínimo, dados pelas condições $\cos(3\phi(\mathbf{k})) = 0$ e $|\Gamma(\mathbf{k})| = \frac{t_{\perp} t_3}{t^2}$, são identificados. O surgimento destes pontos é consequência da amplitude de salto t_3 do Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_{AB}$, que produz um efeito de distorção nas linhas de iso-energia – a chamada distorção trigonal (MCCANN; KOSHINO, 2013; ROZHKOV et al., 2016). Para $m = \Lambda = 0$, os pontos de Dirac correspondem a pontos de contato entre as bandas de energia, e valores não-nulos destes parâmetros produzem um gap de energia, conforme mostrado na Fig. 34. O ramo $s = 0$ sempre apresenta um gap entre as bandas de energia e, qualitativamente, seu perfil é similar ao do ramo $s = 1$.

5.3 Emaranhamento rede-camada

Os autoestados do Hamiltoniano (5.21), $|\psi_{n,s}\rangle$ ($n, s = \{0, 1\}$), são superposições da forma

$$|\psi_{n,s}(\mathbf{k})\rangle \equiv M_{n,s}^{A1} |A1(\mathbf{k})\rangle + M_{n,s}^{B1} |B1(\mathbf{k})\rangle + M_{n,s}^{A2} |A2(\mathbf{k})\rangle + M_{n,s}^{B2} |B2(\mathbf{k})\rangle, \quad (5.36)$$

e formalmente se comportam como os bispinores autoestados do Hamiltoniano (5.26). Conforme discutido anteriormente no Capítulo 3, os bispinores $|\psi_{n,s}\rangle$, são descritos em termos de uma estrutura de grupos $SU(2) \otimes SU(2)$ envolvendo seus dois graus de liberdade

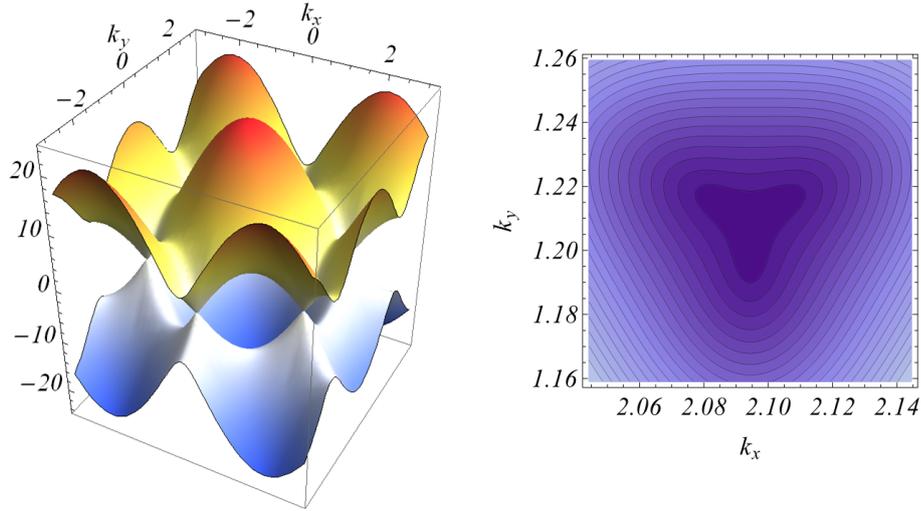


Figura 33 – (Esquerda) Bandas de energia para o ramo $s = 1$, $t/t_{\perp} = 8.29$, $t_3/t_{\perp} = 0.99$, e para $m/t_{\perp} = \Lambda/t_{\perp} = 0$. As bandas de energia se tocam nos cantos da primeira zona de Brillouin (pontos de Dirac). Próximo a tais pontos, o perfil de energia se aproxima a uma parábola em função de k e a relação de dispersão é formalmente a mesma da obtida da equação de Dirac com um termo de massa não-nulo. (Direta) Zoom ao redor do ponto de Dirac K_+ . As linhas de iso-energia são distorcidas devido a amplitude de salto t_3 – efeito de distorção trigonal. As linhas de energia constante possuem uma simetria de $\frac{2\pi}{3}$ ao redor destes pontos devido ao fator $\cos(3\phi(\mathbf{k}))$ na expressão (5.35). Para um valor nulo de t_3 , as linhas de energia constante são perfeitamente simétricas ao redor dos pontos de Dirac.

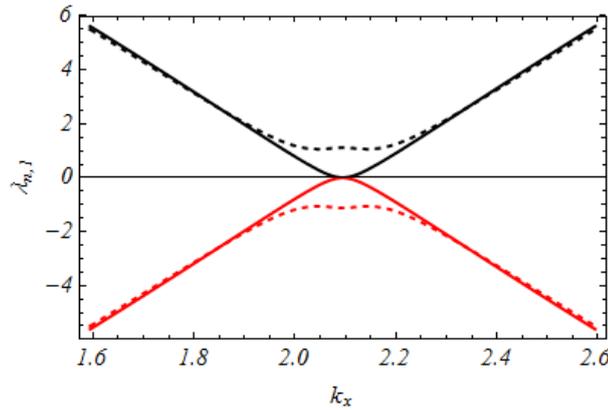


Figura 34 – Gráfico auxiliar para as bandas de energia do ramo $s = 1$ em função de k_x para $k_y = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}$, $t/t_{\perp} = 8.29$, $t_3/t_{\perp} = 0.99$, e para $m/t_{\perp} = \Lambda/t_{\perp} = 0$ (linhas sólidas) e $m/t_{\perp} = \Lambda/t_{\perp} = 1$ (linhas tracejadas). Para $m = \Lambda = 0$ as bandas $n = 0$ e $n = 1$ se tocam nos pontos de Dirac. Valores não nulos de m e Λ criam um gap de energia entre as bandas de valência e de condução, deformando a relação de dispersão.

internos: paridade intrínseca e spin. De fato, a forma $SU(2) \otimes SU(2)$ do Hamiltoniano

(5.26) para as matrizes de Dirac na representação usual (2.18) é

$$\hat{\mathcal{H}} = \mathbf{p} \cdot (\hat{\sigma}_x^{(P)} \otimes \hat{\sigma}^{(S)}) + M(\hat{\sigma}_z^{(P)} \otimes \hat{I}_2^{(S)}) + \mathbf{W} \cdot (\hat{I}_2^{(P)} \otimes \hat{\sigma}^{(S)}) - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot (\hat{\sigma}_y^{(P)} \otimes \hat{\sigma}^{(S)}),$$

e os biespinores correspondente são estados bipartite emaranhados entre spin e paridade intrínseca.

A relação entre o Hamiltoniano do grafeno $\hat{\mathcal{H}}_{AB}$ e o Hamiltoniano de Dirac modificado (5.26) também define uma correspondência entre os graus de liberdade discretos associados à equação de Dirac e os intrínsecos ao grafeno bicamada. Tais graus de liberdade discretos para o grafeno são identificados como rede (A or B) e camada (1 or 2) tal que o emaranhamento entre spin e paridade intrínseca das soluções da equação de Dirac são traduzidas em emaranhamento entre rede e camada para o grafeno. Os estados associados ao Hamiltoniano (5.21) podem então ser interpretados como estados de dois qubits através da correspondência com dois qubits

$$\begin{aligned} |A1\rangle &\equiv |00\rangle, & |B1\rangle &\equiv |01\rangle, \\ |A2\rangle &\equiv |10\rangle, & |B2\rangle &\equiv |11\rangle, \end{aligned} \quad (5.37)$$

que será adotada de agora em diante.

As propriedades de correlação dos autoestados de (5.26) podem ser calculadas através dos vetores de Bloch dos subsistemas em termos, por exemplo, da concorrência $C[\rho] = \sqrt{1 - (a^{(P)})^2} = \sqrt{1 - (a^{(S)})^2}$ que será adotada nesta seção como quantificador de emaranhamento. Em particular o vetor associado ao estado de spin $\mathbf{a}^{(S)}$ é dado por

$$\begin{aligned} \mathbf{a}^{(S)} &= \text{Tr}[(\hat{I}_2^{(P)} \otimes \hat{\sigma}^{(S)})\rho_{n,s}] = \\ &= \frac{(-1)^n}{|\lambda_{n,s}|} \left[\mathbf{W} + \frac{(-1)^s}{\sqrt{g_2}} [(\mathbf{p} \cdot \mathbf{W})\mathbf{p} + (\mathbf{W} \cdot \boldsymbol{\varepsilon})\boldsymbol{\varepsilon} + M(M\mathbf{W} + \mathbf{p} \times \boldsymbol{\varepsilon})] \right], \end{aligned} \quad (5.38)$$

e, através das relações com os parâmetros do grafeno (5.27), é possível quantificar o emaranhamento rede-camada dos autoestados descritos por $\rho_{n,s}$. Os resultados não dependem do número quântico n e, portanto, o perfil de emaranhamento não depende da banda a qual o estado pertence. A Figura 35 mostra os gráficos da concorrência em função das componentes do vetor de onda \mathbf{k} , k_x e k_y , na primeira zona de Brillouin para $m = 0$ e $\Lambda = 0$, ou seja quando a dinâmica é dada apenas por (5.18). O emaranhamento entre rede e camada é altamente concentrado ao redor do ponto de Dirac. Entretanto, para $m = \Lambda = 0$ a função de onda é singular em \mathbf{K}_{\pm} e, neste ponto, a fórmula (5.33) gera estados mistos separáveis.

Além disso, para $m \neq 0$ e/ou $\Lambda \neq 0$, estados com $\mathbf{k} = \mathbf{K}_{\pm}$ são separáveis para $s = 1$. Para $s = 0$ estados com *momentum* no ponto de Dirac possuem concorrência dada por

$$C[\rho_{n,0}(\mathbf{K}_{\pm})] = \frac{4t_{\perp}^2}{4t_{\perp}^2 + (2m + \Lambda)^2}. \quad (5.39)$$

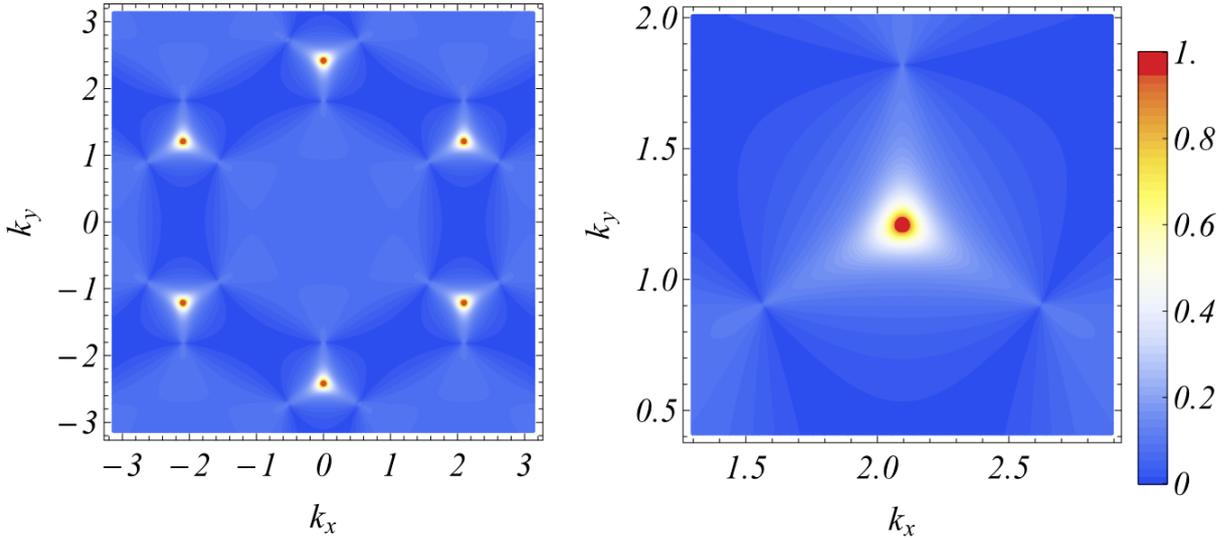


Figura 35 – (Esquerda) Concorrência no espaço \mathbf{k} para $s = 1$, $m = 0$, $\Lambda = 0$ e mesmo conjunto de parâmetros utilizados na Fig. 33. (Direita) Zoom do painel esquerdo ao redor do ponto de Dirac K_+ . Quando ambos os termos de massa e voltagem são nulos, i.e. para o Hamiltoniano Eq. (5.18), as correlações quânticas entre rede e camada são maximizadas para estados com vetores de onda próximos aos pontos de Dirac.

O efeito do termo de voltagem Λ para estados ao redor do ponto de Dirac \mathbf{K}_+ é mostrado na Fig. 36. O termo de voltagem espalha a concorrência pelo espaço recíproco, distribuindo o emaranhamento ao redor dos pontos de Dirac. Quanto maior o valor de Λ , mais distribuído o emaranhamento no espaço k . Entretanto, no limite $\Lambda/t_\perp \rightarrow \infty$, a concorrência se anula para todos os vetores de onda.

O emaranhamento rede-camada decresce rapidamente em função de m/t_\perp para $\Lambda/t_\perp = 0$. A Figura 37 mostra a concorrência no espaço \mathbf{k} ao redor do ponto de Dirac \mathbf{K}_+ para o mesmo conjunto de parâmetros utilizados na Fig. 35, com $\Lambda/t_\perp = 0$ e $m/t_\perp = 0.1$ (primeiro gráfico), $m/t_\perp = 0.5$ (segundo gráfico) e $m/t_\perp = 1.0$ (terceiro gráfico). O parâmetro de massa, de maneira geral, suprime o emaranhamento rede-camada.

A Figura 38 mostra a concorrência na primeira zona de Brillouin para $(\Lambda/t_\perp, m/t_\perp) = (0, 0)$ (primeiro gráfico), $(\Lambda/t_\perp, m/t_\perp) = (10, 0)$ (segundo gráfico) e $(\Lambda/t_\perp, m/t_\perp) = (0, 1)$ (terceiro gráfico). Enquanto o termo de voltagem espalha o emaranhamento pelo espaço \mathbf{k} , o termo de massa suprime a correlação. Estados com *momentum* no centro da primeira zona de Brillouin (baixos valores de k) são separáveis.

A distorção trigonal identificada no espectro de energia do Hamiltoniano (5.18) tem implicações em outras propriedades físicas do grafeno bicamada (MCCANN; KOSHINO, 2013; ROZHKOV et al., 2016; CSERTI; CSORDÁS; DÁVID, 2007; KECHEDZHI et al., 2007) e no espectro de emaranhamento de seus autoestados (PREDIN; WENK; SCHLIE-

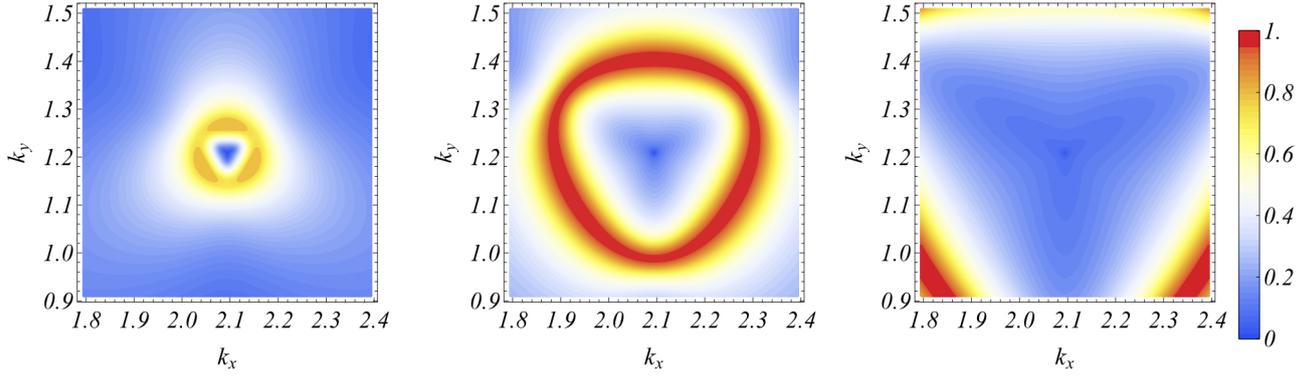


Figura 36 – Concorrência no espaço \mathbf{k} para $s = 1$ ao redor de \mathbf{K}_+ , para o mesmo conjunto de parâmetros utilizados na Fig. 35, com $m/t_\perp = 0$ e $\Lambda/t_\perp = 1$ (primeiro gráfico), $\Lambda/t_\perp = 5$ (segundo gráfico) e $\Lambda/t_\perp = 10$ (terceiro gráfico). A inclusão do termo de voltagem (5.20) espalha o emaranhamento rede-camada pelo espaço k . Considerando a coordenada angular no plano $k_x - k_y$, estados maximamente emaranhados correspondem a região vermelha ao redor do ponto de Dirac.

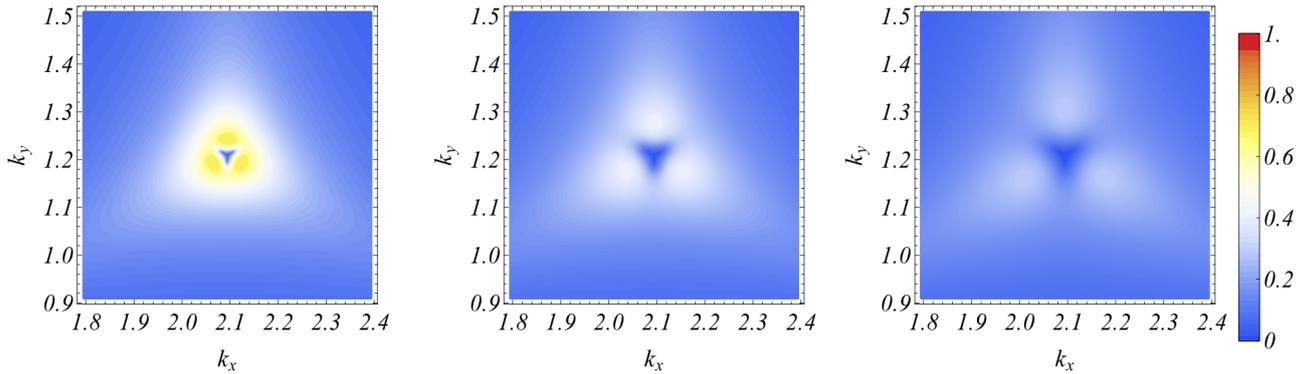


Figura 37 – Concorrência no espaço \mathbf{k} para $s = 1$ ao redor do ponto de Dirac \mathbf{K}_+ , para o mesmo conjunto de parâmetros utilizado na Figura 35, para $\Lambda/t_\perp = 0$, com $m/t_\perp = 0.1$ (primeiro gráfico), $m/t_\perp = 0.5$ (segundo gráfico) e $m/t_\perp = 1$ (terceiro gráfico). O termo de massa (5.19) destrói o emaranhamento e para $m/t_\perp \rightarrow \infty$, a correlação se anula em toda a primeira zona de Brillouin.

MANN, 2016). É, então, interessante investigar os efeitos da amplitude t_3 no emaranhamento rede-camada. A Figura 39 mostra os gráficos da concorrência sobrepostos pelas correspondentes linhas de iso-energia (linhas negras) e pelas linhas de iso-emaranhamento (linhas verdes) para $t_3/t_\perp = 0.997$ (primeira linha), $t_3/t_\perp = 5$ (segunda linha) e $t_3/t_\perp = 10$ (terceira linha), e para $m/t_\perp = \Lambda/t_\perp = 0$ (primeira coluna), $m/t_\perp = 0$ e $\Lambda/t_\perp = 1$ (segunda coluna), e $m/t_\perp = 1$ e $\Lambda/t_\perp = 0$ (terceira coluna). A distorção exibida pelas linhas de iso-energia também é identificada no padrão de concorrência, com mesma simetria angular invariante diante rotações de $\frac{2\pi}{3}$. Na realidade, as linhas de iso-emaranhamento possuem dois padrões de simetria: o primeiro segue as linhas de iso-energia e o segundo é rotacio-

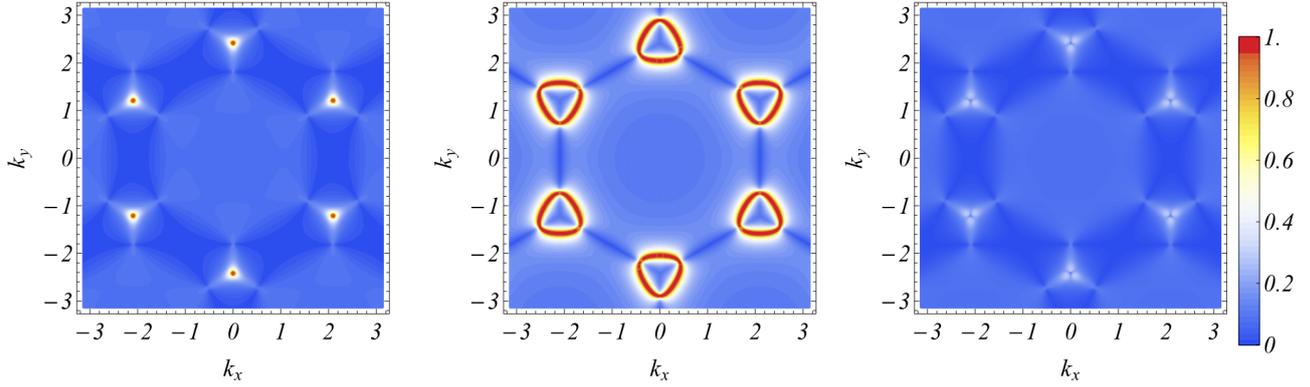


Figura 38 – Comparação do perfil de emaranhamento para \mathbf{k} na primeira zona de Brillouin. Os gráficos são para $(\Lambda/t_{\perp}, m/t_{\perp}) = (0, 0)$ (primeiro gráfico), $(\Lambda/t_{\perp}, m/t_{\perp}) = (10, 0)$ (segundo gráfico) e $(\Lambda/t_{\perp}, m/t_{\perp}) = (0, 1)$ (terceiro gráfico), outros parâmetros são fixados nos mesmo valores utilizados na Fig. 35.

nado com respeito ao padrão das linhas de iso-energia. Para t_3 nulo, o emaranhamento recupera sua simetria ao redor dos pontos de Dirac e um valor crescente de t_3/t_{\perp} leva a um crescimento geral do emaranhamento rede-camada.

5.4 Dinâmica dos estados rede-camada maximamente emaranhados - efeitos de ruídos não-markovianos

Como no caso dos íons aprisionados, o formalismo utilizado para calcular os autovalores e autoestados do Hamiltoniano do grafeno bicamada (5.21) permite o estudo da evolução temporal de um estado de uma partícula arbitrário do sistema e a inclusão de efeitos de ruído descrevendo flutuações aleatórias dos termos de massa e de voltagem.

Dado um estado genérico de uma partícula do grafeno bicamada, representado no espaço dos *momenta* e dado em termos do operador densidade $\rho(0)$, sua evolução temporal é construída, utilizando a relação de completeza dos autoestados do Hamiltoniano $\sum_{\{n,s\}} \rho_{n,s} = \hat{I}_4$, sendo dada por

$$\rho(\tau) = e^{-i\hat{H}\tau} \rho(0) e^{i\hat{H}\tau} = \sum_{n,s=0}^1 \sum_{m,l=0}^1 e^{-i(\lambda_{n,s} - \lambda_{m,l})\tau} \rho_{n,s} \rho(0) \rho_{m,l}, \quad (5.40)$$

com os $\rho_{n,s}$ construídos através de (5.33). Dada a dinâmica obtida da equação acima, é possível obter o valor médio de qualquer observável \hat{A} através de $\langle \hat{A} \rangle(\tau) = \text{Tr}[\hat{A}\rho(\tau)]$. Em particular, a probabilidade de sobrevivência do estado $\rho(\tau)$ é calculado por

$$\mathcal{P}_{\rho(0)}(\tau) = \text{Tr}[\rho(0)\rho(\tau)] = \sum_{n,s=0}^1 \sum_{m,l=0}^1 e^{-i(\lambda_{n,s} - \lambda_{m,l})\tau} \text{Tr}[\rho(0)\rho_{n,s}\rho(0)\rho_{m,l}]. \quad (5.41)$$

Neste *framework* é possível reconstruir o comportamento dinâmico de qualquer estado de uma partícula sob a dinâmica especificada pelo Hamiltoniano (5.21), uma vez que os

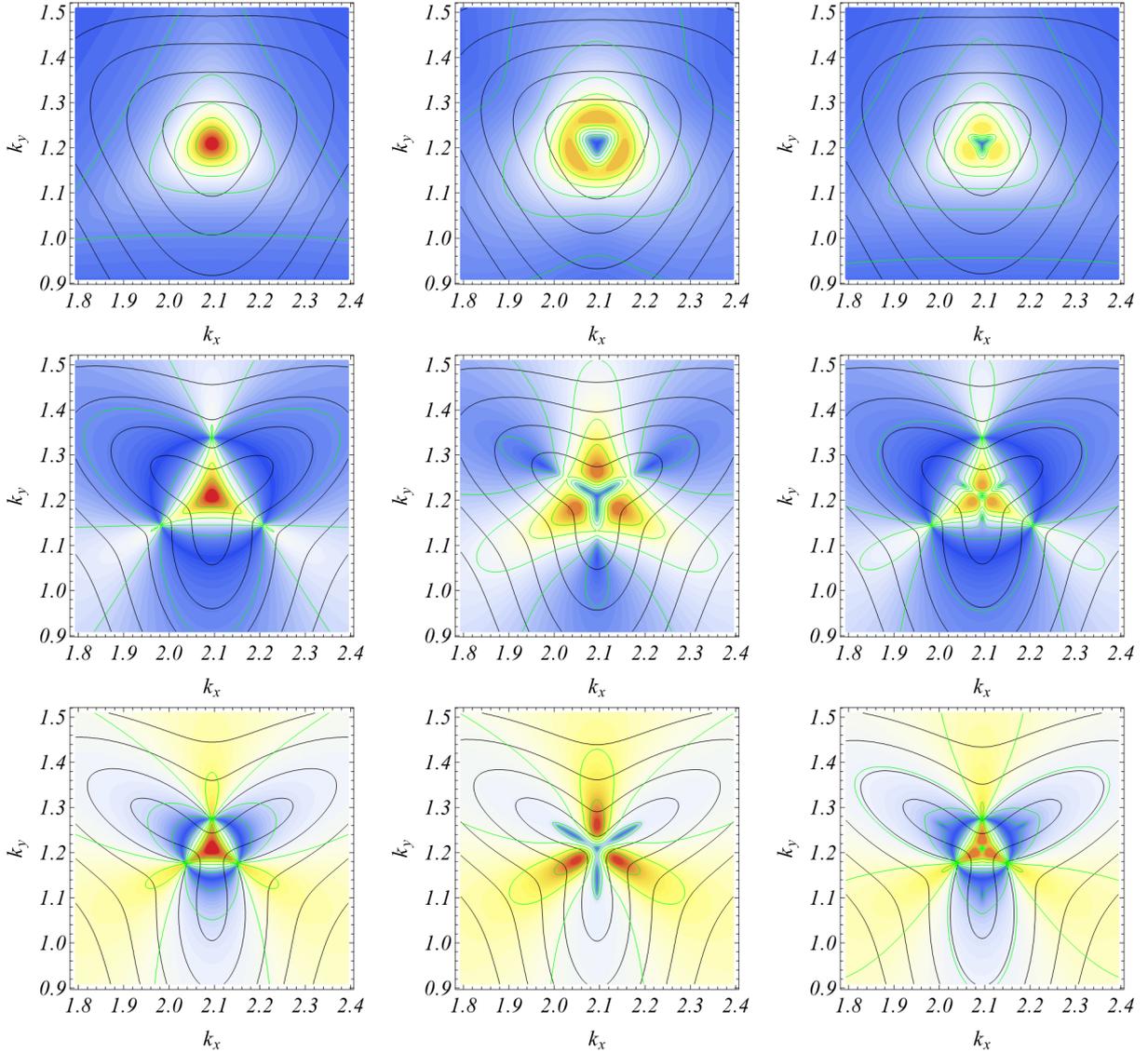


Figura 39 – Gráficos da concorrência para vetores de onda próximos ao ponto de Dirac para $t_3/t_\perp = 0.997$ (primeira linha), $t_3/t_\perp = 5$ (segunda linha) e $t_3/t_\perp = 10$ (terceira linha), para $m/t_\perp = \Lambda/t_\perp = 0$ (primeira coluna), $m/t_\perp = 0$ e $\Lambda/t_\perp = 1$ (segunda coluna), e $m/t_\perp = 1$ e $\Lambda/t_\perp = 0$ (terceira coluna). Outros parâmetros estão em correspondência com os utilizados nas outras figuras desta seção. As linhas pretas correspondem às linhas de iso-energia enquanto as linhas verdes correspondem às linhas de iso-concorrência. A concorrência exibe simetria polar de $\frac{2\pi}{3}$ e o emaranhamento possui um comportamento similar ao das autoenergias devido a amplitude t_3 .

autoestados $\rho_{n,s}$ são dados em termos dos autoestados de Dirac do Hamiltoniano (5.26). Com a evolução temporal (5.40) de um estado arbitrário é possível, também, calcular o emaranhamento rede-camada que, no caso desta seção, será dado pela negatividade $\mathcal{N}[\rho]$ (3.44).

De particular interesse é a dinâmica de estados maximamente emaranhados. No

caso do grafeno bicamada, estados que apresentam emaranhamento máximo entre rede e camada são construídos como $\rho_C(\tau = 0) = |\psi_C\rangle\langle\psi_C|$ e $\rho_W(\tau = 0) = |\psi_W\rangle\langle\psi_W|$:

$$\begin{aligned} |\psi_C\rangle &= \frac{a_1^\dagger(\mathbf{k}) + b_2^\dagger(\mathbf{k})}{\sqrt{2}}|0\rangle = \frac{|A1(\mathbf{k})\rangle + |B2(\mathbf{k})\rangle}{\sqrt{2}}, \\ |\psi_W\rangle &= \frac{a_2^\dagger(\mathbf{k}) + b_1^\dagger(\mathbf{k})}{\sqrt{2}}|0\rangle = \frac{|A2(\mathbf{k})\rangle + |B1(\mathbf{k})\rangle}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (5.42)$$

As evoluções temporais de $\rho_C(\tau = 0)$ e $\rho_W(\tau = 0)$ são obtidas através de Eq. (5.40), e as correspondentes probabilidades de sobrevivência $\mathcal{P}_C(\tau)$ e $\mathcal{P}_W(\tau)$ são calculadas através de Eq. (5.41). Para um dado vetor de onda \mathbf{k} , $\rho_C(\tau = 0)$ e $\rho_W(\tau = 0)$, o emaranhamento entre rede e camada é máximo $\mathcal{N}[\rho_{C(W)}(0)] = 1$. Uma vez que a evolução temporal dos estados é calculada, o emaranhamento em função do tempo é obtido através da negatividade associada.

Para os estados ρ_C e ρ_W com vetores de onda no canto da primeira zona de Brillouin, a análise da evolução temporal se simplifica. O Hamiltoniano (5.21) para $\mathbf{k} = \mathbf{K}_+$ (e para $m = 0$) é dado por

$$\hat{H}_{\mathbf{k}=\mathbf{K}_+} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} +\Lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +\Lambda & 2t_\perp & 0 \\ 0 & 2t_\perp & -\Lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\Lambda \end{bmatrix}, \quad (5.43)$$

uma forma matricial composta por dois blocos associados aos espaços $\{|00\rangle, |11\rangle\}$ e $\{|01\rangle, |10\rangle\}$. Para $\mathbf{k} = \mathbf{K}_+$, os autoestados obtidos da Eq. (5.33) são explicitamente dados por

$$\rho_{n,0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{(-1)^n \Lambda + \sqrt{4t_\perp^2 + \Lambda^2}}{2\sqrt{4t_\perp^2 + \Lambda^2}} & (-1)^n \frac{t_\perp}{\sqrt{4t_\perp^2 + \Lambda^2}} & 0 \\ 0 & (-1)^n \frac{t_\perp}{\sqrt{4t_\perp^2 + \Lambda^2}} & \frac{(-1)^{n+1} \Lambda + \sqrt{4t_\perp^2 + \Lambda^2}}{2\sqrt{4t_\perp^2 + \Lambda^2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \rho_{n,1} = \begin{bmatrix} \delta_{n,0} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \delta_{n,1} \end{bmatrix}, \quad (5.44)$$

de modo que $\rho_{n,0}$ é uma combinação linear dos estados $|01\rangle$ e $|10\rangle$, e $\rho_{n,1}$ é uma combinação linear de $|00\rangle$ e $|11\rangle$. Portanto, os estados $|\psi_C\rangle$ e $|\psi_W\rangle$ são combinações lineares dos autoestados descritos por $\rho_{0,0}$ e $\rho_{1,0}$ (para $|\psi_W\rangle$), e dos autoestados descritos por $\rho_{0,1}$ e $\rho_{1,1}$ (para $|\psi_C\rangle$), de modo que a evolução temporal destes estados é simplificada neste caso.

Devido a estrutura de blocos do Hamiltoniano Eq. (5.43), $\rho_C(\tau)$ não se sobrepõe a $\rho_{n,0}$, e $\rho_W(\tau)$ não se sobrepõe a $\rho_{n,1}$. Das Eqs. (5.40) e (5.44) a expressão explícita para $\rho_C(\tau)$ é,

$$\rho_C(\tau) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & e^{-i\Lambda\tau} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ e^{i\Lambda\tau} & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (5.45)$$

e, para $\rho_W(\tau)$

$$\rho_W(\tau) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \mathcal{A}(\tau) & \mathcal{B}(\tau) & 0 \\ 0 & \mathcal{B}^*(\tau) & 1 + \mathcal{A}(\tau) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (5.46)$$

com

$$\mathcal{A} = \frac{2\Lambda \left(t_{\perp} - \cos \left(\tau \sqrt{\Lambda^2 + 4t_{\perp}^2} \right) \right)}{\Lambda^2 + 4t_{\perp}^2}, \quad (5.47)$$

$$\mathcal{B} = \frac{4t_{\perp}}{\Lambda^2 + 4t_{\perp}^2} \left[t_{\perp} + \frac{\Lambda}{4} \left(\Lambda \cos \left(\tau \sqrt{4t_{\perp}^2 + \Lambda^2} \right) - i \sqrt{\Lambda^2 + 4t_{\perp}^2} \sin \left(\tau \sqrt{4t_{\perp}^2 + \Lambda^2} \right) \right) \right]. \quad (5.48)$$

As expressões correspondentes para as probabilidades de sobrevivência são dadas por

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_C &= \text{Tr}[\rho_C(\tau) \rho_C(\tau = 0)] = \cos^2 \left(\frac{1}{2} \Lambda \tau \right), \\ \mathcal{P}_W &= \text{Tr}[\rho_W(\tau) \rho_W(\tau = 0)] \\ &= \frac{1}{2(\Lambda^2 + 4t_{\perp}^2)} \left[8t_{\perp}^2 + \Lambda^2 \left(1 + \cos \left(\tau \sqrt{4t_{\perp}^2 + \Lambda^2} \right) \right) \right], \end{aligned} \quad (5.49)$$

e as expressões para as negatividades são

$$\begin{aligned} \mathcal{N}[\rho_C(\tau)] &= 1, \\ \mathcal{N}[\rho_W(\tau)] &= \frac{1}{\Lambda^2 + 4t_{\perp}^2} \left[16t_{\perp}^4 + \Lambda^4 + \right. \\ &\quad \left. + 4\Lambda^2 t_{\perp}^2 \left(2 \cos \left(\tau \sqrt{4t_{\perp}^2 + \Lambda^2} \right) + \sin^2 \left(\tau \sqrt{4t_{\perp}^2 + \Lambda^2} \right) \right) \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (5.50)$$

A Figura 40 mostra as probabilidades de sobrevivência (linhas contínuas) e negatividades (linhas tracejadas) para os estados iniciais $\rho_C(0)$ (linhas pretas) e $\rho_W(0)$ (linhas cinzas) com vetores de onda no ponto de Dirac \mathbf{K}_+ , dadas explicitamente pelas Eqs. (5.49)-(5.50), em função do parâmetro adimensional $t_{\perp}\tau$ (em unidades naturais). Com respeito aos valores experimentais dos parâmetros do Hamiltoniano *tight-binding* (5.17), a amplitude t_{\perp} define a escala de tempo $\tau_{\perp} = t_{\perp}^{-1} \sim 0.3 \text{ eV}^{-1}$. Para este gráfico, e os seguintes desta seção, será utilizado $\Lambda/t_{\perp} = 1$ tal que Λ e t_{\perp} possuem mesma magnitude e são associados à mesma escala de tempo τ_{\perp} . O padrão de oscilações quânticas das probabilidades de sobrevivência possuem uma periodicidade bem definida pelos períodos característicos:

$$\tau_C = 2\pi \left(\frac{\Lambda}{2} \right)^{-1}, \quad \text{and} \quad \tau_W = 2\pi \left(\Lambda^2 + 4t_{\perp}^2 \right)^{-1/2}, \quad (5.51)$$

para ρ_W e ρ_C , respectivamente. Os períodos são definidos pelas diferenças entre as autoenergias. Para $\Lambda/t_{\perp} = 1$, os períodos são relacionados a escala de tempo τ_{\perp} por $\tau_C = 4\pi\tau_{\perp} \sim 3.8 \text{ eV}^{-1}$ e $\tau_W = 2\pi\tau_{\perp}/\sqrt{5} \sim 2.8 \text{ eV}^{-1}$. A amplitude de oscilação associada ao estado ρ_C é limitada pela evolução entre o estado inicial e um estado ortogonal $|\psi_{\bar{C}}\rangle = (|A1(\mathbf{K}_+)\rangle - |B2(\mathbf{K}_+)\rangle)/\sqrt{2}$. As expressões (5.50) mostram explicitamente que o

emaranhamento do estado ρ_C não é afetado pela evolução temporal, enquanto o emaranhamento rede-camada do estado $\rho_W(\tau = 0)$ oscila, com platôs de emaranhamento máximo definidos pelo período característico τ_W .

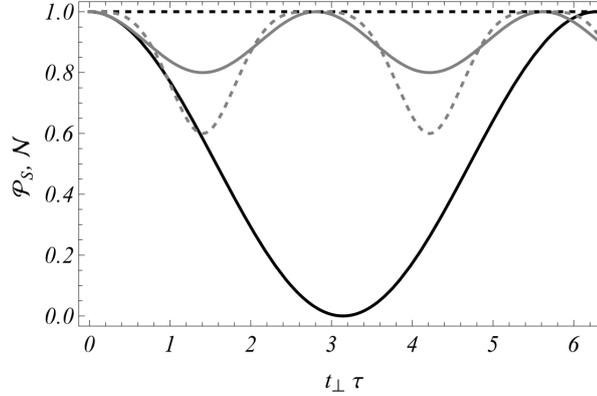


Figura 40 – Probabilidades de sobrevivência (linhas contínuas) e emaranhamento entre rede e camada (linhas tracejadas) em função do parâmetro adimensional $t_{\perp}\tau$ para os estados $\rho_C(\tau = 0)$ (linhas pretas) e $\rho_W(\tau = 0)$ (linhas cinzas), com $\Lambda/t_{\perp} = 1$. Ambas as probabilidades de sobrevivência oscilam com o tempo devido a sobreposição entre os estados iniciais e diferentes autoestados do Hamiltoniano, e as oscilações exibem uma periodicidade bem definida dada por (5.51). O estado ρ_C mantém seu emaranhamento total durante a evolução temporal, enquanto a negatividade do estado ρ_W oscila com a mesma frequência de sua probabilidade de sobrevivência.

5.4.1 Inclusão do ruído não-Markoviano de Ornstein-Uhlenbeck

Assim como o apresentado na seção 4.4, o formalismo considerado permite a inclusão de efeitos de ruídos. Será considerado o ruído local com Hamiltoniano da forma

$$\hat{\mathcal{H}}_{noise}(\tau) = \frac{\Lambda'(\tau)}{2} \hat{\sigma}_z^{(1)} \otimes \hat{I}_2^{(2)} + \frac{m'(t)}{2} \hat{I}_2^{(1)} \otimes \hat{\sigma}_z^{(2)}. \quad (5.52)$$

que afeta separadamente os graus de liberdade rede e camada. Diferente da seção 4.4.2, aqui será suposto que as flutuações $\Lambda'(\tau)$ e $m'(\tau)$ são modelados por processos de Ornstein-Uhlenbeck, caracterizados pelas propriedades de valor médio (KUBO; TODA; HASHITSUME, 1991; YU, 2010)

$$\langle A(\tau) \rangle = 0, \quad \langle A(\tau_i) A(\tau_j) \rangle = \frac{\Gamma_A \nu}{2} e^{-\nu |\tau_i - \tau_j|} \quad (A = \Lambda', m'). \quad (5.53)$$

As flutuações assim descritas são não-Markovianas, com tempo de correlação definidos pelo parâmetro de largura de banda ν , e possuem um limite Markoviano bem definido $\lim_{\nu \rightarrow \infty} \langle A(\tau) A(s) \rangle = \Gamma_A \delta(\tau - s)$, ou seja, no limite de largura de banda infinita, ou de tempo de correlação nulo $T = \nu^{-1}$. Neste limite, este ruído se torna um ruído local usual, conforme descrito pelas Eqs.(4.69) Apesar da dinâmica não-Markoviana implicar

em efeitos de memória incluídos através de integrais sobre tempos anteriores ao inicial (NAKAJIMA, 1958), sob condições particulares é possível incluir os efeitos de memória através de coeficientes dependentes do tempo (BREUER; KAPPLER; PETRUCCIONE, 1999; STRUNZ; YU, 2004; YU, 2004). Este é o caso dos efeitos de memória incluídos através de processos de Ornstein-Uhlenbeck (YU, 2010).

Seguindo o mesmo procedimento da seção 4.4, a evolução temporal do operador densidade, na representação de interação, é escrita como

$$\tilde{\rho}(\tau) = \sum_{\mu=1}^4 K_{\mu}^{\dagger}(\tau) \rho(0) K_{\mu}(\tau), \quad (5.54)$$

onde K_{μ} são os operadores de Kraus para o ruído considerado e dados explicitamente por (YU, 2010)

$$\begin{aligned} K_1(\tau) &= E_1(\tau) \otimes E_1(\tau), & K_2 &= E_1(\tau) \otimes E_2(\tau), \\ K_3(\tau) &= E_2(\tau) \otimes E_1(\tau), & K_4 &= E_2(\tau) \otimes E_2(\tau), \end{aligned} \quad (5.55)$$

onde

$$E_1(\tau) = \begin{bmatrix} p(\tau) & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad E_2(\tau) = \begin{bmatrix} \sqrt{1-p^2(\tau)} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (5.56)$$

e os coeficientes dependentes do tempo $p(\tau)$ são dados em termos de Γ e ν por

$$p(\tau) = \exp[-f(\tau)], \quad f(\tau) = \frac{\Gamma}{2} \left[\tau + \frac{1}{\nu} (e^{-\nu\tau} - 1) \right]. \quad (5.57)$$

A evolução completa do estado na representação de Schrödinger é dada então como

$$\begin{aligned} \rho(\tau) &= e^{i\mathcal{H}\tau} \tilde{\rho}(\tau) e^{-i\mathcal{H}\tau} \\ &= \sum_{n,s=0}^1 \sum_{m,l=0}^1 \sum_{\mu} e^{-i(\lambda_{n,s} - \lambda_{m,l})\tau} \rho_{n,s} K_{\mu}^{\dagger}(\tau) \rho(0) K_{\mu}(\tau) \rho_{m,l}, \end{aligned} \quad (5.58)$$

e, em particular, a probabilidade de sobrevivência de um estado arbitrário $\rho(0)$ é

$$\mathcal{P}_{\rho(0)}(\tau) = \text{Tr}[\rho(0)\rho(\tau)] = \sum_{\mu=1}^4 \sum_{n,s=0}^1 \sum_{m,l=0}^1 e^{-i(\lambda_{n,s} - \lambda_{m,l})\tau} \text{Tr}[\rho(0)\rho_{n,s} K_{\mu}^{\dagger}(\tau) \rho(0) K_{\mu}(\tau) \rho_{m,l}]. \quad (5.59)$$

Desta maneira é possível descrever como o emaranhamento rede-camada é afetado pelo ruído não-Markoviano e como os efeitos de memória descritos em termos do parâmetro ν , influenciam a dinâmica dos estados de uma partícula do grafeno bicamada.

Como primeiro *approach*, considera-se o efeito do ruído Eq. (5.52) nas propriedades de emaranhamento de um estado preparado inicialmente como um autoestado do Hamiltoniano (5.21), com vetor de onda no ponto de Dirac \mathbf{K}_+ . A Figura 41 mostra as probabilidades de sobrevivência e negatividade de um estado inicialmente preparado como o autoestado ρ_{00} (c.f. 5.33) em função do parâmetro $t_{\perp} \tau$, para $\nu/t_{\perp} = 0.01$ (linhas

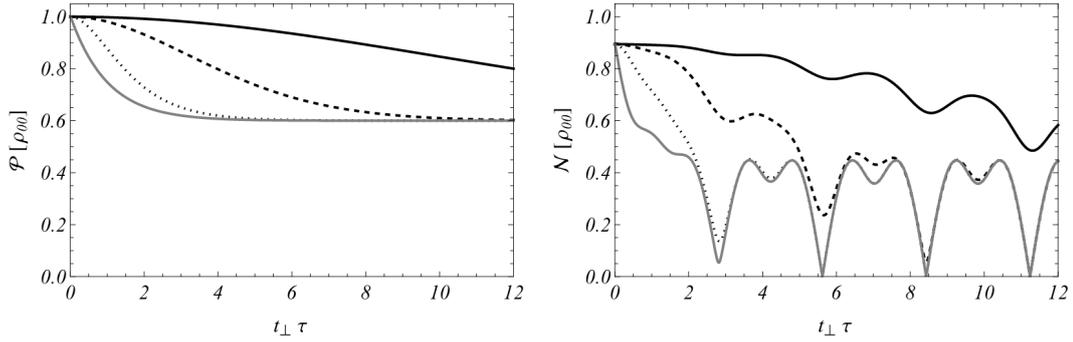


Figura 41 – Probabilidade de sobrevivência (esquerda) e negatividade (direita) para um estado inicialmente preparado como o autoestado ρ_{00} do Hamiltoniano (5.21) sob influência do ruído não-Markoviano. Os gráficos são para larguras de banda $\nu/t_{\perp} = 0.01$ (linhas grossas), 0.1 (linhas tracejadas), 1 (linhas pontilhadas) e $\nu \rightarrow \infty$ (linhas cinzas), para o estado com vetor de onda no ponto de Dirac e outros parâmetros em correspondência com os da Fig. 40. Enquanto a probabilidade de sobrevivência apresenta um decaimento exponencial, o emaranhamento do estado tende a um comportamento oscilatório. Para $\tau \gg 1/t_{\perp}$, o emaranhamento não depende de ν .

grossas), 0.1 (linhas tracejadas), 1 (linhas pontilhadas) e no limite Markoviano $\nu/t_{\perp} \rightarrow \infty$ (linhas cinzas), descrevendo os efeitos de diferentes ordens de escala temporal dos efeitos de memória. Por exemplo, para $\nu/t_{\perp} = 0.01$, a escala de memória do ambiente, τ_{mem} , é da ordem de $\sim 1/\nu = 10^2 \tau_{\perp}$ que, para os valores experimentais Eq. (5.17) é $\sim 38.1 \text{ eV}^{-1}$. Por outro lado, no limite Markoviano $\tau_{\perp} \gg \tau_{mem}$, os efeitos de memórias estão relacionados a escalas de tempo muito menores que a escala característica da evolução temporal associada ao parâmetro t_{\perp} . Neste gráfico, e nos restantes desta seção, é utilizado $\Gamma/t_{\perp} = 1$, equivalente a definir, no limite Markoviano, a ação do ruído em uma escala de tempo igual a escala da evolução livre dada por τ_{\perp} . Os outros parâmetros estão em correspondência com os adotados na Fig. 40.

As flutuações aleatórias transformam o estado inicial em uma mistura estatística e a probabilidade de sobrevivência apresenta um decaimento monotônico. No limite Markoviano, a probabilidade de sobrevivência apresenta um perfil de decaimento exponencial e o emaranhamento rede-camada também é degradado pelo ruído, apesar do estado evoluído no tempo apresentar oscilações de emaranhamento. Para larguras de banda pequenas, as características iniciais do estado são preservadas por um período de tempo maior e para $\tau \gg 1/t_{\perp}$ a dependência temporal do emaranhamento não depende de ν .

Estados preparados inicialmente nas configurações de máximo emaranhamento (5.42) possuem emaranhamento destruído pelo ruído. A Figura 42 apresenta as probabilidades de sobrevivência (coluna da esquerda) e o emaranhamento (coluna da direita) para o estado inicial ρ_C (primeira linha) e ρ_W (segunda linha). Similar aos resultados apresentados na Fig. 41, ρ_C e ρ_W são evoluem para configurações diferentes da inicial

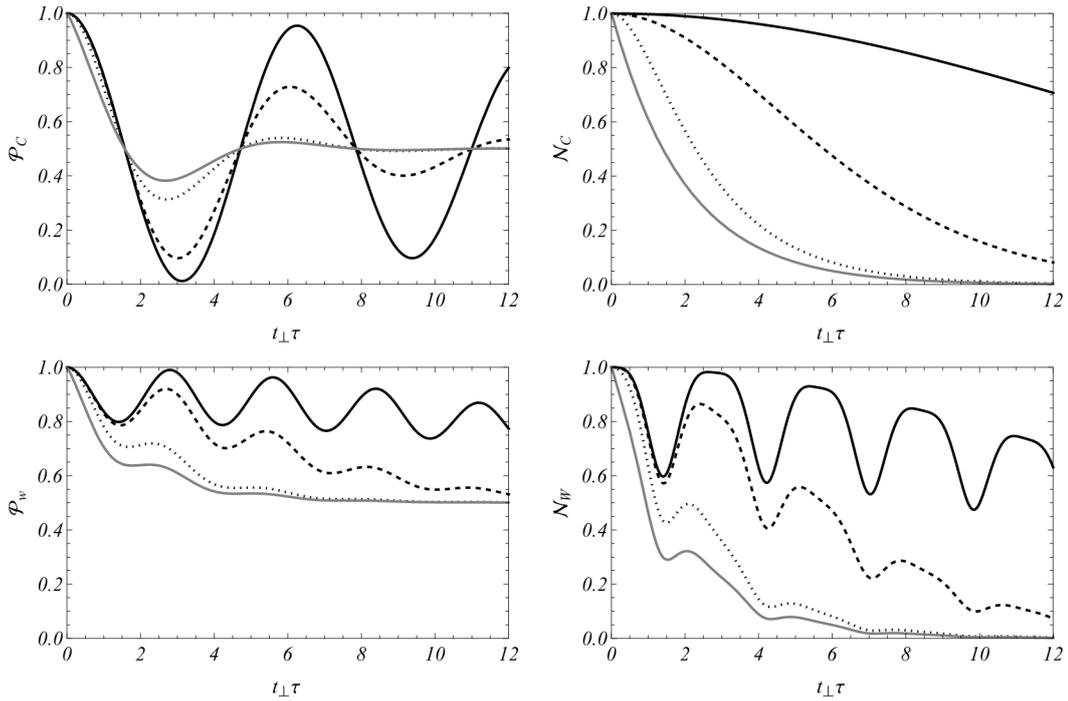


Figura 42 – Probabilidade de sobrevivência (coluna da esquerda) e negatividade (coluna da direita), para os estados iniciais (5.42) ρ_C (primeira linha) e ρ_W (segunda linha) sob o ruído não-Markoviano. Os parâmetros e estilos de linha estão em correspondência com os da Fig. 41. A perda de emaranhamento devido ao ruído possui um perfil exponencial para ρ_C e um comportamento oscilatório amortecido para ρ_W . Larguras de banda pequenas (i.e. tempos de correlação altos) de modo geral preservam as características iniciais dos estados.

devido ao ruído. Oscilações amortecidas levam o sistema assintoticamente a uma mistura estatística com 50% de sua configuração inicial. Para ambos os estados, o emaranhamento também é degradado. O emaranhamento rede-camada do estado ρ_C exibe um decaimento exponencial, sem oscilações, enquanto o emaranhamento no estado ρ_W , mesmo no limite Markoviano, apresenta oscilações amortecidas. O termo não-Markoviano do ruído preserva a quantidade inicial de emaranhamento nos estados, de certo modo competindo com a decoerência. Para períodos de evolução longos, ambos os estados se tornam separáveis.

5.5 Considerações Finais

Neste capítulo foi descrita a relação entre o grafeno bicamada e a equação de Dirac incluindo potenciais externos. O foco principal foi a relação entre os graus de liberdade discretos da equação de Dirac (spin-paridade) e os graus de liberdade do grafeno, identificados como rede e camada, e a descrição do emaranhamento quântico advindo desta relação com a equação de Dirac. Os principais pontos do capítulo são

- O grafeno monocamada é descrito efetivamente pela equação de Dirac com massa

nula, gerando diversas propriedades únicas ao material;

- O modelo *tight-binding* para o grafeno bicamada (5.21), incluindo os termos de voltagem e massa associados a criação de um gap de energia, pode ser diretamente mapeado em um Hamiltoniano de Dirac incluindo um termo de potencial tensorial e um termo de potencial pseudo-tensorial (5.26);
- A relação entre os dois Hamiltonianos foi utilizada para o cálculo dos autoestados e autoenergias do grafeno através do método introduzido no capítulo 3;
- O emaranhamento entre spin e paridade intrínseca dos biespinores corresponde ao emaranhamento entre rede e camada no grafeno;
- As propriedades de correlação rede-camada dos autoestados, bem como os efeitos dos termos de voltagem e massa, foram descritos e foi identificado um comportamento qualitativo semelhante ao observado na autoenergias - distorção trigonal;
- Utilizando os autoestados construídos a dinâmica de um estado arbitrário foi construída e o perfil de oscilação quântica para estados inicialmente maximamente emaranhados foi observado;
- Neste *framework* foi incluído efeitos de ruídos, associados às flutuações aleatórias dos termos de massa e de voltagem, através do formalismo de operadores de Kraus. Foi adotado, neste caso, um modelo de ruído não-Markoviano;
- Efeitos de memória do ruído foram estudados, em particular para estados maximamente emaranhado a correlação é destruída pelo ruído e, de maneira geral, tempos de correlação maior são traduzidos em uma maior preservação das propriedades iniciais dos estados considerados.

Uma descrição mais realística do grafeno deve incluir desordens, como impurezas e vacâncias. No contexto do modelo *tight-binding*, tais desordens podem ser incluídas através de potenciais de curto alcance (como potenciais de Coulomb) na equação de Dirac e subsequente consideração de processos de espalhamento, dos quais propriedades de transporte podem ser calculadas (NOVIKOV, 2007; PEREIRA; NILSSON; NETO, 2007; KATSNELSON, 2007; CASTRO-NETO et al., 2009). Além disso, desordens podem nuclear estados localizados, que afetam a densidade de estados do sistema (PEREIRA; SANTOS; CASTRO-NETO, 2008) e podem gerar acoplamentos spin-órbita (CASTRO-NETO; GUINEA, 2009). O espalhamento em termos de ondas esféricas, descrevendo impurezas carregadas, pode ser calculado em um *framework* similar ao da seção 3.3.1. As amplitudes incidentes devem governar as propriedades de emaranhamento dos estados refletidos e transmitidos e são esperados efeitos como a geração/destruição do emaranhamento rede-camada pelos processos de espalhamento pelas impurezas. O emaranhamento

rede-camada em estados localizados induzidos por impurezas pode também ser calculado diretamente através das soluções da equação de Dirac. Neste caso o emaranhamento deve depender das características de localização do estado e oscilações de emaranhamento podem ser observadas.

Quanto a descrição de efeitos de ambiente é importante mencionar que processos de relaxação, importantes na descrição de propriedades de transporte do grafeno bicamada (BHARGAVI; KUBAKADDI, 2014; HUANG et al., 2015), podem também afetar as propriedades de emaranhamento rede-camada. Os principais processos de relaxação envolvidos nas propriedades de transporte do grafeno bicamada são relacionados com espalhamentos elétron-fônon e elétron-elétron, além das supracitadas impurezas. Todos estes processos geram perda de energia dos portadores de carga no material. Interações elétron-fônon podem ser descritas pela inclusão de campos vetoriais na dinâmica efetiva de Dirac (CASTRO-NETO et al., 2009), que levam, por exemplo, a efeitos de localização no estado quântico similar aos observados para o grafeno deformado mecanicamente. Espalhamentos elétron-elétron são incluídos via potenciais de Coulomb no formalismo *tight-binding*, requerendo uma análise mais complexa. Em ambos os casos, a utilização de um *framework* no contexto da segunda quantização revela importantes propriedades de transporte para o qual a descrição da influência de uma física de muitos corpos no emaranhamento ainda não foi trabalhada. Uma proposta interessante seria a inclusão destas interações com fônons e elétrons através de técnicas de sistemas quânticos abertos, similar as utilizadas em óptica quântica (BREUER; PETRUCCIONE, 2002), em um cenário que também envolve efeitos de temperatura finita. Neste caso, a dinâmica de um estado arbitrário inicial é dada em termos de uma equação mestra e banhos térmicos associados a elétrons e fônons levariam a termalização do estado e, de maneira geral, a supressão do emaranhamento.

6 Conclusões

A estrutura matemática da equação de Dirac é suportada por uma estrutura de grupos $SU(2) \otimes SU(2)$, tendo como consequência a descrição da dinâmica de dois graus de liberdade discretos, o spin, relacionado às representações irredutíveis do grupo de Lorentz, e a paridade intrínseca, associada à invariância da equação diante simetria de paridade total. Esta estrutura permite a interpretação dos biespinores de Dirac como estados de dois qubits que, de modo geral são emaranhados (BERNARDINI; MIZRAHI, 2014).

Neste trabalho nos concentramos na caracterização do emaranhamento intrínseco entre spin e paridade dos biespinores de Dirac em diversos cenários, em particular, sua tradução a dois sistemas que emulam a dinâmica de Dirac: um íon aprisionado no contexto da simulação da equação de Dirac (BITTENCOURT; BERNARDINI; BLASONE, 2016) e o grafeno bicamada incluindo termos de voltagem e massa (BITTENCOURT; BERNARDINI, 2017b). O estudo do emaranhamento intrínseco de Dirac nestes sistemas é importante não só do ponto de vista de simulação dos efeitos relativísticos associados à equação de Dirac, como no caso do íon aprisionado que pode ser manipulado de modo a tornar possível a medida do emaranhamento intrínseco dos biespinores através de técnicas experimentais amplamente utilizadas, como também para revelar novos efeitos físicos, como é o caso do emaranhamento entre rede e camada no grafeno bicamada. Nossos resultados são divididos em duas frentes: o emaranhamento de biespinores no contexto puro da equação de Dirac, e a relação da estrutura relativística $SU(2) \otimes SU(2)$ com sistemas tipo Dirac.

Na primeira frente de estudos, partindo da observação da estrutura tensorial da equação de Dirac, caracterizamos como potenciais externos afetam as propriedades correlacionais dos biespinores. Como exemplo preliminar, consideramos o espalhamento de um estado biespinorial (BITTENCOURT S. S. MIZRAHI, 2015), preparado como superposição de estados de helicidade, por uma barreira de potencial constante. Neste simples contexto constatamos que o processo de espalhamento é suficiente para criar e manipular o emaranhamento intrínseco, de modo que, mesmo para um estado incidente separável, as ondas transmitidas e refletidas são emaranhadas.

Em um contexto mais geral da equação de Dirac, consideramos a inclusão dos diversos tipos de potenciais externos, classificados de acordo com suas leis de transformação diante simetrias de Poincaré (THALLER, 1992). Uma vez que estes potenciais também são dados em termos de operadores do $SU(2) \otimes SU(2)$, esperamos que sua presença na dinâmica de Dirac afete o conteúdo de emaranhamento dos autoestados. Consideramos um cenário no qual todos os potenciais externos são constantes e desenvolvemos uma metodologia para reconstruir os autoestados do Hamiltoniano de Dirac incluindo tais

potenciais, dado que propriedades algébricas específicas sejam satisfeitas. Uma vez que os autoestados e autoenergias associados ao Hamiltoniano geral foram construídos, calculamos as propriedades de emaranhamento spin-paridade de um ponto de vista genérico e, em particular, descrevemos o conteúdo de emaranhamento associado a um Hamiltoniano que inclui potenciais tensorial, pseudo-vetorial e pseudo-escalar para qual observamos um comportamento de transição, em função do ângulo relativo entre o campo associado ao potencial tensorial e o *momentum*, de estados parcialmente emaranhados a estados maximamente emaranhados.

Também consideramos neste cenário genérico estados mistos e descrevemos a característica local das correlações intrínsecas, com um interesse particular dos efeitos de transformações CP tanto no emaranhamento quanto nas outras correlações quânticas (BERNARDINI; BITTENCOURT; BLASONE, 2018). Mesmo quando um estado não é invariante diante de transformações CP , o caráter de localidade das correlações spin-paridade são invariantes, sendo apenas modificados se a operação de paridade muda os parâmetros internos do estado, como é exemplificado ao se considerar estados mistos construídos com os autoestados do Hamiltoniano de Dirac incluindo acoplamento não-minimal. Para estes estados os efeitos das transformações CP são observados apenas na discórdia geométrica, sugerindo que esta quantidade pode ser utilizada para caracterizar os efeitos destas transformações em estados biespinoriais. Também consideramos a inclusão de efeitos térmicos de maneira simplificada, através do estudo das correlações e não-localidade em estados térmicos.

Ainda no cenário geral da equação de Dirac, caracterizamos a influência de *boosts* de Lorentz no emaranhamento entre duas partículas de Dirac (BITTENCOURT; BERNARDINI; BLASONE, 2018), cenário relevante para o estudo da implementação de protocolos de informação como o GPS quântico (GIOVANNETTI; LLOYD; MACCONE, 2001). Devido à estrutura intrínseca $SU(2) \otimes SU(2)$ da equação de Dirac, um estado de duas partículas é um estado de 4 qubits, e o emaranhamento codificado em superposições destes estados pode estar distribuído de maneiras não equivalentes entre os graus de liberdade. Neste caso, consideramos o emaranhamento médio calculado através de entropias lineares (MEYER; WALLACH, 2002), e o emaranhamento apenas entre os spins, de modo a investigar como mudanças entre referenciais afeta o modo como o emaranhamento está distribuído entre os diferentes graus de liberdade deste sistema. Descrevemos inicialmente um cenário genérico, onde os biespinores que compõe a superposição são supostos autoestados de helicidade, e especializamos nossos resultados para três estados antissimétricos. Para um estado antissimétrico com spins separáveis um *boost* de Lorentz não pode criar emaranhamento em contraste com o emaranhamento global, que de maneira geral cresce monotonicamente em função da rapidez do *boost*. Para um estado maximamente emaranhado com relação ao referencial no qual as partículas possuem *momenta* opostos, os *boosts* em geral degradam o emaranhamento entre os spins apesar de aumentar o emaranhamento global. No terceiro

estado considerado as partículas possuem mesmo *momentum* e emaranhamento entre os spins e tanto este quanto o emaranhamento global de comportam de modo não monotônico diante *boosts*. Neste cenário de *boosts* consideramos também superposições entre estados de quiralidade definida. Diferente da helicidade, a quiralidade é invariante diante *boosts* e esta propriedade possui consequências para o emaranhamento. De fato, através da projeção em estados quirais é possível obter estados invariantes que possuem mesmo conteúdo de emaranhamento em todos os referenciais conectados por *boosts*.

Na segunda etapa consideramos como o conteúdo correlacional associado à estrutura $SU(2) \otimes SU(2)$ é traduzido a sistemas com comportamento efetivo descrito pela equação de Dirac.

Considerando que um íon aprisionado é um sistema conveniente para a simulação da dinâmica de Dirac, descrevemos como a estrutura spin-paridade dos biespinores de Dirac é traduzida pelo protocolo de simulação quântica do Hamiltoniano de Dirac incluindo acoplamento não-minimal com potenciais tensorial e pseudo-tensorial constantes (BITTENCOURT; BERNARDINI; BLASONE, 2016). Neste caso o protocolo de simulação utiliza quatro níveis hiperfinos do íon aprisionado e a estrutura spin-paridade é traduzida em uma estrutura composta associada a dois números quânticos da dinâmica dos íons aprisionados: o *momentum* angular total, F , e sua projeção no campo magnético auxiliar utilizado para quebrar a degenerescência dos níveis iônicos internos, M . Desta maneira, a medida de correlações entre estes dois subsistemas é equivalente a medida de correlações spin-paridade dos biespinores. Além disso, o Hamiltoniano considerado possui as propriedades algébricas necessárias para a aplicação da metodologia definida no capítulo 3. Os autoestados e autoenergias do Hamiltoniano podem ser calculados e, considerando que um estado biespinorial é descrito em termos de uma superposição de estados iônicos na simulação, com o formalismo desenvolvido é possível descrever a dinâmica de qualquer estado inicial. Em particular, consideramos estados preparados inicialmente em níveis iônicos específicos e observamos o padrão de oscilação quântico típico de um sistema de quatro níveis. O emaranhamento também oscila com o tempo para estes estados e observamos uma relação qualitativa entre o emaranhamento e a quiralidade média do estado. Esta última pode ser escrita em termos de probabilidade de medida de superposições de estados iônicos maximamente emaranhados entre F e M tornando sua medida experimental mais alcançável.

Apesar das técnicas manipulação e caracterização de estados de íons aprisionados serem altamente desenvolvidas, em cenários reais é importante considerar a presença de efeitos de ambiente. Em particular consideramos, para o cenário da simulação do Hamiltoniano de Dirac incluindo acoplamento não-minimal, a presença de dois tipos de ruídos que descrevem processos estocásticos aleatórios em estados de dois qubits (YU; EBERLY, 2006), o local, que afeta separadamente cada um dos graus de liberdade, e o

global, que afeta coletivamente os graus de liberdade, associados às flutuações aleatórias do campo magnético auxiliar. Os ruídos foram incluídos na dinâmica através de seus correspondentes operadores de Kraus, e consideramos seus efeitos em estados inicialmente maximamente emaranhados (BITTENCOURT; BERNARDINI, 2017c; BITTENCOURT; BERNARDINI, 2017a). Estados do tipo Werner, superposições do tipo $|01\rangle + |10\rangle$, são completamente insensíveis à presença do ruído global, enquanto estados do tipo gato $\propto |00\rangle + |11\rangle$ têm seu emaranhamento degradado pela interação com o ambiente. De modo geral, entretanto, as correlações quânticas quantificadas por meio da discórdia geométrica apresentam um comportamento peculiar diante da evolução sob ruído global: para o regime que simula um estado não-relativístico há uma transição entre regime de decaimento clássico e quântico, indicados por uma descontinuidade na primeira derivada da discórdia geométrica em função do tempo. Em geral o efeito do ruído local em ambos os estados maximamente emaranhados é a supressão do emaranhamento inicial, entretanto mesmo para tempos de evolução muito maiores que o período de relaxação associado ao ruído, os estados ainda apresentam oscilações de emaranhamento.

Por último descrevemos a relação entre o grafeno bicamada e a estrutura $SU(2) \otimes SU(2)$ da equação de Dirac (BITTENCOURT; BERNARDINI, 2017b). Neste caso, partindo do Hamiltoniano do modelo *tight-binding* para o grafeno de duas camadas, construímos um mapa para um Hamiltoniano de Dirac modificado incluindo termos de potencial tensorial e pseudo-vetorial. Novamente a metodologia para construção dos autoestados e das autoenergias introduzida no capítulo 3 foi utilizada permitindo a obtenção analítica da estrutura de bandas do material de uma maneira simplificada e direta. Ressaltamos que outras técnicas algébricas e numéricas foram utilizadas na literatura para o cálculo dos autoestados e das bandas de energia (MCCANN; KOSHINO, 2013), entretanto a relação com o Hamiltoniano de Dirac se mostra mais simples e direta. Neste sistema a estrutura intrínseca da equação de Dirac é refletida na dinâmica de dois graus de liberdade discretos identificáveis no grafeno bicamada: rede e camada. Deste modo, a relação com a dinâmica relativística permite identificar os autoestados do grafeno como estados emaranhados de rede-camada e utilizando as técnicas introduzidas no capítulo 3 descrevemos as propriedades correlacionais do autoestados do Hamiltoniano do modelo *tight-binding* em particular a influência dos termos de massa e de voltagem. Para o Hamiltoniano sem estes dois termos, o emaranhamento rede-camada é altamente concentrado ao redor dos pontos de Dirac ao passo que a inclusão do termo de voltagem espalha o emaranhamento ao redor destes pontos. O termo de massa tem um efeito geral de supressão da correlação quântica em toda a primeira zona de Brillouin. Também observamos que a concorrência, em função do vetor de onda \mathbf{k} possui simetria de rotação similar a apresentada pelas bandas de energia, em particular as linhas de emaranhamento constante possuem uma distorção similar a distorção trigonal das linhas de energia constante.

Assim como no caso dos íons aprisionados, o formalismo utilizado na obtenção dos

autoestados e autoenergias do Hamiltoniano do grafeno bicamada permite a reconstrução da dinâmica de um estado inicial qualquer. Consideramos, então, a dinâmica de estados iniciais maximamente emaranhados entre rede e camada com vetor de onda no ponto de Dirac, simplificando o cálculo da evolução temporal dos estados (BITTENCOURT; BLASONE; BERNARDINI, 2018). Os dois estados considerados, o estado de Gato e o de Werner, são, para este vetor de onda em particular, combinações de apenas dois autoestados do Hamiltoniano e, em particular, o estado de Gato sempre é maximamente emaranhado, enquanto o estado de Werner apresenta o típico padrão de oscilação quântica esperado desta dinâmica. Incluímos nesta descrição também um ruído clássico, neste caso, não-Markoviano descrito pelo chamado processo de Ornstein-Uhlenbeck (KUBO; TODA; HASHITSUME, 1991; YU, 2010). Este ruído possui um limite Markoviano bem definido equivalente ao ruído local considerado no capítulo 4. Apesar do efeito de memória, este tipo de ruído ainda pode ser descrito em termos de operadores de Kraus e observamos que o parâmetro associado ao efeito de memória tem um efeito geral de preservação das propriedades iniciais dos estados considerados. Entretanto, para períodos de evolução maiores que o período de relaxação do ruído, os estados maximamente emaranhados tendem a estados puros separáveis. Para um estado inicialmente preparado como um autoestado do Hamiltoniano sem ruídos mesmo para longos períodos de evolução ainda há emaranhamento no estado.

Com relação às futuras perspectivas deste trabalho, a área mais promissora a ser explorada é a relação entre a equação de Dirac e o grafeno, sob a perspectiva das correlações quânticas. Listamos, a seguir, os futuros cenários a serem considerados

- Na discussão apresentada desconsideramos os possíveis efeitos da amplitude t_4 . A primeira extensão natural de nossos resultados seria considerar o efeito desta amplitude no emaranhamento entre rede e camada. Neste caso é necessário também estender o formalismo desenvolvido para a obtenção dos autoestados e autoenergias, que serão dados em termos de soluções de equações de terceiro grau.
- Considerar a influência da geometria de empilhamento no emaranhamento rede-camada. Neste caso partindo do modelo *tight-binding* para outras geometrias de empilhamento, como o empilhamento AA e o empilhamento torcido, podemos seguindo um procedimento similar ao utilizado mapear a estrutura em um Hamiltoniano de Dirac modificado e descrever as propriedades de emaranhamento dos autoestados associados;
- Partindo do modelo *tight-binding* para o grafeno descrevendo estados supercondutores (BLACK-SCHAFFER; DONIACH, 2007; HONERKAMP, 2008; NANDKISHORE; LEVITOV; CHUBUKOV, 2012; PREDIN; SCHLIEMANN, 2017) mapear o Hamiltoniano relevante do sistema a um Hamiltoniano de Dirac modificado, nos mesmos

moldes do feito nesta tese. Neste cenário será possível estudar o efeito de instabilidades supercondutoras no emaranhamento intrínseco às excitações de baixa energia do material, além descrever os efeitos de diversas simetrias, em particular reversão temporal, conjugação de carga e paridade espacial, no conteúdo informacional dos estados obtidos;

- Utilizando as soluções da equação de Dirac com condições de contorno (BREY; FERTIG, 2006; AKHMEROV; BEENAKKER, 2008), descrever o conteúdo de correlações intrínsecas em nanofitas de grafeno, tanto no caso monocamada como no caso bicamada. Descrever ao menos para o caso do grafeno monocamada os efeitos de distorções mecânicas nas propriedades de correlação, incluindo-os através potenciais de calibre na Hamiltoniana de Dirac que descreve as excitações de baixa energia (LOW; GUINEA; KATSNELSON, 2011; ZHU; STROSCIO; LI, 2015);
- Avaliar o efeito do espalhamento por potenciais externos em estados biespinoriais livres, em conexão com o cenário de impurezas em sistemas de grafeno (NOVIKOV, 2007; PEREIRA; NILSSON; NETO, 2007; KATSNELSON, 2007; PEREIRA; SANTOS; CASTRO-NETO, 2008; CASTRO-NETO; GUINEA, 2009). Para tanto deve ser utilizado todo o ferramental advindo da mecânica quântica relativística descrita pela equação de Dirac e espera-se observar fenômenos de interferência para os estados espalhados, de maneira semelhante com o que foi obtido no caso do espalhamento para barreira de potencial.

As extensões citadas acima são interessantes não apenas do ponto de vista da física do grafeno, mas também do ponto de vista da equação de Dirac em si. Para os estudos apontados acima é necessário ampliar o formalismo introduzido nesta tese a cenários mais gerais, como por exemplo incluindo efeitos de localização ou considerando combinações de potenciais que não satisfazem as propriedades algébricas necessárias para o uso do método (3.135). Do ponto de vista tecnológico, a descrição do emaranhamento rede-camadas do grafeno bicamada, ou de correlações intrínsecas entre rede e vale no grafeno monocamada submetido a deformações mecânicas, podem ser o ponto de partida para proposição de métodos de medida e manipulação destas correlações que podem ser adaptadas para a construção de portas lógicas quânticas e subsequente implementação de algoritmos quânticos.

Referências

- ADHIKARI, S. et al. Swapping path-spin intraparticle entanglement onto spin-spin interparticle entanglement. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 89, n. 1, p. 10005, 2010.
- AKHMEROV, A. R.; BEENAKKER, C. W. J. Boundary conditions for dirac fermions on a terminated honeycomb lattice. *Phys. Rev. B*, v. 77, p. 085423, 2008.
- ALSING, P. M.; DOWLING, J. P.; MILBURN, G. J. Ion trap simulations of quantum fields in an expanding universe. *Phys. Rev. Lett.*, v. 94, p. 220401, 2005.
- ALSING, P. M.; MILBURN, G. J. Lorentz invariance of entanglement. *arXiv:quant-ph/020305*, 2002.
- AMICO, L. et al. Entanglement in many-body systems. *Rev. Mod. Phys.*, v. 80, p. 517–576, 2008.
- BARTLETT, S. D.; TERNO, D. R. Relativistically invariant quantum information. *Phys. Rev. A*, v. 71, p. 012302, 2005.
- BAUKE, H. et al. What is the relativistic spin operator? *New Journal of Physics*, v. 16, n. 4, p. 043012, 2014.
- BELL, J. S. On the einstein-podolsky-rosen paradox. *Physics*, v. 1, n. 3, p. 195 – 200, 1964.
- BENNETT, C. H. et al. Concentrating partial entanglement by local operations. *Phys. Rev. A*, v. 53, p. 2046–2052, 1996.
- BENNETT, C. H. et al. Quantum nonlocality without entanglement. *Phys. Rev. A*, v. 59, p. 1070–1091, 1999.
- BERMUDEZ, A.; MARTIN-DELGADO, M. A.; LUIS, A. Chirality quantum phase transition in the dirac oscillator. *Phys. Rev. A*, v. 77, p. 063815, 2008.
- BERNARDINI, A. Stationary phase method and delay times for relativistic and non-relativistic tunneling particles. *Annals of Physics*, v. 324, n. 6, p. 1303 – 1339, 2009.
- BERNARDINI, A.; ROCHA, R. da. Dynamical dispersion relation for elko dark spinor fields. *Physics Letters B*, v. 717, n. 1, p. 238 – 241, 2012.
- BERNARDINI, A. E. Chirality dynamics for a fermionic particle non-minimally coupling with an external magnetic field. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 39, n. 22, p. 7089, 2006.
- BERNARDINI, A. E. Dynamics of chiral oscillations: a comparative analysis with spin flipping. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, v. 32, n. 1, p. 9, 2006.
- BERNARDINI, A. E. Flavor coupled with chiral oscillations in the presence of an external magnetic field. *The European Physical Journal C - Particles and Fields*, v. 46, n. 1, p. 113–122, 2006.

- BERNARDINI, A. E. Dirac neutrino mass from the beta-decay end point modified by the dynamics of a lorentz-violating equation of motion. *Phys. Rev. D*, v. 75, p. 097901, 2007.
- BERNARDINI, A. E. Delay time computation for relativistic tunneling particles. *The European Physical Journal C*, v. 55, n. 1, p. 125–132, 2008.
- BERNARDINI, A. E. The exact correspondence between phase times and dwell times in a symmetrical quantum tunneling configuration. *The European Physical Journal C*, v. 53, n. 4, p. 673–678, 2008.
- BERNARDINI, A. E. Principle of stationary phase for propagating wave packets in the unidimensional scattering problem. *The European Physical Journal C*, v. 56, n. 4, p. 545–556, 2008.
- BERNARDINI, A. E. Relation between phase and dwell times for quantum tunneling of a relativistically propagating particle. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 82, n. 6, p. 60005, 2008.
- BERNARDINI, A. E. Cosmological neutrino entropy changes due to flavor statistical mixing. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 103, n. 3, p. 30005, 2013.
- BERNARDINI, A. E. Quantum meashurement schemes related to flavor-weighted energies. *International Journal of Modern Physics A*, v. 28, n. 15, p. 1350065, 2013.
- BERNARDINI, A. E. *Notas de Aula em Teoria Quântica de Campos*. [S.l.]: (Não publicado), 2017.
- BERNARDINI, A. E.; BERTOLAMI, O. Lorentz violating extension of the standard model and the β -decay endpoint. *Phys. Rev. D*, v. 77, p. 085032, 2008.
- BERNARDINI, A. E.; BITTENCOURT, V. A. S. V. The cvb energy density through the quantum measurement theory. *Astroparticle Physics*, n. 41, p. 31 – 37, 2013.
- BERNARDINI, A. E.; BITTENCOURT, V. A. S. V.; BLASONE, M. Cp symmetry and thermal effects on dirac bi-spinor spin-parity local correlations. *arXiv:712.09538[quant-ph]*, 2018.
- BERNARDINI, A. E.; GUZZO, M. M. Influence of second-order corrections to the energy-dependence of neutrino flavor conversion formulas. *Modern Physics Letters A*, v. 23, n. 23, p. 1949–1960, 2008.
- BERNARDINI, A. E.; GUZZO, M. M.; NISHI, C. C. Quantum flavor oscillations extended to the dirac theory. *Fortschritte der Physik*, v. 59, n. 5-6, p. 372–453, 2011.
- BERNARDINI, A. E.; LEO, S. D. Flavor and chiral oscillations with dirac wave packets. *Phys. Rev. D*, v. 71, p. 076008, 2005.
- BERNARDINI, A. E.; LEO, S. de; ROTELLI, P. P. Above barrier potential diffusion. *Modern Physics Letters A*, v. 19, n. 36, p. 2717–2725, 2004.
- BERNARDINI, A. E.; MIZRAHI, S. S. Relativistic dynamics compels a thermalized fermi gas to a unique intrinsic parity eigenstate. *Physica Scripta*, v. 89, n. 7, p. 075105, 2014.
- BERNARDINI, A. E.; ROCHA, R. da. Obtaining the equation of motion for a fermionic particle in a generalized lorentz-violating system framework. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 81, n. 4, p. 40010, 2008.

- BERNARDINI, A. E. A. E.; LEO, S. D. Dirac spinors and flavor oscillations. *The European Physical Journal C - Particles and Fields*, v. 37, n. 4, p. 471–480, 2004.
- BHARGAVI, K.; KUBAKADDI, S. High field transport properties of a bilayer graphene. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 56, p. 123 – 129, 2014.
- BITTENCOURT S. S. MIZRAHI, A. E. B. V. A. S. V. $Su(2) \times su(2)$ bi-spinor structure entanglement induced by a step potential barrier scattering in two-dimensions. *Annals of Physics*, n. 355, p. 35 – 47, 2015.
- BITTENCOURT, V. A. S. V.; BERNARDINI, A. E. Entanglement of dirac bi-spinors driven by poincaré classes of $su(2) \times su(2)$ coupling potentials. *Annals of Physics*, v. 364, p. 182–199, 2016.
- BITTENCOURT, V. A. S. V.; BERNARDINI, A. E. Dirac bi-spinor entanglement under local noise and its simulation by jaynes-cummings interactions. *IOP Conf. Series: Journal of Physics*, v. 880, n. 012063, p. 1 – 8, 2017.
- BITTENCOURT, V. A. S. V.; BERNARDINI, A. E. Lattice-layer entanglement in bernal-stacked bilayer graphene. *Phys. Rev. B.*, v. 95, n. 195145, p. 195145–1 – 195145–11, 2017.
- BITTENCOURT, V. A. S. V.; BERNARDINI, A. E. Schrödinger cat and werner state disentanglement simulated by trapped ion systems. *J. Phys. B: Mol. Phys.*, v. 50, n. 075501, p. 1 – 9, 2017.
- BITTENCOURT, V. A. S. V.; BERNARDINI, A. E.; BLASONE, M. Quantum transitions and quantum entanglement from dirac-like dynamics simulated by trapped ions. *Phys. Rev. A.*, v. 93, n. 053823, p. 053823–1 – 053823–12, 2016.
- BITTENCOURT, V. A. S. V.; BERNARDINI, A. E.; BLASONE, M. Global dirac bispinor entanglement under lorentz boosts. *Phys. Rev. A*, v. 97, p. 032106, 2018.
- BITTENCOURT, V. A. S. V.; BLASONE, M.; BERNARDINI, A. E. Graphene lattice-layer entanglement under non-markovian phase noise. *arXiv:1801.00755[cond-mat.mes-hall]*, 2018.
- BITTENCOURT, V. A. S. V.; VILLAS-BOAS, C. J.; BERNARDINI, A. E. Maximal correlation between flavor entanglement and oscillation damping due to localization effects. *epl*, v. 108, n. 50005, p. 50005–p1 – 50005–p6, 2014.
- BLACK-SCHAFFER, A. M.; DONIACH, S. Resonating valence bonds and mean-field d -wave superconductivity in graphite. *Phys. Rev. B*, v. 75, p. 134512, 2007.
- BLASONE, M. et al. Hierarchies of geometric entanglement. *Phys. Rev. A*, v. 77, p. 062304, 2008.
- BLASONE, M. et al. Multipartite entangled states in particle mixing. *Phys. Rev. D*, v. 77, p. 096002, 2008.
- BLASONE, M. et al. Entanglement in neutrino oscillations. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 85, n. 5, p. 50002, 2009.

- BLASONE, M. et al. Flavor entanglement in neutrino oscillations in the wave packet description. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 112, n. 2, p. 20007, 2015.
- BREUER, H.-P.; KAPPLER, B.; PETRUCCIONE, F. Stochastic wave-function method for non-markovian quantum master equations. *Phys. Rev. A*, v. 59, p. 1633–1643, 1999.
- BREUER, H. P.; PETRUCCIONE, F. *The theory of open quantum systems*. 1. ed. Oxfor: Oxford University Press, 2002.
- BREY, L.; FERTIG, H. A. Electronic states of graphene nanoribbons studied with the dirac equation. *Phys. Rev. B*, v. 73, p. 235411, 2006.
- BRUNNER, N. et al. Bell nonlocality. *Rev. Mod. Phys.*, v. 86, p. 419–478, 2014.
- CABAN, J. R. P. Lorentz-covariant reduced spin density matrix and einstein-podolsky-rosen-bohm correlations. *Phys. Rev. A.*, v. 72, p. 012103, 2005.
- CABAN, P.; REMBIELINSKI, J. Einstein-podolsky-rosen correlations of dirac particles: Quantum field theory approach. *Phys. Rev. A*, v. 74, p. 042103, 2006.
- CABAN, P.; REMBIELINSKI, J.; WLODARCZYK, M. Strange behavior of the relativistic einstein-podolsky-rosen correlations. *Phys. Rev. A.*, v. 79, p. 014102, 2009.
- CABAN, P.; REMBIELINSKI, J.; WLODARCZYK, M. Spin operator in the dirac theory. *Phys. Rev. A*, v. 88, p. 022119, 2013.
- CASANOVA, J. et al. Klein tunneling and dirac potentials in trapped ions. *Phys. Rev. A*, v. 82, p. 020101, 2010.
- CASTRO-NETO, A. H.; GUINEA, F. Impurity-induced spin-orbit coupling in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, v. 103, p. 026804, 2009.
- CASTRO-NETO, A. H. et al. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, v. 81, p. 109–162, 2009.
- CHANDRAN, A. et al. Bulk-edge correspondence in entanglement spectra. *Phys. Rev. B*, v. 84, p. 205136, 2011.
- CHARLIER, J. C.; GONZE, X.; MICHENAUD, J. P. First-principles study of the electronic properties of graphite. *Phys. Rev. B*, v. 43, p. 4579–4589, 1991.
- CHOI, T. Relativistic spin operator and lorentz tranformation of the spin state of a massive dirac particle. *Journal of the Korean Physical Society*, v. 62, n. 8, p. 1085 – 1092, 2013.
- CHOI, T.; HUR, J.; KIM, J. Relativistic effects on the spin entanglement of two massive dirac particles. *Phys. Rev. A*, v. 84, p. 012334, 2011.
- CIRAC, J. I.; ZOLLER, P. Quantum computations with cold trapped ions. *Phys. Rev. Lett.*, v. 74, p. 4091–4094, 1995.
- CLAUSER, J. F. et al. Proposed experiment to test local hidden-variable theories. *Phys. Rev. Lett.*, v. 23, p. 880–884, 1969.

- CORDOURIER-MARURI, G. et al. Graphene-enabled low-control quantum gates between static and mobile spins. *Phys. Rev. B*, v. 89, p. 075426, 2014.
- CORMICK, C.; SCHMIEGELOW, C. T. Noise-induced transport in the motion of trapped ions. *Phys. Rev. A*, v. 94, p. 053406, 2016.
- CSERTI, J.; CSORDÁS, A.; DÁVID, G. Role of the trigonal warping on the minimal conductivity of bilayer graphene. *Phys. Rev. Lett.*, v. 99, p. 066802, 2007.
- CZACHOR, M. Einstein-podolsky-rosen-bohm experiment with relativistic massive particles. *Phys. Rev. A*, v. 55, p. 72–77, 1997.
- DAFFER, S.; WÓDKIEWICZ, K.; MCIVER, J. K. Quantum markov channels for qubits. *Phys. Rev. A*, v. 67, p. 062312, 2003.
- DAKIC, B.; VEDRAL, V.; BRUKNER, C. Necessary and sufficient condition for nonzero quantum discord. *Phys. Rev. Lett.*, v. 105, p. 190502, 2010.
- DATTA, A.; SHAJI, A.; CAVES, C. M. Quantum discord and the power of one qubit. *Phys. Rev. Lett.*, v. 100, p. 050502, 2008.
- DIRAC, P. A. M. A theory of electrons and protons. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, v. 126, 1920.
- DIRAC, P. A. M. The quantum theory of the electron. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, v. 117, 1928.
- DORNER, U. Quantum frequency estimation with trapped ions and atoms. *New Journal of Physics*, v. 14, n. 4, p. 043011, 2012.
- DOUÇOT, B. et al. Entanglement skyrmions in multicomponent quantum hall systems. *Phys. Rev. B*, v. 78, p. 195327, 2008.
- EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B.; ROSEN, N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Phys. Rev.*, v. 47, p. 777–780, 1935.
- FERRARO, A. et al. Almost all quantum states have nonclassical correlations. *Phys. Rev. A*, v. 81, p. 052318, 2010.
- FIORENTINO, M.; WONG, F. N. C. Deterministic controlled-not gate for single-photon two-qubit quantum logic. *Phys. Rev. Lett.*, v. 93, p. 070502, 2004.
- FISCHER, U. R.; SCHÜTZHOLD, R. Quantum simulation of cosmic inflation in two-component bose-einstein condensates. *Phys. Rev. A*, v. 70, p. 063615, 2004.
- FONDA, L.; GHIRARDI, G. C. *Symmetry Principles in Quantum Physics*. 1. ed. New York: Marcel Dekker Inc., 1970.
- FRIIS, N.; BERTLMANN, R. A.; HUBER, M. Relativistic entanglement of two massive particles. *Phys. Rev. A*, v. 81, n. 042114, p. 042114–1 – 042114–9, 2010.
- FUJITA, M. et al. Peculiar localized state at zigzag graphite edge. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 65, n. 7, p. 1920–1923, 1996.

- FURNSTAHL, R.; RUSNAK, J. J.; SEROT, B. D. The nuclear spin-orbit force in chiral effective field theories. *Nuclear Physics A*, v. 632, n. 4, p. 607 – 623, 1998.
- GEORGESCU, I. M.; ASHHAB, S.; NORI, F. Quantum simulation. *Rev. Mod. Phys.*, v. 86, p. 153–185, 2014.
- GERRITSMAN, R. et al. Quantum simulation of the dirac equation. *Nature*, v. 463, n. 08688, p. 68 – 72, 2010.
- GERRITSMAN, R. et al. Quantum simulation of the klein paradox with trapped ions. *Phys. Rev. Lett.*, v. 106, p. 060503, 2011.
- GINGRICH, R. M.; ADAMI, C. Quantum entanglement of moving bodies. *Phys. Rev. Lett.*, v. 89, n. 27, p. 270402–1 – 270402–4, 2002.
- GINOCCHIO, J. N. Relativistic harmonic oscillator with spin symmetry. *Phys. Rev. C*, v. 69, p. 034318, 2004.
- GIORGI, G. L.; PAGANELLI, S.; GALVE, F. Ion-trap simulation of the quantum phase transition in an exactly solvable model of spins coupled to bosons. *Phys. Rev. A*, v. 81, p. 052118, 2010.
- GIOVANNETTI, V.; LLOYD, S.; MACCONE, L. Quantum-enhanced positioning and clock synchronization. *Nature*, v. 412, p. 417 – 419, 2001.
- GIUNTI, C.; KIM, C. W. *Fundamentals of neutrino physics and astrophysics*. 1. ed. Oxford: Oxford University Press, 2007.
- GOERBIG, M. O. Electronic properties of graphene in a strong magnetic field. *Rev. Mod. Phys.*, v. 83, p. 1193–1243, 2011.
- GREINER, W. *Relativistic quantum mechanics: Wave equations*. 3. ed. Berlin: Springer-Verlag, 2000.
- GRIFFITHS, D. *Introduction to elementary particles*. 1. ed. New York: John Wiley Sons, 1987.
- HÄFFNER, H. et al. Scalable multiparticle entanglement of trapped ions. *Nature*, v. 438, p. 643 – 646, 2004.
- HÄFFNER, H. et al. Robust entanglement. *Applied Physics B*, v. 81, n. 2, p. 151–153, 2005.
- HALZEN, F.; MARTIN, A. D. *Quarks and Leptons: An introductory course to modern particle physics*. 1. ed. New York: John Wiley Sons, 1984.
- HASEGAWA, Y. et al. Evidence for entanglement and full tomographic analysis of bell states in a single-neutron system. *Phys. Rev. A*, v. 76, p. 052108, 2007.
- HENDERSON, L.; VEDRAL, V. Classical, quantum and total correlations. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 34, n. 35, p. 6899, 2001.
- HÄFFNER, H.; ROOS, C.; BLATT, R. Quantum computing with trapped ions. *Physics Reports*, v. 469, n. 4, p. 155 – 203, 2008.

- HONERKAMP, C. Density waves and cooper pairing on the honeycomb lattice. *Phys. Rev. Lett.*, v. 100, p. 146404, 2008.
- HORODECKI, R.; HORODECKI, P.; HORODECKI, M. Violating bell inequality by mixed spin-1/2 states: necessary and sufficient condition. *Physics Letters A*, v. 200, n. 5, p. 340 – 344, 1995. ISSN 0375-9601.
- HORODECKI, R. et al. Quantum entanglement. *Rev. Mod. Phys.*, v. 81, p. 865–942, 2009.
- HRADIL, Z. Quantum-state estimation. *Phys. Rev. A*, v. 55, p. R1561–R1564, 1997.
- HUANG, J. et al. Hot carrier relaxation of dirac fermions in bilayer epitaxial graphene. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 27, n. 16, p. 164202, 2015.
- HUANG, Y. Computing quantum discord is np-complete. *New Journal of Physics*, v. 16, n. 3, p. 033027, 2014.
- ITZYKSON, C.; ZUBER, J. B. *Quantum Field Theory*. 1. ed. New York: McGraw-Hill, 1980.
- JORDAN, T. F. Lorentz transformations that entangle spins and entangle momenta. *Phys. Rev. A.*, v. 75, n. 022101, p. 022101–1 – 022101–5, 2007.
- JOZSA, R. et al. Quantum clock synchronization based on shared prior entanglement. *Phys. Rev. Lett.*, v. 85, n. 9, p. 2010 – 2013, 2000.
- KATSNELSON, M. I. Scattering of charge carriers by point defects in bilayer graphene. *Phys. Rev. B*, v. 76, p. 073411, 2007.
- KATSNELSON, M. I.; NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K. Chiral tunnelling and the klein paradox in graphene. *Nature*, v. 438, p. 620 – 625, 2006.
- KECHEDZHI, K. et al. Influence of trigonal warping on interference effects in bilayer graphene. *Phys. Rev. Lett.*, v. 98, p. 176806, 2007.
- KENT, A.; MUNRO, W. J.; SPILLER, T. P. Quantum tagging: Authenticating location via quantum information and relativistic signaling constraints. *Phys. Rev. A*, v. 84, n. 012326, p. 012326–1 – 012326–7, 2011.
- KIELPINSKI, D. et al. A decoherence-free quantum memory using trapped ions. *Science*, v. 291, n. 5506, p. 1013–1015, 2001.
- KIELPINSKI, D.; MONROE, C.; WINELAND, D. J. Architecture for a large-scale ion-trap quantum computer. *Nature*, v. 417, p. 709 – 711, 2002.
- KLEIN, O. Die reflexion von elektronen an einem potentialsprung nach der relativistischen dynamik von dirac. *Zeitschrift für Physik*, v. 53, n. 3, p. 157–165, Mar 1929.
- KLEPP, J.; SPONAR, S.; HASEGAWA, Y. Fundamental phenomena of quantum mechanics explored with neutron interferometers. *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, v. 2014, n. 8, p. 082A01, 2014.
- KRAUS, K. *States, Effects, and Operations: Fundamental notions in quantum theory*. 1. ed. Berlin: Springer-Verlag, 1983.

- KUBO, R.; TODA, M.; HASHITSUME, N. *Statistical Physics II: Nonequilibrium statistical mechanics*. 2. ed. Berlin: Springer-Verlag, 1991.
- KUZMENKO, A. B. et al. Determination of the gate-tunable band gap and tight-binding parameters in bilayer graphene using infrared spectroscopy. *Phys. Rev. B*, v. 80, p. 165406, 2009.
- LAFLORENCIE, N. Quantum entanglement in condensed matter systems. *Physics Reports*, v. 646, p. 1 – 59, 2016.
- LAMATA, L. et al. Relativistic quantum mechanics with trapped ions. *New Journal of Physics*, v. 13, n. 9, p. 095003, 2011.
- LAMATA, L. et al. Dirac equation and quantum relativistic effects in a single trapped ion. *Phys. Rev. Lett.*, v. 98, p. 253005, 2007.
- LANGER, C. et al. Long-lived qubit memory using atomic ions. *Phys. Rev. Lett.*, v. 95, p. 060502, 2005.
- LÄUCHLI, A. M. et al. Disentangling entanglement spectra of fractional quantum hall states on torus geometries. *Phys. Rev. Lett.*, v. 104, p. 156404, 2010.
- LEIBFRIED, D. et al. Quantum dynamics of single trapped ions. *Rev. Mod. Phys.*, v. 75, p. 281–324, 2003.
- LEIBFRIED, D. et al. Experimental determination of the motional quantum state of a trapped atom. *Phys. Rev. Lett.*, v. 77, p. 4281–4285, 1996.
- LEONHARDT, U. Quantum-state tomography and discrete wigner function. *Phys. Rev. Lett.*, v. 74, p. 4101–4105, 1995.
- LI, H.; HALDANE, F. D. M. Entanglement spectrum as a generalization of entanglement entropy: Identification of topological order in non-abelian fractional quantum hall effect states. *Phys. Rev. Lett.*, v. 101, p. 010504, 2008.
- LOW, T.; GUINEA, F.; KATSNELSON, M. I. Gaps tunable by electrostatic gates in strained graphene. *Phys. Rev. B*, v. 83, p. 195436, 2011.
- MAO, G. Effect of tensor couplings in a relativistic hartree approach for finite nuclei. *Phys. Rev. C*, v. 67, p. 044318, 2003.
- MAZIERO, J. et al. Classical and quantum correlations under decoherence. *Phys. Rev. A*, v. 80, p. 044102, 2009.
- MAZZOLA, L.; PILO, J.; MANISCALCO, S. Sudden transition between classical and quantum decoherence. *Phys. Rev. Lett.*, v. 104, p. 200401, 2010.
- MCCANN, E.; KOSHINO, M. The electronic properties of bilayer graphene. *Reports on Progress in Physics*, v. 76, n. 5, p. 056503, 2013.
- MEYER, D. A.; WALLACH, N. R. Global entanglement in multiparticle systems. *Journal of Mathematical Physics*, v. 43, n. 9, p. 4273–4278, 2002.
- MIZRAHI, S. S. Bits, time, carriers and matter. *Journal of Russian Laser Research*, v. 32, n. 4, 2011.

- MOHSENI, M.; LIDAR, D. A. Direct characterization of quantum dynamics. *Phys. Rev. Lett.*, v. 97, p. 170501, 2006.
- MOLINA-TERRIZA, G.; TORRES, J. P.; TORNER, L. Twisted photons. *Nature Physics*, v. 3, 2007.
- MONS, T. et al. 14-qubit entanglement: Creation and coherence. *Phys. Rev. Lett.*, v. 106, p. 130506, 2011.
- MYATT, C. J. et al. Decoherence of quantum superpositions through coupling to engineered reservoirs. *Nature*, v. 403, p. 269–273, 2000.
- NAKAJIMA, S. On quantum theory of transport phenomenon steady diffusion. *Progress of Theoretical Physics*, v. 20, n. 6, p. 948–959, 1958.
- NANDKISHORE, R.; LEVITOV, L. S.; CHUBUKOV, A. V. Chiral superconductivity from repulsive interactions in doped graphene. *Nature Physics*, v. 8, p. 158, 2012.
- NATION, P. D. et al. Analogue hawking radiation in a dc-squid array transmission line. *Phys. Rev. Lett.*, v. 103, p. 087004, 2009.
- NG, H.; KIM, K. Quantum estimation of magnetic-field gradient using w-state. *Optics Communications*, v. 331, p. 353 – 358, 2014.
- NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. *Quantum computation and quantum information*. 1. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- NILSSON, J. et al. Electronic properties of graphene multilayers. *Phys. Rev. Lett.*, v. 97, n. 266801, p. 266801–1 – 266801–4, 2006.
- NOVIKOV, D. S. Elastic scattering theory and transport in graphene. *Phys. Rev. B*, v. 76, p. 245435, 2007.
- NOVOSELOV, K. S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, v. 306, p. 666 – 669, 2004.
- NOVOSELOV, K. S. et al. Unconventional quantum hall effect and berry's phase of 2π in bilayer graphene. *Nature Physics*, v. 2, p. 177 – 180, 2006.
- OLLIVIER, H.; ZUREK, W. H. Quantum discord: A measure of the quantumness of correlations. *Phys. Rev. Lett.*, v. 88, p. 017901, 2001.
- OSTERLOH, A. et al. Scaling of entanglement close to a quantum phase transition. *Nature*, v. 416, p. 608 – 610, 2002.
- PACHOS, J.; SOLANO, E. Generation and degree of entanglement in a relativistic formulation. *Quantum information and communication*, n. 2, p. 115 – 120, 2003.
- PEREIRA, V. M.; NILSSON, J.; NETO, A. H. C. Coulomb impurity problem in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, v. 99, p. 166802, 2007.
- PEREIRA, V. M.; SANTOS, J. M. B. L. dos; CASTRO-NETO, A. H. Modeling disorder in graphene. *Phys. Rev. B*, v. 77, p. 115109, 2008.

- PERES, A. Separability criterion for density matrices. *Phys. Rev. Lett.*, v. 77, p. 1413–1415, 1996.
- PERES, A.; SCUDO, P. F.; TERNO, D. R. Quantum entropy and special relativity. *Phys. Rev. Lett.*, v. 88, n. 23, p. 230402–1 – 230402–3, 2002.
- PERES, A.; TERNO, D. R. Quantum information and relativity theory. *Rev. Mod. Phys.*, v. 76, p. 93–123, 2004.
- PERES, N. M. R.; GUINEA, F.; NETO, A. H. C. Electronic properties of disordered two-dimensional carbon. *Phys. Rev. B*, v. 73, p. 125411, 2006.
- PLENIO, M. B.; VEDRAL, V. Teleportation, entanglement and thermodynamics in the quantum world. *Contemporary Physics*, v. 39, n. 6, p. 431 – 446, 1998.
- POPESCU, S. Bell’s inequalities versus teleportation: What is nonlocality? *Phys. Rev. Lett.*, v. 72, p. 797–799, 1994.
- POYATOS, J. F. et al. Motion tomography of a single trapped ion. *Phys. Rev. A*, v. 53, p. R1966–R1969, 1996.
- PRAMANIK, T. et al. Information transfer using a single particle path-spin hybrid entangled state. *Physics Letters A*, v. 374, n. 9, p. 1121 – 1125, 2010.
- PREDIN, S.; SCHLIEMANN, J. Entanglement spectra of superconductivity ground states on the honeycomb lattice. *The European Physical Journal B*, v. 90, n. 12, p. 239, 2017.
- PREDIN, S.; WENK, P.; SCHLIEMANN, J. Trigonal warping in bilayer graphene: Energy versus entanglement spectrum. *Phys. Rev. B*, v. 93, p. 115106, 2016.
- RAHMAN, A. et al. Transmission of phase information between electrons and holes in graphene. *Phys. Rev. B*, v. 87, p. 081401, 2013.
- RIEBE, M. et al. Process tomography of ion trap quantum gates. *Phys. Rev. Lett.*, v. 97, p. 220407, 2006.
- RIGOLIN, G.; OLIVEIRA, T. R. de; OLIVEIRA, M. C. de. Operational classification and quantification of multipartite entangled states. *Phys. Rev. A*, v. 74, p. 022314, 2006.
- RINDLER, W. *Introduction to special relativity*. 1. ed. Oxford: Oxford University Press, 1985.
- ROCHA, R. da; BERNARDINI, A. E.; SILVA, J. M. H. da. Exotic dark spinor fields. *Journal of High Energy Physics*, v. 2011, n. 4, p. 110, 2011.
- ROCHA, R. da; BERNARDINI, A. E.; VAZ, J. κ -deformed poincaré algebras and quantum clifford-hopf algebras. *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics*, v. 07, n. 05, p. 821–836, 2010.
- ROCHA, R. da; SILVA, J. M. H. da; BERNARDINI, A. E. Elko spinor fields as a tool for probing exotic topological spacetime features. *International Journal of Modern Physics: Conference Series*, v. 03, p. 133–142, 2011.
- ROOS, C. F. et al. Bell states of atoms with ultralong lifetimes and their tomographic state analysis. *Phys. Rev. Lett.*, v. 92, p. 220402, 2004.

- ROSS, C. F. et al. Designer atoms for quantum metrology. *Nature*, v. 443, p. 316, 2006.
- ROSZAK, K.; CYWIŃSKI, L. The relation between the quantum discord and quantum teleportation: The physical interpretation of the transition point between different quantum discord decay regimes. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 112, n. 1, p. 10002, 2015.
- ROWE, M. A. et al. Transport of quantum states and separation of ions in a dual rf ion trap. *Quantum Information and Computation*, v. 2, p. 257 – 271, 2002.
- ROZHKOVA, A. et al. Electronic properties of graphene-based bilayer systems. *Physics Reports*, v. 648, p. 1 – 104, 2016.
- RUSIN, T. M.; ZAWADZKI, W. Zitterbewegung of electrons in graphene in a magnetic field. *Phys. Rev. B*, v. 78, p. 125419, 2008.
- SACKETT, C. A. et al. Experimental entanglement of four particles. *Nature*, v. 404, p. 256–259, 2000.
- SAKURAI, J. J. *Advanced Quantum Mechanics*. 1. ed. Boston: Addison-Wesley, 1967.
- SALDANHA, P. L.; VEDRAL, V. Physical interpretation of the wigner rotations and its implications for relativistic quantum information. *New Journal of Physics*, v. 14, n. 2, p. 023041, 2012.
- SCHMIDT-KALER, F. et al. The coherence of qubits based on single Ca^+ ions. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, v. 36, n. 3, p. 623, 2003.
- SCHMIDT-KALER, F. et al. Realization of the cirac-zoller controlled-not quantum gate. *Nature*, v. 422, p. 408 – 411, 2003.
- SCHRÖDINGER, E. Discussion of probability relations between separated systems. *Prod. Camb. Phil. Soc.*, v. 31, p. 555– 563, 1935.
- SHENG, Y. B.; DENG, F. G. Efficient quantum entanglement distribution over an arbitrary collective-noise channel. *Phys. Rev. A*, v. 81, p. 042332, 2010.
- SHOR, P. W. Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer. *SIAM Journal on Computing*, v. 26, n. 5, p. 1484–1509, 1997.
- SHORE, B. W.; KNIGHT, P. L. The jaynes-cummings model. *Journal of Modern Optics*, v. 40, n. 7, p. 1195–1238, 1993.
- SLONCZEWSKI, P. R. W. P. R. Band structure of graphite. *Phys. Rev.*, v. 109, n. 2, p. 272 – 279, 1958.
- SOLANO, E.; AGARWAL, G. S.; WALTHER, H. Strong-driving-assisted multipartite entanglement in cavity qed. *Phys. Rev. Lett.*, v. 90, p. 027903, 2003.
- STREATER, R. F.; WIGHTMAN, A. S. *PCT, spin and statistics, and all that*. 1. ed. New York: W. A. Benjamin INC., 1964.
- STRUNZ, W. T.; YU, T. Convolutionless non-markovian master equations and quantum trajectories: Brownian motion. *Phys. Rev. A*, v. 69, p. 052115, 2004.

- TENEV, T. G.; IVANOV, P. A.; VITANOV, N. K. Proposal for trapped-ion emulation of the electric dipole moment of neutral relativistic particles. *Phys. Rev. A*, v. 87, p. 022103, 2013.
- TERASHIMA, H.; UEDA, M. Relativistic einstein-podolsky-rosen correlation and bell's inequality. *International Journal of Quantum Information*, v. 1, n. 1, p. 93 – 114, 2003.
- THALLER, B. *The Dirac Equation*. 1. ed. Berlim: Springer-Verlag, 1992.
- THOMALE, R.; AROVAS, D. P.; BERNEVIG, B. A. Nonlocal order in gapless systems: Entanglement spectrum in spin chains. *Phys. Rev. Lett.*, v. 105, p. 116805, 2010.
- TUNG, W.-K. *Group Theory in Physics: An introduction to symmetry principles, group representations, and special functions in classical and quantum physics*. 1. ed. London: World Scientific Publishi Co., 1993.
- VAZ, J.; ROCHA, R. da. *An introduction to clifford algebras and spinors*. 1. ed. Oxford: Oxford University Press, 2016.
- VIDAL, G. et al. Entanglement in quantum critical phenomena. *Phys. Rev. Lett.*, v. 90, p. 227902, 2003.
- VIDAL, G.; WERNER, R. F. Computable measure of entanglement. *Phys. Rev. A*, v. 65, p. 032314, 2002.
- WALLACE, P. R. The band theory of graphite. *Phys. Rev.*, v. 71, p. 622–634, 1947.
- WALTON, Z. D. et al. Decoherence-free subspaces in quantum key distribution. *Phys. Rev. Lett.*, v. 91, p. 087901, 2003.
- WÓDKIEWICZ, K. Stochastic decoherence of qubits. *Opt. Express*, v. 8, n. 2, p. 145–152, 2001.
- WEEDBROOK, C. et al. Gaussian quantum information. *Rev. Mod. Phys.*, v. 84, p. 621–669, 2012.
- WEINBERG, S. *Quantum Theory of Fields Volume 1: Foundations*. 1. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1995.
- WIGHTMAN, A. S.; SCHWEBER, S. S. Configuration space methods in relativistic quantum field theory. i. *Phys. Rev.*, v. 98, p. 812–837, 1955.
- WIGNER, E. On unitary representations of the inhomogeneous lorentz group. *Annals of Mathematics*, v. 40, n. 1, p. 149 – 204, 1939.
- WINELAND, D. J. et al. Double-resonance and optical-pumping experiments on electromagnetically confined, laser-cooled ions. *Opt. Lett.*, v. 5, n. 6, p. 245–247, 1980.
- WINELAND, D. J. et al. Experimental issues in coherent quantum-state manipulation of trapped atomic ions. *J. Res. Ntl. Inst. Stand. Technol.*, v. 103, p. 259 – 328, 1998.
- WOOTERS, W. K. Entanglement of formation and concurrence. *Quantum Information and Computation*, v. 1, n. 1, 2001.

- WU, G. Y.; LUE, N. Y. Graphene-based qubits in quantum communications. *Phys. Rev. B*, v. 86, p. 045456, 2012.
- WU, G. Y.; LUE, N. Y.; CHANG, L. Graphene quantum dots for valley-based quantum computing: A feasibility study. *Phys. Rev. B*, v. 84, p. 195463, 2011.
- YAMAGUCHI, F.; YAMAMOTO, Y. Quantum simulation of the t-j model. *Superlattices and Microstructures*, v. 32, n. 4, p. 343 – 345, 2002.
- YU, J. E. T. Entanglement evolution in a non-markovian environment. *Optics Communications*, v. 283, p. 676 – 680, 2010.
- YU, T. Non-markovian quantum trajectories versus master equations: Finite-temperature heat bath. *Phys. Rev. A*, v. 69, p. 062107, 2004.
- YU, T.; EBERLY, J. Sudden death of entanglement: Classical noise effects. *Optics Communications*, v. 264, n. 2, p. 393 – 397, 2006.
- YU, T.; EBERLY, J. H. Phonon decoherence of quantum entanglement: Robust and fragile states. *Phys. Rev. B*, v. 66, p. 193306, 2002.
- YU, T.; EBERLY, J. H. Qubit disentanglement and decoherence via dephasing. *Phys. Rev. B*, v. 68, p. 165322, 2003.
- YU, T.; EBERLY, J. H. Finite-time disentanglement via spontaneous emission. *Phys. Rev. Lett.*, v. 93, p. 140404, 2004.
- ZHANG, Y. et al. Experimental observation of the quantum hall effect and berry's phase in graphene. *Nature*, v. 438, p. 201, 2005.
- ZHU, S.; STROSCIO, J. A.; LI, T. Programmable extreme pseudomagnetic fields in graphene by a uniaxial stretch. *Phys. Rev. Lett.*, v. 115, p. 245501, 2015.