



JORDANA TORRICO FERREIRA

**EMARANHAMENTO TÉRMICO E EFEITO
MAGNETOCALÓRICO DO MODELO ISING-XYZ DE
ESTRUTURA TIPO DIAMANTE**

LAVRAS - MG

2014

JORDANA TORRICO FERREIRA

**EMARANHAMENTO TÉRMICO E EFEITO MAGNETOCALÓRICO DO
MODELO ISING-XYZ DE ESTRUTURA TIPO DIAMANTE**

Dissertação de mestrado apresentada à
Universidade Federal de Lavras, como
parte das exigências do Programa de Pós-
Graduação em Física, área de concentra-
ção em Física da Matéria Consensada,
para a obtenção do título de Mestre.

Orientador

Dr. Sergio Martins de Souza

Coorientadores

Dr. Moises Rojas Leyva

Dr. Onofre Rojas Santos

LAVRAS - MG

2014

JORDANA TORRICO FERREIRA

**EMARANHAMENTO TÉRMICO E EFEITO
MAGNETOCALÓRICO DO MODELO ISING-XYZ DE
ESTRUTURA TIPO DIAMANTE**

Dissertação de mestrado apresentada à
Universidade Federal de Lavras, como
parte das exigências do Programa de Pós-
Graduação em Física, área de concentra-
ção em Física da Matéria Consensada,
para a obtenção do título de Mestre.

APROVADA em 14 de julho de 2014.

Dr. Eduardo Vasquez Corrêa Silva - UERJ

Dr. Germano Amaral Monerat - UERJ

Dr. Sergio Martins de Souza

Orientador

LAVRAS - MG

2014

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus orientadores; Prof. Dr. Sergio Martins de Souza, Prof. Dr. Onofre Rojas e Prof. Dr. Moises Rojas, pela orientação à pesquisa;

Agradeço a CAPES, FAPEMIG e CNPq, pelo apoio financeiro prestados durante a realização do trabalho;

Agradeço à Universidade Federal de Lavras, pelo fornecimento da excelente estrutura física e pessoal.

RESUMO

Essa dissertação de mestrado tem como objetivo estudar a entropia residual, o efeito magnetocalórico e investigar o comportamento do emaranhamento térmico na cadeia de spin do tipo diamante Ising-XYZ, sendo essa uma cadeia infinita. Com essa finalidade, revisamos aqui os conceitos básicos e fundamentais da termodinâmica e magnetização no modelo de Ising unidimensional e, dentro do formalismo da mecânica quântica, introduzimos o operador densidade, a concorrência e o conceito de emaranhamento térmico. De posse desse ferramental teórico, abordamos o modelo de interesse estudando os diagramas de fase e a magnetização induzida por um campo magnético externo à temperatura zero. Utilizando a técnica de matriz de transferência, obtemos a energia livre de Helmholtz em sua forma exata, a partir da qual derivamos a entropia e o efeito magnetocalórico. Em particular, observamos que este modelo apresenta entropia residual devido à frustração geométrica da cadeia. Finalmente, utilizando o operador densidade, determinamos a concorrência do sistema a fim de estudar as propriedades do emaranhamento térmico. Os resultados mostram um deterioramento do emaranhamento para altas temperaturas, levando a configurações em que crescente, o emaranhamento térmico reaparece no sistema, até que, para uma certa temperatura limiar, ele desaparece por completo.

Palavras-chave: Ising-Heisenberg. Entropia residual. Efeito magnetocalórico. Emaranhamento térmico.

ABSTRACT

This master degree dissertation aims to study the magnetocaloric effect and investigates the behavior of the thermal entanglement in a diamond-type spin Ising-XYZ chain. To this end, we review the basic and fundamental concepts of thermodynamics and magnetization in one-dimensional Ising model, and, within the quantum mechanics formalism, we introduce the density operator, the concurrence and the concept of thermal entanglement. Following this theoretical approach, we discuss our spin-chain model by studying the phase diagrams and magnetization as functions of an external magnetic field at zero temperature. Using the transfer-matrix method, we obtain the exact Helmholtz free energy, from which we derive the entropy and the magnetocaloric effect. In particular, we note that this spin-chain model has residual entropy due to geometrical frustration. Finally, using the density operator, we determine the system concurrence in order to study the entanglement thermal properties. Our results show the vanishing of the quantum entanglement for high temperatures, leading to configurations in which, for certain parameters, the system is completely disentangled. However, for some special situations, if one keeps increasing the temperature, the thermal entanglement reappears in the system until it vanishes completely for a certain threshold temperature.

Keywords: Ising-Heisenberg. Residual entropy. Magnetocaloric effect. Thermal entanglement.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Distribuição dos íons magnéticos em uma estrutura paramagnética.	22
Figura 2	Distribuição dos íons magnéticos em uma estrutura ferromagnética.	22
Figura 3	Distribuição dos íons magnéticos em uma estrutura antiferromagnética.	23
Figura 4	Distribuição dos íons magnéticos em uma estrutura Ferrimagnética.	23
Figura 5	Frustração geométrica de três spins dispostos em uma rede triangular.	24
Figura 6	Cadeia de Ising com interações de primeiros vizinhos, cíclica de N sítios.	27
Figura 7	Cadeia tipo diamante Ising-XYZ anisotrópica.	43
Figura 8	Diagrama de fase à temperatura zero assumindo os valores fixos de $J_z/J = 0$ e $J = 1$. (a) Na ausência de campo magnético para J_0/J versus γ . (b) Para J_0/J versus h e assumindo $\gamma = 0,95$	47
Figura 9	Diagramas de fase à temperatura zero assumindo os valores fixos de $J = 1$ e $J_0/J = -0,3$. Em (a) para h versus γ assumindo $J_z/J = 0$ e em (b) para h/J versus γ assumindo $J_z/J = 0,3$	48
Figura 10	Magnetização à temperatura zero em função do parâmetro de anisotropia γ e do campo magnético h/J , assumindo os valores fixos $J = 1$, $J_0/J = -0,3$ e $J_z/J = 0,3$	50

- Figura 11 Curvas de magnetização à temperatura zero em função do campo magnético para os valores do fator de anisotropia $\gamma = 0,4$, $\gamma = 0,45$, $\gamma = 0,5$ e $\gamma = 0,55$, assumindo os valores fixos de $J = 1$, $J_0/J = -0,3$ e $J_z/J = 0,3$ 50
- Figura 12 Curvas de magnetização à temperatura zero em função do campo magnético h , assumindo $J_z/J = 0$ e $J = 1$ fixos. (a) Assumindo $\gamma = 0,99$ e diferentes valores de J_0/J . (b) Assumindo $J_0/J = -0,3$ e diferentes valores de γ 51
- Figura 13 Densidade de entropia no limite de baixa temperatura $T/J = 0,01$ para os valores fixos de $J = 1$ e $J_z/J = 0$. A região escura corresponde à entropia diferente de zero enquanto a região branca corresponde a entropia zero. (a) Entropia em função de γ versus h para o valor fixo de $J_0/J = -0,3$, (b) Entropia em função de J_0/J versus h para o valor fixo de $\gamma = 0,95$ e (c) Entropia em função J_0/J versus γ na ausência de campo magnético. 54
- Figura 14 Entropia em função da temperatura T/J e do campo magnético h , assumindo $J = 1$, $J_z/J = 0$, $J_0/J = -0,3$ e a entropia constante. (a) Para o valor fixo de $\gamma = 0,95$. (b) Para o valor fixo de $\gamma = 1,0$ 56
- Figura 15 Parâmetro de Grüneisen Γ_h em função do campo magnético h/J , assumindo $J_0/J = -0,3$, $J = 1$, $J_z/J = 0$ fixos e valores da temperatura T/J . (a) $\gamma = 0,95$, (b) $\gamma = 0,99$, e (c) $\gamma = 1,0$ 57

Figura 16 Concorrência do emaranhamento térmico no limite de baixa temperatura $T/J = 0,01$ para o valor fixo de $J = 1$ (a) γ versus h/J e $J_0/J = -0,3$ e $J_z/J = 0,3$ fixos, (b) γ versus h/J e $J_0/J = -0,3$ e $J_z/J = 0$ fixos, (c) J_0/J versus γ e $h/J = 0$ e $J_z/J = 0$ fixos e (d) J_0/J versus h/J e $\gamma = 0,95$ e $J_z/J = 0$ fixos. 65

Figura 17 Deterioração do emaranhamento térmico quando a temperatura aumenta assumindo $J = 1$, $J_0/J = -0,3$ e $J_z/J = 0,3$ fixos. a) $T/J = 0,02$. b) $T/J = 0,04$. c) $T/J = 0,08$. d) $T/J = 0,16$. Observa-se com o aumento da temperatura, o surgimento de regiões não emaranhadas $\mathcal{C} = 0$, regiões em azul. 67

Figura 18 Deterioração do emaranhamento térmico quando a temperatura aumenta assumindo $J = 1$. (a) Concorrência como função de T/J e J_0/J assumindo $J_z/J = 0$, $h/J = 0,27$ e $\gamma = 0,95$. (b) Concorrência como função de T/J e J_0/J assumindo $J_z/J = 0,3$, $h/J = 0,35$ e $\gamma = 0,6$. (c) Concorrência como função de T/J e γ assumindo $J_0/J = 0,3$, $J_z/J = 0$ e $h/J = 0,3$. (d) Concorrência como função de T/J e γ assumindo $J_0/J = 0,3$, $J_z/J = 0,3$ e $h/J = 0,3$. Observa-se com o aumento da temperatura, o surgimento de regiões não emaranhadas $\mathcal{C} = 0$, regiões em azul. 68

LISTA DE SÍMBOLOS

$Z_{\mathcal{N}}$	Função de partição do sistema
k_B	Constante de Boltzmann
T	Temperatura absoluta do sistema
ε_i	Autoenergia do hamiltoniano
f	Energia livre de Helmholtz
N	Número de partícula
S	Entropia do sistema por sítio
V	Volume
C	Calor específico por sítio
p	Pressão
M	Magnetização por sítio
μ	Momento magnético
h	Campo magnético externo
L	Momento angular
m_e	Massa do elétron
e	Carga do elétron
χ	Susceptibilidade
Γ_h	Parâmetro de Grüneisen
\mathcal{H}	Hamiltoniano
\mathbf{T}	Matriz de transferência
ρ	Operador densidade
$E_o F$	Emaranhamento de formação
\mathcal{C}	Concorrência
\mathbf{S}	Operador de spin
σ	Spin Ising

- ω Peso de Boltzmann
- σ_x Componente x da matriz de Pauli
- σ_y Componente y da matriz de Pauli
- σ_z Componente z da matriz de Pauli
- J_0 Parâmetro de acoplamento Ising
- J Parâmetro de acoplamento Heisenberg
- J_Z Parâmetro de acoplamento Heisenberg na componente z
- γ Fator de anisotropia
- \mathbf{V} e \mathbf{V}^{-1} Matrizes que diagonaliza a matriz de transferência
- \mathbf{D} Matriz de transferência diagonalizada
- λ Autovalor da matriz de transferência
- $|\psi\rangle$ Vetor do estado quântico
- c_n Amplitude de probabilidade
- P_n Probabilidade
- \mathcal{E} Espaço de Hilbert
- Λ Autovalor da matriz densidade
- R Matriz
- H Hamiltoniano por plaqueta
- ϱ Operador densidade por plaqueta

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
2	PROPRIEDADES E GRANDEZAS TERMODINÂMICAS . .	16
2.1	Propriedades e Grandezas Termodinâmicas	16
2.1.1	Função de Partição	16
2.1.2	Energia Livre de Helmholtz	17
2.1.3	Entropia	17
2.1.4	Calor Específico	18
2.2	Magnetização e Propriedades Magnéticas	19
2.2.1	Momentos Magnéticos	19
2.2.2	Magnetização	20
2.2.3	Susceptibilidade Magnética	21
2.2.4	Propriedades Magnéticas	21
2.3	Frustração Geométrica	24
2.4	Efeito Magnetocalórico	25
3	MODELO DE ISING	27
3.1	Matriz de Transferência	29
3.2	Termodinâmica	30
4	EMARANHAMENTO	33
4.1	Operador Densidade	34
4.2	Função de Correlação	36
4.3	Estados de Bell	37

4.4	Emaranhamento de Formação e Concorrência	38
4.5	Emaranhamento Térmico	40
5	CADEIA DE ESTRUTURA TIPO DIAMANTE ISING-XYZ	
	ANISOTRÓPICA	42
5.1	Modelo Ising-XYZ Anisotrópico	43
5.2	Diagramas de Fase à Temperatura Zero	45
5.3	Platôs da magnetização à temperatura zero	49
5.4	Termodinâmica do Modelo	52
5.5	Efeito Magnetocalórico	55
6	EMARANHAMENTO TÉRMICO NO MODELO ISING-XYZ	
	ANISOTRÓPICO	59
6.1	Quantificação do Emaranhamento	60
6.2	Concorrência	63
6.3	Deterioração do Emaranhamento	66
7	CONCLUSÃO	70
	APÊNDICE	72
	REFERÊNCIAS	74

1 INTRODUÇÃO

A Física da Matéria Condensada é uma parte da física que estuda, *a grosso modo*, as propriedades físicas dos materiais em que seus átomos ou partículas estão concentrados, de forma que, em muitas situações, esses passam a atuar de forma "coletiva". A Física da Matéria Condensada, portanto, é uma área que usa as teorias existentes para modelar ou descobrir materiais com diferentes características, assim como prever a existência de novos materiais com propriedades surpreendentes (OLIVEIRA; JESUS, 2011). Dentro dessa grande área, o objetivo de interesse com essa pesquisa é investigar materiais magnéticos que possam ser descritos por um modelo tipo diamante Ising-XYZ anisotrópico (ANANIKIAN et al., 2012; ANANIKIAN; LAZARYAN; NALBAND, 2012; ROJAS et al., 2011, 2012). Esse tipo de estrutura pode ser encontrada na natureza no mineral *Azurite* (JESCHKE et al., 2011; KANG et al., 2009).

Nesta dissertação de mestrado, estudamos a termodinâmica do modelo de estrutura tipo diamante Ising-XYZ anisotrópico, analisando os diagramas de fase e os platôs de magnetização à temperatura zero. Em especial, verificamos que o modelo apresenta entropia residual devido ao fato da cadeia exibir frustração geométrica e, dentre os principais resultados, constatamos a presença do efeito magnetocalórico. Esse efeito foi observado pela primeira vez pelo físico alemão Emil Warburg em 1881, quando percebeu que um metal poderia aquecer-se ao ser aproximado de um forte ímã (WANBURG, 1881). Esse efeito térmico induzido pelo magnetismo é fortemente correlacionado com propriedades físicas dos materiais, tais como calor específico, condutividade térmica e magnetização. Ele ocorre, portanto, quando há uma variação de temperatura de um material magnético devido à aplicação de um campo magnético sobre ele. Dentre as aplicações do

efeito magnetocalórico, destacamos à busca por refrigeradores menos poluentes, com menor perda de energia e sem a necessidade de compressores (GAMA et al., 2004).

De particular interesse para o trabalho que desenvolvemos nesta dissertação é o fato do modelo proposto apresentar emaranhamento térmico. O primeiro conceito de emaranhamento surgiu em 1935, onde Albert Einstein, Boris Podolsky e Nathan Rosen publicaram o artigo "*Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?*". Nesse trabalho, os autores descreveram um sistema quântico que contrariava o princípio da localidade, mostrando que o resultado da medida realizada numa parte desse sistema tinha um efeito *não local* sobre outra parte do sistema, mesmo que a distância entre as duas partes fosse grande. Assim, os autores mostraram que, ao se fazer uma medida num sistema com correlações quânticas, alterava-se de forma espontânea as partes do sistema que estavam "entrelaçadas" entre si (EINSTEIN; PODOLSKY; ROSEN, 1935). O resultado desse artigo ficou conhecido como paradoxo de EPR e, inspirado nele, Schrödinger criou sua famosa metáfora do *gato*. Na década de 1960, o físico John Bell levou o emaranhamento ao laboratório, obtendo o que hoje conhecemos como desigualdade de Bell, que é uma importante propriedade satisfeita pelos sistemas emaranhados (NIELSEN; CHUANG, 2010; PAHLAVANI, 2012).

Atualmente, o emaranhamento quântico tem sido alvo de intensas pesquisas tanto em física básica quanto em aplicações tecnológicas. Podemos utilizar o emaranhamento para diversos fins, tais como teletransporte quântico, correlação quântica de erros, protocolos de computação quântica, criptografia quântica, entre outros. Dentro desse contexto, o objetivo de interesse é estudar o emaranhamento térmico do modelo de estrutura tipo Ising-XYZ anisotrópico.

Nesta dissertação, portanto, estudamos o efeito magnetocalórico e o ema-

ranhamento térmico, verificando como esse último se comporta com relação à temperatura. Esta dissertação foi dividida da seguinte forma:

Nos capítulos 2, 3 e 4, apresentamos uma introdução aos conceitos e técnicas utilizadas no desenvolvimento deste trabalho. No capítulo 5 é apresentado o modelo de estrutura tipo diamante Ising-XYZ anisotrópico a ser estudado e os diagramas de fase à temperatura zero, magnetização, a termodinâmica do modelo e efeito magnetocalórico. No capítulo 6 estudamos o emaranhamento térmico e fizemos uma análise de como este se comporta com a temperatura. Por fim, no capítulo 7, são apresentadas as conclusões da dissertação e as perspectivas futuras do trabalho.

2 PROPRIEDADES E GRANDEZAS TERMODINÂMICAS

A Mecânica Estatística é uma teoria probabilística que estabelece a conexão entre o macroscópico (Termodinâmica) e o microscópico (Mecânica). Ao se tentar descrever as propriedades de um sistema formado por um grande número de partículas, se torna necessário recorrer a uma descrição probabilística do estado de um sistema (SALINAS, 2013).

Neste capítulo fizemos uma revisão termodinâmica de materiais magnéticos. Vamos começar com a função de partição e energia livre de Helmholtz, a partir das quais é possível obter diversas grandezas termodinâmicas. A seguir estudamos a entropia, o calor específico, a magnetização e a susceptibilidade magnética. E por fim discutimos a frustração geométrica e o efeito magnetocalórico, que são importantes para o estudo do modelo.

2.1 Propriedades e Grandezas Termodinâmicas

2.1.1 Função de Partição

A função de partição canônica é uma grandeza termodinâmica que descreve as propriedades estatísticas de um sistema em equilíbrio térmico. Esta função leva em conta a soma das energias de todos os estados i do sistema (SALINAS, 2013), sendo definida por

$$Z_N = \sum_i e^{-\beta \varepsilon_i}, \quad (1)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura e ε_i são as energias do sistema. Os termos $e^{-\beta\varepsilon_i}$ são chamados de pesos de Boltzmann e dão uma medida de probabilidade do sistema encontrar-se no estado i .

2.1.2 Energia Livre de Helmholtz

A energia livre de Helmholtz é a energia interna de um sistema que pode ser transformada em trabalho realizado pelo sistema sobre sua vizinhança a temperatura constante. Em termos quantitativos a energia livre de Helmholtz (STYER, 2007) é definida por:

$$f = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N} \ln \mathcal{Z}_N, \quad (2)$$

onde \mathcal{Z}_N é a função de partição do sistema e N o número de sítios da rede. A partir da energia livre de Helmholtz podemos definir grandezas termodinâmicas do sistema como a entropia, a magnetização, o efeito magnetocalórico e entre outras.

2.1.3 Entropia

A entropia é uma função de estado associada a um estado de equilíbrio termodinâmico de um sistema. Da mesma forma que a primeira lei da termodinâmica corresponde à existência da energia interna como função de estado, a segunda lei corresponde à existência da entropia (NUSSENZVEIG, 2002). Disto decorre que a entropia quantifica o estado dinâmico de um sistema que varia em função do seu estado inicial de organização da matéria, caracterizando um processo irreversível. Em outras palavras, ela representa uma parte da energia interna que não pode ser convertida em trabalho (BORGES, 1999; CALLEN, 1985), fornecendo uma infor-

mação quantitativa da desordem de um sistema termodinâmico. Podemos escrever a entropia do sistema em função da energia livre de Helmholtz mantendo o volume constante, como

$$S = - \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_V. \quad (3)$$

2.1.4 Calor Específico

O calor específico é a grandeza que relaciona a variação térmica de determinada substância ao receber uma certa quantidade de calor, sendo este último a energia térmica em trânsito de um corpo para outro, devido, unicamente, a uma diferença de temperatura (STYER, 2007). Assim, o calor específico é uma grandeza positiva definida $C \geq 0$, e está associada à entropia (SALINAS, 2013). O calor específico à pressão constante é dado por

$$C_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p, \quad (4)$$

e o calor específico para um volume constante é:

$$C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V. \quad (5)$$

Relacionando o calor específico com a energia livre usando a equação (3), obtemos, por sítio, o calor específico ao volume constante

$$C_V = -T \left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \right)_V. \quad (6)$$

2.2 Magnetização e Propriedades Magnéticas

2.2.1 Momentos Magnéticos

a) Momento Magnético Orbital

Em um sistema atômico, o momento magnético depende da camada eletrônica ocupada pelo elétron, e quando esta camada está incompleta gera um momento magnético não nulo (BLUNDELL, 2001). Assim, podemos associar o momento magnético ao momento angular de um elétron:

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e}\vec{L}, \quad (7)$$

onde $\vec{\mu}$ é o momento magnético orbital, L é o momento angular orbital, e é o módulo da carga elétrica do elétron e m_e é a massa do elétron. Observamos que $\vec{\mu}$ e \vec{L} são proporcionais e têm sentidos oposto.

b) Momento Magnético de Spin

O momento magnético de spin está relacionado às partículas elementares que possuem momento angular intrínseco ou de spin. Este momento angular intrínseco $\vec{\mu}_s$ é dado por

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m_e}\vec{S}, \quad (8)$$

onde $\vec{\mu}_s$ e \vec{S} são proporcionais e seus vetores têm sentidos oposto. Podemos relacionar o comportamento do spin através das matrizes de Pauli (BLUNDELL,

2001)

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

e é possível definir ainda o operador do momento angular de spin como

$$\vec{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}, \quad (10)$$

onde $\mathbf{S}_x = \frac{1}{2}\sigma_x$, $\mathbf{S}_y = \frac{1}{2}\sigma_y$ e $\mathbf{S}_z = \frac{1}{2}\sigma_z$.

2.2.2 Magnetização

Átomos com camadas eletrônicas incompletas geram momento magnético não nulo, fazendo com que surjam diferentes tipos de ordenamentos magnéticos nos materiais (BLUNDELL, 2001). O momento magnético de um átomo decorre do momento angular orbital e do momento magnético de spin dos elétrons. Ocorre magnetização do material quando a soma dos momentos magnéticos de spin é diferente de zero. Isso acontece quando a temperatura é suficientemente baixa ou há um campo magnético externo h aplicado ou o campo magnético é produzido pela interação dos momentos magnéticos de spin, sendo, esse último, o que se denomina magnetização espontânea (OLIVEIRA; JESUS, 2011).

Em termos quantitativos, a magnetização é a medida da média do ordenamento dos momentos magnéticos por sítio, sendo definida por

$$\vec{M} = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta V} \sum_i \vec{\mu}_i, \quad (11)$$

onde μ_i são os momentos magnéticos de spin e ΔV é o volume do material. Em

particular, podemos relacionar a magnetização por sítio com a energia livre de Helmholtz

$$\vec{M} = -\frac{\partial f}{\partial h}. \quad (12)$$

Os spins tendem a se alinhar paralelamente ao campo magnético externo, resultando em uma magnetização que aumenta linearmente como o campo até a saturação. Já em um material antiferromagnético real, esta simples imagem é modificada em vários aspectos que serão discutidos em detalhes a seguir. Em particular, sob circunstâncias apropriadas, as flutuações quânticas podem induzir platôs de magnetização. Tais platôs são observados em um número significativo de compostos (LACROIX; MENDELS; MILA, 2011).

2.2.3 Susceptibilidade Magnética

Os materiais paramagnéticos e diamagnéticos são caracterizados pela capacidade que têm de se magnetizarem. Esta resposta à magnetização é quantificada através da susceptibilidade magnética. Os diamagnéticos são caracterizados por um pequeno valor da susceptibilidade magnética $\chi < 0$ e os paramagnéticos por $\chi > 0$ (OLIVEIRA; JESUS, 2011). Quando o campo magnético $h \rightarrow 0$, a susceptibilidade magnética é dada por

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} = -\frac{\partial^2 f}{\partial h^2}. \quad (13)$$

2.2.4 Propriedades Magnéticas

a) Paramagnetismo

Os materiais paramagnéticos são caracterizados por possuírem magnetização nula na ausência de um campo magnético externo, pois seus spins estão distribuídos aleatoriamente. Quando aplicado um campo magnético externo os

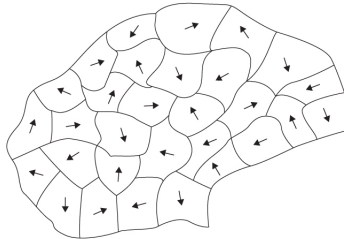


Figura 1 Distribuição dos íons magnéticos em uma estrutura paramagnética.

spins tendem a se alinhar paralelamente ao campo e isso faz com que o material apresente uma magnetização diferente de zero. A susceptibilidade magnética neste caso será positiva (OLIVEIRA; JESUS, 2011).

b) Ferromagnetismo

Os materiais ferromagnéticos são caracterizados por apresentarem magnetização espontânea abaixo de uma determinada temperatura (temperatura de Curie). Acima desta temperatura o material perde sua magnetização e torna-se um

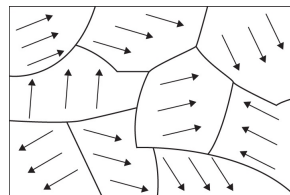


Figura 2 Distribuição dos íons magnéticos em uma estrutura ferromagnética.

material paramagnético, ocorrendo uma transição de fase de ferromagnético para paramagnético. A susceptibilidade magnética tem um dependência linear com o inverso da temperatura acima da temperatura crítica (OLIVEIRA; JESUS, 2011).

c) Antiferromagnetismo

Os materiais antiferromagnéticos são qualitativamente semelhantes a um material ferromagnético, porém caracterizados pelo ordenamento de todos seus momentos magnéticos de spin na mesma direção mas em sentidos opostos. Quando

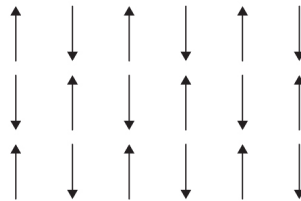


Figura 3 Distribuição dos íons magnéticos em uma estrutura antiferromagnética.

seus momentos magnéticos de spin têm mesmo valor absoluto, eles se anulam ficando com magnetização nula (CASQUILHO; TEIXEIRA, 2012).

d) Ferrimagnetismo

Os materiais ferrimagnéticos também têm qualitativamente as mesmas semelhanças de um material ferromagnético, mas com seus momentos magnéticos de spin na mesma direção e sentido oposto. Porém, seus momentos de spin não

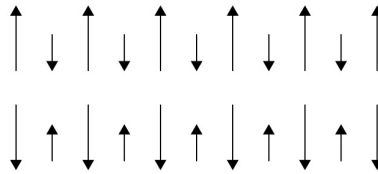


Figura 4 Distribuição dos íons magnéticos em uma estrutura Ferrimagnética.

têm mesmo valor, assim a magnetização é diferente de zero (CASQUILHO; TEIXEIRA, 2012).

2.3 Frustração Geométrica

Frustração é a incapacidade que um sistema tem de minimizar sua energia por consequência de interações competitivas, sendo originada tanto por desordem quanto por propriedades estruturais do material. Chamamos essa última de frustração geométrica. É importante citar que qualquer distorção estrutural, pode inevitavelmente alterar a frustração e, como consequência, dar origem a estados fundamentais diferentes.

A maior parte dos materiais magnéticos frustrados é conhecida como magnetos geometricamente frustrados. Nesses sistemas, a frustração surge do efeito de competição de interação de trocas equivalentes, que é consequência da força entre os elétrons e gera a diferença entre a energia de spins paralelos e antiparalelos. Um típico exemplo de frustração geométrica é a de três spins dispostos em uma rede triangular, onde há uma interação antiferromagnética do tipo Ising entre eles, isto é, os spins possuem apenas dois estados *up* ou *down*. Esta configuração pode ser visualizada na Figura 5.

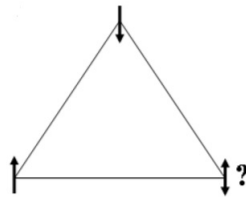


Figura 5 Frustração geométrica de três spins dispostos em uma rede triangular.

Vemos aqui que ao se posicionar dois spins anti-paralelos, o terceiro não será capaz de minimizar simultaneamente as interações com os outros dois, ocorrendo alta degenerescência do estado fundamental.

Podemos quantificar a frustração geométrica através do cálculo da entropia à temperatura zero que é chamada de entropia residual. A entropia de um sistema à

temperatura nula deve ser determinada pela degenerescência de seu estado fundamental, sendo estritamente zero caso o sistema não seja degenerado (DIEP, 2004; LACROIX; MENDELS; MILA, 2011).

2.4 Efeito Magnetocalórico

O efeito magnetocalórico (EMC) se dá quando um material magnético é submetido a uma variação de campo magnético externo e, conseqüentemente, sua temperatura sofre uma variação. De fato, não apenas varia a temperatura do material, mas também varia a entropia magnética do sistema sob o efeito do campo magnético (TISHIN; SPICHKIN, 2003). O EMC é intrínseco a todos os materiais magnéticos.

A entropia desse tipo de sistema pode ser considerada como a soma de duas contribuições: a entropia relacionada à ordenação magnética e a entropia relacionada à temperatura do sistema. O campo magnético aplicado ao sistema tende a alinhar os spins, que estão desordenados devido à energia térmica de agitação e, conseqüentemente, a entropia magnética será reduzida (TISHIN; SPICHKIN, 2003).

Podemos caracterizar o EMC em dois processos: adiabático e isotérmico. O processo adiabático consiste em isolar o material magnético para que não ocorra troca de calor. À medida que se aplica um campo magnético externo no material sua temperatura aumenta, a fim de preservar a entropia total do sistema. Removendo o campo magnético, a entropia magnética tende a aumentar e a temperatura do material diminui até atingir a temperatura inicial. No processo isotérmico, por outro lado, o material está em contato com o reservatório, fazendo troca de calor com a aplicação do campo, mantendo sua temperatura constante.

Para quantificar o EMC devemos usar a relação de Maxwell (TISHIN; SPICHKIN, 2003), que é dada por

$$\left(\frac{\partial \mathcal{S}(T, h)}{\partial h}\right)_T = \left(\frac{\partial M(T, h)}{\partial T}\right)_h, \quad (14)$$

o calor específico a campo magnético constante é dado por

$$C_h = T \left(\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial T}\right)_h. \quad (15)$$

Relacionando as equações (14) e (15) obtemos para um processo adiabático a expressão do efeito magnetocalórico,

$$dT = \frac{T}{C_h} \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_S dM. \quad (16)$$

A equação (16) pode ser relacionada ao parâmetro de Grüneisen para sistemas magnético em condições adiabáticas (GARST; ROSCH, 2005; ZHU et al., 2003)

$$\Gamma_h = \frac{1}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial h}\right)_S = -\frac{1}{C_h} \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_h, \quad (17)$$

onde Γ_h é o parâmetro de Grüneisen, C_h é o calor específico a um campo magnético constante e $(\partial M/\partial T)_h$ é a variação da magnetização M com relação à variação da temperatura T . Este parâmetro Γ_h quantifica o efeito magnetocalórico (GARST; ROSCH, 2005).

3 MODELO DE ISING

O modelo de Ising é utilizado para descrever fenômenos magnéticos em materiais ferromagnéticos (CASQUILHO; TEIXEIRA, 2012). Materiais ferromagnéticos, como discutido brevemente no capítulo anterior, são materiais que apresentam magnetização espontânea abaixo de uma determinada temperatura, conhecida como temperatura de Curie, acima da qual a magnetização desaparece. Historicamente, esse modelo descreve com sucesso o comportamento de um sistema de spins fixos em uma rede com atração entre primeiros vizinhos. Ele foi proposto por Wilhelm Lenz em 1920 e resolvido por seu aluno de doutorado Ernst Ising em 1925. Ernst Ising resolveu o modelo exatamente para uma dimensão, configuração para a qual a transição de fase ocorre em $T = 0$. Em 1944, Onsager resolveu o modelo de Ising bi-dimensional para campo magnético nulo (SALINAS, 2013).

O modelo mais simples unidimensional e não trivial de Ising com interações de curto alcance de uma rede cíclica de N sítios (BAXTER, 1982) é descrito na Figura 6.

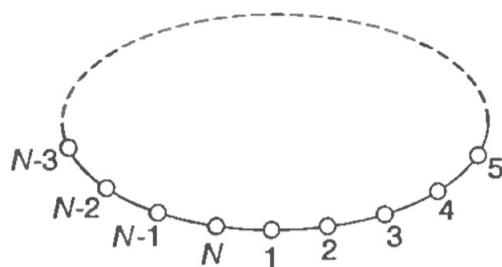


Figura 6 Cadeia de Ising com interações de primeiros vizinhos, cíclica de N sítios.

A solução do modelo descrito pela Figura 6 pode ser encontrada em diversos livros de Física Estatística, utilizamos aqui as referências Casquilho e Teixeira

(2012) e Salinas (2013). Assim, o hamiltoniano deste modelo é dado por

$$\mathcal{H} = -J_0 \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (18)$$

onde $\sigma_i = \pm 1/2$ e $i = 1, 2, 3, \dots, N$. O primeiro termo é a interação entre os primeiros vizinhos, onde J_0 é o parâmetro de interação, e o segundo termo é a interação do campo magnético externo h com o spin. Quando $J_0 > 0$, os spins de primeiros vizinhos tendem a se alinhar paralelamente formando um material ferromagnético, já para $J_0 < 0$ estes tendem a se alinhar antiparalelamente formando um material antiferromagnético.

A função de partição deste sistema é dada por

$$\mathcal{Z}_N = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{(K \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{L}{2} \sum_{i=1}^N (\sigma_i + \sigma_{i+1}))}, \quad (19)$$

onde $K = \beta J_0$, $L = \beta h$ e o segundo termo foi escrito de maneira simétrica. Adotando condições periódicas de contorno, podemos escrever a função de partição como

$$\mathcal{Z}_N = \sum_{\sigma} \prod_{i=1}^N \omega(\sigma_i, \sigma_{i+1}), \quad (20)$$

com $\omega(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \equiv e^{(K \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{L}{2} \sum_{i=1}^N (\sigma_i + \sigma_{i+1}))}$.

Um método de resolver a equação (20) usada nas referências Casquilho e Jesus (2012) e Salina (2013) é a técnica da matriz de transferência.

3.1 Matriz de Transferência

Podemos considerar a matriz de transferência como um operador, contendo as informações do spin da rede, "transferindo" informação de um sítio para o sítio mais próximo. Para se construir a matriz de transferência é preciso saber os autoestados do hamiltoniano $H_{i,i+1} = -J_0\sigma_i\sigma_{i+1} - h/2(\sigma_i + \sigma_{i+1})$. Sabendo quais são os autoestados, podemos construir os pesos de Boltzmann e, assim, construir a matriz de transferência.

Os pesos de Boltzmann são dados por

$$\omega(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \sum_j e^{-\beta\varepsilon_j(\sigma_i, \sigma_{i+1})} = e^{-\beta\varepsilon_1(\sigma_i, \sigma_{i+1})} + e^{-\beta\varepsilon_2(\sigma_i, \sigma_{i+1})}, \quad (21)$$

considerando que σ assume os valores $\pm 1/2$, obtêm-se quatro possibilidades possíveis para os pesos de Boltzmann, $\omega(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) = \omega(1)$, $\omega(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) = \omega(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) = \omega(0)$ e $\omega(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) = \omega(-1)$ e a matriz de transferência é definida por

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \omega(1) & \omega(0) \\ \omega(0) & \omega(-1) \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Podemos então, escrever cada termo da matriz de transferência para o modelo de Ising

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} e^{\left(\frac{K}{4} + \frac{L}{2}\right)} & e^{-\frac{K}{4}} \\ e^{-\frac{K}{4}} & e^{\left(\frac{K}{4} - \frac{L}{2}\right)} \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Como a matriz de transferência é diagonalizável, podemos fazer

$$\mathbf{V}\mathbf{T}\mathbf{V}^{-1} = \mathbf{D}, \quad (24)$$

onde \mathbf{V} é a matriz dos autovetores, \mathbf{V}^{-1} é a matriz transposta de \mathbf{V} e \mathbf{D} é a matriz de transferência diagonalizada. Assim

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}, \quad (25)$$

com seus autovalores sendo

$$\lambda_{\pm} = \frac{(\omega(1) + \omega(-1)) \pm Q}{2},$$

onde $Q = \sqrt{(\omega(1) + \omega(-1))^2 - 4(\omega(1)\omega(-1) - \omega(0)^2)}$.

3.2 Termodinâmica

A função de partição canônica pode ser escrita em termos dos autovalores da matriz de transferência

$$\mathcal{Z}_N = Tr(\mathbf{V}\mathbf{T}\mathbf{V}^{-1})^N = Tr(\mathbf{D}^N), \quad (26)$$

encontrando os seguintes autovalores

$$\lambda_{\pm} = e^{\frac{K}{4}} \cosh\left(\frac{L}{2}\right) \pm \left[e^{-\frac{K}{2}} \cosh^2\left(\frac{L}{2}\right) + 2 \sinh\left(\frac{K}{2}\right) \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (27)$$

assim podemos escrever a função de partição em termos dos autovalores

$$\mathcal{Z}_N = Tr(\mathbf{D}^N) = \lambda_+^N + \lambda_-^N = \lambda_+ \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right], \quad (28)$$

no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, usando que $\lambda_+ > \lambda_-$, obtemos

$$\mathcal{Z}_N = \lambda_+^N. \quad (29)$$

A partir da função de partição podemos calcular a energia livre de Helmholtz,

$$f = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N} \ln Z_N = -\frac{1}{\beta} \ln \lambda_+, \quad (30)$$

de forma que, substituindo λ_+ é dado pela equação (27), obtemos

$$f = -\frac{1}{\beta} \ln \left[e^{\left(\frac{\beta J}{4}\right)} \cosh\left(\frac{\beta h}{2}\right) + \left[e^{\left(-\frac{\beta J}{2}\right)} \cosh^2\left(\frac{\beta h}{2}\right) + 2 \sinh\left(\frac{\beta J}{2}\right) \right]^{\frac{1}{2}} \right]. \quad (31)$$

Com isso, a entropia por sítio pode ser calculada por

$$\mathcal{S} = - \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_V, \quad (32)$$

o calor específico por sítio é

$$C_V = T \left(\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial T} \right)_V, \quad (33)$$

e a magnetização por sítio é dada por

$$M_{(h,T)} = \left(\frac{\partial f}{\partial h} \right)_T = \frac{1}{2} \frac{\sinh\left(\frac{\beta h}{2}\right)}{\left[\sinh^2\left(\frac{\beta h}{2}\right) + e^{\beta J} \right]^{\frac{1}{2}}}. \quad (34)$$

Note que para campo nulo $h = 0$ e $T \neq 0$ a magnetização é nula.

O modelo de Ising percorreu uma longa história depois de ter sido resolvido exatamente em uma dimensão. Podemos interpretar as variáveis de spins de

diversas maneiras: como componentes do spin dos átomos, como uma indicação de que o sítio i pode estar ocupado por um átomo do tipo A , ou do tipo B e como que um número de ocupação que assinala a presença ou ausência de uma molécula numa determinada célula de um gás de rede. Essa multiplicidade de interpretação já indica o caráter universal do modelo, capaz de captar os aspectos essenciais do comportamento crítico (SALINAS, 2013).

4 EMARANHAMENTO

O emaranhamento é a capacidade que um sistema quântico possui de exibir correlações não locais. Toda vez que um estado apresenta correlação acima do limiar clássico, um tipo especial de correlação quântica, podemos afirmar que este sistema está emaranhado (ROJAS et al., 2012).

Schrödinger (1935, 555 p.) descreve o emaranhamento quântico como: "Quando dois sistemas, cujos estados conhecemos através de seus representantes (função de onda), entram em interação física temporária devido às forças conhecidas entre eles, e depois de um tempo de influência mútua os sistemas voltam a se separar, então eles não podem mais ser descritos da mesma forma que anteriormente, a saber, associados a cada um deles um representante próprio. Através da interação os dois representantes se tornam emaranhados."

Os estados de Bell são os exemplos mais conhecidos de estados emaranhados. Do ponto de vista teórico, estados desse tipo não podem ser escritos como o produto de suas partes, isto é, são estados que não podem ser separados em um produto tensorial de vetores de subespaços de Hilbert. Esta correlação entre seus constituintes é própria do emaranhamento. Estados não separáveis, portanto, são ditos emaranhados, uma vez que apresentam correlações quânticas que são mais fortes do que as correlações clássicas (NIELSEN; CHUANG, 2010).

O emaranhamento pode ser utilizado para diversos fins tecnológicos tais como teletransporte quântico, correlação quântica de erros, protocolos de computação quântica, distribuição de chave criptográfica quântica entre outros (PAHLAVANI, 2012).

Neste capítulo foi feita uma breve revisão sobre o operador densidade, a função de correlação, os estados de Bell, emaranhamento de formação, concorrên-

cia e o emaranhamento térmico.

4.1 Operador Densidade

Uma maneira de modelar sistemas quânticos consiste em utilizar o operador densidade ρ , também conhecido como matriz densidade, pois ele fornece uma descrição conveniente para sistemas quânticos que não são completamente conhecidos. O estado de um sistema físico em geral não é perfeitamente determinado. Este sistema passa a exibir uma incerteza estatística, além da incerteza intrínseca quântica. Neste caso, o operador densidade passa a ser descrito por (COHENTANOUDJI; DIU; LALOE, 2005)

$$\rho = \sum_n P_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|, \quad (35)$$

onde o sistema quântico está em um estado $|\varphi_n\rangle$ com probabilidade P_n . Este operador possui algumas propriedades: é um operador positivo, ou seja, para qualquer $|\varphi\rangle$, obtemos

$$\langle \phi | \rho | \phi \rangle = \sum_n P_n \langle \phi | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \phi \rangle = \sum_n P_n |\langle \phi | \varphi_n \rangle|^2. \quad (36)$$

Pela conservação de probabilidade, a propriedade de traço unitário ainda é válida:

$$Tr(\rho) = \sum_n P_n Tr(|\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|) = \sum_n P_n = 1. \quad (37)$$

a) Estado puro

Dado um estado quântico $|\varphi\rangle$, sendo este um estado puro, podemos descrevê-lo usando o operador densidade (COHENTANOOUDJI; DIU; LALOE, 2005)

$$\rho = |\varphi\rangle \langle\varphi|. \quad (38)$$

Podemos associar este operador densidade à matriz densidade, onde os elementos na base $\{|U_n\rangle\}$ da matriz é dado por

$$\rho_{nn'} = \langle U_{n'} | \rho | U_n \rangle = c_n c_{n'}^*. \quad (39)$$

onde c_n é a amplitude de probabilidade. Pela conservação da probabilidade, temos

$$\sum_n |c_n|^2 = \sum_n \rho_{nn'} = \text{Tr}(\rho) = 1. \quad (40)$$

Uma outra propriedade importante do estado puro é que $\rho = \rho^2$ e ρ representa um projetor.

a) Estado misto

O estado de um sistema físico em geral não é perfeitamente determinado. Estes sistemas passam a exibir uma incerteza estatística, além da incerteza intrínseca quântica. Neste caso, o operador densidade passa a ser (COHENTANOOUDJI; DIU; LALOE, 2005)

$$\rho = \sum_n P_n |\varphi_n\rangle \langle\varphi_n|, \quad (41)$$

onde o sistema quântico está em um estado $|\varphi_n\rangle$ com probabilidade P_n . Pela conservação da probabilidade, a propriedade de traço unitário é válida eq. (37), e

ρ não representa mais um projetor, logo $\rho \neq \rho^2$, assim

$$\text{Tr}(\rho^2) \leq 1. \quad (42)$$

4.2 Função de Correlação

A função de correlação revela informações parciais sobre as correlações quânticas de longo alcance que estão presentes em um estado, descrevendo como os graus de liberdade de um sítio são afetados pelos graus de liberdade de outros sítios. Em sistemas com vários corpos, aparecem naturalmente os estados correlacionados (AMICO et al., 2004). Assim, a função de correlação spin-spin situados há uma distancia r define a medida da correlação entre os spins dos sítios σ_i e σ_{i+r} (BELLUCI; OHANYAN, 2013; YEOMANS, 1992), e é dada por:

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_i \sigma_{i+r} e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (43)$$

para quaisquer sítios fixos i e $i+r$. Assumindo-se $\sigma_i = \pm 1/2$, temos que se o produto de $\sigma_i \sigma_{i+r} = 1$, os dois spins são os mesmos e quando $\sigma_i \sigma_{i+r} = -1$ eles são diferentes, de modo que a correlação dá uma noção de como os spins estão correlacionados: se $\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle = 1$ os spins estão alinhados paralelamente; Da mesma forma, se $\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle = -1$ os spins estão alinhados antiparalelamente; E se a correlação é zero, eles não estão correlacionados.

Utilizando a técnica da matriz de transferência e o processo descrito no Apêndice A (BELLUCCI; OHANYAN, 2013), obtemos

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle = \frac{1}{Z_N} \text{Tr}(\tilde{\omega}^{N-r} \tilde{\sigma} \tilde{\omega}^r \tilde{\sigma}). \quad (44)$$

onde $\tilde{\omega}$ é a matriz de transferência diagonalizada e $\tilde{\sigma} = \mathbf{V}^{-1}\sigma\mathbf{V}$.

4.3 Estados de Bell

Em um sistema quântico que tenha mais de um grau de liberdade, o espaço de Hilbert \mathcal{E} é descrito como um produto tensorial $\mathcal{E} = \mathcal{E}_a \otimes \mathcal{E}_b \otimes \dots$, em que cada subespaço \mathcal{E}_i esta associado a um grau de liberdade. Esta estrutura tensorial do espaço de Hilbert gera na mecânica quântica propriedades específicas do sistema, de tal forma que os vários graus de liberdade são correlacionados ou emaranhados (BASDEVANT; DALIBART, 2002).

Considerando um sistema físico com dois graus de liberdades A e B onde os estados são descritos pelo espaço de Hilbert $\mathcal{E} = \mathcal{E}_A \otimes \mathcal{E}_B$, podemos escrever os vetores de estado de forma fatorizável (BASDEVANT; DALIBART, 2002)

$$|\varphi\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle. \quad (45)$$

Preparando o sistema em um certo estado, de tal maneira que o subsistema do estado seja bem definido, $|\alpha\rangle$ para A e $|\beta\rangle$ para B , o estado arbitrário \mathcal{E} pode não ser fatorizável. Se um estado consiste de uma soma de estados não fatorizáveis, este estado é chamado de estado emaranhado (PAHLAVANI, 2012). Considere o exemplo

$$|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\alpha_1\rangle \otimes |\beta_1\rangle + |\alpha_2\rangle \otimes |\beta_2\rangle). \quad (46)$$

Observamos que há forte correlação entre os graus de liberdade de A e B . Estados como este não podem ser representados como um simples produto tensorial e são chamados de estados emaranhados. A partir de (46) podemos escrever

quatro exemplos de estados emaranhados,

$$|\phi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|++\rangle \pm |--\rangle), \quad (47)$$

$$|\varphi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle \pm |-+\rangle), \quad (48)$$

estes quatro estados são chamados estados de Bell e são maximamente emaranhados.

4.4 Emaranhamento de Formação e Concorrência

O emaranhamento de formação e a concorrência são métodos de quantificação do emaranhamento. Foram utilizadas as referências Amico et al. (2004), Ananikian, Lazaryan e Nalbandyan (2012), Hill e Wootters (1997), Pahlavani (2012), Rojas et al. (2012) e Wootters (1998) para demonstrar o emaranhamento de formação e a concorrência.

O emaranhamento de formação é definido através do operador densidade ρ de um par de sistema quântico A e B . Assim, considerando o estado $|\varphi_i\rangle$ associado a probabilidade P_i (HILL; WOOTTERS, 1997) de modo que

$$\rho = \sum_i P_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|. \quad (49)$$

Para um estado puro, o emaranhamento E é definido pela entropia de qualquer um dos dois subsistemas A e B :

$$E(\varphi) = -Tr(\rho_A \log_2 \rho_A) = -Tr(\rho_B \log_2 \rho_B), \quad (50)$$

onde ρ_A é o traço parcial de $|\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|$ sobre o subsistema B e ρ_B é definido analo-

gamente. Tomando o mínimo sobre todas as possíveis decomposições em estados puros, o emaranhamento de formação de ρ , $E(\rho)$, é definido da média do emaranhamento das decomposições desses estados

$$E(\rho) = \sum_i P_i E(\varphi_i). \quad (51)$$

O mínimo é tomado para desprezar as correlações clássicas presentes na mistura estatística. Sem a minimização, a quantidade E não distingue correlações clássicas de quânticas (WOOTTERS, 2008). Podemos escrever a equação (51) como

$$EoF(\rho) = \min_{\{P_n, |\rho\rangle\}} E(\rho). \quad (52)$$

Por causa do processo de minimização, o cálculo analítico da equação (51) torna-se inviável na maioria dos casos para sistemas gerais. Mas para o caso especial de dois qubits, há uma expressão analítica para obter o emaranhamento de formação para a matriz densidade:

$$EoF(\rho) = -x \log_2(x) - (1-x) \log_2(1-x), \quad (53)$$

onde

$$x = \frac{1 + \sqrt{1 - \mathcal{C}}}{2}, \quad (54)$$

sendo \mathcal{C} a concorrência definida por (ROJAS et al., 2012)

$$\mathcal{C} = \max \left\{ 0, \sqrt{\Lambda_1} - \sqrt{\Lambda_2} - \sqrt{\Lambda_3} - \sqrt{\Lambda_4} \right\}, \quad (55)$$

onde Λ_i são os autovalores em ordem decrescente da matriz R dada por

$$R = \rho(\sigma^y \otimes \sigma^y) \rho^* (\sigma^y \otimes \sigma^y) \quad (56)$$

sendo os Λ_i números reais e não negativos, ρ é o operador densidade, ρ^* é o complexo conjugado do operador densidade e σ^y é a matriz de Pauli. Quando a concorência $\mathcal{C}(\rho) = 0$, o estado representado por ρ não é emaranhado, e se $0 < \mathcal{C} < 1$ é parcialmente emaranhado e $\mathcal{C}(\rho) = 1$ é maximamente emaranhado.

4.5 Emaranhamento Térmico

Para um sistema em equilíbrio termodinâmico com um reservatório, o operador densidade que descreve esse sistema é dado por (WANG; FU; SOLOMON, 2001):

$$\rho = \frac{e^{\beta\mathcal{H}}}{\mathcal{Z}_N}. \quad (57)$$

Para estados com invariância translacional $\delta\mathbf{S}_z = 0$, $x = y$, e apresenta simetria $g_{xy} = g_{yx}$. Escrevendo na base $|++\rangle$, $|+-\rangle$, $| -+\rangle$ e $|--\rangle$ e que os autoestados do Hamiltoniano apresentam simetria (AMICO et al., 2004), a matriz densidade pode ser escrita como

$$\rho = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & c \\ 0 & x & y & 0 \\ 0 & y & x & 0 \\ c & 0 & 0 & b \end{pmatrix}. \quad (58)$$

onde a, b, c, x e y são reais. Podemos expressar os elementos da matriz densidade

em termos da função de correlação $g_{\alpha\alpha} = \langle S_a^\alpha S_b^\alpha \rangle$ e $M_\alpha = \langle S_\beta^\alpha \rangle$, no caso de sistema com invariância translacional $\langle S_a^z \rangle = \langle S_b^z \rangle$, obtendo

$$a = \frac{1}{4} + g_{zz} + M_z, \quad (59)$$

$$b = \frac{1}{4} + g_{zz} - M_z, \quad (60)$$

$$c = g_{xx} - g_{yy}, \quad (61)$$

$$x = \frac{1}{4} - g_{zz}, \quad (62)$$

$$y = g_{xx} + g_{yy}. \quad (63)$$

Consequentemente a expressão da concorrência fica

$$C = 2 \max \left\{ 0, |g_{xx} - g_{yy}| - \frac{1}{4}, |g_{xx} + g_{yy}| - \sqrt{\left(\frac{1}{4} + g_{zz}\right)^2 - M_z^2} \right\}. \quad (64)$$

Com a concorrência dada por (64) podemos estudar o emaranhamento térmico do modelo proposto.

5 CADEIA DE ESTRUTURA TIPO DIAMANTE ISING-XYZ ANISOTRÓPICA

Devido a sua importância prática e maleabilidade no que se refere ao uso de propriedades térmicas e magnéticas, muitos materiais magnéticos têm sido objetivos de pesquisa teórica (ČANOVÁ; STREČKA; JAŠČUR, 2006; LISNYI; STREČKA, 2013; ROJAS et al., 2011) e experimental (AIMO et al., 2013; JESCHKE et al., 2011; KANG et al., 2009; RULE et al., 2014). Em particular, o modelo de estrutura tipo diamante tem tido muita atenção devido ao interesse teórico associado à frustração geométrica de seus spins (KANG et al., 2009).

Neste trabalho, com o intuito de estudar materiais reais, escolhemos o mineral natural $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$, conhecido como *Azurite* (ROJAS et al., 2012). Este material apresenta uma estrutura tipo diamante e pode ser descrito por um modelo de spin $1/2$ Ising-Heisenberg (ANANIKIAN; LAZARYAN; NALBANDYAN, 2012; HONECKER et al., 2011; JESCHKE et al., 2011; KANG et al., 2009; ROJAS et al., 2011, 2012). Dentro desse contexto, Lisnyi estudou os platôs da magnetização em relação à temperatura do modelo de estrutura diamante assimétrico Ising-XYZ anisotrópico de spin $1/2$. Rojas et al. (2012), por sua vez, investigaram os diagramas de fase e o emaranhamento térmico da cadeia tipo diamante Ising-XXZ. Um modelo de estrutura tipo diamante simétrica de spin $1/2$ Ising-Heisenberg foi estudado recentemente por Ananikian et al. (2012b) onde, obtiveram como principal resultado o emaranhamento térmico. Em particular, Čanová, Strečka e Jaščur (2006) investigaram o efeito da frustração geométrica na cadeia tipo diamante Ising-Heisenberg de spin misturados $1/2$ e S . Além disso, Pereira, Moura e Lyra (2009) investigaram o efeito magnetocalórico para uma cadeia tipo diamante cineticamente frustrada. Em todos esses trabalhos, o objetivo era utili-

zar o modelo de Ising-Heisenberg para descrever o comportamento magnético e termodinâmico de um material magnético de interesse.

Neste capítulo será apresentada a cadeia tipo diamante Ising-XYZ anisotrópica e sua solução exata. Apresentando ainda alguns resultados dos diagramas de fase à temperatura zero, magnetização, entropia e efeito magnetocalórico.

5.1 Modelo Ising-XYZ Anisotrópico

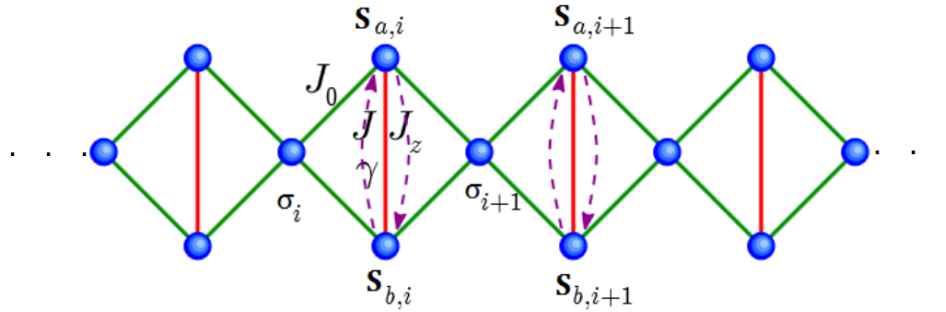


Figura 7 Cadeia tipo diamante Ising-XYZ anisotrópica.

Na Figura 7, os sítios a e b representam os spins \mathbf{S} Heisenberg e os sítios c representam os spins Ising σ . As linhas verdes são os acoplamentos de interação Heisenberg e as linhas vermelhas os acoplamento de interação Ising. Há também um campo magnético externo aplicado na direção z interagindo com a cadeia. Esta é uma cadeia cíclica de N sítios de estrutura tipo diamante descrita pelo modelo Ising-XYZ anisotrópico. O hamiltoniano total do sistema é dado por:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & - \sum_{i=1}^N [J(1 + \gamma)\mathbf{S}_{a,i}^x \mathbf{S}_{b,i}^x + J(1 - \gamma)\mathbf{S}_{a,i}^y \mathbf{S}_{b,i}^y + J_z \mathbf{S}_{a,i}^z \mathbf{S}_{b,i}^z] \\ & + J_0(\mathbf{S}_{a,i}^z + \mathbf{S}_{b,i}^z)(\sigma_i + \sigma_{i+1}) + h(\mathbf{S}_{a,i}^z + \mathbf{S}_{b,i}^z) + \frac{h}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1}), \end{aligned} \quad (65)$$

onde $\sigma_i = \pm 1/2$. Os primeiro, segundo e terceiro termos são as interações tipo Heisenberg entre os sítios a e b , sendo J é o parâmetro de interação e γ o fator de anisotropia do sistema nos eixos x e y e J_z o parâmetro de interação no eixo z . O quarto termo na equação (61) representa a interação Ising-Heisenberg entre os sítios a , b e c , onde J_0 é o parâmetro de interação tipo Ising. Os dois últimos termos descrevem a interação do campo magnético externo h com a cadeia.

Para estudar a física do modelo apresentado na Figura 7, devemos primeiramente construir o hamiltoniano para uma plaqueta da cadeia, este é escrito na forma matricial:

$$H_{i,i+1} = \begin{pmatrix} -\frac{J_z}{4} - (J_0 + \frac{h}{2})\mu - h & 0 & 0 & -\frac{J\gamma}{2} \\ 0 & \frac{J_z}{4} - \frac{h}{2}\mu & -\frac{J}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{J}{2} & \frac{J_z}{4} - \frac{h}{2}\mu & 0 \\ -\frac{J\gamma}{2} & 0 & 0 & -\frac{J_z}{4} + (J_0 - \frac{h}{2})\mu + h \end{pmatrix}, \quad (66)$$

sendo $\mu = \sigma_i + \sigma_{i+1}$. Em seguida, diagonalizamos o hamiltoniano a fim de obter as autoenergias e autovetores correspondentes. Após algumas manipulações algébricas, diagonalizando o hamiltoniano através de $\det(H_{i+1} - I\varepsilon) = 0$, foram obtidas as seguintes autoenergias:

$$\varepsilon_1 = -\frac{J_z}{4} - \frac{h}{2}\mu + \Delta(\mu), \quad (67)$$

$$\varepsilon_2 = \frac{J_z}{4} - \frac{J}{2}\mu - \frac{h}{2}\mu, \quad (68)$$

$$\varepsilon_3 = \frac{J_z}{4} + \frac{J}{2}\mu - \frac{h}{2}\mu, \quad (69)$$

$$\varepsilon_4 = -\frac{J_z}{4} - \frac{h}{2}\mu - \Delta(\mu), \quad (70)$$

onde $\Delta(\mu) = \sqrt{\frac{1}{4}J^2\gamma^2 + (h + J_0\mu)^2}$. Os autovetores na base $|++\rangle$, $|+-\rangle$,

$| - + \rangle, | - - \rangle$ são

$$|\varphi_1\rangle = N_+[\alpha_+ |++\rangle + |--\rangle], \quad (71)$$

$$|\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+-\rangle + |-+\rangle], \quad (72)$$

$$|\varphi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[| - + \rangle - | + - \rangle], \quad (73)$$

$$|\varphi_4\rangle = N_-[\alpha_- |++\rangle + |--\rangle], \quad (74)$$

onde $\alpha_{\pm} = -J\gamma/2J_o\mu + 2h \pm 2\Delta(\mu)$ e $N_{\pm} = 1/\sqrt{\alpha_{\pm}^2 + 1}$.

Antes de encontrar a solução para toda cadeia, determinamos a seguir os diagramas de fase à temperatura zero.

5.2 Diagramas de Fase à Temperatura Zero

Após serem obtidas analiticamente as autoenergias, construímos os diagramas de fase através da minimização destas. Observamos quatro estados: o Ising ferromagnético e Heisenberg modulado (*FMF*), o Ising frustrado (*IFR*), o Ising ferromagnético e Heisenberg antiferromagnético (*FAF*) e o Heisenberg frustrado (*HFR*). Podemos representar explicitamente o estado *FMF* como:

$$|FMF_1\rangle = \prod_{i=1}^N |\varphi_4\rangle_i \otimes |+\rangle_i, \quad (75)$$

$$|FMF_2\rangle = \prod_{i=1}^N |\varphi_4\rangle_i \otimes |-\rangle_i, \quad (76)$$

e suas correspondentes energias no estado fundamental são:

$$E_{FMF_1} = -\frac{h}{2} - \sqrt{(h + J_0)^2 + \frac{1}{4}J^2\gamma^2}, \quad (77)$$

$$E_{FMF_2} = \frac{h}{2} - \sqrt{(h - J_0)^2 + \frac{1}{4}J^2\gamma^2}. \quad (78)$$

Notamos que FMF_1 e FMF_2 são degenerados a campo magnético nulo e o modelo mostra uma região com frustração representada pelo estado IFR . Este estado é dado por

$$|IFR\rangle = \prod_{i=1}^N |\varphi_2\rangle_i \otimes |\sigma\rangle_i, \quad (79)$$

com energia do estado fundamental dada por

$$E_{IFR} = -\frac{|J|}{2}. \quad (80)$$

O estado FAF é representado por

$$|FAF\rangle = \prod_{i=1}^N |\varphi_2\rangle_i \otimes |+\rangle_i, \quad (81)$$

e sua energia do estado fundamental é

$$E_{FAF} = -\frac{J + h}{2}. \quad (82)$$

Considerando os valores especiais de $\gamma = \sqrt{1 - 4(J_0 + h)^2}$, obtemos frustração geométrica com o campo magnético e seu estado é representado por

$$|HFR\rangle = \prod_{i=1}^N |\varphi_{2(4)}\rangle_i \otimes |+\rangle_i, \quad (83)$$

e a energia correspondente ao estado HFR é dada por

$$E_{HFR} = -\frac{|J| + h}{2}. \quad (84)$$

As Figuras 8(a) e 8(b) mostram os diagramas de fase para os valores fixos de $J_z/J = 0$ e $J = 1$. Na Figura 8(a) fez-se o gráfico de J_0/J em função de γ . Na ausência de campo magnético externo, observamos duas regiões que apresentam transição de fase quântica: uma FMF com autoenergia $E_{FMF} = 1/2\sqrt{4J_0^2 + \gamma}$ e outra IFR com autoenergia $E_{IFR} = -0,50$. A região IFR apresenta entropia residual $S = k_B \ln(2)$ em toda sua extensão. A linha verde que contorna a região IFR para $\gamma = \sqrt{1 - 4J_0^2}$ tem entropia residual $S = k_B \ln(3)$ e o ponto azul corresponde a um ponto de frustração com entropia residual $S = k_B \ln(4)$.

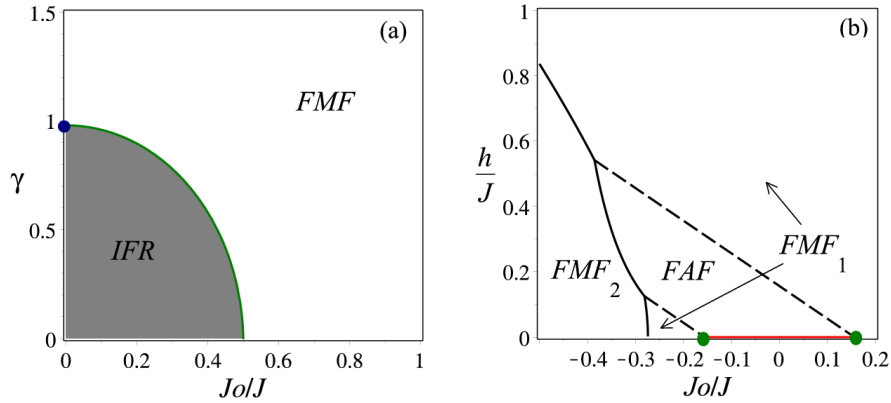


Figura 8 Diagrama de fase à temperatura zero assumindo os valores fixos de $J_z/J = 0$ e $J = 1$. (a) Na ausência de campo magnético para J_0/J versus γ . (b) Para J_0/J versus h e assumindo $\gamma = 0,95$.

Na Figura 8(b) foi ilustrado o diagrama de fase em função do campo magnético h/J e J_0/J fixando $\gamma = 0,95$. Observa-se a presença de quatro regiões bem definidas: duas que representam o estado FMF_1 com autoenergia $E_{FMF_1} = -1/2h - 1/2\sqrt{0,9025 + 4J_0^2 + 8J_0h + 4h^2}$, uma região correspondente ao es-

tado FMF_2 com autoenergia $E_{FMF_2} = 1/2h - 1/2\sqrt{0,9025 + 4J_0^2 - 8J_0h + 4h^2}$ e outra dada pelo estado FAF com autoenergia $E_{FAF} = -0,50h - 0,50$. A linha vermelha corresponde ao estado frustrado IFR representado por (79) com entropia residual $S = k_B \ln(2)$, sendo o ponto verde corresponde a um ponto de frustração e sua entropia residual é $S = k_B \ln(3)$. A linha tracejada corresponde à HFR com entropia residual $S = k_B \ln(2)$.

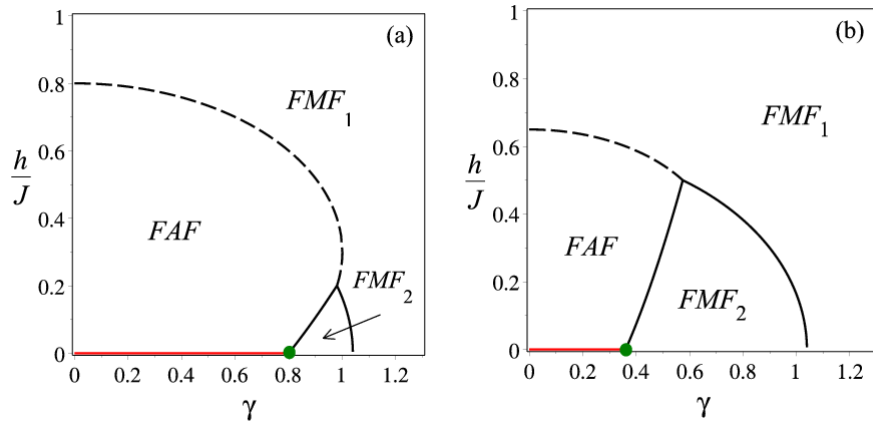


Figura 9 Diagramas de fase à temperatura zero assumindo os valores fixos de $J = 1$ e $J_0/J = -0,3$. Em (a) para h versus γ assumindo $J_z/J = 0$ e em (b) para h/J versus γ assumindo $J_z/J = 0,3$.

Na Figura 9 é ilustrado o diagrama de fase de γ versus h/J para valores fixos de $J = 1$ e $J_0/J = -0,3$. A Figura 9(a) assume o valor fixo de $J_z/J = 0$, apresentando três regiões: uma corresponde ao estado FMF_1 com autoenergia $E_{FMF_1} = -1/2h - 1/2\sqrt{\gamma^2 + 4h^2 - 2,4h + 0,36}$, uma região dada pelo estado FMF_2 com autoenergia $E_{FMF_2} = 1/2h - 1/2\sqrt{\gamma^2 + 4h^2 + 2,4h + 0,36}$ e outra representada pelo estado FAF com autoenergia $E_{FAF} = -0,5h - 0,5$. Já a Figura 9(b) assumindo o valor fixo de $J_z = 0,3$. Observamos que nela contém três regiões bem definidas: uma região representada pelo estado FMF_1 com autoenergia $E_{FMF_1} = -1/2h - 0,075 - 1/2\sqrt{\gamma^2 + 4h^2 - 2,4h + 0,36}$,

uma região dada pelo estado FMF_2 com autoenergia $E_{FMF_2} = 1/2 - 0,075 - 1/2\sqrt{\gamma^2 + 4h^2 + 2,4h + 0,36}$ e outra região correspondente ao estado FAF com autoenergia $E_{FAF} = -0,500h - 0,425$. A linha vermelha corresponde à IFR a campo magnético nulo, representado por (79), e sua entropia residual é $S = k_B \ln(2)$. A linha tracejada é equivalente ao estado HFR , dado por (83) e entropia residual de $S = k_B \ln(2)$.

Na próxima seção descrevemos o comportamento dos platôs da magnetização à temperatura zero.

5.3 Platôs da magnetização à temperatura zero

Uma propriedade dos modelos de Ising e Heisenberg é a presença de platôs da magnetização à temperatura zero. No modelo Ising-XYZ anisotrópico, no entanto, podemos observar um comportamento diferente; algumas regiões não apresentam platôs da magnetização devido ao fator de anisotropia γ . A partir de um determinado valor de γ os platôs da magnetização desaparecem. Uma maneira simples de obter a magnetização à temperatura zero no limite termodinâmico é através da energia do estado fundamental, dada por

$$M = -\frac{1}{3} \left(\frac{\partial E}{\partial h} \right)_{T \rightarrow 0}. \quad (85)$$

A Figura 10 representa a magnetização M/M_s , onde M_s é a magnetização de saturação, em função do parâmetro de anisotropia γ e do campo magnético h , assumindo os parâmetros fixos $J = 1$, $J_0/J = -0,3$ e $J_z/J = 0,3$. Em termos de diagrama de fase, na Figura 9(b), a região de platô corresponde a região FAF , com um platô cuja magnetização é $1/3$, enquanto que à região FMF_1 representada

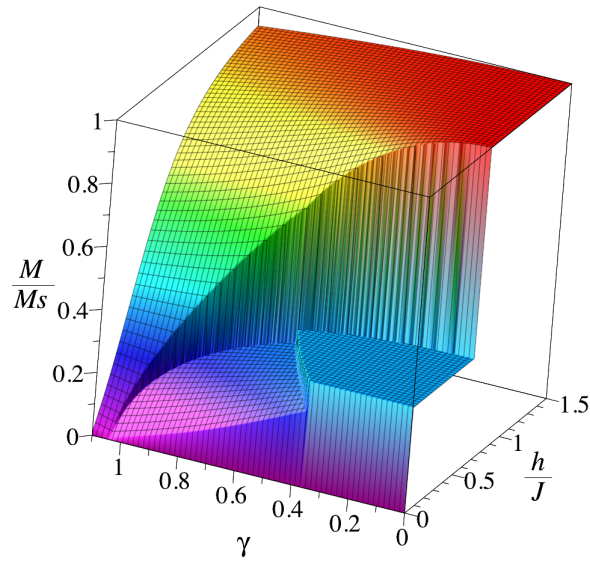


Figura 10 Magnetização à temperatura zero em função do parâmetro de anisotropia γ e do campo magnético h/J , assumindo os valores fixos $J = 1$, $J_0/J = -0,3$ e $J_z/J = 0,3$.

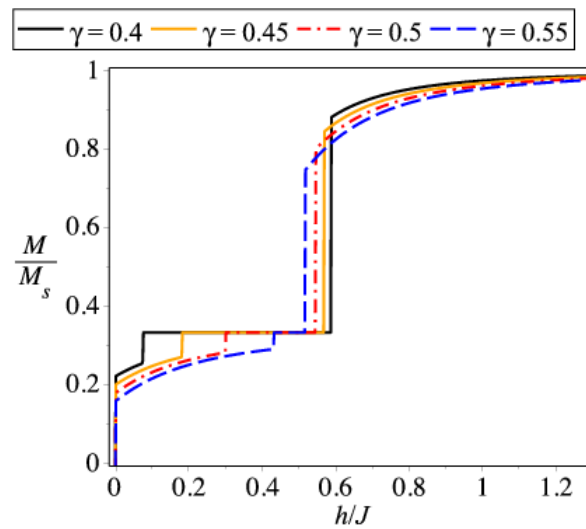


Figura 11 Curvas de magnetização à temperatura zero em função do campo magnético para os valores do fator de anisotropia $\gamma = 0,4$, $\gamma = 0,45$, $\gamma = 0,5$ e $\gamma = 0,55$, assumindo os valores fixos de $J = 1$, $J_0/J = -0,3$ e $J_z/J = 0,3$.

pela curva alta e a região FMF_2 correspondente a curva baixa não apresentam platôs da magnetização, isso ocorre devido ao fator de anitropia γ .

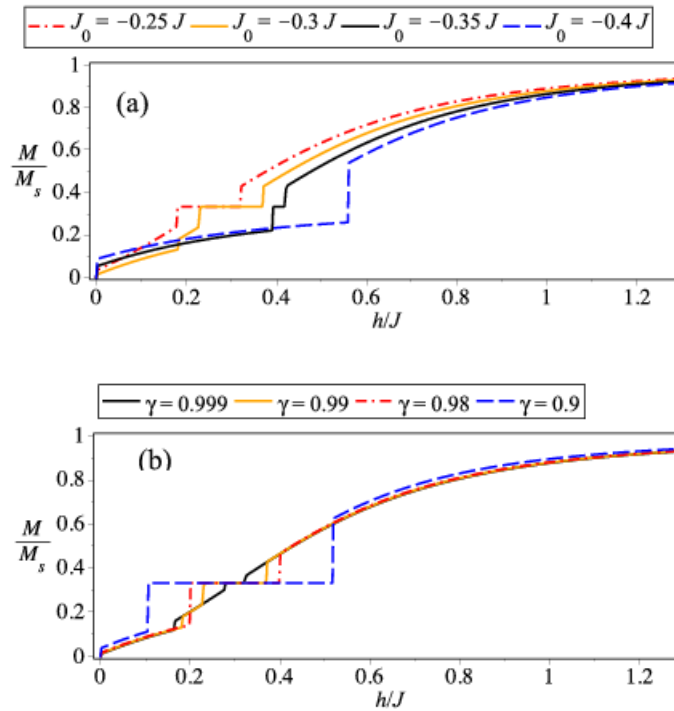


Figura 12 Curvas de magnetização à temperatura zero em função do campo magnético h , assumindo $J_z/J = 0$ e $J = 1$ fixos. (a) Assumindo $\gamma = 0,99$ e diferentes valores de J_0/J . (b) Assumindo $J_0/J = -0,3$ e diferentes valores de γ .

Os platôs da magnetização foram representados mais claramente na Figura 11, que ilustra a magnetização em função de h/J assumindo os valores fixos de $J = 1$, $J_0/J = -0,3$ e $J_z/J = 0,3$ para diferentes valores de γ . Observamos que à medida que γ aumenta, o platô de magnetização diminui. Já no caso limite do modelo estudado para $J_z/J = 0$, $J_0/J = -0,3$ e $J = 1$, a Figura 12(a) mostra os platôs da magnetização em função de h/J para diversos valores de J_0/J e $\gamma = 0,99$, que representa o desaparecimento do platô para $J_0/J < -0,35$. O mesmo comportamento ocorre na Figura 12(b) para diferentes valores de γ , no

limite de $\gamma \rightarrow 1$, o platô de $1/3$ da magnetização desaparece. A magnetização de saturação ocorre para campos magnéticos intensos.

5.4 Termodinâmica do Modelo

Colocando o sistema em banho térmico, podemos analisar outras propriedades termodinâmicas decorrentes da temperatura. Uma propriedade de nosso modelo é que usando o método da matriz de transferência podemos estudar a função de partição. Com esse objetivo, começaremos encontrando os pesos de Boltzmann, pois a partir deles construímos a matriz de transferência, encontrando, portanto, a função de partição e as grandezas termodinâmicas do sistema. Os pesos de Boltzmann são calculados a partir de

$$\omega(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \sum_i e^{-\beta \varepsilon_i}. \quad (86)$$

Explicitando os valores de ω , temos

$$\omega(1) = 2 \exp\left(\frac{\beta h}{2}\right) \left[e^{\frac{\beta J_z}{4}} \cosh \frac{\beta \Delta(1)}{2} + e^{-\frac{\beta J_z}{4}} \cosh \frac{\beta J}{2} \right], \quad (87)$$

$$\omega(0) = 2 \left[e^{\frac{\beta J_z}{4}} \cosh \frac{\beta \Delta(0)}{2} + e^{-\frac{\beta J_z}{4}} \cosh \frac{\beta J}{2} \right], \quad (88)$$

$$\omega(-1) = 2 \exp\left(\frac{-\beta h}{2}\right) \left[e^{\frac{\beta J_z}{4}} \cosh \frac{\beta \Delta(-1)}{2} + e^{-\frac{\beta J_z}{4}} \cosh \frac{\beta J}{2} \right], \quad (89)$$

onde $\Delta(1) = 1/2\sqrt{J^2\gamma^2 + 4J_0^2 + 8J_0h + 4h^2}$ para $\mu = 1$, $\Delta(0) = 1/2\sqrt{J^2\gamma^2 + 4h^2}$ para $\mu = 0$, e $\Delta(-1) = 1/2\sqrt{J^2\gamma^2 + 4J_0^2 - 8J_0h + 4h^2}$ para $\mu = -1$. Logo a

matriz de transferência fica

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \omega(1) & \omega(0) \\ \omega(0) & \omega(-1) \end{pmatrix}. \quad (90)$$

Diagonalizando a matriz de transferência a partir de (24), foram encontrados seus autovalores:

$$\lambda_{\pm} = \frac{\omega(1) + \omega(-1) \pm Q}{2}, \quad (91)$$

com $Q = \sqrt{(\omega(1) + \omega(-1))^2 - 4(\omega(1)\omega(-1) - \omega^2(0))}$.

De acordo com a seção (3.2), no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$ e considerando $\lambda_+ > \lambda_-$, a função de partição é

$$\mathcal{Z}_N = \lambda_+^N. \quad (92)$$

A energia livre de Helmholtz é dada por

$$f = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln \mathcal{Z}_N}{N} = -\beta \ln \lambda_+. \quad (93)$$

A entropia por sítio pode ser facilmente obtida a partir da energia livre de Helmholtz $S = -(\partial f / \partial T)$:

$$S = -\frac{\partial}{\partial T} (k_B T \ln \lambda_+). \quad (94)$$

Representando a entropia na Figura 13, na qual mostramos a densidade de entropia para os valores fixos de $J = 1$ e $J_z/J = 0$ e no limite de baixas temperaturas $T/J = 0,01$. A região branca corresponde à entropia zero e a região escura corresponde à entropia diferente de zero, de forma que quanto mais escura a região,

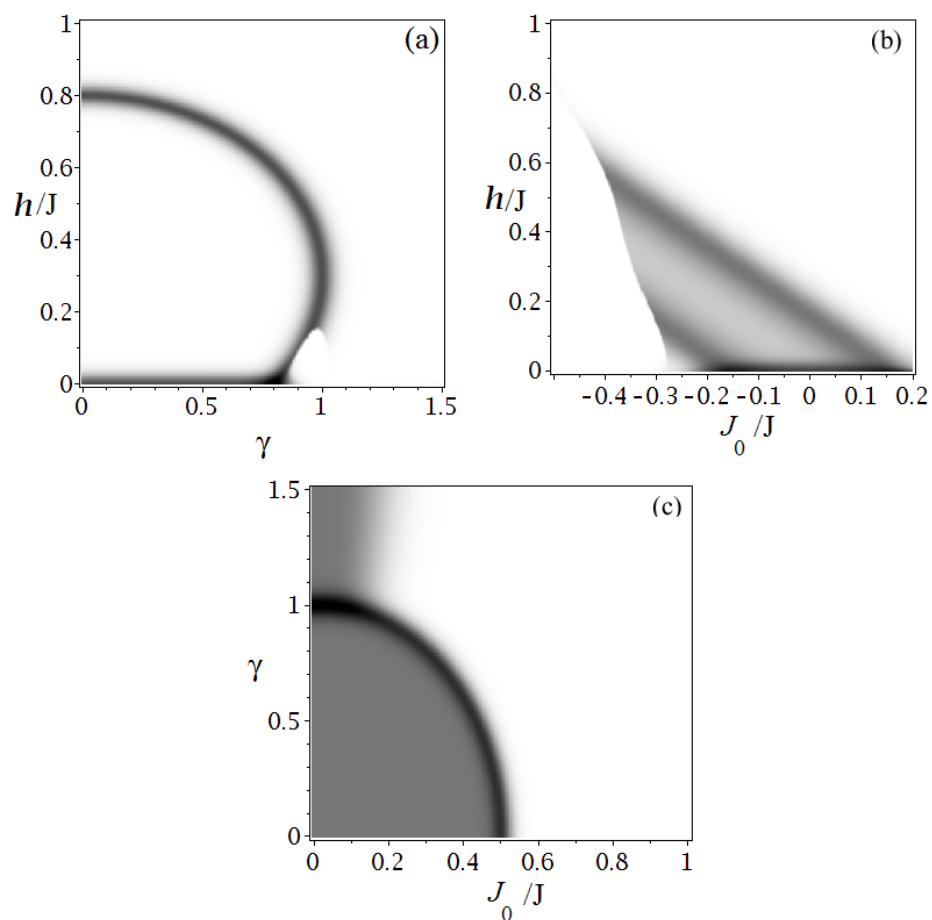


Figura 13 Densidade de entropia no limite de baixa temperatura $T/J = 0,01$ para os valores fixos de $J = 1$ e $J_z/J = 0$. A região escura corresponde à entropia diferente de zero enquanto a região branca corresponde a entropia zero. (a) Entropia em função de γ versus h para o valor fixo de $J_0/J = -0,3$, (b) Entropia em função de J_0/J versus h para o valor fixo de $\gamma = 0,95$ e (c) Entropia em função J_0/J versus γ na ausência de campo magnético.

maior a entropia. A Figura 13(a) corresponde à Figura 9(a) do diagrama de fase para o valor fixo de $J_0/J = -0,3$. Observamos na entropia em função de γ versus h que há uma curva escura na região de transição de fase e uma linha escura no eixo γ , na região preta o sistema apresenta entropia residual. Podendo fazer a mesma análise para a Figura 13(b) correspondente à Figura 8(b) e a Figura 13(c) correspondente à Figura 8(a), onde as regiões mais escuras apresentam entropia residual devido à frustração geométrica do sistema.

Uma propriedade que nosso modelo apresenta é o efeito magnetocalórico e será apresentaremos na próxima seção.

5.5 Efeito Magnetocalórico

Recentemente, demonstrou-se que vários sistemas de spin frustrados podem apresentar o efeito magnetocalórico (EMC) durante um processo de desmagnetização adiabática, que pode ser de importância prática para construção de refrigeradores magnéticos. Usando este fato, investigamos também a desmagnetização do modelo sob condições adiabáticas. Em particular, estamos interessados no cálculo exato do parâmetro de Grüneisen Γ_h , que é um quantificador do EMC e dado pela equação (17).

Na Figura 14 ilustramos as mudanças típicas da temperatura T/J em relação ao campo magnético externo h/J para os dois diferentes cenários de magnetização discutido anteriormente, assumindo os valores fixos de $J = 1$, $J_z/J = 0$ e $J_0/J = -0,3$, com entropia constante representada pelas linhas pretas. Foi observado a partir desta figura que o efeito magnetocalórico mais proeminente pode ser detectado apenas se a entropia é suficientemente próxima do valor $S = k_B \ln(2)$, segundo o qual a temperatura desaparece infinitamente mais rápido quando o campo

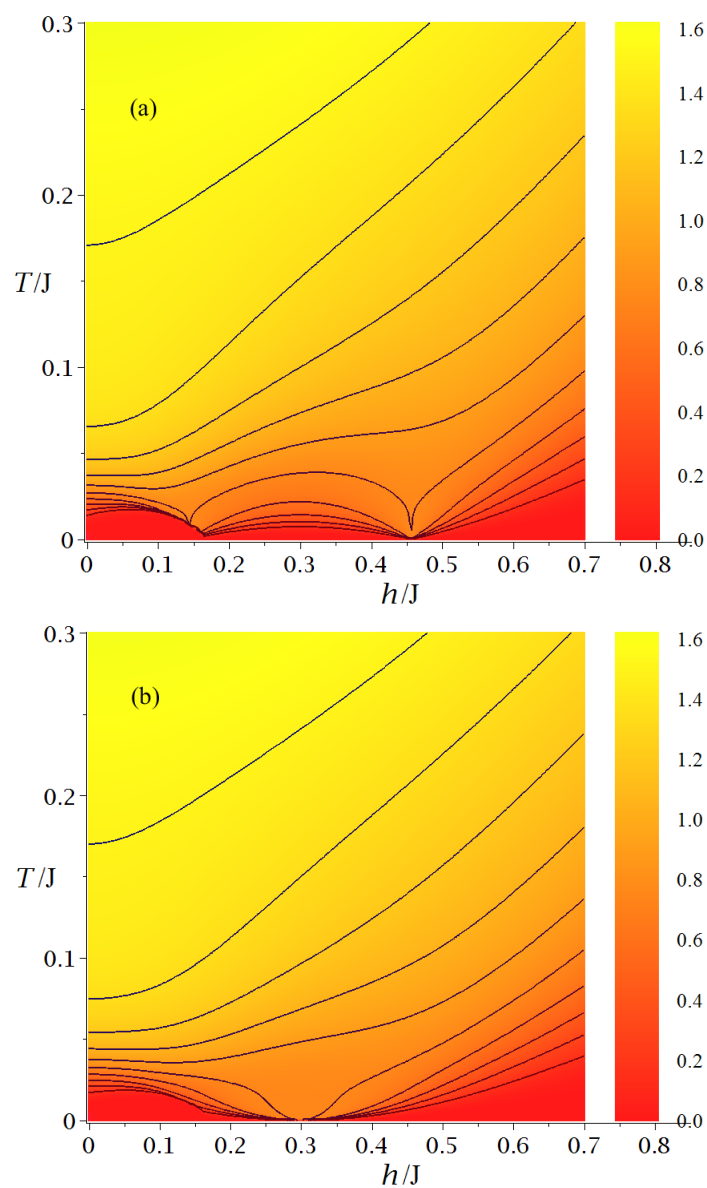


Figura 14 Entropia em função da temperatura T/J e do campo magnético h , assumindo $J = 1$, $J_z/J = 0$, $J_0/J = -0,3$ e a entropia constante. (a) Para o valor fixo de $\gamma = 0,95$. (b) Para o valor fixo de $\gamma = 1,0$.

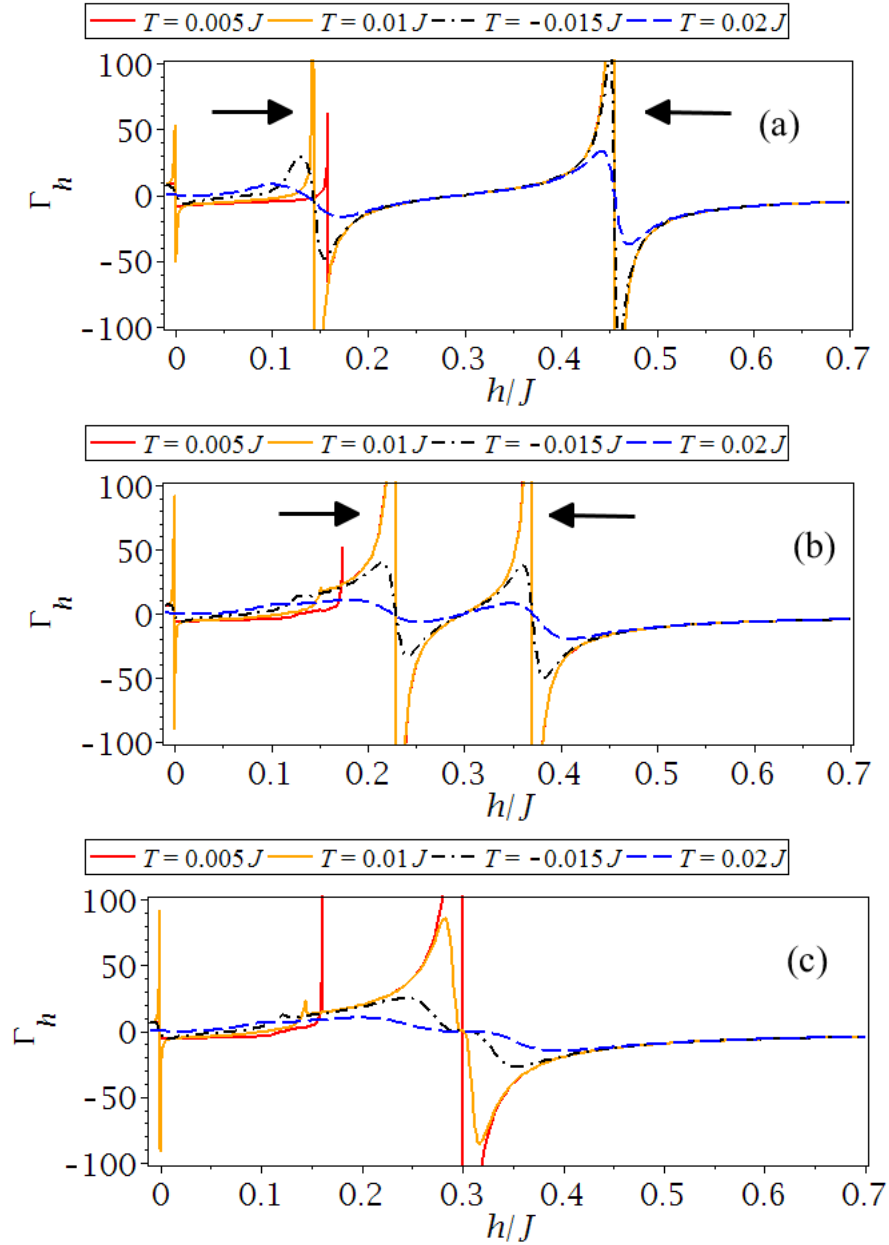


Figura 15 Parâmetro de Grüneisen Γ_h em função do campo magnético h/J , assumindo $J_0/J = -0,3$, $J = 1$, $J_z/J = 0$ fixos e valores da temperatura T/J . (a) $\gamma = 0,95$, (b) $\gamma = 0,99$, e (c) $\gamma = 1,0$.

externo aplicado aumenta.

A Figura 14(a) exibe as curvas de entropia constante para os valores fixos de $\gamma = 0,95$, $J = 1$, $J_z/J = 0$ e $J_0/J = -0,3$, e mostra duas regiões onde há efeito magnetocalórico, uma em $h/J \approx 0,16$ e outra em $h/J \approx 0,45$. Um gráfico semelhante está representado na Figura 14(b) para o valor fixo $\gamma = 1,0$ e o efeito magnetocalórico ocorre para $h/J = 0,3$.

Já na Figura 15 ilustramos o parâmetro de Grüneisen Γ_h versus h/J dado pela equação (17) para diferentes valores de temperatura $T/J = 0,005$, $T/J = 0,01$, $T/J = 0,015$ e $T/J = 0,02$ e os valores fixos de $J = 1$, $J_0/J = -0,3$ e $J_z/J = 0$. Quando Γ_h atinge os picos ocorre uma transição de fase, e esta corresponde a uma região frustrada. Na Figura 15(a) fixamos $\gamma = 0,95$; podemos observar que os dois picos refere-se aos picos representados na Figura 14(a) e a fronteiras de transição de fase mostradas na Figura 8(b). Para maiores valores $\gamma = 0,99$, mostrado na Figura 15(b) os picos se aproximam e, para $\gamma = 1$ referente a Figura 15(c) os dois picos se unem em apenas um para o valor de $h/J = 0,3$. Podemos analisar também que à medida que a temperatura aumenta estes picos diminuem, tornando o EMF menos eficiente.

Outra propriedade interessante deste modelo é o emaranhamento térmico, que apresentaremos no capítulo seguinte.

6 EMARANHAMENTO TÉRMICO NO MODELO ISING-XYZ ANISOTRÓPICO

O emaranhamento é um dos tipos de correlação mais fascinantes dos sistemas quânticos. Atualmente, muitos esforços têm sido dedicados a caracterizar, qualitativa e quantitativamente, as propriedades dos sistemas emaranhados em Materia Condensada que são candidatos naturais para a realização da computação quântica, bem como de informação quântica (VEDRAL, 2008). Há, portanto, bastante interesse no estudo do emaranhamento de sistemas do estado sólido, tal como em uma cadeia de spin unidimensional (KAMTA; STATAACE, 2002; OŠCONNOR; WOOTTERS, 2001; SUN; CHEN; CHEN, 2003). A cadeia de Heisenberg, por exemplo, é uma cadeia quântica simples que apresenta características de emaranhamento.

No que se refere às cadeias de spins, várias investigações têm se concentrado no emaranhamento térmico assumindo algumas estruturas de cadeia finita. Em, particular, uma cadeia de dois qubits para o modelo anisotrópico XYZ foi estudada na ausência (WANG, 2002) e na presença de campo magnético externo (ARNESEN; BOSE; VEDRAL, 2001; KAMTA; ISTOMIN; STARACE, 2007). Nessas investigações, há três motivações básicas no que concerne no estudo do emaranhamento. A primeira é saber como sistemas de muitos corpos são capazes de mostrar o emaranhamento e qual o comportamento deste em relação à variação de temperatura. A segunda motivação é se o emaranhamento pode ser usado como parâmetro de ordem para transição de fase quântica. E finalmente, a terceira motivação para esses estudos vêm das possíveis aplicações tecnológicas; dentre elas, usar o emaranhamento para a construção de novos materiais que possam ser usados em dispositivos computação quântica e informação quântica (VEDRAL,

2008).

Neste capítulo será apresentado um estudo sobre emaranhamento térmico do modelo proposto. A presença do emaranhamento é investigada através da concorrência quântica. Por fim, realizamos um estudo sobre o comportamento do emaranhamento em função da temperatura.

6.1 Quantificação do Emaranhamento

Uma vez que o modelo Ising-XYZ anisotrópico foi demonstrado possuir emaranhamento térmico, torna-se de grande interesse quantificar esse efeito. Um dos métodos de quantificação do emaranhamento é chamada concorrência (quântica), que pode ser escrita em termos dos elementos da matriz densidade ρ (ROJAS et al., 2012). Com esse objetivo, primeiramente calculou-se o operador densidade de uma plaqueta da cadeia e, através da técnica da matriz de transferência, calculou-se este operador para a cadeia completa. Assim, os elementos do operador densidade para uma plaqueta podem ser escritos como uma matriz:

$$\varrho = \begin{pmatrix} \varrho_{11} & 0 & 0 & \varrho_{14} \\ 0 & \varrho_{22} & \varrho_{23} & 0 \\ 0 & \varrho_{32} & \varrho_{33} & 0 \\ \varrho_{41} & 0 & 0 & \varrho_{44} \end{pmatrix}, \quad (95)$$

onde os elementos do operador são

$$\varrho_{11} = \frac{\alpha_+^2}{\alpha_+^2 + 1} e^{-\beta\varepsilon_1} + \frac{\alpha_-^2}{\alpha_-^2 + 1} e^{-\beta\varepsilon_4}, \quad (96)$$

$$\varrho_{22} = \varrho_{33} = \frac{1}{2} \left(e^{-\beta\varepsilon_2} + e^{-\beta\varepsilon_3} \right), \quad (97)$$

$$\varrho_{23} = \varrho_{32} = \frac{1}{2} \left(e^{-\beta\varepsilon_2} - e^{-\beta\varepsilon_3} \right), \quad (98)$$

$$\varrho_{14} = \varrho_{41} = \frac{\alpha_+}{\alpha_+^2 + 1} e^{-\beta\varepsilon_1} + \frac{\alpha_-}{\alpha_-^2 + 1} e^{-\beta\varepsilon_4}, \quad (99)$$

$$\varrho_{44} = \frac{1}{\alpha_+^2 + 1} e^{-\beta\varepsilon_1} + \frac{1}{\alpha_-^2 + 1} e^{-\beta\varepsilon_4}. \quad (100)$$

Usando o método da matriz de transferência, podemos escrever o operador densidade como sendo

$$\rho_{ij} = \frac{1}{Z_N} \text{Tr} \left(\omega(\sigma_1, \sigma_2) \dots \omega(\sigma_{r-1}, \sigma_r) \varrho_{ij} \omega(\sigma_{r+1}, \sigma_{r+2}) \dots \omega(\sigma_N, \sigma_1) \right). \quad (101)$$

Reorganizando os termos, obtemos

$$\rho_{ij} = \frac{1}{Z_N} \text{Tr} \left(\mathbf{T}^{r-1} \mathbf{P}_{ij} \mathbf{T}^{N-r} \right) = \frac{1}{Z_N} \text{Tr} \left(\mathbf{P}_{ij} \mathbf{T}^{N-1} \right), \quad (102)$$

onde assumiu-se

$$\mathbf{P}_{ij} = \begin{pmatrix} \varrho_{ij}(1) & \varrho_{ij}(0) \\ \varrho_{ij}(0) & \varrho_{ij}(-1) \end{pmatrix}. \quad (103)$$

A matriz que diagonaliza a matriz de transferência \mathbf{T} é dada por

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \lambda_+ - \omega(-1) & \lambda_- - \omega(-1) \\ \omega(0) & \omega(0) \end{pmatrix}, \quad (104)$$

sendo a sua inversa

$$\mathbf{V}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{Q} & -\frac{\lambda_- - \omega(-1)}{Q\omega(0)} \\ -\frac{1}{Q} & \frac{\lambda_+ - \omega(-1)}{Q\omega(0)} \end{pmatrix}. \quad (105)$$

Finalmente, o operador densidade definido na equação (101) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\rho_{ij} = \frac{\text{Tr} \left(\mathbf{V}^{-1} \mathbf{P}_{ij} \mathbf{V} \begin{pmatrix} \lambda_+^{N-1} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{N-1} \end{pmatrix} \right)}{\lambda_+^N + \lambda_-^N}. \quad (106)$$

Portanto, o operador densidade de uma cadeia tipo diamante de N plaquetas com condição de contorno periódica é dado pela equação (106). Para um sistema real tomamos o limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$). Após algumas manipulações algébricas, os elementos da representação matricial do operador densidade, tomam a forma

$$\rho_{ij} = \frac{1}{\lambda_+} \left\{ \frac{\varrho_{ij}(1) + \varrho_{ij}(-1)}{2} + \frac{2\varrho_{ij}(0)\omega(0)}{Q} + \frac{[\varrho_{ij}(1) - \varrho_{ij}(-1)](\omega(1) - \omega(-1))}{2Q} \right\}, \quad (107)$$

onde $(\lambda_-/\lambda_+)^N \rightarrow 0$.

Assim, a matriz do operador densidade do modelo fica

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & \rho_{14} \\ 0 & \rho_{22} & \rho_{23} & 0 \\ 0 & \rho_{32} & \rho_{33} & 0 \\ \rho_{41} & 0 & 0 & \rho_{44} \end{pmatrix}, \quad (108)$$

onde ρ_{ij} são os elementos da matriz densidade. Explicitamente, a concorrência é expressa como

$$\mathcal{C} = \max \{0, |\rho_{14}| - \sqrt{\rho_{22}\rho_{33}}, |\rho_{23}| - \sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}\}. \quad (109)$$

Podemos escrever os elementos da matriz densidade ρ em termos das funções de correlação, como mostrado em (AMICO et al., 2004; BUKMAN; LE-

EUWEN, 1991) e na seção (4.6):

$$\rho_{11} = \frac{1}{4} + \langle \mathbf{S}_a^z \mathbf{S}_b^z \rangle + \langle \mathbf{S}_a^z \rangle, \quad (110)$$

$$\rho_{22} = \rho_{33} = \frac{1}{4} - \langle \mathbf{S}_a^z \mathbf{S}_b^z \rangle, \quad (111)$$

$$\rho_{44} = \frac{1}{4} + \langle \mathbf{S}_a^z \mathbf{S}_b^z \rangle - \langle \mathbf{S}_a^z \rangle, \quad (112)$$

$$\rho_{14} = \rho_{41} = \langle \mathbf{S}_a^x \mathbf{S}_b^x \rangle - \langle \mathbf{S}_a^y \mathbf{S}_b^y \rangle, \quad (113)$$

$$\rho_{23} = \rho_{32} = \langle \mathbf{S}_a^x \mathbf{S}_b^x \rangle + \langle \mathbf{S}_a^y \mathbf{S}_b^y \rangle. \quad (114)$$

Explicitamente, as funções de correlação são (Apêndice A)

$$\langle \mathbf{S}_a^x \mathbf{S}_b^x \rangle = e^{\beta \frac{h}{2}} \frac{\frac{\Delta(1)}{2} e^{-\beta \frac{2h+Jz}{4}} \sinh\left(\frac{\beta J}{2}\right) + \frac{J\gamma}{4} e^{\beta \frac{Jz}{4}} \sinh(\beta \Delta(1))}{\Delta(1)\Lambda_+}, \quad (115)$$

$$\langle \mathbf{S}_a^y \mathbf{S}_b^y \rangle = e^{\beta \frac{h}{2}} \frac{\frac{\Delta(1)}{2} e^{-\beta \frac{Jz}{4}} \sinh\left(\frac{\beta J}{2}\right) - \frac{J\gamma}{4} e^{\beta \frac{Jz}{4}} \sinh(\beta \Delta(1))}{\Delta(1)\Lambda_+}, \quad (116)$$

$$\langle \mathbf{S}_a^z \mathbf{S}_b^z \rangle = e^{\beta \frac{h}{2}} \frac{e^{-\beta \frac{Jz}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J}{2}\right) - e^{\beta \frac{Jz}{4}} \cosh(\beta \Delta(1))}{\Delta(1)\Lambda_+}, \quad (117)$$

$$\langle \mathbf{S}_a^z \rangle = e^{\beta \frac{2h+Jz}{4}} \sinh(\beta \Delta(1)) \frac{J_0 + h}{\Delta(1)\Lambda_+}. \quad (118)$$

Assim, dependendo dos valores da concorrência, o sistema pode ser maximamente emaranhado $\mathcal{C} = 1$, não emaranhado $\mathcal{C} = 0$ ou parcialmente emaranhado $0 < \mathcal{C} < 1$.

6.2 Concorrência

Estudamos a concorrência \mathcal{C} definida pela equação (109) e analisando o sistema escolhido à temperatura zero, verificamos que a região correspondente ao estado FAF discutido no capítulo 5 é maximamente emaranhada com $\mathcal{C} = 1$,

enquanto que na região correspondente ao estado FMF a concorrência depende dos parâmetros do Hamiltoniano, sendo dada por

$$\mathcal{C} = \frac{|J\gamma|}{2\sqrt{(J_0 + h)^2 + \frac{1}{4}J^2\gamma^2}}. \quad (119)$$

Colocando o sistema em contato com um banho térmico, podemos fazer uma análise do emaranhamento. Na Figura 16(a) ilustramos o gráfico de concorrência da densidade de pontos no limite de baixas temperaturas $T/J = 0,01$ e fixando $J = 1$, $J_0/J = -0,3$ e $J_z/J = 0,03$ como função de γ e h/J . A região preta corresponde à concorrência máxima $\mathcal{C} = 1$, enquanto que a região branca corresponde a uma região não emaranhada, com concorrência $\mathcal{C} = 0$ e a região cinza é parcialmente emaranhada, com concorrência $0 < \mathcal{C} < 1$, na Figura 16(a) correspondente ao diagrama de fase da Figura 9(b). Observamos que a região representada pelo estado FAF é maximamente emaranhada, enquanto a região FMF_2 é parcialmente emaranhada. É interessante observar que na região FMF_1 quando $\gamma = 0$ não há emaranhamento, mas a medida que γ cresce a região torna-se emaranhada. Assim, na transição de fase do estado FMF_1 e FAF o emaranhamento é nulo, mas na fronteira entre os estados FMF_1 e FMF_2 há emaranhamento. Observamos também que na fase FMF_1 , quando $\gamma > 1$ e $h \approx 0,3$, existe uma pequena região maximamente emaranhada. Na Figura 16(b), referente a Figura 9(a) do diagrama de fase, a região correspondente ao estado FAF é maximamente emaranhada e na fronteira entre os estados FAF e FMF_1 e de FAF e FMF_2 o emaranhamento é nulo, embora a transição de fase entre FMF_1 e FMF_2 seja parcialmente emaranhada. A região do estado FMF_2 é parcialmente emaranhada enquanto a região FMF_1 para $\gamma = 0$ não é emaranhada. À medida que γ cresce, a região FMF_1 torna-se emaranhada e para $\gamma > 1$ e $h/J \approx 0,3$ há

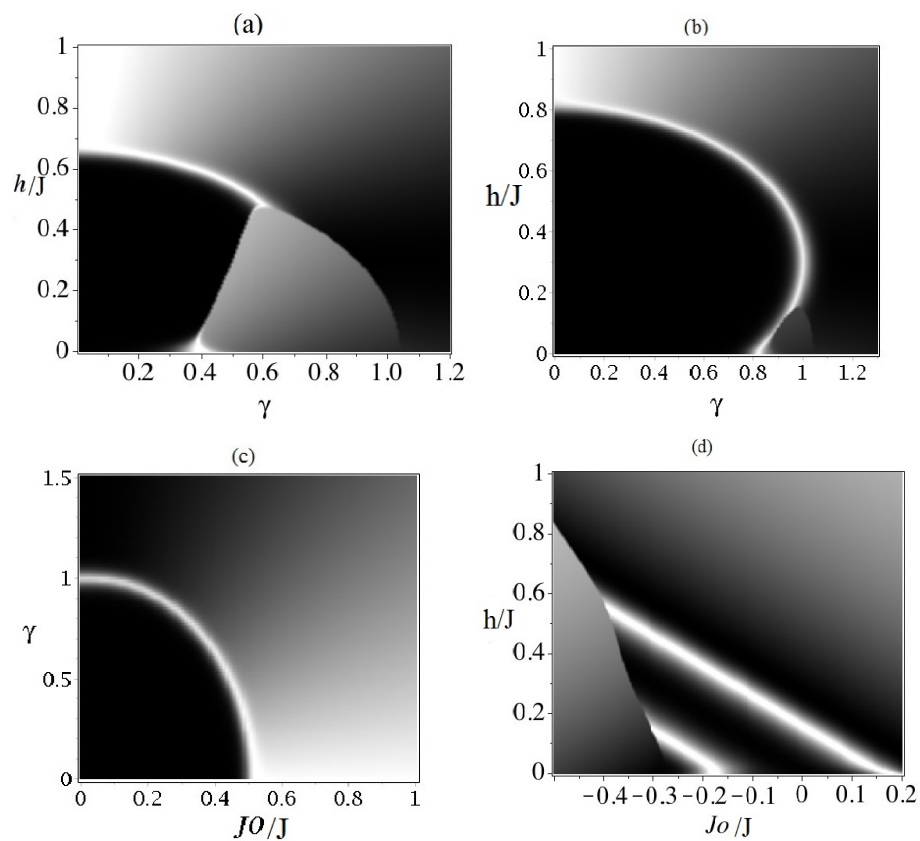


Figura 16 Concorrência do emaranhamento térmico no limite de baixa temperatura $T/J = 0,01$ para o valor fixo de $J = 1$ (a) γ versus h/J e $J_0/J = -0,3$ e $J_z/J = 0,3$ fixos, (b) γ versus h/J e $J_0/J = -0,3$ e $J_z/J = 0$ fixos, (c) J_0/J versus γ e $h/J = 0$ e $J_z/J = 0$ fixos e (d) J_0/J versus h/J e $\gamma = 0,95$ e $J_z/J = 0$ fixos.

uma região maximamente emaranhada.

A Figura 16(c), equivalente a Figura 8(a) do diagrama de fase com os parâmetros fixos $J = 1$, $J_z/J = 0$ e o campo magnético nulo, corresponde à concorrência em função de J_0/J versus γ . A região correspondente ao estado IFR é maximamente emaranhada e, na transição de fase, o emaranhamento repentinamente desaparece. Já a região que corresponde ao estado FMF quando $\gamma = 0$ o emaranhamento é nulo e à medida que γ cresce ele se torna parcialmente emaranhado; quando $J_0/J \approx 0$ e $\gamma > 1$ atinge uma região maximamente emaranhada.

Finalmente, na Figura 16(d) mostramos a concorrência \mathcal{C} em função de J_0/J versus h/J , seguindo o mesmo padrão do diagrama de fase ilustrado na Figura 8(b) para os valores fixos de $J = 1$, $\gamma = 0,95$ e $J_z/J = 0$. Aqui, a região FAF é maximamente emaranhada exceto nas fronteiras de transição de fase, onde observamos que o emaranhamento é nulo onde a transição de fase ocorre de FAF para FMF_1 , mas é parcialmente emaranhada de FAF para FMF_2 . Por último, vemos que na fronteira entre FMF_1 e FMF_2 é parcialmente emaranhada.

6.3 Deterioração do Emaranhamento

Com a finalidade de detalharmos o que acontece da concorrência do emaranhamento térmico retratada na Figura 16(a), ilustramos na Figura 17 uma representação sequenciada da concorrência com o aumento da temperatura fixando $J = 1$, $J_0/J = -0,3$ e $J_z/J = 0,3$, onde ocorre uma deterioração do emaranhamento térmico. Na Figura 17(a) o emaranhamento térmico é ilustrado para $T/J = 0,02$, na Figura 17(b) é ilustrado para $T/J = 0,04$, similarmente na Figura 17(c) é ilustrado para $T/J = 0,08$ e, finalmente na Figura 17(d) é ilustrado para $T/J = 0,16$. Na Figura 17(b), por sua vez, podemos observar que

a região FAF não é integralmente maximamente emaranhada e na transição de fase de FAF para FMF_1 e para FMF_2 começa a forma-se um vale onde o emaranhamento é nulo. Este vale se torna maior na Figura 17(c) e na Figura 17(d). Características quânticas como o emaranhamento geralmente não são vistas além

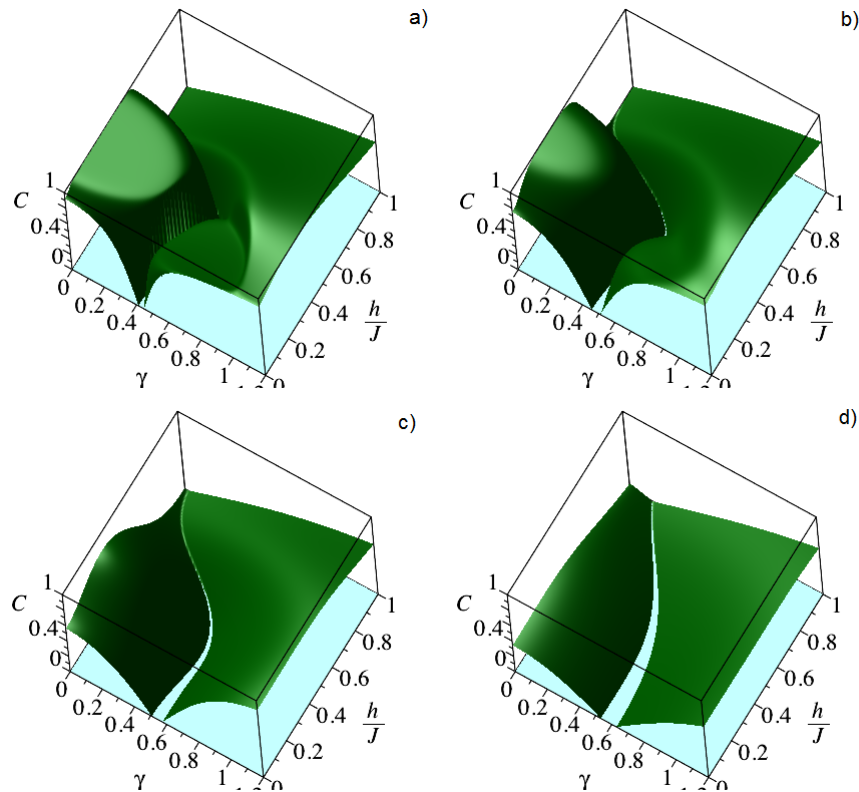


Figura 17 Deterioração do emaranhamento térmico quando a temperatura aumenta assumindo $J = 1$, $J_0/J = -0,3$ e $J_z/J = 0,3$ fixos. a) $T/J = 0,02$. b) $T/J = 0,04$. c) $T/J = 0,08$. d) $T/J = 0,16$. Observa-se com o aumento da temperatura, o surgimento de regiões não emaranhadas $C = 0$, regiões em azul.

da escala atômica e altas temperaturas. O argumento mais comum contra o emaranhamento em sistemas macroscópicos à temperatura finita é de que objetos macroscópicos possuem grande número de constituintes que interagem com o meio ambiente, e isso leva à perda do emaranhamento à medida que a massa, a comple-

xidade e a temperatura aumentam.

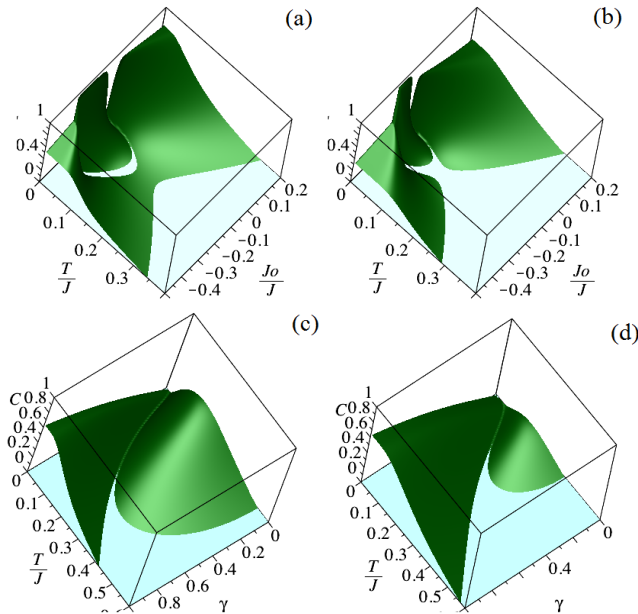


Figura 18 Deterioração do emaranhamento térmico quando a temperatura aumenta assumindo $J = 1$. (a) Concorrência como função de T/J e J_0/J assumindo $J_z/J = 0$, $h/J = 0,27$ e $\gamma = 0,95$. (b) Concorrência como função de T/J e J_0/J assumindo $J_z/J = 0,3$, $h/J = 0,35$ e $\gamma = 0,6$. (c) Concorrência como função de T/J e γ assumindo $J_0/J = 0,3$, $J_z/J = 0$ e $h/J = 0,3$. (d) Concorrência como função de T/J e γ assumindo $J_0/J = 0,3$, $J_z/J = 0,3$ e $h/J = 0,3$. Observa-se com o aumento da temperatura, o surgimento de regiões não emaranhadas $C = 0$, regiões em azul.

O comportamento do emaranhamento também pode ser mostrado como uma função da temperatura, e como a concorrência desaparece à temperatura limiar. Na Figura 18(a) é ilustrada a concorrência como função de T/J versus J_0/J assumindo os valores fixos de $J = 1$, $J_z/J = 0$, $h/J = 0,27$ e $\gamma = 0,95$. Aqui, podemos observar como a concorrência desaparece e, a medida que aumenta a temperatura, surge novamente o emaranhamento térmico e depois desaparece por completo. Na Figura 18(b) a concorrência é descrita em função de T/J versus J_0/J para valores fixos de $J = 1$, $\gamma = 0,6$, $J_z/J = 0,3$ e $h/J = 0,35$. Uma vez

mais podemos observar como a concorrência desaparece para altas temperatura, subitamente resurge o emaranhamento e finalmente desaparece em definitivo.

Na Figura 18(c) é mostrada a concorrência como função de T/J versus γ assumindo os valores fixos de $J = 1$, $J_0/J = 0,3$, $J_z/J = 0$ e $h/J = 0,3$, mais uma vez a concorrência desaparece a temperaturas elevadas. A Figura 18(d), por sua vez, ilustra a concorrência como função de T contra γ assumindo os valores fixos de $J = 1$, $J_0/J = 0,3$, $J_z/J = 0,3$ e $h/J = 0,3$, sendo seu comportamento similar ao da Figura 18(c).

Devido à anisotropia do hamiltoniano, encontrou-se um comportamento bastante interessante no emaranhamento térmico, a temperatura limiar, onde o emaranhamento térmico subitamente desaparece, voltando a surgir até finalmente desaparecer em definitivo.

7 CONCLUSÃO

Obtivemos neste trabalho a solução analítica do modelo tipo diamante Ising-XYZ com fator de anisotropia γ . Estudamos as propriedades termodinâmicas e magnéticas do modelo, e verificamos uma propriedade interessante, devido ao fator de anisotropia γ ocorre o desaparecimento dos platôs da magnetização à temperatura zero.

Analisamos os diagramas de fase à temperatura zero, obtendo regiões bem definidas representadas pelos estados Ising ferromagnético e Heisenberg modulado ferromagnético FMF_1 , FMF_2 e FMF , Ising ferromagnético e Heisenberg antiferromagnético FAF e Ising frustrado IFR , dentre as quais a última apresenta frustração geométrica em toda sua fase, assim como em algumas fronteiras de transição de fase. Devido a essa frustração, o modelo apresenta entropia residual e uma taxa magnetocalórica elevada, fornecendo uma configuração propícia para o estudo do efeito magnetocalórico.

Verificamos ainda que o modelo apresenta emaranhamento térmico e, explorando esse fato, determinamos quantitativamente o grau de emaranhamento através da concorrência a qual é descrita em termos das funções de correlação. Estudamos a concorrência, fixando os parâmetros J , J_0 , J_z h e γ e, como previsto, constatamos que o emaranhamento se deteriora com o aumento da temperatura. No entanto, observamos que há uma região onde o emaranhamento desaparece com o aumento da temperatura e, ao aumentarmos um pouco mais a temperatura, ele resurge e depois desaparece completamente. Não encontramos na literatura estudos sobre este modelo que relatem tal comportamento.

Por fim, enfatizamos que este trabalho abre perspectivas bastante promissoras na pesquisa de materiais magnéticos modelados por cadeias de spin anisotró-

pica. Em outras palavras, nossos resultados são um ponto de partida, por exemplo, para estudo do efeito magnetocalórico e do emaranhamento térmico para cadeias tipo Ising-Heisenberg com estruturas mais elaboradas.

APÊNDICE A - Função de correlação para os sítios $\mathbf{S}_{a,i}$ e $\mathbf{S}_{b,i}$

A função de correlação é dada pela equação (43), apresentada no capítulo 4. A partir dela, podemos determinar a função de correlação entre os sítos $\mathbf{S}_{a,i}$ e $\mathbf{S}_{b,i}$:

$$\langle \mathbf{S}_{a,i}^z, \mathbf{S}_{b,i}^z \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{i\}} \mathbf{S}_{a,i} \mathbf{S}_{b,i} e^{-\beta \mathcal{H}}. \quad (120)$$

Assim, expandindo o somatório em termos dos pesos de Boltzmann e usando a técnica da matriz de transferência, a função de correlação fica expressa como:

$$\langle \mathbf{S}_{a,i}^z, \mathbf{S}_{b,i}^z \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{i\}} \mathbf{S}_{a,i} \mathbf{S}_{b,i} e^{\prod_{i=1}^N \omega_{\sigma_i, \sigma_{i+1}}}; \quad (121)$$

expandindo o produtório, obtemos por fim

$$\langle \mathbf{S}_{a,i}^z, \mathbf{S}_{b,i}^z \rangle = \frac{1}{Z_N} \text{Tr} \left(\mathbf{V}^{-1} \mathbf{S}_{a,i}^z \mathbf{S}_{b,i}^z \mathbf{V} \mathbf{V}^{-1} \omega_{\sigma_i, \sigma_{i+1}} \mathbf{V} \right), \quad (122)$$

onde

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \lambda_+ - \omega(-1) & \lambda_- - \omega(-1) \\ \omega(0) & \omega(0) \end{pmatrix} \quad (123)$$

e

$$\mathbf{V}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{Q} & -\frac{\lambda_- - \omega(-1)}{Q\omega(0)} \\ -\frac{1}{Q} & \frac{\lambda_+ - \omega(-1)}{Q\omega(0)} \end{pmatrix}, \quad (124)$$

são as matrizes que diagonalizam a matriz de transferência.

Utilizando as matrizes \mathbf{V} e \mathbf{V}^{-1} , expressamos a função de correlação como:

$$\langle \mathbf{S}_{a,i}^z, \mathbf{S}_{b,i}^z \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr} \left(\tilde{\Sigma}_{a,b}^z \tilde{\omega}^{N-1} \right), \quad (125)$$

onde $\tilde{\Sigma}_{a,b}^z = \mathbf{V}^{-1} \mathbf{S}_{a,i}^z, \mathbf{S}_{b,i}^z \mathbf{V}$ e $\tilde{\omega}^{N-1} = \mathbf{V}^{-1} \omega_{\sigma_i \sigma_{i+1}} \mathbf{V}$. Assim, chegamos à equação (117). Com a equação (120) obtemos as funções de correlação para $\langle \mathbf{S}_a^x \mathbf{S}_b^x \rangle$, $\langle \mathbf{S}_a^y \mathbf{S}_b^y \rangle$ e o valor esperado de $\langle \mathbf{S}_a^z \rangle$.

REFERÊNCIAS

- AIMO, F. et al. Magnetic structure of azurite above the $1/3$ magnetization plateau. **Physical Review B**, New York, v. 84, p. 12401-12405, Dec. 2013.
- AMICO, L. et al. Dynamics of entanglement in one-dimensional spin systems. **Physical Review A**, New York, v. 69, n. 1, p. 22304-22328, Feb. 2004.
- ANANIKIAN, N.; LAZARYAN, H.; NALBANDYAN, M. Magnetic and quantum entanglement properties of the distorted diamond chain model for Azurite. **Journal Physical B**, New York, v. 85, p. 223-228, June 2012.
- ANANIKIAN, N. S. et al. Thermal entanglement of a spin-1/2 Ising–Heisenberg model on a symmetrical diamond chain. **Journal of Physics: Condensed Matter**, Bristol, v. 24, n. 25, p. 256001-256017, May 2012.
- ARNESEN, M. C.; BOSE, S.; VEDRAL, V. Natural thermal and magnetic entanglement in 1D Heisenberg model. **Physical Review Letter**, New York, v. 87, n. 1, p. 17901-17905, May 2001.
- BASDEVANT, J. L.; DALIBART, J. **Quantum mechanics**. Berlin: Springer, 2002. 511 p.
- BAXTER, R. J. **Exactly solved models in statistical mechanics**. New York: Academic, 1982. 486 p.
- BELLUCCI, S.; OHANYAN, V. Correlation functions in one-dimensional spin lattices with Ising and Heisenberg bonds. **The European Physical Journal B**, Trieste, v. 86, n. 11, p. 446-458, Nov. 2013.
- BLUNDELL, S. **Magnetism in Condensed Matter**. New York: Oxford University, 2001. 238 p.
- BORGES, E. P. Irreversibilidade, desordem e incerteza: três visões da generalização do conceito de entropia. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, São Paulo, v. 21, n. 4, p. 453-463, dez. 1999.

BUKMAN, D. J.; AN, G.; LEEUWEN, J. M. J. van. Cluster-variation approach to the spin $-1/2$ XXZ model. **Physical Review B**, New York, v. 43, n. 16, p. 13352-13364, June 1991.

CALLEN, H. B. **Thermodynamics and an introduction to thermostatics**. 2nd ed. New York: J. Wiley, 1985. 493 p.

CĀNOVÁ, L.; STREČKA, J.; JAŠČUR, M. Geometric frustration in the class of exactly solvable Ising-Heisenberg diamond chains. **Physical Condensed Matter**, Bristol, v. 18, p. 4967-4984, Mar. 2006.

CASQUILHO, J. P.; TEIXEIRA, P. I. C. **Introdução à Física Estatística**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2012. 426 p.

COHEN-TANOUDJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. **Quantum mechanics**. New York: J. Wiley; Hermann, 2005. v. 1, 914 p.

DIEP, H. T. **Frustrated spin systems**. Hackensack: World Scientific, 2004. 599 p.

EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B.; ROSEN, N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? **Physical Review**, New York, v. 47, p. 777-779, 1935.

FISHER, M. E. Transformations of Ising Models. **Physical Review**, New York, v. 113, n. 4, p. 969-981, Feb. 1959.

GAMA, S. et al. Pressure-induced colossal magnetocaloric effect in MnAs. **Physical Review Letters**, New York, v. 93, p. 237202-237204, Dec. 2004.

GARST, M.; ROSCH, A. Sign change of the Grüneisen parameter and magnetocaloric effect near quantum critical points. **Physical Review B**, New York, v. 72, p. 205129-205139, Mar. 2005.

HILL, S.; WOOTTERS, W. K. Entanglement of a pair of quantum bits. **Physical Review Letters**, New York, v. 78, n. 26, p. 5022-5025, June 1997.

HONECKER, A. et al. Dynamic and thermodynamic properties of the generalised diamond chain model for azurite. **Physical Condensed Matter**,

Bristol, v. 23, p. 164211-164229, 2011.

JESCHKE, H. et al. Multi-step approach to microscopic models for frustrated quantum magnets: the case of the natural mineral azurite. **Physical Review Letters**, New York, v. 106, p. 217201-217210, Apr. 2011.

KAMTA, G. L.; ISTOMIN, A. Y.; STARACE, A. F. Thermal entanglement of two interacting qubits in a static magnetic field. **Physical Review Letters**, New York, v. 44, p. 389-400, June 2007.

KAMTA, G. L.; STARACE, A. F. Anisotropy and magnetic fields effects on the entanglement of a two qubits Heisenberg XY chain. **Physical Journal D**, New York, v. 88, p. 107901-107904, Feb. 2002.

KANG, J. et al. Consequence of intrachain dimer-monomer spin frustration and the interchain dimer-monomer spin exchange in diamond-chain compound Azurite $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$. **Journal Physics Condensed Matter**, Bristol, v. 21, p. 392201-392223, 2009.

LACROIX, C.; MENDELS, P.; MILA, F. **Introduction to Frustrated magnetism: materials, experiments, theory**. Berlin: Springer, 2011. 679 p.

LISNYI, B.; STREČKA, J. Exact results for a generalized spin 1/2 Ising-Heisenberg diamond chain with the second-neighbor interaction between nodal spins. **Physical Journal B**, New York, v. 86, p. 446-459, Dec. 2013.

NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. **Quantum computation and quantum information**. Cambridge: Cambridge University, 2010. 676 p.

NUSSENZVEIG, H. M. **Curso de física básica 2**. 4. ed. São Paulo: E. Blucher, 2002. v. 2, 314 p.

O'CONNOR, K. M.; WOOTTERS, W. K. Entangled rings. **Physical Review A**, New York, v. 63, n. 5, p. 52302-52311, Apr. 2001.

OLIVEIRA, I. S.; JESUS, V. L. B. de. **Introdução à física do estado sólido**. 2. ed. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2011. 507 p.

PAHLAVANI, M. R. **Measurements in quantum mechanics**. Zagreb: InTech,

2012. 348 p.

PEREIRA, M. S. S.; MOURA, F. A. B. F. de; LYRA, M. L. Magnetocaloric effect in kinetically frustrated diamond chains. **Physical Review B**, New York, v. 79, n. 5, p. 54427-54434, Feb. 2009.

ROJAS, O. et al. Exactly solvable mixed-spin Ising-Heisenberg diamond chain with biquadratic interactions and single-ion anisotropy. **Physical Review B**, New York, v. 83, n. 9, p. 94430-94439, Mar. 2011.

ROJAS, O.; VALVERDE, J. S.; SOUZA, S. M. Generalized transformation for decorated spin models. **Physical A**, Amsterdam, v. 388, n. 8, p. 1419-1430, Apr. 2009.

ROJAS, O. et al. Thermal entanglement in an exactly solvable Ising-XXZ diamond chain structure. **Physical Review A**, New York, v. 86, n. 4, p. 42330-42338, Oct. 2012.

RULE, K. C. et al. Nature of the spin dynamics and $1/3$ magnetization plateau in azurite. **Physical Review Letters**, New York, v. 100, p. 117202-117206, Jan. 2014.

SALINAS, S. R. A. **Introdução à física estatística**. 3. ed. São Paulo: EDUSP, 2013. 464 p.

SCHRÖDINGER, E. Discussion of probability relations between separated systems. **In Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society**, Cambridge, v. 31, p. 555-5563, 1935.

STYER, D. F. **Statistical mechanics**. Oberlin: Department of Physics and Astronomy Oberlin College, 2007. 240 p.

SUN, Y.; CHEN, Y.; CHEN, H. Thermal entanglement in the two-qubit Heisenberg XY model under a nonuniform external magnetic field. **Physics Review A**, New York, v. 68, p. 44301-44307, Oct. 2003.

TISHIN, A. M.; SPICHKIN, Y. I. **The magnetocaloric effect and its applications**. Bristol: Institute of Physics, 2003. 475 p.

VALVERDE, J.S.; ROJAS, O.; SOUZA, S.M. de, J. Two dimensional XXZ-Ising model on square-hexagon lattice **Physical Review E** v. 79, p. 041101 Apr. 2009.

VEDRAL, V. Quantifying entanglement in macroscopic systems. **Nature**, London, v. 453, p. 1004-1007, 2008.

WANBURG, E. Magnetische Untersuchungen. **Annalen der Physik**, Leipzig, v. 249, n. 5, p. 141-164, 1881.

WANG, X. Threshold temperature for pairwise and many-particle thermal entanglement in the isotropic Heisenberg model. **Physical Review A**, New York, v. 66, n. 4, p. 44305-33409, Oct. 2002.

WANG, X.; FU, H.; SOLOMON, A. I. Thermal entanglement in three-qubit Heisenberg models. **Journal of Physics**, New York, v. 34, p. 11307-11309, May 2001.

WOOTTERS, W. K. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. **Physical Review Letters**, New York, v. 80, n. 10, p. 2245-2248, Mar. 1998.

YEOMANS, J. M. **Statistical mechanics of phase transitions**. New York: University of Oxford, 1992. 164 p.

ZHU, L. et al. Universally diverging Grüneisen parameter and the magnetocaloric effect close to quantum critical points. **Physical Review Letters**, New York, v. 91, n. 6, p. 66404-66407, Aug. 2003.