# Exercício 2 - Parte 2

## Estado Térmico e Violação da Desigualdade de Bell - Detalhamento

# Problema

- Estado térmico:

$$\rho = Ne^{-\beta H_{AB}} \in \mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$$

- Hamiltoniano de interação:

$$H_{AB} = J\vec{\sigma}_A \cdot \vec{\sigma}_B = J(\sigma_x^A \sigma_x^B + \sigma_y^A \sigma_y^B + \sigma_z^A \sigma_z^B)$$

- Operador CHSH:

$$CHSH = AB + A'B + AB' - A'B'$$

- Objetivo: Calcular $\langle CHSH \rangle = \mathrm{tr}(\rho\, CHSH)$

# Determinação dos Autoestados - Passo 1

- Equação de Schrödinger:

$$H_{AB} \left|\psi\right\rangle_{AB} = E_n \left|\psi\right\rangle_{AB}$$

- Estado genérico:

$$\left|\psi\right\rangle_{AB} = C_{00}\left|00\right\rangle + C_{10}\left|10\right\rangle + C_{01}\left|01\right\rangle + C_{11}\left|11\right\rangle$$

- Aplicando $H_{AB}$:

$$\begin{aligned} J(\sigma_x^A\sigma_x^B + \sigma_y^A\sigma_y^B + \sigma_z^A\sigma_z^B)(C_{00}\left|00\right\rangle + \cdots + C_{11}\left|11\right\rangle) \\ = E_n(C_{00}\left|00\right\rangle + \cdots + C_{11}\left|11\right\rangle) \end{aligned}$$

# Determinação dos Autoestados - Passo 2

- Ação das matrizes de Pauli:

$$\sigma_x |0\rangle = |1\rangle \,, \quad \sigma_x |1\rangle = |0\rangle$$
$$\sigma_y |0\rangle = i\,|1\rangle \,, \quad \sigma_y |1\rangle = -i\,|0\rangle$$
$$\sigma_z |0\rangle = |0\rangle \,, \quad \sigma_z |1\rangle = -\,|1\rangle$$

- Termo $\sigma_x^A \sigma_x^B$:

$$\sigma_x^A \sigma_x^B (C_{00} |00\rangle + \cdots) = C_{00} |11\rangle + C_{10} |01\rangle + C_{01} |10\rangle + C_{11} |00\rangle$$

- Termo $\sigma_y^A \sigma_y^B$:

$$\sigma_y^A \sigma_y^B (C_{00} |00\rangle + \cdots) = -C_{00} |11\rangle + C_{10} |01\rangle + C_{01} |10\rangle - C_{11} |00\rangle$$

# Determinação dos Autoestados - Passo 3

- Termo $\sigma_z^A \sigma_z^B$:

$$\sigma_z^A \sigma_z^B (C_{00}\,|00\rangle + \cdots) = C_{00}\,|00\rangle - C_{10}\,|10\rangle - C_{01}\,|01\rangle + C_{11}\,|11\rangle$$

- Combinando todos os termos:

$$\begin{aligned} J[&(C_{00} - C_{00} + C_{00})\,|00\rangle + (C_{10} + C_{10} - C_{10})\,|01\rangle \\ &+ (C_{01} + C_{01} - C_{01})\,|10\rangle + (C_{11} - C_{11} + C_{11})\,|11\rangle] = E_n(\cdots) \end{aligned}$$

- Equações acopladas:

$$\begin{cases} JC_{11} = E_n C_{11} \\ 2JC_{10} - JC_{01} = E_n C_{10} \\ 2JC_{01} - JC_{10} = E_n C_{01} \\ JC_{00} = E_n C_{00} \end{cases}$$

# Solução das Equações

- Solução não trivial quando $C_{10} = \pm C_{01}$:

$$(J + E_n)^2 = 4J^2 \Rightarrow E_n = -3J \text{ ou } E_n = J$$

- Para $E_n = -3J$:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle - |01\rangle) \quad \text{(singleto)}$$

- Para $E_n = J$:

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle), \quad |\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle), \quad |\psi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle + |0$$

- Base completa de autoestados (estados de Bell)

# Matriz Densidade Térmica - Detalhe

- Forma geral:

$$\rho_\beta = \frac{\sum_n e^{-\beta E_n} |\psi_n\rangle \langle\psi_n|}{\sum_j e^{-\beta E_j}}$$

- Substituindo os autovalores:

$$\rho_\beta = \frac{e^{3\beta J} |\psi_1\rangle \langle\psi_1| + e^{-\beta J}(|\psi_2\rangle \langle\psi_2| + |\psi_3\rangle \langle\psi_3| + |\psi_4\rangle \langle\psi_4|)}{e^{3\beta J} + 3e^{-\beta J}}$$

- Normalização:

$$\mathrm{tr}(\rho_\beta) = \frac{e^{3\beta J} + 3e^{-\beta J}}{e^{3\beta J} + 3e^{-\beta J}} = 1$$

# Cálculo de $\langle CHSH \rangle$ - Parte 1

- Operador CHSH:

$$CHSH = AB + A'B + AB' - A'B'$$

- Escolha ótima de operadores:

$$A = \sigma_z, \quad A' = \sigma_x, \quad B = \frac{\sigma_z + \sigma_x}{\sqrt{2}}, \quad B' = \frac{\sigma_z - \sigma_x}{\sqrt{2}}$$

- Cálculo para $|\psi_1\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle\psi_1| AB |\psi_1\rangle &= -\cos(\alpha - \gamma) \\ \langle\psi_1| A'B |\psi_1\rangle &= -\cos(\alpha' - \gamma) \\ &\vdots \end{aligned}$$

# Cálculo de $\langle CHSH \rangle$ - Parte 2

- Contribuição de $|\psi_1\rangle$:

$$\langle\psi_1| C |\psi_1\rangle = -\cos(\alpha-\gamma) - \cos(\alpha'-\gamma) - \cos(\alpha-\gamma') + \cos(\alpha'-\gamma')$$

- Contribuição de $|\psi_2\rangle$:

$$\langle\psi_2| C |\psi_2\rangle = \cos(\alpha+\gamma) + \cos(\alpha'+\gamma) + \cos(\alpha+\gamma') - \cos(\alpha'+\gamma')$$

- Contribuição de $|\psi_3\rangle$:

$$\langle\psi_3| C |\psi_3\rangle = -\cos(\alpha+\gamma) - \cos(\alpha'+\gamma) - \cos(\alpha+\gamma') + \cos(\alpha'+\gamma')$$

- Contribuição de $|\psi_4\rangle$:

$$\langle\psi_4| C |\psi_4\rangle = \cos(\alpha-\gamma) + \cos(\alpha'-\gamma) + \cos(\alpha-\gamma') - \cos(\alpha'-\gamma')$$

# Resultado Final

- Combinando todas as contribuições:

$$\langle C \rangle = 2\sqrt{2}\frac{e^{-\beta J} - e^{3\beta J}}{e^{3\beta J} + 3e^{-\beta J}}$$

- Forma alternativa usando sinh:

$$\langle C \rangle = -2\sqrt{2}\frac{2\sinh(2\beta J)}{e^{2\beta J} + 3e^{-2\beta J}}$$

- Casos limites:
  - $\beta \to \infty$ (T $\to$ 0): $\langle C \rangle \to 2\sqrt{2}$ (violação máxima)
  - $\beta \to 0$ (T $\to \infty$): $\langle C \rangle \to 0$ (sem violação)

# Condição para Violação

- Violação ocorre quando $|\langle C \rangle| > 2$:

$$2\sqrt{2}\frac{e^{3\beta J} - e^{-\beta J}}{e^{3\beta J} + 3e^{-\beta J}} > 2$$

- Solução:

$$e^{4\beta J} > 4\sqrt{2} + 3 \quad \Rightarrow \quad \beta J > \frac{\ln\left(4\sqrt{2}+3\right)}{4} \approx 0.416$$

- Interpretação física: Violação só ocorre abaixo de uma temperatura crítica

# Conclusões

- O estado térmico do sistema de dois spins pode violar a desigualdade de Bell
- A violação é máxima no limite de temperatura zero
- Existe uma temperatura crítica acima da qual a violação desaparece
- O emaranhamento é sensível à temperatura, sendo destruído pelo aumento da agitação térmica