

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

PATRÍCIA A. ALMEIDA DE OLIVEIRA

**Emaranhamento eletrônico em moléculas de pontos
quânticos semicondutores**

Uberlândia
2015

PATRÍCIA A. ALMEIDA DE OLIVEIRA

Emaranhamento eletrônico em moléculas de pontos quânticos
semicondutores

Dissertação de Mestrado apresentado
ao Instituto de Física da Universidade
Federal de Uberlândia em preenchi-
mento parcial dos requisitos para
obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador:

PROFA. DRA. LILIANA SANZ DE LA TORRE

Uberlândia
2015



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA



PATRICIA APARECIDA ALMEIDA DE OLIVEIRA

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física, do Instituto de Física, da Universidade Federal de Uberlândia, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Uberlândia, 20 DE Fevereiro de 2015.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. José Maria Villas-Bôas
Universidade Federal de Uberlândia- UFU

Prof. Dr. Marcos Cesar de Oliveira
Universidade Federal de Campinas - UNICAMP

Prof. Dr. Liliana Sanz de la Torre
Universidade Federal de Uberlândia – UFU

Agradecimentos

Preciso começar agradecendo minha orientadora Liliana Sanz, não só pela paciência infinita nesses últimos dois anos, mas principalmente pela excelente orientação nesses quase seis anos de trabalho.

Agradeço aos meus pais, Suely Catarina Almeida e Juvenil Oliveira, por tudo que me proporcionaram até hoje, pela paciência que tiveram durante todos estes anos, por terem sido um exemplo para mim e principalmente por sempre acreditarem em mim. À Nathy, minha irmã preferida, agradeço por ser uma ótima amiga e por todo o apoio fornecido nestes últimos anos.

À minha filha Giovanna, que creio não encontrar as palavras certas e suficientes para agradecer como realmente merece, mas agradeço por toda compreensão, amor e carinho que alegram cada um dos meus dias.

Ao Grupo de Óptica e Informação Quântica e todos os meus amigos, professores e funcionários do Instituto de Física, que direta e indiretamente contribuíram para o desenvolvimento deste trabalho.

Finalmente, agradeço ao Instituto de Física da Universidade Federal de Uberlândia, ao Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Informação Quântica, INCT-IQ, e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPq, pelo apoio financeiro.

Resumo

Nesta dissertação estudamos a dinâmica do emaranhamento entre dois qubits eletrônicos localizados em duas moléculas quânticas acopladas, onde cada molécula é composta por dois pontos quânticos semicondutores. O foco principal é a produção de estados maximamente emaranhados no sistema de dois níveis sem considerarmos perdas. Utilizamos a concorrência, uma medida de correlação quântica, para analisar as características do emaranhamento dos autoestados do sistema obtidos através da diagonalização exata do Hamiltoniano que descreve as moléculas quânticas. Definimos uma nova base, a base de estados de Bell, que permite reescrever o Hamiltoniano para as moléculas acopladas. Essa nova interpretação possibilitou determinar dois subespaços de matrizes $2 \otimes 2$ que elucidam o comportamento do emaranhamento no sistema. Ainda auxiliados por esta nova base, verificamos a dinâmica do emaranhamento ao manipularmos parâmetros físicos do sistema como a dessintonia e o tunelamento entre os pontos contidos nas moléculas e a interação de Coulomb entre as moléculas. Identificamos um conjunto de parâmetros onde é possível obter estados maximamente emaranhados e condições onde não é possível emaranhar os subsistemas.

Palavras-chave: Informação Quântica, Emaranhamento, Estados de Bell, Pontos Quânticos, Moléculas Quânticas.

Abstract

In this work, we study the dynamics of entanglement between two electronic qubits inside two coupled quantum molecules, where each molecule is consisting of two semiconductor quantum dots. Our first interest is to explore the production of maximally entangled states in the two level system not considering dissipation. Using the Bell states, we define a new basis for the system of interest, which allows to obtain a new Hamiltonian for the quantum molecules. To analyze the characteristics of eigenstates of the Hamiltonian which describes the quantum molecules, we use a measure of entanglement called concurrence. From the new base, we verify the behavior the dynamics of entanglement by manipulating the physical parameters of the system as the detuning and the tunneling between the quantum dots contained in molecules and the Coulomb interaction. We identified a set of physical parameters which are linked to the creation of maximally entangled states and other conditions where it is not possible to entangle the subsystems.

Keywords: Quantum Information, Entanglement, Bell states, Quantum Dots, Quantum Molecules.

Sumário

Lista de símbolos	viii
Lista de Figuras	xiii
Lista de Tabelas	xiv
Introdução	1
1 Moléculas Quânticas acopladas	5
1.1 Heteroestruturas Semicondutoras	5
1.2 Pontos quânticos	10
1.2.1 Pontos quânticos duplos	12
2 Emaranhamento Quântico	17
2.1 Operador densidade	17
2.1.1 Descrição de sistemas compostos usando operador densidade	20
2.1.2 Operação transposição parcial	21
2.2 Emaranhamento	21
2.2.1 Definição e aplicações de um estado emaranhado	22
2.2.2 Critérios de separabilidade	28
2.2.3 Quantificadores de emaranhamento	30
3 Emaranhamento em moléculas quânticas acopladas	33
3.1 Espectro, autoestados e emaranhamento	33
3.1.1 Anti-cruzamentos de energia e sua relação com o emaranhados	33
3.2 Propriedades de emaranhamento dos autoestados eletrônicos em moléculas quânticas acopladas	36
3.2.1 Solução analítica para o caso ressonante	37

3.2.2	Resultados Numéricos	39
4	Geração dinâmica de estados emaranhados	45
4.1	Geração dinâmica de estados emaranhados	45
4.1.1	Efeitos do tunelamento sobre a dinâmica do emaranhamento	46
4.1.2	Efeitos das dessintonias sobre a dinâmica da Concorrência	49
5	Perspectivas	52
5.1	Sistemas quânticos abertos	52
5.1.1	Decoerência	52
5.1.2	Equação mestra	55
5.1.3	Equação mestra de Lindblad	57
5.2	Sistema e modelo	58
6	Conclusões	62
	Referências bibliográficas	65

Lista de símbolos

C - Concorrência;

D - Matrizes de acoplamento entre os subespaços M_{\pm} ;

δ_i - Anti-cruzamentos de energia;

Δ_i - Taxas de tunelamento entre os pontos quânticos da molécula i ;

ϵ - Energias discretas dos níveis eletrônicos;

ε_i - Dessintonia entre os níveis eletrônicos dos pontos quânticos contidos na molécula i ;

\mathcal{H} - Espaço de Hilbert;

g - Densidade de estados;

$\Gamma_j^{\Delta_i}$ - Termo de normalização dos autoestados do sistema na base de Bell;

Γ_{ij} - Taxas de tunelamento incoerentes que acoplam os pontos quânticos aos seus respectivos reservatórios;

γ_{ij} - Taxa de *dephasing* puro entre os níveis eletrônicos;

J - Acoplamento de Coulomb entre as moléculas de pontos quânticos;

M_{\pm} - Subespaços de matrizes $2 \otimes 2$ do Hamiltoniano na base de Bell;

m^* - Massa efetiva do elétron;

μ_i - Potencial químicos;

N - Número de estados eletrônicos acessíveis;

ν_i - Autovalores negativos da matriz transposta parcial do operador densidade;

\mathcal{N} - Negatividade;

$\Omega_j^{\Delta_i}$ - Coeficiente dos autoestados do Hamiltoniano na base de Bell;

Ω_{\pm} - Frequências características dos batimentos na dinâmica da concorrência;

$Q(\rho)$ - Quantificador de emaranhamento;

ρ - Operador densidade;

σ_i - Matrizes de Pauli;

\mathcal{V} - Volume do cristal;

V - Potencial eletrostático;

Lista de Figuras

- 1.1 (a) Representação esquemática de uma heteroestrutura AlGaAs/GaAs crescida na direção z , sendo L a espessura da camada intermediária. (b) Representação do perfil de potencial dos poços quânticos, onde ΔE_c e ΔE_v são respectivamente a diferença de energia das bandas de condução e de valência dos materiais e $E_{g,\text{GaAs(AlGaAs)}}$ é a energia do gap do GaAs (AlGaAs). (c) Banda de condução da heteroestrutura na direção de crescimento, onde duas barreiras de potencial formam um poço de potencial com altura V_e 6
- 1.2 Comparação entre as densidades de estados em função da energia para sistemas de dimensão três (3D), dois (2D), um (1D) e zero (0D). (a) Densidade de estados em semicondutor tipo *bulk*; (b) Densidade de estados em poços quânticos; (c) Densidade de estados em fios quânticos; (d) Densidade de estados de pontos quânticos (CORCORAN, 1998). 11
- 1.3 (a) Imagem representativa de uma junção de amostras dos materiais semicondutores GaAs/AlGaAs que formam, devido a diferença do *gap* de energia entre esses materiais, um gás de elétrons bidimensional. O confinamento nas outras duas direções ocorre com a aplicação de tensões de voltagem nos eletrodos formados sobre a camada de AlGaAs; (b) Imagem de um ponto quântico eletrostático similar ao da figura (a), feita através de microscopia eletrônica (KOUWENHOVEN, 1998). 12

1.4 (a) Imagem, feita através de microscopia eletrônica, da amostra utilizada por Fujisawa *et al.* Os eletrodos V_L , V_l , V_C , V_r e V_R são tensionados negativamente, afim de definir os dois pontos quânticos (L e R, do inglês *left* e *right*) entre a fonte (S, do inglês *Source*) e o dreno (D, *Drain*). V_{SD} é a diferença de potencial entre a fonte e o dreno. (b) Diagrama esquemático do regime de transporte eletrônico. Γ_L e Γ_R são, respectivamente, as taxas de tunelamento da fonte para a $|L\rangle$ e de $|R\rangle$ para o dreno, ε é a dessintonia. (c) Regime de bloqueio de Coulomb (FUJISAWA, 2004). (d) Dessintonia entre os níveis eletrônicos dos pontos L e R, definida por meio da diferença dos potenciais químicos: $\varepsilon \equiv \mu_R - \mu_L$, onde μ_L e μ_R são respectivamente o potencial químico do ponto da esquerda e da direita. (e) Representação esquemática da transição, efeito da taxa de tunelamento Δ , entre os dois níveis eletrônicos que definem o *qubit* na molécula. 13

1.5 (a) Imagem feita através de microscopia eletrônica do dispositivo utilizado por Shinkai *et al.*. Os círculos representam os pontos quânticos nas moléculas **M1** e **M2**. Todas as medidas foram realizadas à temperatura $T = 100\text{mK}$ e a um campo magnético de 0.6T . As dessintonias nas moléculas, ε_1 e ε_2 , e o tunelamento entre os pontos, Δ_1 e Δ_2 , foram controlados independentemente através da alteração da tensão em algumas portas afim de compensar a interferência eletrostática (SHINKAI, 2009). (b) Diagrama esquemático que descreve a transição entre os níveis eletrônicos devido as taxas de tunelamento Δ_1 e Δ_2 15

3.1 Comportamento do espectro de energia e da Concorrência de elétrons em duas moléculas quânticas acopladas como função da razão entre a dessintonia dos níveis eletrônicos e a interação de Coulomb, ε_1/J , considerando $\varepsilon_2 = 0$ e as taxas de tunelamento iguais em cada molécula ($\Delta_1 = \Delta_2 = J/16$). (a) Espectro de energia do sistema como função de ε_1/J , sendo E_0 a energia do estado fundamental e E_i a energia do i -ésimo estado excitado; (b) concorrência dos autoestados correspondentes as autoenergias do sistema, como função de ε_1/J . Os estados $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|2\rangle$ e $|3\rangle$, correspondem respectivamente ao estado fundamental, primeiro, segundo e terceiro estado excitado. 35

- 3.2 Comportamento da Concorrência de elétrons em duas moléculas quânticas acopladas como função da razão entre a dessintonia dos níveis eletrônicos e a interação de Coulomb, ε_1/J , considerando $\varepsilon_2 = 0$ e as taxas de tunelamento $\Delta_1 = J/8$ e $\Delta_2 = J/2$. Os estados $|0\rangle$ e $|i\rangle$ correspondem respectivamente ao estado fundamental i -ésimo estado excitado. Parâmetros utilizados: $\varepsilon_2 = 0$ e $\Delta_1 = J/8$ e $\Delta_2 = J/2$ 36
- 3.3 Comportamento da Concorrência de elétrons em duas moléculas quânticas acopladas como função da razão entre as dessintonias dos níveis eletrônicos e o acoplamento de Coulomb, ε_1/J e ε_2/J , considerando dois regimes de tunelamento: Para o primeiro regime de tunelamento $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta = J/16$, os resultados se encontram nas figuras: (a) $|0\rangle$, (b) $|1\rangle$, (c) $|2\rangle$ e (d) $|3\rangle$. Os resultados referentes ao segundo regime de tunelamento, $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta = J/4$, correspondem as figuras: (e) $|0\rangle$, (f) $|1\rangle$, (g) $|2\rangle$ e (h) $|3\rangle$ 40
- 3.4 Comportamento da Concorrência de elétrons em duas moléculas quânticas acopladas como função da razão entre a dessintonia do nível eletrônico e o acoplamento de Coulomb, ε/J , e da razão entre a taxa de tunelamento e o acoplamento de Coulomb, Δ/J , sendo $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$ e $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon$: (a) $|0\rangle$, (b) $|1\rangle$, (c) $|2\rangle$ e (d) $|3\rangle$ 42
- 3.5 Comportamento da Concorrência de elétrons em duas moléculas quânticas acopladas como função da razão entre as dessintonias dos níveis eletrônicos e o acoplamento de Coulomb, ε_1/J e ε_2/J , considerando taxas de tunelamento diferentes $\Delta_1 = J/4$ e $\Delta_2 = J/8$: (a) $|0\rangle$, (b) $|1\rangle$, (c) $|2\rangle$ e (d) $|3\rangle$ 43
- 4.1 Comportamento da dinâmica da concorrência de elétrons em moléculas quânticas acopladas como função da razão entre a taxa de tunelamento e o acoplamento de Coulomb, Δ_1/J , considerando a condição de ressonância, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$, e que as taxas de tunelamento nas moléculas são iguais $\Delta_2 = \Delta_1$ sendo $|\Psi(0)\rangle = |RL\rangle$. (a) Concorrência como função do tempo de da razão Δ/J considerando $\Delta_1 = \Delta_2$ para $0 < t < 3$ ns; (b-e) Dinâmica da concorrência $0 < t < 1$ ns considerando escolhas específicas para a razão Δ/J . 46

4.2	Comportamento da dinâmica das Populações e da Concorrência de elétrons em moléculas quânticas acopladas considerando o estado inicial $ \Psi(0)\rangle = RL\rangle$. Onde $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$ e $\Delta_1 = \Delta_2$ sendo $\Delta_1/J = \sqrt{3}/4$ que satisfaz a condição de oscilações periódicas na dinâmica da Concorrência. (a) Populações dos quatro estados posicionais $ M_1M_2\rangle$ como função do tempo; (b) Dinâmica da Concorrência com oscilações periódicas.	48
4.3	Comportamento de três padrões distintos da Concorrência dos elétrons em duas moléculas quânticas acopladas como função da razão entre a dessintonia dos níveis eletrônicos e a interação de Coulomb, ε_i/J , e do tempo, considerando as taxas de tunelamento em cada molécula são iguais ($\Delta_1 = \Delta_2$) e que sua razão com o acoplamento de Coulomb é $\Delta_1/J = \sqrt{3}/4$. (a) Os resultados deste gráfico são válidos para as seguintes condições: $ \Psi(0)\rangle = \{ RL\rangle, LR\rangle\}$ para $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$ e $ \Psi(0)\rangle = \{ LL\rangle, RR\rangle\}$ para $\varepsilon_2 = -\varepsilon_1$; (b) Os resultados deste gráfico são válidos para as seguintes condições: $ \Psi(0)\rangle = RL\rangle$ considerando $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$ e $ \Psi(0)\rangle = LL\rangle$ para a condição $\varepsilon_2 = -\varepsilon_1$; (c) Os resultados deste gráfico são válidos para as seguintes condições: $ \Psi(0)\rangle = LR\rangle$ considerando $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$ e $ \Psi(0)\rangle = RR\rangle$ para $\varepsilon_2 = -\varepsilon_1$	50
5.1	(a) Sistema constituído por duas moléculas quânticas, cada uma acoplada a seus reservatórios por Γ_{ij} , onde cada molécula pode assumir os seguintes estados eletrônicos: $ 0\rangle, L\rangle, R\rangle$ e $ 2\rangle$. (b) Diagrama esquemático do acoplamento dos níveis dos estados eletrônicos devido aos processos de tunelamento coerentes descritos por Δ_i	60

Lista de Tabelas

2.1	Tabela de convenções associando cada estado de Bell (coluna esquerda) medido pelo receptor a uma mensagem de dois bits (coluna direita) enviada pelo transmissor.	26
2.2	Tabela que relaciona a medida obtida pelo transmissor T com a operação unitária a ser realizada pelo receptor R com o objetivo de determinar o estado $ \eta\rangle$, teletransportado de T para R.	28

Introdução

Nas últimas décadas, as áreas de Computação Quântica e Informação Quântica passaram por um acelerado desenvolvimento. Seu início se deu em 1982, quando o físico Richard Feynman (FEYNMAN, 1982) apontou o fato de que sistemas clássicos não são capazes de modelar eficientemente os sistemas quânticos e que estes só poderiam ser modelados utilizando-se outros sistemas quânticos. Em 1985, Deutsch (DEUTSH, 1985) levantou a possibilidade de uma maior capacidade de processamento dos computadores quânticos em relação aos computadores clássicos. Até 1990, as discussões acerca da computação quântica se limitavam apenas a curiosidades. Mas, em 1994 Peter Shor, (SHOR, 1994) publica sua proposta de algoritmo quântico referente ao problema da fatoração de números inteiros grandes, e desde então a pesquisa nessa área tem despertado interesse devido as suas possíveis aplicações tecnológicas em segurança, comunicações, etc.

A possibilidade de definir superposições coerentes de estados quânticos é um dos fatores por trás das vantagens do uso de computadores quânticos. Diferentemente da computação clássica na qual um bit, unidade básica de informação, pode assumir unicamente os valores lógicos 0 ou 1, na computação quântica um bit quântico, ou *qubit*¹, pode ainda ser uma combinação linear de ambos. Essa superposição de estados permite que os computadores quânticos possam realizar operações simultâneas o que é chamado de *paralelismo quântico* e não tem análogo na computação clássica. O algoritmo de Deutsch foi o primeiro a utilizar esse recurso e demonstrar a maior eficiência dos computadores quânticos, ao corroborar que o mesmo resolveria o problema de determinar se uma função é constante ou balanceada após uma única operação (DEUTSH, 1985). O recurso do *paralelismo quântico* também foi utilizado por Shor em seu algoritmo quântico para fatoração de números inteiros, algoritmo que apresenta um ganho de velocidade exponencial sobre sua contrapartida clássica (GROVER, 1997; JOZSA, 1997).

¹Um bit quântico, ou um *qubit*, é o análogo quântico de um bit de informação. Enquanto um bit pode assumir os valores lógicos 0 ou 1, o *qubit* pode assumir os valores lógicos $|0\rangle$, $|1\rangle$, ou ainda ser uma superposição coerente de ambos os estados da forma: $c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$

Outra consequência do princípio de superposição é a criação de estados quânticos emaranhados, onde a interação entre diferentes subsistemas mistura os graus de liberdade das partes constituintes. O emaranhamento permite que dois ou mais subsistemas estejam correlacionados de tal forma que um subsistema não pode ser corretamente descrito sem que a sua contra-parte seja levada em conta. Este fenômeno tem importantes aplicações no processo de transmissão e processamento quântico de informação, sendo considerado um ingrediente indispensável na construção de um computador quântico escalável (CAVES, 2004), além de estar presente em diversos protocolos de informação, como por exemplo, a codificação superdensa, o teletransporte quântico e a criptografia quântica (BENNETT, 1992; BENNETT, 1993; ROOS, 2004).

Algoritmos e protocolos de informação são baseados em sequências de operações lógicas, que em Mecânica Quântica são caracterizadas por transformações unitárias sobre estados quânticos. Essas transformações são chamadas de *portas lógicas quânticas*, sendo essenciais à computação quântica portas que atuem sobre um e dois *qubits*. A implementação de um *qubit* pode ser realizada utilizando qualquer sistema quântico de dois níveis. Desta forma, faz-se necessário estudar sistemas físicos que sejam candidatos promissores à computação quântica. Várias propostas experimentais tem sido realizadas, dentre as quais podemos mencionar átomos e íons aprisionados (ROOS, 2004), condensados de Bose-Einstein (BOEHI, 2009) e spins nucleares (KANE, 1998). Sistemas de estado sólido tem atraído grande interesse devido à sua potencial aplicabilidade na implementação de processamento quântico de informação (LOSS, 1998).

As tecnologias de nanofabricação atuais permitem projetar os denominados *pontos quânticos*, ou átomos artificiais. Nestes dispositivos, por se intercalar diferentes materiais semicondutores, é possível confinar espacialmente elétrons e buracos e explorar os *gaps* de energia ou parâmetros de rede de cada material (MARK, 1993). Neste tipo de sistema, um *qubit* pode ser definido usando a carga ou o spin da partícula confinada, além dos estados excitônicos (KANE, 1998; LOSS, 1998; BORGES, 2010). Oscilações de Rabi entre dois níveis, condição necessária para a definição de um *qubit*, têm sido reportadas neste tipo de sistema (STIEVATER, 2001; BORRI, 2002). O processo de decoerência, fenômeno responsável pela destruição dos estados quânticos de superposição, tem sido bastante explorado em pontos quânticos (JACAK, 2005; VILLAS-BOAS, 2005; BORRI, 2003).

É possível construir dispositivos mais complexos acoplando pontos quânticos. Um dos sistemas de interesse na comunidade científica devido ao seu potencial de aplicação para o processamento quântico de informação é a molécula quântica, constituída de dois pon-

tos quânticos acoplados via tunelamento (KRENNER, 2005; BRACKER, 2006; VILLAS-BOAS, 2004). Estamos interessados num segundo sistema onde os elétrons pertencentes a duas moléculas quânticas diferentes interagem via interação coulombiana (HAYASHI, 2003; SHINKAI, 2009). Neste sistema, um *qubit* é definido pela posição do elétron à esquerda ou à direita da molécula correspondente, onde o tunelamento é o mecanismo que acopla os dois estados. Trabalhos experimentais mostraram que é possível realizar um conjunto universal de portas de dois *qubits* (SHINKAI, 2009) e alguns trabalhos teóricos têm explorado aspectos relacionados com emaranhamento e decoerência (EMARY, 2009; FANCHINI, 2010). A necessidade de criar superposições de estados de *qubits*, na implementação prática das operações lógicas, impõe o requerimento de que os parâmetros de interação envolvidos sejam rigorosamente controlados. Por esta razão, as investigações sobre os efeitos dos parâmetros físicos do sistema e dos processos de decoerência em sistemas quânticos promissores é um passo essencial para construção de um processador lógico quântico.

Neste trabalho, tivemos como principal objetivo verificar como se comporta o emaranhamento no sistema de dois elétrons em duas moléculas quânticas acopladas ao manipularmos seus parâmetros físicos. Consideramos apenas dois níveis eletrônicos para cada molécula, caso onde o sistema se encontra isolado dos seus respectivos reservatórios eletrônicos em um regime de bloqueio de Coulomb. Analisamos o espectro de energia do sistema como função das dessintonias entre os pontos quânticos contidos nas moléculas, e verificamos o comportamento do emaranhamento dos autoestados correspondentes. Em seguida, reescrevemos o Hamiltoniano do sistema em uma base de estados de Bell, afim de verificar o comportamento físico do sistema. Descrevemos teoricamente a dinâmica das correlações quânticas em função do tunelamento e das dessintonias entre os pontos contidos nas moléculas. Em todos os cálculos de emaranhamento, onde consideramos as moléculas isoladas, utilizamos como medida de emaranhamento a concorrência (*concurrence*, em inglês), um quantificador de emaranhamento eficaz tanto para estados puros, quanto para estados mistos e que é útil em sistemas $2 \otimes 2$ e $2 \otimes 3$.

A dissertação está disposta da seguinte forma: No capítulo 1, discutimos brevemente as propriedades das nanoestruturas semicondutoras. Após apresentar os aspectos gerais deste tipo de dispositivo, descrevemos o nosso sistema físico de interesse a saber, duas moléculas quânticas acopladas. No capítulo 2, começamos discutindo brevemente o formalismo do *operador densidade*, essencial no estudo do emaranhamento. Em seguida, revisamos os aspectos mais importantes sobre o problema do emaranhamento em sistemas quânticos, descrevendo as características gerais do emaranhamento, critérios de separabilidade e quan-

tificadores de emaranhamento, dentre eles a *concorrência* e a *negatividade*. No capítulo 3, apresentamos os resultados obtidos para o sistema composto por duas moléculas acopladas. Discutimos inicialmente o espectro de energia e sua relação com o emaranhamento no sistema. No capítulo 4, verificamos a possibilidade de gerar dinamicamente estados altamente emaranhados. Analisamos os efeitos da taxa de tunelamento entre os pontos das moléculas individuais através de resultados numéricos e analíticos. As perspectivas com relação ao estudo da influência de processos de decoerência estão dispostas no capítulo 5, onde iniciamos uma abordagem sobre os possíveis mecanismos de decoerência no sistema de estudo deste trabalho. As conclusões da dissertação se encontram no capítulo 5.

Capítulo 1

Moléculas Quânticas acopladas

Em este capítulo, apresentamos o sistema físico de interesse, que consiste em elétrons dentro de duas moléculas quânticas acopladas. Cada molécula é composta por dois pontos quânticos semicondutores acoplados entre si por tunelamento. Com o objetivo de entender melhor este tipo de sistema, fazemos na seção 2.1 uma discussão breve sobre as propriedades de confinamento presentes em heteroestruturas semicondutoras. Na seção 2.2, após apresentar os aspectos gerais dos pontos quânticos semicondutores, descrevemos de forma detalhada o sistema composto por duas moléculas quânticas acopladas.

1.1 Heteroestruturas Semicondutoras

Após a demonstração do efeito transistor por J. Bardeen e W. Brattain em 1947, os materiais semicondutores têm sido responsáveis por inúmeros avanços, seja no campo tecnológico ou na área de pesquisa em ciência básica. Até os anos 60, os dispositivos semicondutores eram baseados em materiais tipo *bulk*, ou seja, porções de material de dimensões macroscópicas. Em 1970, Esaky e Tsu propuseram a fabricação de estruturas híbridas, denominadas heteroestruturas semicondutoras, formadas por finas camadas de materiais semicondutores diferentes e intercalados (ESAKY, 1970). As primeiras observações experimentais relacionadas a estas estruturas vieram em 1974 e demonstraram as consideráveis vantagens que estes dispositivos trariam: Chang, Esaky e Tsu observaram o tunelamento ressonante em barreiras duplas (CHANG, 1974), Esaky e Chang mediram propriedades de transporte (ESAKY, 1974) e Dingle, Wiegman e Henry observaram a quantização no espectro de energia em poços quânticos (DINGLE, 1974).

Os métodos de crescimento até então disponíveis possibilitavam o crescimento de cristais

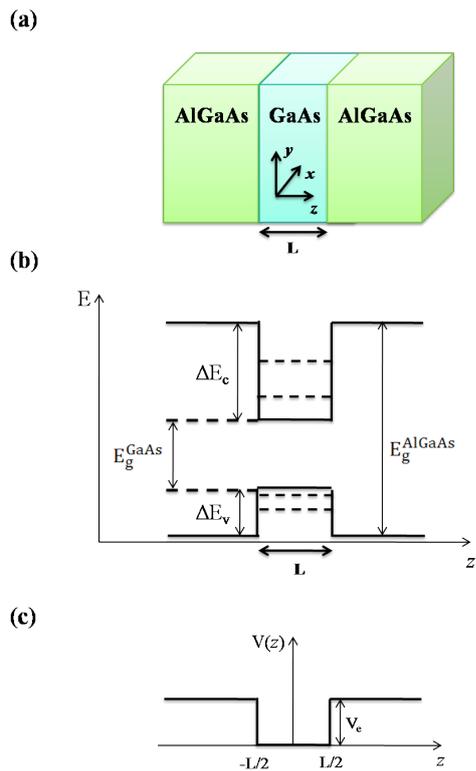


Figura 1.1: (a) Representação esquemática de uma heteroestrutura AlGaAs/GaAs crescida na direção z , sendo L a espessura da camada intermediária. (b) Representação do perfil de potencial dos poços quânticos, onde ΔE_c e ΔE_v são respectivamente a diferença de energia das bandas de condução e de valência dos materiais e $E_{g^{GaAs(AlGaAs)}}$ é a energia do gap do GaAs (AlGaAs). (c) Banda de condução da heteroestrutura na direção de crescimento, onde duas barreiras de potencial formam um poço de potencial com altura V_e .

de alta qualidade. No entanto, havia necessidade de uma melhora nas técnicas de crescimento afim de conseguir camadas com espessuras nanométricas. Essa dificuldade foi superada nas décadas de 80 e 90 com novas tecnologias e novas técnicas de crescimento, dentre elas a mais utilizada atualmente é o crescimento epitaxial por feixe molecular (MBE, do inglês *molecular beam epitaxy*), técnica de crescimento de cristais a partir da evaporação de elementos em um ambiente de ultra-vácuo (10^{13} vezes menor que a pressão atmosférica) onde o cristal crescido possui a mesma estrutura cristalina do material (substrato) sobre o qual está sendo formado (HERMAN, 1996). As heteroestruturas fabricadas por MBE são sistemas de altíssima pureza com regiões ativas muito finas, que possibilitam um aumento da velocidade de operação dos dispositivos. Um elevado controle do crescimento também é obtido por meio de outros processos como a epitaxia por deposição de vapor químico (CVD, do inglês *chemical vapor deposition*), a epitaxia por feixe químico (CBE, do inglês *chemical beam epitaxy*) e a epitaxia de fase líquida (LPE, do inglês *liquid phase epitaxy*).

Intercalar materiais semicondutores em camadas de espessuras nanométricas tem como objetivo explorar a quantização do movimento dos portadores de carga ao longo da estrutura. Em todas as técnicas de fabricação, essa quantização de movimento é feita explorando as diferenças dos parâmetros físicos dos materiais envolvidos nos processos de fabricação. Os poços quânticos, por exemplo, são estruturas formadas por uma fina camada de um semicondutor colocado entre duas camadas de um outro semicondutor com *gap*¹ maior. Uma vez que os *gaps* de energia desses materiais são diferentes, as bandas de condução e de valência nestes sistemas formam naturalmente poços e barreiras de potencial para elétrons e buracos, restringindo o movimento dos portadores em duas dimensões. Através desses poços quânticos é possível produzir fios quânticos onde o confinamento é unidimensional. Outra propriedade física útil para se obter o confinamento é o parâmetro de rede dos materiais semicondutores. Quando há uma grande diferença entre o parâmetro de rede do substrato e o material a ser depositado, observa-se a formação de ilhas que podem ser consideradas como pontos quânticos onde o confinamento se dá nas três dimensões. A formação dessas ilhas é energeticamente favorável porque as partículas do material depositado têm maior energia de ligação entre si do que com o substrato (WARBURTON, 2002).

A redução de dimensionalidade que ocorre nas heteroestruturas semicondutoras, pode

¹A população eletrônica de qualquer cristal é agrupada em bandas de energia separadas por regiões proibidas, as quais correspondem a intervalos de energia não permitidos para o elétron. Esta lacuna de energia é conhecida como *gap* de energia. Um elétron na banda de valência precisa ser excitado, no mínimo, com a energia do *gap* para que haja uma transição desta banda para a de condução. Quando um elétron passa para a banda de condução, ele deixa um estado desocupado na banda de valência que se comporta como uma carga positiva e recebe o nome de buraco (KITTEL, 1978).

ser tratada utilizando um problema bastante conhecido dentro da Mecânica Quântica: o poço quântico quadrado unidimensional. A figura 1.1 (a) mostra a representação esquemática de uma heteroestrutura de GaAs/AlGaAs, onde a junção de materiais com diferentes *gaps* de energia faz com que apareçam potenciais na direção de crescimento para elétrons e buracos (figura 1.1 (b)). A presença da heteroestrutura gera na banda de condução² um poço de potencial na direção z conforme mostrado na figura 1.1 (c). A equação de Schrödinger, na aproximação de massa efetiva³, para um elétron de massa m^* neste caso pode ser aproximada por

$$-\frac{\hbar}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi + V(z)\Psi = E\Psi. \quad (1.1)$$

Utilizando separação de variáveis, $\Psi(x, y, z) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$, obtemos as seguintes equações para cada direção:

$$-\frac{\hbar}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_x(x) = E_x \psi_x(x) \quad (1.2)$$

$$-\frac{\hbar}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \psi_y(y) = E_y \psi_y(y) \quad (1.3)$$

$$-\frac{\hbar}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi_z(z) + V(z)\psi_z(z) = E_z \psi_z(z) \quad (1.4)$$

A solução das equações (1.2) e (1.3) são ondas planas dadas pelas funções $\psi_x(x) = e^{ik_x x}$ e $\psi_y(y) = e^{ik_y y}$, e as autoenergias relacionadas são dadas respectivamente por $E_x = \hbar k_x^2 / 2m^*$ e $E_y = \hbar k_y^2 / 2m^*$, sem nenhuma restrição sobre os valores de k_x e k_y . Este fato indica que o espectro de energias é contínuo e a função de onda não está confinada nas direções x e y .

Na direção z , onde temos as heteroestruturas, as funções de onda para estados pares são dadas por

$$\psi_z(z) = \begin{cases} Ae^{kz}, & z \leq -L/2; \\ B \cos(k_z z), & -L/2 \leq z \leq L/2; \\ Ae^{-kz}, & L/2 \leq z, \end{cases} \quad (1.5)$$

²Um poço de potencial é também formado na banda de valência de modo que todos os efeitos de confinamento são observados também nos buracos.

³Massa efetiva de elétrons e buracos em um semiconductor é definida tendo em conta as forças exercidas sobre os portadores pelos átomos presentes no cristal; essa massa é diferente em semicondutores diferentes, por conseguinte, a mobilidade dos portadores de carga é diferente em semicondutores diferentes (KITTEL, 1978).

onde $k_z = \sqrt{2m^*E_z}/\hbar$ e $k = \sqrt{2m^*(V_e - E_z)}/\hbar$. Diferente das funções ψ_x e ψ_y , que estão uniformemente distribuídas no plano xy , a função ψ_z é restrita à região $|z| \leq L/2$, caindo exponencialmente na região das barreiras. O potencial de confinamento gerado pela heteroestrutura reduz um grau de liberdade do sistema, por isso os poços quânticos são conhecidos como sistemas bidimensionais, onde o termo *dimensionalidade* refere-se ao número de graus de liberdade do elétron. Além de reduzir os graus de liberdade do sistema, a presença de uma heteroestrutura discretiza o espectro de energia relacionado ao movimento do elétron na direção z , pois as condições de contorno em $-L/2$ e $L/2$ levam a equações transcendentais que são satisfeitas apenas para certos valores de E_z , portanto os níveis de energia em z são discretos. Assim, a energia do sistema onde os portadores estão confinados a se mover em duas dimensões (poços quânticos) é dada por

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) + E_z^{(n)}, \quad (1.6)$$

com $n = 1, 2, 3, \dots$, onde o espectro de energia é quantizado somente na direção onde há confinamento. Já em um sistema no qual os portadores estão confinados a se mover em uma única direção, como no caso dos fios quânticos, onde os portadores estão livres apenas na direção x , temos

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} k_x^2 + E_y^{(m)} + E_z^{(n)}, \quad (1.7)$$

com $m = 1, 2, 3, \dots$. Finalmente, quando os portadores estão confinados em todas as direções, como nos pontos quânticos, temos

$$E = E_x^{(l)} + E_y^{(m)} + E_z^{(n)}, \quad (1.8)$$

com $l = 1, 2, 3, \dots$ onde obtemos um espectro de energia completamente discreto.

Do ponto de vista das propriedades eletrônicas, a redução da dimensão tem efeito direto na densidade de estados do sistema. A densidade de estados é a função que descreve o número N de estados disponíveis por energia por unidade de volume

$$g(E) = \frac{2}{\mathcal{V}} \frac{dN}{dE} \quad (1.9)$$

O fator 2 leva em conta o fato de que dois elétrons de spin oposto podem ocupar cada estado de energia e \mathcal{V} é o volume do cristal. Para um sistema tridimensional (semicondutor *bulk*)

a densidade de estados e proporcional à raiz quadrada da energia

$$g^{3D}(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - \epsilon_i}, \quad (1.10)$$

onde ϵ_i são as energia discretas dos níveis. Para os poços quânticos a densidade de estados é uma função degrau

$$g^{2D}(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \sigma(E - \epsilon_i); \quad (1.11)$$

para os fios quânticos temos

$$g^{1D}(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar} \sqrt{m^*} 2(E - \epsilon_i); \quad (1.12)$$

e para pontos quânticos a densidade tem a forma

$$g^{0D}(E) = 2\delta(E - \epsilon_i). \quad (1.13)$$

A figura 1.2 mostra os efeitos da redução da dimensionalidade sobre a densidade de estados. De acordo com a equação (1.10) a densidade de estados de semicondutores tipo *bulk* é uma função contínua como mostra a figura 1.2 (a). Quando os portadores estão livres para se mover apenas em duas dimensões como no caso dos poços quânticos há quebras na continuidade da função (equação 1.11) o que podemos ver na figura 1.2 (b). No caso dos fios quânticos (1D), vemos na figura 1.2 (c) que a densidade de estados é caracterizada por singularidades (VAN HOVE, 1953). Já a densidade de estados dos pontos quânticos é simplesmente dada por uma séries de funções delta (figura 1.2 (d)) e, como nos átomos, depende apenas do número de níveis confinados, sendo por isso muitas vezes chamados de *átomos artificiais* (KASTNER, 1993).

1.2 Pontos quânticos

Assim como os átomos naturais, os pontos quânticos possuem um espectro discreto de níveis de energia e podem conter um número discreto de elétrons. Átomos artificiais, no entanto, possuem uma propriedade única: a corrente através do ponto e a capacitância entre os condutores podem variar em muitas ordens de grandeza quando a carga é alterada por um único elétron (MICHLER, 2003). Os diferentes tipos de pontos quânticos e suas diferentes propriedades são definidos por seus processos de formação. A auto-organização é o modo

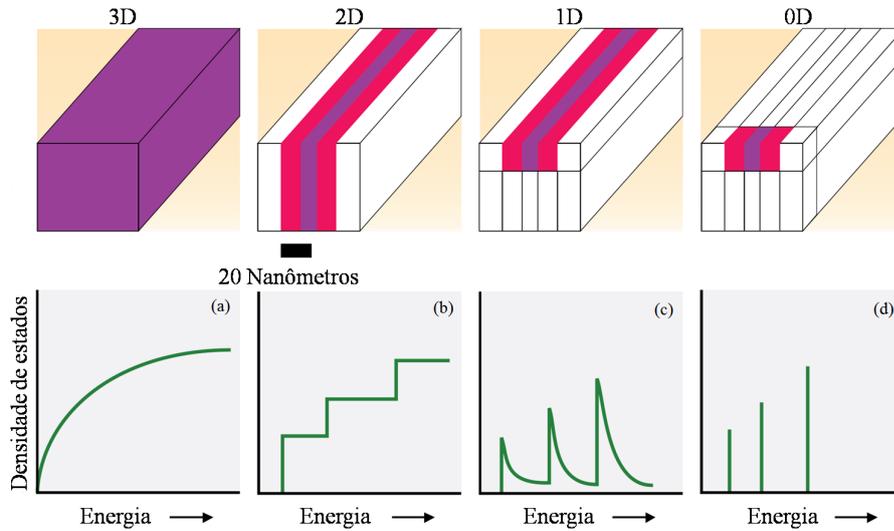


Figura 1.2: Comparação entre as densidades de estados em função da energia para sistemas de dimensão três (3D), dois (2D), um (1D) e zero (0D). (a) Densidade de estados em semiconductor tipo *bulk*; (b) Densidade de estados em poços quânticos; (c) Densidade de estados em fios quânticos; (d) Densidade de estados de pontos quânticos (CORCORAN, 1998).

mais utilizado no crescimento de pontos quânticos semicondutores, esses tipos de pontos podem ser crescidos principalmente por técnicas de crescimento epitaxial como MBE e o MOVPE (*Metalorganic Vapour Phase Epitaxy*). Está técnica tem boa reprodutividade e a densidade de pontos quânticos é tipicamente da ordem de 10^9cm^{-2} a 10^{11}cm^{-2} , sendo sua principal desvantagem a posição aleatória dos pontos quânticos. Técnicas de litografia, como a *litografia por feixe de elétrons* e a *litografia por feixe de íons*, e a técnica de *campo elétrico modulado* também são bastante utilizadas.

Como foi mencionado anteriormente, utilizando técnicas de MBE é possível construir heteroestruturas com níveis de energia quantizados na direção do crescimento, enquanto os elétrons ficam livres para se moverem nas outras duas direções. Esses elétrons livres nesse plano constituem o que se chama de gás de elétrons bidimensional (2DEG) cujos valores típicos da densidade eletrônica são de $(1 - 5)10^{15}\text{m}^{-2}$. Um exemplo da construção de um gás bidimensional consiste em formar uma junção de uma amostra de GaAs com uma amostra de AlGaAs, cujos parâmetros de rede de ambos os materiais, por serem praticamente iguais, permitem um “casamento” quase perfeito na interface. A partir desse gás de elétrons bidimensional é possível confinar elétrons nas outras duas direções formando assim um ponto quântico. Esse confinamento pode ser obtido pela formação de pequenos discos

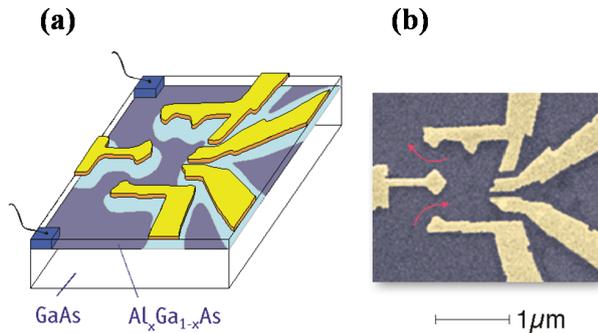


Figura 1.3: (a) Imagem representativa de uma junção de amostras dos materiais semicondutores GaAs/AlGaAs que formam, devido a diferença do *gap* de energia entre esses materiais, um gás de elétrons bidimensional. O confinamento nas outras duas direções ocorre com a aplicação de tensões de voltagem nos eletrodos formados sobre a camada de AlGaAs; (b) Imagem de um ponto quântico eletrostático similar ao da figura (a), feita através de microscopia eletrônica (KOUWENHOVEN, 1998).

de GaAs e AlGaAs posicionados entre eletrodos, de forma que os elétrons podem fluir ao longo do eixo z ou definindo a região de confinamento do ponto quântico no plano do gás bidimensional através da construção de eletrodos metálicos sobre o gás de elétrons. As figuras 1.3 (a) e (b) mostram um ponto quântico construído pelo confinamento de elétrons no plano do gás bidimensional onde, quando uma voltagem é aplicada aos eletrodos, o campo resultante repele os elétrons dessa camada e os comprime em pequenas regiões. A intensidade do confinamento nessas regiões, bem como o número de elétrons contidos nesse tipo de ponto quântico podem ser bem manipulados pela variação da voltagem nos eletrodos. Esse tipo de ponto, chamado de ponto quântico eletrostático, tem tido importância fundamental no estudo da física de muitos corpos em sistemas fermiônicos (REIMANN, 2002). Transporte eletrônico, efeitos de bloqueio de Coulomb e regime Kondo também têm sido investigados nestes sistemas (CRONENWETT, 1998; GOLDHABER-GORDON, 1998).

1.2.1 Pontos quânticos duplos

O próximo passo, depois de estudar pontos quânticos individuais, é estudar os sistemas compostos por mais de um ponto. Uma motivação importante para esta análise é a ideia recente de utilizar pontos quânticos acoplados para aplicações em a computação quântica, como no trabalho de Loss e DiVincenzo em que o spin dos elétrons em cada ponto atua como um *qubit* (LOSS, 1998). Existem também propostas de pontos quânticos nos quais o

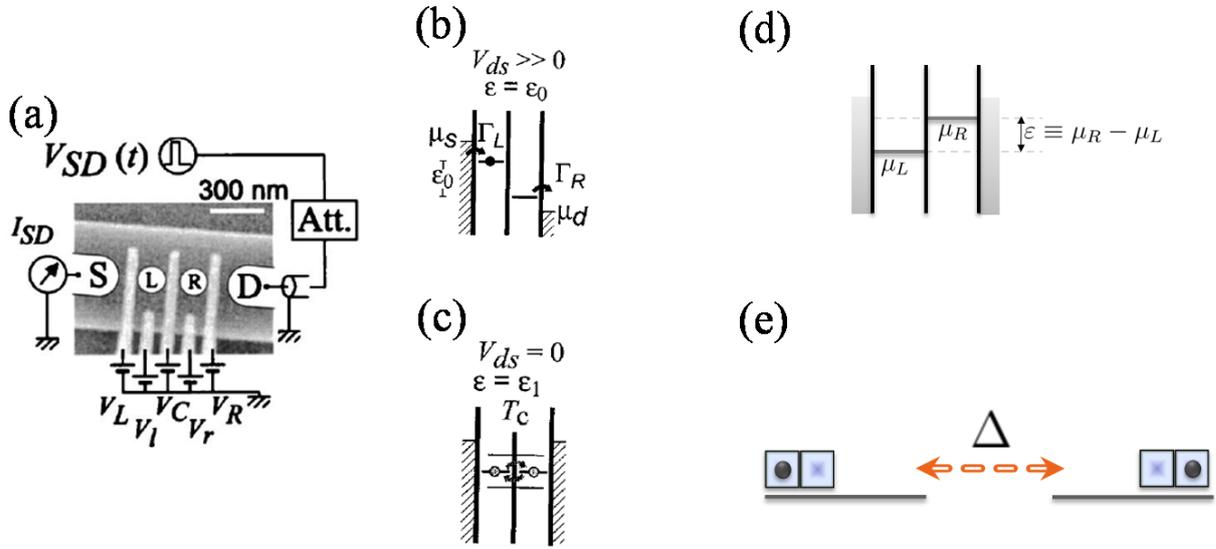


Figura 1.4: (a) Imagem, feita através de microscopia eletrônica, da amostra utilizada por Fujisawa *et al.* Os eletrodos V_L , V_I , V_C , V_r e V_R são tensionados negativamente, afim de definir os dois pontos quânticos (L e R, do inglês *left* e *right*) entre a fonte (S, do inglês *Source*) e o dreno (D, *Drain*). V_{SD} é a diferença de potencial entre a fonte e o dreno. (b) Diagrama esquemático do regime de transporte eletrônico. Γ_L e Γ_R são, respectivamente, as taxas de tunelamento da fonte para a $|L\rangle$ e de $|R\rangle$ para o dreno, ϵ é a dessintonia. (c) Regime de bloqueio de Coulomb (FUJISAWA, 2004). (d) Dessintonia entre os níveis eletrônicos dos pontos L e R, definida por meio da diferença dos potenciais químicos: $\epsilon \equiv \mu_R - \mu_L$, onde μ_L e μ_R são respectivamente o potencial químico do ponto da esquerda e da direita. (e) Representação esquemática da transição, efeito da taxa de tunelamento Δ , entre os dois níveis eletrônicos que definem o *qubit* na molécula.

grau de liberdade da carga eletrônica é explorada para definir o *qubit* (BARENCO, 1995; BRUM, 1997; ZANARDI, 1998).

Em uma série de artigos, publicados por Hayashi e colaboradores, foi demonstrado que é possível manipular coerentemente um único elétron excedente em um sistema constituído por dois pontos quânticos acoplados por tunelamento (HAYASHI, 2003; FUJISAWA, 2004). Os pontos foram definidos por portas metálicas no gás de elétrons bidimensional em uma heteroestrutura de GaAs/AlGaAs, conforme mostrado na figura 1.4 (a). Assim como pontos quânticos isolados são considerados como átomos artificiais, dois pontos quânticos acoplados podem ser considerados uma molécula artificial. Os autores demonstraram que o *qubit* pode ser inicializado, manipulado e medido, pela manipulação da diferença de voltagem entre a fonte e o dreno, V_{SD} .

Na figura 1.4 (b) apresentamos o diagrama esquemático do regime de transporte, onde o sistema é inicializado com o tunelamento do elétron da fonte para o ponto da esquerda, isso ocorre quando $V_{SD} \gg 0$ ($\sim 650\mu\text{eV}$) e a taxa de tunelamento Γ_L é muito maior que a dessintonia na molécula. Após a inicialização, a diferença de voltagem entre a fonte e o dreno é desligada $V_{SD} = 0$, por um tempo de manipulação, onde a molécula é ajustada em um regime de bloqueio de Coulomb, figura 1.4 (c) (LIVERMORE, 1996). Neste caso, é permitido apenas tunelamento de primeira ordem (Δ) entre os pontos da molécula, de modo que o elétron pode oscilar entre o ponto da esquerda e o ponto da direita. Durante este tempo de manipulação, temos um sistema artificial de dois níveis que define o *qubit* de carga (FUJISAWA, 2004): o elétron em excesso ocupa ou o ponto da esquerda (do inglês *left*, $|L\rangle$) ou o ponto da direita (*right*, $|R\rangle$), o que define o nosso *qubit*.

Após o tempo de manipulação, V_{SD} é restaurada para o processo de medida, figura 1.4 (b) (FUJISAWA, 2004), e o elétron tunela do ponto da direita para o dreno contribuindo para a medida de corrente. Assim, com exceção do tempo de manipulação, o sistema perde e recebe elétrons para os reservatórios, de modo que possui quatro níveis eletrônicos: $|L\rangle$, $|R\rangle$, nenhum elétron na molécula $|0\rangle$ e um elétron em excesso em cada ponto da molécula $|2\rangle$.

Em nosso trabalho, consideraremos inicialmente o regime de bloqueio de Coulomb, onde temos apenas os estados $|L\rangle$ e $|R\rangle$ que definem o nosso *qubit*. Neste caso, podemos considerar dois estados de carga, em que um elétron em excesso ocupa o ponto da esquerda (do inglês *left*, $|L\rangle$) ou o ponto da direita (*right*, $|R\rangle$), com potenciais eletroquímicos μ_L e μ_R , respectivamente. O Hamiltoniano efetivo da molécula pode ser escrito como

$$H = \frac{1}{2}\varepsilon(t)\sigma_z + \frac{1}{2}\Delta\sigma_x, \quad (1.14)$$

onde ε é a dessintonia entre os níveis eletrônicos do ponto da direita e o da esquerda, caracterizada por $\varepsilon \equiv \mu_R - \mu_L$ (figura 1.4 (d)). O parâmetro Δ descreve o tunelamento entre pontos da molécula (figura 1.4 (e)) e σ_j ($j = x, y, z$) são as matrizes de Pauli.

Em um importante experimento recente, Shinkai et al. (SHINKAI, 2009) construíram um dispositivo, onde duas moléculas quânticas estão acopladas eletrostaticamente mas isoladas por condução, cada uma contendo um *qubit* de carga. Nesse sistema a corrente de tunelamento ressonante através de cada molécula é influenciada pelo estado de carga da segunda molécula (SHINKAI, 2007), e os estados de carga nas duas moléculas oscilam coerentemente. Por meio de medidas de transporte, foi demonstrado que é possível realizar um conjunto de portas de dois *qubits*, um dos requisitos essenciais à computação quântica.

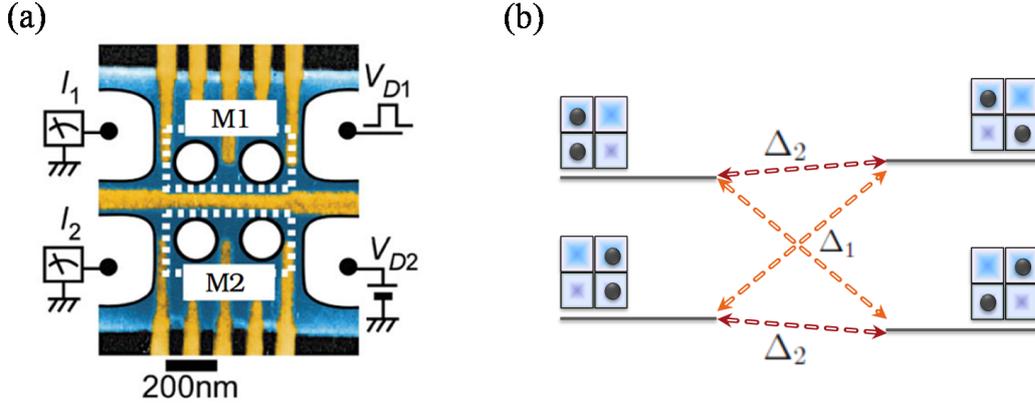


Figura 1.5: (a) Imagem feita através de microscopia eletrônica do dispositivo utilizado por Shinkai *et al.*. Os círculos representam os pontos quânticos nas moléculas **M1** e **M2**. Todas as medidas foram realizadas à temperatura $T = 100\text{mK}$ e a um campo magnético de 0.6T . As dessintonias nas moléculas, ε_1 e ε_2 , e o tunelamento entre os pontos, Δ_1 e Δ_2 , foram controlados independentemente através da alteração da tensão em algumas portas afim de compensar a interferência eletrostática (SHINKAI, 2009). (b) Diagrama esquemático que descreve a transição entre os níveis eletrônicos devido as taxas de tunelamento Δ_1 e Δ_2 .

Na figura 1.5, a imagem feita com uso de microscopia eletrônica mostra o sistema integrado pelas duas moléculas, **M1** e **M2**, implementadas na heteroestrutura de GaAs/AlGaAs. Cada molécula possui uma fonte e um dreno individual, isolados eletricamente uns dos outros, garantindo que se possa medir correntes independentes em **M1** e **M2**. Todos os parâmetros dos *qubits* podem ser bem controlados através das 11 portas de voltagem que integram o sistema. Afim de preservar a interação de Coulomb entre os dois *qubits*, as moléculas são ajustadas em um regime de acoplamento fraco.

A base computacional das moléculas acopladas pode ser definida por:

$$\{|L, L\rangle, |L, R\rangle, |R, L\rangle, |R, R\rangle\}, \quad (1.15)$$

onde a base do sistema bipartite resulta do produto direto da base $\{|L\rangle, |R\rangle\}$ associada a cada molécula (**M1** e **M2**).

O Hamiltoniano que descreve este sistema é dado por (SHINKAI, 2009):

$$\hat{H}_{2M} = \frac{1}{2} \sum_i (\varepsilon_i \sigma_z^{(i)} + \Delta_i \sigma_x^{(i)}) + \frac{J}{4} \sigma_z^{(1)} \otimes \sigma_z^{(2)} \quad (1.16)$$

onde ε_i é a dessintonia entre os níveis eletrônicos dos pontos de cada molécula individual definidos de acordo com a descrição da figura 1.4 (d) e Δ_i representa o tunelamento dentro de cada uma das moléculas $M(i = 1, 2)$. Os últimos acoplam os estados do sistema conforme pode ser visto na figura 1.5. A interação de Coulomb entre os elétrons está associado a J . Utilizando o seguinte ordenamento de base $\{|LL\rangle, |LR\rangle, |RL\rangle, |RR\rangle\}$ podemos escrever o Hamiltoniano na forma matricial:

$$\hat{H}_{2M} = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon_s}{2} + \frac{J}{4} & \frac{\Delta_2}{2} & \frac{\Delta_1}{2} & 0 \\ \frac{\Delta_2}{2} & \frac{\varepsilon_d}{2} - \frac{J}{4} & 0 & \frac{\Delta_1}{2} \\ \frac{\Delta_1}{2} & 0 & -\frac{\varepsilon_d}{2} - \frac{J}{4} & \frac{\Delta_2}{2} \\ 0 & \frac{\Delta_1}{2} & \frac{\Delta_2}{2} & -\frac{\varepsilon_s}{2} + \frac{J}{4} \end{pmatrix} \quad (1.17)$$

com $\varepsilon_s = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$ e $\varepsilon_d = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$.

Capítulo 2

Emaranhamento Quântico

Neste capítulo, apresentaremos de maneira concisa alguns dos conceitos fundamentais para o desenvolvimento deste trabalho. Na seção 2.1, introduzimos o operador densidade, sua definição, interpretação e propriedades, que será utilizado em todos os estudos apresentados nesta dissertação. Na seção 2.2, abordamos o conceito de emaranhamento em sistemas quânticos, fazendo uma breve discussão sobre critérios de separabilidade e quantificadores de emaranhamento, dando destaque a dois quantificadores, a concorrência utilizada nos resultados apresentados nesta dissertação, e a negatividade medida que utilizaremos em cálculos futuros.

2.1 Operador densidade

Na Mecânica Quântica, dado um certo Hamiltoniano com autovalores e autoestados definidos, podemos descrever qualquer estado puro como uma superposição de autoestados dada pela equação

$$|\Psi\rangle = \sum_k c_k |\psi_k\rangle, \quad (2.1)$$

onde, os estados $|\psi_k\rangle$ formam um conjunto completo de funções ortonormais do espaço de Hilbert, e os coeficientes c_k satisfazem a relação $\sum_k |c_k|^2 = 1$. Assim, toda a informação sobre o estado está contida no vetor $|\Psi\rangle$ e os coeficientes c_k são interpretados como amplitudes de probabilidade.

Porém, na maioria dos casos de interesse onde o sistema físico interage com o ambiente que o cerca, lidamos com informação incompleta sobre o estado do sistema. Este fato está relacionado ao conceito de probabilidade dentro da física estatística. Neste formalismo, o

sistema é descrito com um estado *misto*. Consequentemente, não é possível descrever uma mistura estatística na forma de um vetor de estado e nestes casos é conveniente utilizarmos uma descrição alternativa baseada no *operador densidade* (COHEN-TANOUDJI, 1978).

A representação de um sistema por um operador densidade apresenta vantagens à representação através de um vetor de estado, porque é de aplicação geral a qualquer sistema, quer seja um estado puro, quer seja uma mistura estatística. Um estado puro pode ser representado tanto por um vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ como pela matriz densidade,

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|. \quad (2.2)$$

Por sua vez, uma mistura estatística só é devidamente representada por uma matriz densidade da forma:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_k p_k \hat{\rho}_k(t) = \sum_k p_k |\psi_k(t)\rangle \langle \psi_k(t)|, \quad (2.3)$$

em que p_k são as probabilidades associadas a cada estado $|\psi_k(t)\rangle$ da mistura, e $\rho_k(t)$, é o operador densidade associado ao mesmo estado.

O operador densidade é definido de forma que possa descrever informações do sistema em estudo, e satisfaz as seguintes propriedades:

1. $\hat{\rho}$ é hermitiano:

$$\hat{\rho}^\dagger = \left(\sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \right)^\dagger = \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k| = \hat{\rho}. \quad (2.4)$$

2. $\hat{\rho}$ é um operador positivo semi-definido,

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle &= \langle \psi | \left(\sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \right) | \psi \rangle \\ &= \sum_k p_k \langle \psi | \psi_k\rangle \langle \psi_k | \psi \rangle \\ &= \sum_k p_k |\langle \psi | \psi_k\rangle|^2 \geq 0. \end{aligned} \quad (2.5)$$

3. $\hat{\rho}$ tem a propriedade de conservar à probabilidade. Considerando a normalização do estado em que o sistema se encontra, temos que

$$\sum_k |c_k(t)|^2 = \sum_k \rho_{kk}(t) = 1. \quad (2.6)$$

A soma dos elementos da diagonal da matriz densidade é denominado traço da matriz, $\text{Tr}\{\hat{\rho}(t)\}$, essa soma deve sempre ser igual à unidade o que expressa a conservação de probabilidade dentro da mecânica quântica.

4. Assim como no caso de um vetor de estado, em que a evolução temporal de uma sistema é descrita pela equação de Schrödinger, é definido o análogo dessa equação para o caso do operador densidade. A equação tem a forma:

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)], \quad (2.7)$$

onde $[\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)]$ é o comutador¹ entre o operador Hamiltoniano e o operador densidade. A equação acima é chamada de *equação de Von Neumann*.

5. No caso do estado puro, tem-se ainda a seguinte idempotência:

$$\hat{\rho}^2(t) = \hat{\rho}(t). \quad (2.8)$$

Uma propriedade útil, que é utilizada na distinção entre um estado puro e uma mistura estatística, está contido no fato de que o traço sobre o quadrado do operador densidade, $\hat{\rho}^2 = \sum_k p_k^2 |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k|$, é sempre menor ou igual a um,

$$\text{tr}(\hat{\rho}^2) \leq 1. \quad (2.9)$$

No caso em que $\text{tr}(\hat{\rho}^2) = 1$, o sistema se encontra em um estado puro. Quando $\text{tr}(\hat{\rho}^2) < 1$, estamos lidando com uma mistura estatística de estados.

6. Os elementos de matriz do operador densidade tem um importante significado físico. Os elementos da diagonal, ρ_{nn} , representam a probabilidade de encontrar o sistema no estado $|\psi_n\rangle$, e por isso são chamados *populações*. Os elementos fora da diagonal, ρ_{np} , estão associados aos efeitos de interferência entre os estados $|\psi_n\rangle$ e $|\psi_p\rangle$. No caso em que $\rho_{np} = 0$, dizemos que não há correlações que produzam efeitos de interferência entre os estados $|\psi_n\rangle$ e $|\psi_p\rangle$. Agora quando $\rho_{np} \neq 0$, existe coerência (ou correlações quânticas) entre os dois estados. Por isso, os elementos não diagonais são denominados *coerências*.

¹Definimos o comutador de dois operadores \hat{A} e \hat{B} como: $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Quando o comutador de dois operadores é nulo, $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, diz-se que os dois operadores comutam.

2.1.1 Descrição de sistemas compostos usando operador densidade

O espaço de estados de um sistema físico composto é o produto tensorial² dos espaços de estados componentes. Especificamente, se temos os subsistemas numerados de 1 a n , o estado do subsistema 1 é $|\Psi_1\rangle$, do subsistema 2 é $|\Psi_2\rangle$, e assim sucessivamente. Desta forma, o estado do sistema composto será:

$$|\Psi\rangle = |\Psi_1\rangle \otimes |\Psi_2\rangle \dots \otimes |\Psi_n\rangle$$

O produto tensorial entre os espaços de estados é uma característica exclusiva da Mecânica Quântica pois, na Mecânica Clássica, o espaço de fase de um sistema composto é o produto cartesiano entre os espaços de fase dos sistemas individuais. Esta novidade está diretamente relacionada com a caracterização do emaranhamento, uma propriedade física puramente quântica do sistema composto.

Veremos agora, como descrever sistemas compostos utilizando o formalismo do operador densidade. Consideremos, por simplicidade, um sistema quântico composto por 2 subsistemas, A e B , que chamaremos sistema bipartite. O espaço de estados de tal sistema é:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B, \quad (2.10)$$

onde \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_B são os espaços de estados de cada um dos subsistemas. A matriz densidade do sistema composto é escrita como

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{AB} &= \rho_A \otimes \rho_B \\ &= \sum_{i,j,k,l} |i_A, j_B\rangle \langle k_A, l_B| \\ &= \sum_{i,j,k,l} (\langle i_A, j_B | \rho | k_A, l_B \rangle) |i_A, j_B\rangle \langle k_A, l_B|, \end{aligned} \quad (2.11)$$

onde

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_A &= \sum_{i,k} |i_A\rangle \langle k_A|, \\ \hat{\rho}_B &= \sum_{j,l} |j_B\rangle \langle l_B|. \end{aligned} \quad (2.12)$$

²O produto tensorial é uma maneira de “juntarmos” espaços vetoriais para formarmos outro espaço vetorial “maior”. Sejam \mathbf{V} e \mathbf{U} os espaços de estado de dois sistemas físicos individuais. Se as dimensões desses espaços forem m e n , então o produto tensorial $\mathbf{V} \otimes \mathbf{U}$ é um espaço vetorial de dimensão $m \times n$.

Quando não há correlações, tanto o subsistema A quanto o subsistema B podem ser descritos de forma independente pela equação (2.12). Nos casos onde existem correlações entre os subsistemas, o operador densidade do subsistema $A(B)$, $\hat{\rho}_{A(B)}$, é obtido por meio do *traço parcial*, sobre o subsistema $B(A)$, da matriz densidade do sistema bipartite $\hat{\rho}_{AB}$,

$$\hat{\rho}_{A(B)} = Tr_B \hat{\rho}_{AB}, \quad (2.13)$$

estes são chamados operadores densidade reduzidos.

2.1.2 Operação transposição parcial

Outra propriedade importante associada ao operador densidade de um sistema composto é a operação de transposição parcial em relação a um dos subsistemas. Para um sistema bipartite AB , com sua matriz densidade descrita pela equação (2.11), podemos obter a transposição parcial sobre o subsistema A (B), ao transpor os índices de matriz associados somente ao subsistema A (B). Deste modo, a matriz transposta parcial ρ^{TA} de ρ com relação ao subsistema A , será escrita da seguinte forma

$$\hat{\rho}^{TA} = \sum_{i,j,k,l} (\langle k_A, j_B | \rho | i_A, l_B \rangle) |i_A, j_B\rangle \langle k_A, l_B|. \quad (2.14)$$

Sendo seus elementos de matriz relacionados por

$$\langle i_A, j_B | \rho^{TA} | k_A, l_B \rangle = \langle k_A, j_B | \rho | i_A, l_B \rangle. \quad (2.15)$$

A operação de transposição parcial é uma operação que preserva o traço, portanto ρ_{TA} , que também é um operador hermitiano, satisfaz a condição $Tr(\rho^{TA}) = 1$. A transposição parcial será muito útil adiante, visto que é fundamental para a definição da negatividade (VIDAL, WERNER, 2002), que é um método de medida de emaranhamento suficiente e necessária para sistemas de até 6 dimensões.

2.2 Emaranhamento

Logo após a década de 1920, a maioria dos postulados da Mecânica Quântica já eram conhecidos. Em 1935, Einstein, Podolsky e Rosen (EINSTEIN, 1935) descrevem uma nova consequência da teoria quântica: o fato de que quando dois ou mais sistemas quânticos

interagem³, o estado final de um deles pode depender do estado final dos outros. É desta ideia que surge o conceito de emaranhamento. Durante muito tempo, a abordagem desse tema estava limitado a propiciar discussões meramente filosóficas a respeito de fundamentos físicos, até que a existência de tais correlações quânticas foram demonstradas experimentalmente nos experimentos de Aspect, onde através de medidas da polarização de pares de fótons, demonstrou-se que as desigualdades de Bell podem ser violadas (ASPECT, 1982).

No início da década de 1990, os físicos passaram a se perguntar se esta propriedade de sistemas quânticos poderia ser útil de alguma forma. Como resposta a esta indagação, a ideia de emaranhamento entre bits quânticos passou a ser usada para implementar diversos protocolos quânticos de informação, relacionando assim duas áreas até então distintas, a computação e a física quântica. Dentre estes protocolos podemos citar a codificação superdensa, teletransporte quântico e código de correção de erros, alguns já implementados experimentalmente (BENNETT, 1993; LOSS, DIVINCENZO, 1998; BRUN, 2000). As propostas de computadores quânticos e de protocolos de informação quântica desenvolvidas desde então tem apontado para uma maior capacidade e velocidade de processamento de informação que um computador quântico teria sobre a sua contrapartida clássica. Uma possível explicação por trás do ganho exponencial de velocidade de processamento dos computadores quânticos foi introduzida por Ekert e Jozsa (EKER, JOZSA, 1998). Posteriormente, Linden e Popescu demonstraram que o emaranhamento é uma condição necessária para que haja ganho exponencial de velocidade em uma grande classe de algoritmos, tal como o de Shor (LINDEN, 2001). No entanto, eles não puderam determinar se o emaranhamento é condição suficiente, e deixaram em aberto a possibilidade de existirem outros algoritmos tão eficientes quanto o de Shor que não utilizam o emaranhamento. Um ponto importante a enfatizar é o fato de que o emaranhamento não está presente em todos os algoritmos, pois existem propostas de algoritmos de busca com um ganho *polinomial* sobre os algoritmos clássicos que nunca acessam um estado emaranhado (MEYER, 2000).

2.2.1 Definição e aplicações de um estado emaranhado

Emaranhamento de estados puros

No caso de estados puros, podemos definir o emaranhamento da seguinte forma:

³Mesmo sendo uma característica de sistemas compostos, é possível haver emaranhamento em um único sistema. Um átomo, por exemplo, pode ter seu *momentum* emaranhado a seu *spin* através da interação com um campo magnético.

DEFINIÇÃO 1: *Seja um sistema quântico composto de n subsistemas, tal que o espaço de Hilbert associado é*

$$\mathcal{H} = \otimes_{i=1}^n \mathcal{H}_i,$$

onde \mathcal{H}_i é o espaço de Hilbert associado a cada subsistema. Se $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ é o estado que descreve o sistema, então ele não está emaranhado se, e somente se, podemos escrevê-lo como

$$|\psi\rangle = \otimes_{i=1}^n |\psi_i\rangle, \quad (2.16)$$

onde $|\psi_i\rangle \in \mathcal{H}_i$. Este tipo de estado é conhecido como estado separável.

Tomemos como exemplo um sistema bipartite cuja a base computacional é definida como: $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$. Considerando agora dois vetores de estado que podem descrever este sistema, o estado 1 dado por:

$$|\phi\rangle = \frac{1}{2} [(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)], \quad (2.17)$$

e o estado 2 por:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle). \quad (2.18)$$

O estado descrito pela equação (2.17), é um exemplo de estado não emaranhado, pois pode ser escrito como o produto dos estados,

$$|\phi\rangle = |\varphi_1\rangle \otimes |\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_1 + |1\rangle_1) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_2 + |1\rangle_2).$$

No caso do estado 2, quando tentamos escrevê-lo como produto dos estados, observamos que

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\varphi_1\rangle \otimes |\varphi_2\rangle = (a_1 |0\rangle_1 + b_1 |1\rangle_1) \otimes (a_2 |0\rangle_2 + b_2 |1\rangle_2) \\ &= a_1 a_2 |00\rangle + a_1 b_2 |01\rangle + b_1 a_2 |10\rangle + b_1 b_2 |11\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle), \end{aligned}$$

em que as únicas possibilidades são:

$$a_1 a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}};$$

$$\begin{aligned}
a_1 b_2 &= 0; \\
b_1 a_2 &= 0; \\
b_1 b_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}.
\end{aligned}$$

Mas, para $a_1 b_2 = 0$, temos que ou $a_1 = 0$, o que implica em $a_1 a_2 = 0 \neq \frac{1}{\sqrt{2}}$, ou $b_2 = 0$ e portando $b_1 b_2 = 0 \neq \frac{1}{\sqrt{2}}$. O mesmo ocorre com a terceira possibilidade. Assim, vemos que não é possível escrever o estado $|\psi\rangle$, como um produto entre os estados $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$, ou seja, $|\psi\rangle$ é um estado emaranhado.

Emaranhamento de estados mistos

Quando lidamos com estados mistos a definição 1 não se aplica, sendo necessária uma formulação mais geral de emaranhamento, válida tanto para estados puros quanto para mistos. Assim, partindo da definição de emaranhamento para estados puros, e utilizando o formalismo do operador densidade, podemos definir:

DEFINIÇÃO 2: *Seja um sistema quântico composto de n subsistemas descrito por uma matriz densidade $\rho \in \otimes_{i=1}^n \mathcal{A}_i$, onde \mathcal{A}_i é o espaço de Hilbert formado por todos os operadores que atuam em \mathcal{H}_i . Dizemos que ρ representa um sistema não emaranhado se, e somente se, ela pode se escrita, para algum k , como uma soma de produtos diretos:*

$$\hat{\rho} = \sum_{j=0}^k p_j \bigotimes_{i=1}^n \hat{\rho}_j^i = \sum_{j=0}^k p_j \left(\hat{\rho}_j^1 \otimes \hat{\rho}_j^2 \otimes \dots \otimes \hat{\rho}_j^n \right), \quad (2.19)$$

onde $\hat{\rho}_j^i \in \mathcal{A}_i$

Os estados $\hat{\rho} = \frac{1}{2} (|00\rangle \langle 00| + |11\rangle \langle 11|)$ e $\hat{\chi} = \frac{1}{3} (|000\rangle \langle 000| + |111\rangle \langle 111| + |001\rangle \langle 001|)$, são exemplos de estados mistos não emaranhados.

Aplicações do emaranhamento

Conforme já mencionado o estudo das propriedades do emaranhamento, critérios de separabilidade e quantificação de emaranhamento, são realizados visando principalmente a aplicação que este recurso quântico traz à ciência da Computação Quântica. Um dos primeiros protocolos de informação onde se aplica o conceito de emaranhamento quântico

é a criptografia quântica, que tem como objetivo gerar um conjunto de chaves que codificam e decodificam informação, estas chaves são compostas por estados emaranhados e dão ao emissor e receptor a certeza de que a transmissão de informação foi realizada com segurança total (EKERT, 1991). A partir de então começaram a surgir outros protocolos que também se utilizam do emaranhamento quântico, dentre os quais destacamos, a codificação superdensa (BENNETT, 1992) e o teletransporte quântico (BENNETT, 1993).

Codificação superdensa

O protocolo de codificação superdensa foi proposto em 1992 por Bennett e Wiesner (BENNETT, 1992), e recebe esse nome pois por meio dele se demonstra que usando estados quânticos emaranhados é possível condensar a transmissão de bits clássicos. Enquanto que no processo de comunicação clássica para transmitir dois bits de informação é necessário que se manipule e transmita pelo menos duas unidades de informação, na codificação superdensa podemos transmitir dois bits de informação clássica por meio de um único qubit, para isso é necessário que entre o transmissor (T) e o receptor (R) exista um canal quântico de comunicação que deve ser composto por um estado de dois qubits maximamente emaranhado, ou seja um estado de Bell.

Para descrever o protocolo de codificação superdensa, definimos primeiramente os estados de Bell

$$\begin{aligned} |\Psi_{\pm}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle \pm |10\rangle), \\ |\Phi_{\pm}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle \pm |11\rangle). \end{aligned} \tag{2.20}$$

Suponha que um sistema bipartite, é preparado no estado $|\Phi_{+}\rangle$. Em seguida envia-se um dos qubits emaranhados para T e o outro qubit para R, de modo que agora transmissor e receptor compartilham um estado maximamente emaranhado. O transmissor pode realizar sobre o seu qubit um conjunto de quatro transformações unitárias locais que são capazes de gerar os quatro estados de Bell da equação (2.20). Esse conjunto de operações relaciona

os estados de Bell da seguinte forma

$$\begin{aligned}
 I |\Phi_+\rangle &= |\Phi_+\rangle, \\
 \sigma_z^T |\Phi_+\rangle &= |\Phi_-\rangle, \\
 \sigma_x^T |\Phi_+\rangle &= |\Psi_+\rangle, \\
 \sigma_y^T |\Phi_+\rangle &= |\Psi_-\rangle.
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

Sendo I a matriz identidade, e σ_j^T ($j = x, y, z$) as matrizes de Pauli que atuam sobre o qubit do transmissor.

Estado de Bell	Convenção
$ \Phi_+\rangle$	00
$ \Psi_+\rangle$	10
$ \Phi_-\rangle$	01
$ \Psi_-\rangle$	11

Tabela 2.1: Tabela de convenções associando cada estado de Bell (coluna esquerda) medido pelo receptor a uma mensagem de dois bits (coluna direita) enviada pelo transmissor.

Após implementar uma dessas quatro operações unitárias locais, o transmissor envia seu qubit ao receptor. Este por sua vez pode determinar qual estado recebeu por realizar uma medida de Bell nos dois qubits que agora possui. Esta medida de Bell permitirá que o receptor diferencie entre os quatro estados de Bell, e através da convenção descrita na tabela 2.1, associe cada um dos estados da equação (2.20) a uma mensagem de dois bits enviada pelo transmissor.

Teletransporte quântico

Em 1993, Bennett e colaboradores apontaram outra aplicação para os estados emaranhados na teoria de informação, que é a possibilidade de teletransportar toda a informação contida em um qubit de uma região do espaço para outra (BENNETT, 1993).

O teletransporte de um qubit $|\eta\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ é efetuado do seguinte modo: Temos um transmissor (T) e um receptor (R) que inicialmente compartilham um estado bipartite maximamente emaranhado, que neste caso adotaremos como sendo o estado $|\Psi_-\rangle$ da equação (2.20). Este estado de Bell é o canal quântico necessário para teletransportar $|\eta\rangle$. O sistema total tem então três qubits e inicialmente esta convencionado da seguinte forma

$|T_1 T_2 R\rangle$, onde os primeiros dois qubits (T_1 é o qubit a ser teletransportado, e T_2 o qubit do estado de Bell compartilhado com o receptor) estão com o transmissor T e o terceiro pertence ao receptor R. O estado inicial é descrito então da seguinte forma

$$\begin{aligned} |\beta\rangle &= |\eta\rangle \otimes |\Psi_-\rangle, \\ |\beta\rangle &= \frac{a}{\sqrt{2}} (|001\rangle - |010\rangle) + \frac{b}{\sqrt{2}} (|101\rangle - |110\rangle). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Podemos reescrever a equação (2.22) em termos dos quatro estados de Bell, de modo que

$$\begin{aligned} |\beta\rangle &= \frac{1}{2} \{ -|\Psi_-\rangle (a|0\rangle + b|1\rangle) + |\Psi_+\rangle (-a|0\rangle + b|1\rangle) \\ &\quad + |\Phi_-\rangle (a|1\rangle + b|0\rangle) + |\Phi_+\rangle (a|1\rangle - b|0\rangle) \}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

O transmissor deve realizar uma medida projetiva nos dois qubits que possui, o qubit a ser teletransportado e o qubit do estado de Bell compartilhado com o receptor. A chance de se obter quaisquer dos estados de Bell (2.20) é de $1/4$, e o transmissor não tem qualquer controle sobre o resultado dessa medida. Esse processo consome o emaranhamento compartilhado com o receptor. A única informação que o transmissor tem é a de que o estado $|\eta\rangle$ foi destruído e suas duas partículas foram emaranhadas. Após a medida, através de uma projeção do resultado da medição no estado descrito pela equação (2.23), podemos saber o estado dos três qubits do sistema composto:

$$\begin{aligned} |\Psi_-\rangle &\rightarrow |\Psi_-\rangle \otimes (-a|0\rangle - b|1\rangle); \\ |\Psi_+\rangle &\rightarrow |\Psi_+\rangle \otimes (-a|0\rangle + b|1\rangle); \\ |\Phi_-\rangle &\rightarrow |\Phi_-\rangle \otimes (a|1\rangle + b|0\rangle); \\ |\Phi_+\rangle &\rightarrow |\Phi_+\rangle \otimes (a|1\rangle - b|0\rangle). \end{aligned} \quad (2.24)$$

O transmissor tem agora dois bits de informação que deve comunicar classicamente ao receptor, com essa informação o receptor finaliza o protocolo aplicando uma operação unitária apropriada ao seu estado, conforme descrito na tabela 2.2, e finalmente obtém o estado $|\eta\rangle$. O envio dos dois bits clássicos pelo transmissor é essencial para este protocolo, pois sem ele o receptor não poder ter a informação completa sobre seu qubit final. Neste processo é como se toda informação do qubit $|\eta\rangle$ fosse separada em duas partes, uma clássica que é transmitida pelos dois bits enviados, e outra parte quântica que viaja para o receptor pelo canal quântico que é definido pelo estado de Bell compartilhado entre o

Medida de T	Operação de R
$ \Psi_{-}\rangle$	$I(-a 0\rangle - b 1\rangle) = - \eta\rangle$
$ \Psi_{+}\rangle$	$\sigma_z(-a 0\rangle + b 1\rangle) = - \eta\rangle$
$ \Phi_{-}\rangle$	$\sigma_x(a 1\rangle + b 0\rangle) = \eta\rangle$
$ \Phi_{+}\rangle$	$\sigma_z\sigma_x(a 1\rangle - b 0\rangle) = \eta\rangle$

Tabela 2.2: Tabela que relaciona a medida obtida pelo transmissor T com a operação unitária a ser realizada pelo receptor R com o objetivo de determinar o estado $|\eta\rangle$, teletransportado de T para R.

transmissor e receptor, consumindo este estado de emaranhamento máximo no processo.

Assim, uma vez estabelecido um canal quântico, ou estado de Bell, entre o transmissor e o receptor, bastam operações locais e comunicação clássica para teletransportar o qubit. É importante salientar que o processo de teletransporte quântico não transfere o qubit em si, mas sim toda a informação nele contida; outro fato é preservação da causalidade relativística, pois como existe a necessidade de uma comunicação clássica entre o processo de teletransporte não é instantâneo. O teletransporte quântico motivou o desenvolvimento de alguns quantificadores de emaranhamento como o *custo de emaranhamento*, o *emaranhamento destilável* e a *fidelidade* (TERRA CUNHA, 2005). Tentativas de se implementar o teletransporte quântico vem sendo realizada com teletransporte de informação em sub-sistema separados por uma distância de aproximadamente 143 Km (XIAO-SONG, 2012).

2.2.2 Critérios de separabilidade

Uma vez definido o que são estados emaranhados, podemos tentar estabelecer critérios com os quais podemos identificar quando um estado é separável. Podemos dizer que o primeiro critério de separabilidade surgiu em 1965, quando John Bell demonstrou uma incompatibilidade entre a Mecânica Quântica e a teoria de variáveis ocultas (BELL, 1964). Esta incompatibilidade tomou a forma de um conjunto de desigualdades de Bell, que podem ser violadas apenas por sistemas emaranhados. Embora para qualquer estado puro emaranhado seja sempre possível encontrar algum tipo de desigualdade de Bell que será violada, essa afirmação não é válida para estados mistos⁴. As desigualdades de Bell hoje

⁴Devido a essa demonstração, os estados de dois qubits maximamente emaranhados ($|\Psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle \pm |10\rangle)$, $|\Phi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle \pm |11\rangle)$) recebem o nome de *estados de Bell*. Estes estados são de particular interesse no contexto de informação quântica sendo utilizados em diversos protocolos de informação, dentre eles o teletransporte quântico.

se encaixam em um conjunto de critérios de separabilidade que são chamados de *testemunhas de emaranhamento* (VEDRAL, 2006). A definição geral de uma testemunha de emaranhamento é que esta deve ser definida como um operador hermitiano e por isso pode em alguns casos ser um observável físico do sistema, como foi o caso das desigualdades de Bell observadas experimentalmente por medidas de polarização de fótons (ASPECT, 1982). Esses observáveis “testemunham” o emaranhamento no sistema através de violações de desigualdades previamente definidas, e cada testemunha de emaranhamento é definida de acordo com o tipo de estado de interesse. Todos os critérios de separabilidade propostos até o momento são limitados pelas condições do problema a ser estudado, como por exemplo a dimensionalidade do sistema, sendo que ainda não existe um critério geral para se determinar se um estado é emaranhado ou separável (HORODECKI, 2009). Nesta dissertação apresentaremos dois exemplos de critério de separabilidade: a decomposição de Schmidt e o critério de Peres-Horodecki.

Decomposição de Schmidt

No caso de sistemas bipartites puros, de qualquer dimensão finita, a decomposição de Schmidt fornece uma condição necessária e suficiente de separabilidade, como mostraremos a seguir (NIELSEN; CHUANG, 2000). Um estado puro de um sistema bipartite, pode ser escrito de forma geral como

$$|\phi_{AB}\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |i_A\rangle \otimes |j_B\rangle \equiv \sum_i |i_A\rangle \otimes |\tilde{i}_B\rangle, \quad (2.25)$$

onde c_{ij} é um número complexo com $\sum_{ij} |c_{ij}|^2 = 1$ ($i = 1, \dots, \dim \mathcal{H}_A$; $j = 1, \dots, \dim \mathcal{H}_B$), e definimos $|\tilde{i}_B\rangle \equiv \sum_j c_{ij} |j_B\rangle$. $\{|i_A\rangle\}$ e $\{|j_B\rangle\}$ são, respectivamente, bases dos espaços de estados \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_B . Se o operador densidade reduzido do subsistema A é diagonal na base $|i_A\rangle$ e λ_i^2 são seus autovalores, podemos escrever

$$\rho_A = \sum_i \lambda_i^2 |i_A\rangle \langle i_A| = \text{Tr}_B |\phi_{AB}\rangle \langle \phi_{AB}| = \sum_{i,j} |i_A\rangle \langle j_A| \langle \tilde{i}_B | \tilde{j}_B \rangle, \quad (2.26)$$

então $\sum_j \langle \tilde{i}_B | \tilde{j}_B \rangle = \lambda_i^2 \delta_{ij}$. Normalizando o estado $|\tilde{i}_B\rangle$, vemos que qualquer estado de um sistema bipartite pode ser escrito na forma de uma decomposição de Schmidt

$$|\phi_{AB}\rangle = \sum_i \lambda_i |i_A\rangle \otimes |i_B\rangle, \quad (2.27)$$

onde λ_i são os coeficientes de Schmidt, obtidos das raízes dos autovalores do operador densidade reduzido. Se apenas um dos coeficientes de Schmidt for diferente de zero o estado é separável. No caso de dois ou mais λ_i serem diferentes de zero o estado é emaranhado.

Critério de Peres-Horodecki

Nos casos de estados mistos, onde a decomposição de Schmidt não se aplica, o critério de Peres-Horodecki é uma condição necessária e suficiente para determinar se um estado é emaranhado ou separável. Este critério mostrou que a operação de transposição da matriz densidade de um sistema composto está ligada ao emaranhamento (HORODECKI, 2009). Se tomarmos a operação de transposição total ρ^T de uma matriz densidade ρ , esta matriz ainda terá autovalores positivos assim como a matriz densidade. No entanto, ao aplicarmos a transposição parcial com definida na seção 1.1,

$$\rho^{TA} = \sum_{i,j,k,l} (\langle k_A, j_B | \rho | i_A, l_B \rangle) |i_A, j_B\rangle \langle k_A, l_B|. \quad (2.28)$$

a matriz parcialmente transposta ρ^{TA} pode ter autovalores negativos. Se a matriz ρ^{TA} tiver todos seus autovalores positivos temos um estado separável, mas havendo um ou mais autovalor negativo o estado é não separável. Assim, o estado de um sistema físico, representado por um operador densidade ρ , será emaranhado se a sua transposta parcial for positiva, por isso esse critério também é conhecido com critério de transposição parcial positiva, ou PPT do inglês *positive partial transpose*, valendo apenas para estados $2 \otimes 2$ e $2 \otimes 3$.

2.2.3 Quantificadores de emaranhamento

Um dos resultados mais impactantes no campo da computação e informação quântica foi a descoberta de que o emaranhamento é um recurso físico com o qual podem-se realizar tarefas de processamento e transmissão de informação. Para isto, é necessário quantificar o emaranhamento, assim como acontece com qualquer outro recurso físico. Um dos primeiros quantificadores de emaranhamento proposta na literatura foi a entropia de von Neumann, $S(\rho)$ (BENNETT, 1996). Em geral, essa grandeza quantifica o emaranhamento por meio do cálculo da entropia da matriz densidade reduzida de qualquer uma das partes do sistema composto.

A quantificação do emaranhamento não é uma tarefa trivial, e mesmo para o caso de

dois qubits que é o sistema mais simples possível em que existe emaranhamento, há vários quantificadores de emaranhamento propostos. Sendo assim o problema de medição do emaranhamento em um sistema físico ainda é um problema em aberto na teoria quântica. No entanto, existem alguns requerimentos que são essenciais para se definir um quantificador de emaranhamento Q (BRUSS, 2002):

- Um medida de emaranhamento $Q(\rho)$ é um mapa que leva operadores densidade em números reais;
- $Q(\rho) \geq 0$ e $Q(\rho) = 0$ se ρ é um estado separável;
- Q não muda por uma transformação unitária local;
- Q não aumenta por operações locais de comunicação clássica.

A seguir, apresentaremos duas medidas de emaranhamento, a concorrência e a negatividade, que satisfazem estes requisitos. Estes dois quantificadores serão utilizados no decorrer deste trabalho.

Concorrência

A concorrência foi introduzida na literatura por William Wootters, com o intuito de facilitar o cálculo de um outro quantificador de emaranhamento para estados puros, o emaranhamento de formação, EoF (WOOTTERS, 1998). No entanto, essa grandeza mostrou-se um bom quantificador de emaranhamento tanto para estados puros, quanto para estados mistos, sendo recentemente estendida para atuar em dimensões arbitrárias (RUNGTA, 2001), o que não ocorre com o EoF que serve apenas para sistemas $2 \otimes 2$ ou $2 \otimes 3$.

Defini-se a concorrência de um estado ρ como

$$C(\rho) = \max \{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\}, \quad (2.29)$$

sendo λ_i as raízes quadradas dos autovalores, em ordem decrescente, da matriz não hermitiana $R = \rho\tilde{\rho}$. $\tilde{\rho}$ é obtida através da operação *spin-flip* do complexo conjugado da matriz densidade definida como

$$\tilde{\rho} = (\sigma_y^A \otimes \sigma_y^B)\rho^*(\sigma_y^A \otimes \sigma_y^B). \quad (2.30)$$

A quantificação feita por $C(\rho)$ nos diz que se $C(\rho) = 0$ o estado é separável, e quando $C(\rho) = 1$, temos um estado de emaranhamento máximo.

Negatividade

A negatividade pode ser interpretada como uma quantificação do critério de Peres-Horodecki (HORODECKI, 2009). Essa medida quantifica o quanto a matriz tranposta ρ^{TA} viola este critério de separabilidade.

Esse quantificador é baseado na norma do traço da matriz transposta parcial do estado ρ . Sabemos que a norma do traço de qualquer operador hermitiano é definida como $\|A\|_1 = \text{tr} \sqrt{A^\dagger A}$. Para matrizes densidades vimos na seção 1.1, que todos os seus autovalores são positivos e que $\text{tr} \rho = 1$. Porém a matriz transposta parcial ρ^{TA} pode apresentar autovalores negativos e a norma do traço é dada por

$$\|\rho^{TA}\|_1 = 1 + 2\left|\sum_i \nu_i\right|, \quad (2.31)$$

onde $|\sum_i \nu_i|$ é a soma dos autovalores negativos de ρ^{TA} .

Vidal e Werner (VIDAL, 2002) definiram a negatividade de um estado bipartite como sendo

$$\mathcal{N}(\rho) = \frac{\|\rho^{TA}\|_1 - 1}{2} = \left|\sum_i \nu_i\right|. \quad (2.32)$$

Eles demonstraram que a negatividade satisfaz os requisitos para um quantificador de emaranhamento. Caso o estado ρ seja separável, a matriz ρ^{TA} apresentará apenas autovalores positivos e $\mathcal{N}(\rho) = 0$, caso contrário $\mathcal{N}(\rho) \neq 0$ e o estado é emaranhado.

No entanto, dependendo da dimensão do problema, a negatividade com definida na equação (2.32), para estados puros maximamente emaranhados tem valor menor que um, isto é, não está normalizada. Para que esta quantidade seja normalizada e tenha valor igual a um para estados maximamente emaranhados em um sistema $d \otimes d'$ ($d \leq d'$) ela deve ser definida como (LEE, 2003)

$$\mathcal{N}(\rho) = \frac{\|\rho^{TA}\|_1 - 1}{d - 1} = \frac{2}{d - 1} \left|\sum_i \nu_i\right|. \quad (2.33)$$

A negatividade é um critério necessário e suficiente para a separabilidade somente para dimensões $2 \otimes 2$ e $3 \otimes 3$. Para estados de maior dimensão, a negatividade pode ser nula mesmo para estados emaranhados.

Capítulo 3

Emaranhamento em moléculas quânticas acopladas

Neste capítulo, realizamos um tratamento cuidadoso das propriedades de emaranhamento de elétrons contidos em duas moléculas quânticas acopladas, na ausência de qualquer mecanismo de dissipação. Iniciamos com uma análise dos anti-cruzamentos de energia e sua relação com o emaranhamento dos autoestados do sistema. Verificamos que os estados de Bell agem como uma base natural para as moléculas acopladas, além de mostrar como o tratamento da dinâmica considerando esta base auxilia de maneira eficaz na descrição do comportamento físico do sistema. Demonstramos que os estados de Bell são autoestados do Hamiltoniano para escolhas menos restritas de parâmetros físicos que aqueles encontrados na literatura (FUJISAWA, 2011).

3.1 Espectro, autoestados e emaranhamento

3.1.1 Anti-cruzamentos de energia e sua relação com o emaranhados

Afim de vencer a dificuldade da detecção experimental do emaranhamento, Chu e Zhu (CHU, 2006) verificaram a correlação entre os anti-cruzamentos (*anticrossings*) de energia do e os estados emaranhados. Foi verificado que manipulando esse espectro de energia e os parâmetros eletrônicos estruturais tinha-se os ingredientes necessários para a concepção de estados emaranhados. Nesta subseção, analisamos o espectro de energia do sistema e verificamos sua correlação com o grau de emaranhamento nos autoestados do Hamiltoniano

(1.16).

Considerando inicialmente o caso onde a dessintonia na molécula 2 é nula ($\varepsilon_2 = 0$), mostramos na figura 3.1 o comportamento do espectro de energia do sistema e do emaranhamento como função da dessintonia na molécula 1. Consideramos que o tunelamento entre os pontos das moléculas é dado por $\Delta_1 = \Delta_2 = J/16$ (SHINKAI, 2009). Analisando o gráfico da figura 3.1 (a), observamos a formação de anti-cruzamentos (*anticrossings*) no espectro de energia do sistema onde estes representados no gráfico por δ_i e dependem da taxa de tunelamento nas moléculas. Em $\varepsilon_1 = 0$, podemos notar dois anti-cruzamentos de energia, sendo eles entre a energia do estado fundamental e a do primeiro estado excitado, δ_a , e entre as energias do segundo e terceiro estado excitado, δ_b . Outros dois *anticrossings*, δ_c no ponto $\varepsilon_1 = -J/2$ e δ_d em $\varepsilon_1 = J/2$, são observados entre as energias do primeiro e segundo estado excitado.

A seguir, confrontamos o comportamento da energia com a figura 3.1 (b) onde apresentamos, na ordem crescente de energia, a concorrência dos autoestados do Hamiltoniano (1.16). $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ são, respectivamente, o estado fundamental, o primeiro, segundo e terceiro estados excitados. Observamos que o estado fundamental, $|0\rangle$, e o terceiro estado excitado apresentam um comportamento semelhante, enquanto o mesmo ocorre para o primeiro e segundo estados excitados. É possível notar que todos os autoestados possuem um pico na concorrência justamente no ponto em que a dessintonia na molécula 1 é igual em valor à dessintonia na molécula 2. Neste ponto, $\varepsilon_1 = 0$, todos os quatro autoestados do Hamiltoniano (1.16) possuem emaranhamento máximo. Fora deste pico, o estado fundamental e o terceiro estado excitado apresentam um decaimento considerável na concorrência não apresentando outros máximos. Para o primeiro e o segundo estado excitado, $|1\rangle$ e $|2\rangle$, a concorrência apresenta ainda outros dois pequenos picos nos pontos $\varepsilon_1 = \pm J/2$, e cujo o valor máximo em ambos os pontos é de aproximadamente 0.13.

Ao compararmos o gráfico da concorrência com o do espectro de energia na figura 3.1, podemos observar que a formação nos picos na concorrência ocorrem justamente naqueles pontos em que são observados *anticrossings* de energia no espectro do sistema. Vemos que quanto menor o *anticrossing* maior o pico na concorrência e portanto maior o emaranhamento nos autoestados correspondentes as energias que se anti-cruzam. Isso pode ser observado nos pontos $\varepsilon_1 = \pm J/2$, onde os *anticrossings* são bem maiores do que àqueles presentes em $\varepsilon_1 = 0$, e o grau de emaranhamento é consideravelmente menor.

Através de nossos resultados foi possível observar que, quando $\Delta_1 = \Delta_2$, os picos de emaranhamento no ponto $\varepsilon_1 = 0$ do primeiro e segundo estados excitados continuarão

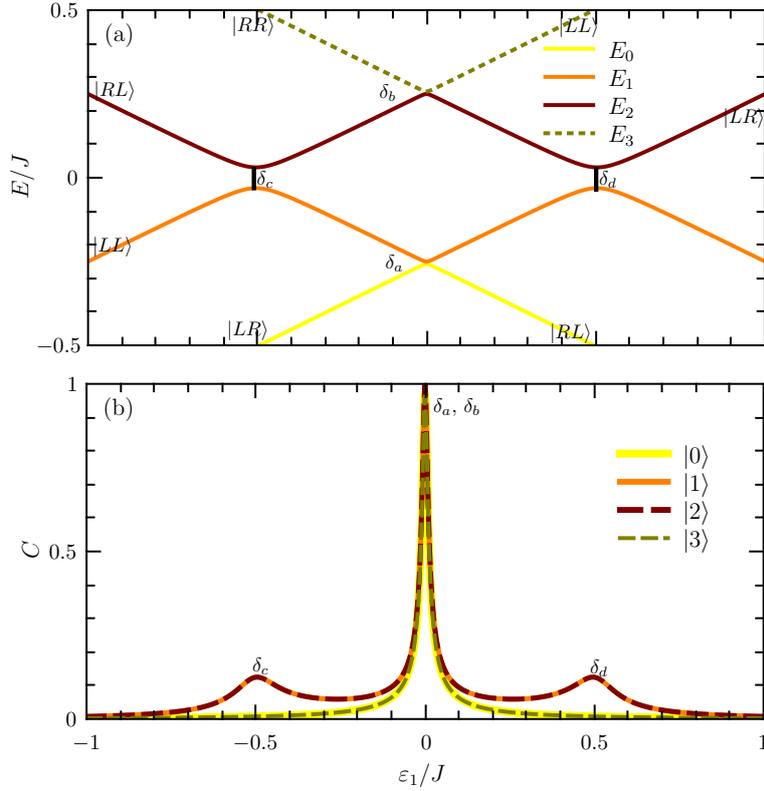


Figura 3.1: Comportamento do espectro de energia e da Concorrência de elétrons em duas moléculas quânticas acopladas como função da razão entre a dessintonia dos níveis eletrônicos e a interação de Coulomb, ε_1/J , considerando $\varepsilon_2 = 0$ e as taxas de tunelamento iguais em cada molécula ($\Delta_1 = \Delta_2 = J/16$). (a) Espectro de energia do sistema como função de ε_1/J , sendo E_0 a energia do estado fundamental e E_i a energia do i -ésimo estado excitado; (b) concorrência dos autoestados correspondentes as autoenergias do sistema, como função de ε_1/J . Os estados $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|2\rangle$ e $|3\rangle$, correspondem respectivamente ao estado fundamental, primeiro, segundo e terceiro estado excitado.

sempre atingindo o emaranhamento máximo, independente dos valores de Δ_i . Já nos pontos $\varepsilon_1 = \pm J/2$ os picos de emaranhamento aumentam gradualmente a medida que as taxas de tunelamento aumentam. No caso do estado fundamental e do terceiro estado excitado o pico da concorrência vai se expandindo em torno do ponto $\varepsilon_1 = 0$ e diminui de intensidade com o acréscimo em Δ_i .

Na figura 3.2, mostramos os resultados do cálculo da concorrência considerando o caso em que temos taxas de tunelamento diferentes, $\Delta_1 = J/8$ e $\Delta_2 = J/2$, sendo $\varepsilon_2 = 0$. É possível notar que, os estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$ não apresentam mais emaranhamento máximo no ponto $\varepsilon_1 = 0$, e, diferente do caso anterior não há valores de ε_1 para o qual os estados sejam

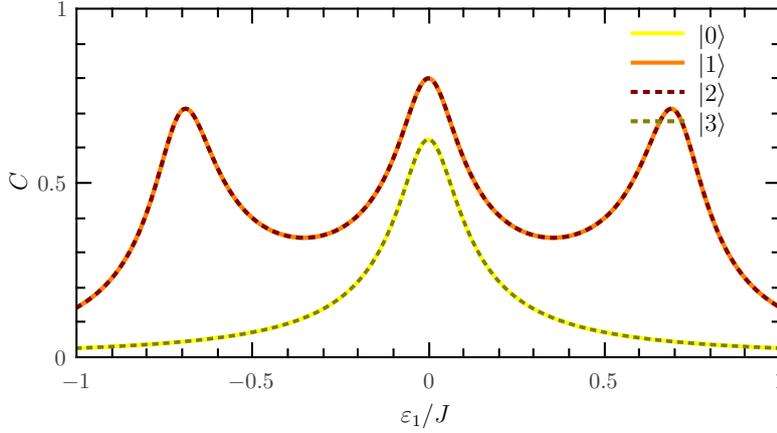


Figura 3.2: Comportamento da Concorrência de elétrons em duas moléculas quânticas acopladas como função da razão entre a dessintonia dos níveis eletrônicos e a interação de Coulomb, ε_1/J , considerando $\varepsilon_2 = 0$ e as taxas de tunelamento $\Delta_1 = J/8$ e $\Delta_2 = J/2$. Os estados $|0\rangle$ e $|i\rangle$ correspondem respectivamente ao estado fundamental i -ésimo estado excitado. Parâmetros utilizados: $\varepsilon_2 = 0$ e $\Delta_1 = J/8$ e $\Delta_2 = J/2$.

completamente separáveis. Ainda para o primeiro e segundo estado excitado, notamos que ter taxas de tunelamento diferentes tem o efeito de deslocar os picos de emaranhamento, que no caso onde $\Delta_1 = \Delta_2$ se encontravam em $\varepsilon_1 = \pm J/2$. Esse deslocamento dos picos dependem da diferença entre as taxas de tunelamento: se $\Delta_1 < \Delta_2$ os picos se deslocam se afastando do ponto $\varepsilon_1 = 0$; se $\Delta_2 < \Delta_1$ os picos se deslocarão em direção ao ponto $\varepsilon_1 = 0$, não alterando a intensidade do pico central. Já o estado fundamental e o terceiro estado excitado, não apresentam grande mudança de comportamento em relação ao caso anterior.

Após esta análise preliminar do espectro de energia e da concorrência, procederemos a estudar o efeito de todos os parâmetros físicos disponíveis, de modo que possamos caracterizar o papel dos estados emaranhados dentro da dinâmica dos elétrons em moléculas quânticas.

3.2 Propriedades de emaranhamento dos autoestados eletrônicos em moléculas quânticas acopladas

Afim de verificarmos a dinâmica do sistema, consideraremos a base de Bell dada por (NIELSEN, 2000)

$$\begin{aligned}
|\Psi_{\pm}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|RL\rangle \pm |LR\rangle), \\
|\Phi_{\pm}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|RR\rangle \pm |LL\rangle).
\end{aligned} \tag{3.1}$$

Utilizando o seguinte ordenamento de base $O_B = \{|\Psi_{-}\rangle, |\Phi_{-}\rangle, |\Psi_{+}\rangle, |\Phi_{+}\rangle\}$, reescrevemos o Hamiltoniano (1.16) da seguinte forma:

$$\hat{H}_B = \begin{pmatrix} -\frac{J}{4} & \Delta_{-} & -\frac{\varepsilon_d}{2} & 0 \\ \Delta_{-} & \frac{J}{4} & 0 & -\frac{\varepsilon_s}{2} \\ -\frac{\varepsilon_d}{2} & 0 & -\frac{J}{4} & \Delta_{+} \\ 0 & -\frac{\varepsilon_s}{2} & \Delta_{+} & \frac{J}{4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{-} & D \\ D & M_{+} \end{pmatrix}, \tag{3.2}$$

onde $\Delta_{\pm} = (\Delta_1 \pm \Delta_2)/2$. Observamos que ao reescrever o Hamiltoniano do sistema na base de Bell podemos dividi-lo em subespaços de matrizes $2 \otimes 2$, dois subespaços M_{\pm} que contém os termos de interação, o acoplamento de Coulomb e o tunelamento além de dois subespaços D , que descrevem o acoplamento entre os subespaços M_{\pm} . Utilizar o Hamiltoniano (1.16) na base de Bell traz vantagens na descrição do emaranhamento do sistema: separa-se o efeito do tunelamento $\Delta_{-}(\Delta_{+})$, que é o responsável pelas oscilações entre os estados $|\Psi_{+}\rangle$ ($|\Psi_{-}\rangle$) e $|\Phi_{+}\rangle$ ($|\Phi_{-}\rangle$) dentro dos subespaços M_{\pm} , do efeito das dessintônias ε_s e ε_d , responsáveis pelas oscilações entre os subespaços. Observamos ainda, que os estados de Bell (3.1) são autoestados do Hamiltoniano (1.16) quando $\Delta_1 = \Delta_2 = 0$ e $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$, e também formam uma base completa. Descreveremos agora, através de cálculos analíticos e numéricos, o estudo das propriedades do emaranhamento dos autoestados.

3.2.1 Solução analítica para o caso ressonante

Podemos obter uma solução analítica ao considerarmos os níveis eletrônicos ressonantes, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$. Observe que, para esta condição, a matriz $2 \otimes 2$, D , da equação (3.2) é nula. Assim os autovalores do Hamiltoniano são dados por

$$E_{\mp}^{\Delta_{\mp}} = \mp \frac{\sqrt{J^2 + 16\Delta_{\mp}^2}}{4}, \tag{3.3}$$

com os autoestados correspondentes escritos da seguinte forma

$$\begin{aligned} |\psi_{-}^{\Delta_{\mp}}\rangle &= \Gamma_{-}^{\Delta_{\mp}} (|\Psi_{\mp}\rangle + \Omega_{-}^{\Delta_{\mp}} |\Phi_{\mp}\rangle) \\ |\psi_{+}^{\Delta_{\mp}}\rangle &= \Gamma_{+}^{\Delta_{\mp}} (|\Phi_{\mp}\rangle + \Omega_{+}^{\Delta_{\mp}} |\Psi_{\mp}\rangle). \end{aligned} \quad (3.4)$$

Onde

$$\Omega_{\mp}^{\Delta_{\mp}} = \mp \frac{J - \sqrt{J^2 + 16\Delta_{\mp}^2}}{4\Delta_{\mp}} \quad (3.5)$$

e $\Gamma = 1/\sqrt{1 + \Omega^2}$ é o termo de normalização. Note que os autoestados são agora uma superposição de dois elementos da base de Bell, e dependem do tunelamento, o que era esperado da análise do Hamiltoniano. Podemos verificar a validade dessa solução considerando o caso limite onde os tunelamentos nas moléculas são nulos ($\Delta_1 = \Delta_2 = 0$). Nesta condição, a função $\Omega_j^{\Delta_i}$ ($j = \mp$) tende assintoticamente a zero quando $\Delta_i \rightarrow 0$ ($i = \mp$) e, conseqüentemente, $\Gamma \rightarrow 1$ de modo que o conjunto de autoestados dados por $\{|\psi_{-}^0\rangle, |\psi_{+}^0\rangle, |\psi_{-}^0\rangle, |\psi_{+}^0\rangle\}$ coincidem com os estados de Bell $\{|\Psi_{-}\rangle, |\Phi_{-}\rangle, |\Psi_{+}\rangle, |\Phi_{+}\rangle\}$.

A solução analítica, equações (3.3, 3.4), é usada para explorar as conseqüências físicas de se fixar a taxa de tunelamento da molécula 2 igual ao tunelamento da molécula 1 ($\Delta_2 = \Delta_1 = \Delta$). Nesta condição, a matriz M_{-} do Hamiltoniano (3.2) torna-se diagonal, e a matriz M_{+} é não-diagonal com $\Delta_{+} = \Delta$. Dependendo da relação entre os parâmetros ε_1 e ε_2 , o sistema apresentará um dos seguintes comportamentos:

- Quando as dessintonias entre os níveis eletrônicos são nulas ($\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$), teremos dois autoestados do sistema correspondendo a dois dos estados de Bell $|\Psi_{-}\rangle$ e $|\Phi_{-}\rangle$ com energias $-J/4$ e $J/4$ respectivamente. Os outros dois autoestados serão dados por $|\psi_{\mp}^{\Delta}\rangle$ com energias E_{\mp}^{Δ} .
- Considerando que as dessintonias nas moléculas sejam iguais ($\varepsilon_2 = \varepsilon_1$), o que implica em $\varepsilon_d = 0$, vemos que o autoestado $|\psi_{-}^0\rangle$ permanece como $|\Psi_{-}\rangle$, um estado maximamente emaranhado, enquanto o estado $|\Phi_{-}\rangle$ fica acoplado ao subespaço “+” pela ação da dessintonia ε_s .
- Se $\varepsilon_2 = -\varepsilon_1$, temos $\varepsilon_s = 0$, de modo que o autoestado $|\psi_{+}^0\rangle$ permanece como o estado de Bell $|\Phi_{-}\rangle$ enquanto os outros três autoestados permanecem acoplados.

Na próxima subseção, apresentamos os resultados numéricos, onde consideramos escolhas gerais para as dessintonias e as taxas de tunelamento.

3.2.2 Resultados Numéricos

Nesta subseção, exploramos as propriedades do emaranhamento nas moléculas quânticas acopladas, além de analisar a ação das dessintonias no sistema quando as taxas de tunelamento nas moléculas são iguais, $\Delta_- = 0$. Em seguida, quantificaremos os efeitos de ambos os termos de tunelamento, Δ_+ e Δ_- .

Taxas de tunelamento iguais

Na figura 3.3, apresentamos os resultados numéricos para a concorrência associada aos autoestados do Hamiltoniano (1.16), em função das dessintonias ε_i , considerando as taxas de tunelamentos iguais ($\Delta_- = 0$ e $\Delta_+ = \Delta$). Aqui consideramos dois regimes diferentes sendo o primeiro com $\Delta = J/16$ apresentado nas figuras 3.3 (a-d) e o segundo $\Delta = J/4$ nas figuras 3.3 (e-h). Assim como na discussão do espectro de energia os autoestados são apresentados na ordem crescente de energia, de modo $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ são, respectivamente, o estado fundamental, o primeiro, segundo e terceiro estados excitados.

Observamos que os resultados numéricos são compatíveis aos resultados analíticos para as três condições definidas: Quando as dessintonias nas moléculas são nulas, os autoestados $|0\rangle$ e $|3\rangle$ correspondem aos estados $|\psi_-^\Delta\rangle$ e $|\psi_+^\Delta\rangle$, respectivamente, enquanto os estados $|1\rangle = |\Psi_- \rangle$ e $|2\rangle = |\Phi_- \rangle$ são estados maximamente emaranhados, o que é confirmado ao verificar os coeficientes dos autoestados calculados pela simulação numérica. Na condição $\varepsilon_d = 0$ onde $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$, observamos que o valor da concorrência do estado $|1\rangle$ é 1, correspondente à linha amarela da figura 3.3(b). Verificando os valores dos coeficientes, notamos que este estado corresponde a $|\Phi_- \rangle$. Na condição $\varepsilon_2 = -\varepsilon_1$, o segundo estado excitado será $|2\rangle = |\Phi_- \rangle$, sendo estas condições associadas as linhas amarelas vistas nas figuras 3.3 (c) e (g).

Nos três casos ressonantes, o valor da concorrência tem uma queda abrupta, devido ao aumento do acoplamento entre os subespaços M_\pm . Os autoestados $|0\rangle$ e $|3\rangle$ apresentam um grau de emaranhamento inferior se comparado os autoestados $|1\rangle$ e $|2\rangle$, com algumas diferenças que podem ser vistas na figura 3.3 (a) e figura 3.3 (e), para o estado fundamental, e a figura 3.3 (d) e a figura 3.3 (h), para o terceiro estado excitado: na condição $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ e no primeiro regime de tunelamento ($\Delta = J/16$), o estado $|0\rangle$ permanece como $|\psi_-^\Delta\rangle$ enquanto que $|3\rangle = |\psi_+^\Delta\rangle$, sendo que ambas as superposições apresentam um alto grau de emaranhamento dada por $C(\rho) = 0.9$. Em seguida, nas seguintes condições $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$ na figura 3.3 (a) e $\varepsilon_2 = -\varepsilon_1$ na figura 3.3 (d), nos pontos que correspondem a $|\varepsilon_i| = J/2$ o valor da concorrência é menor sendo $C(\rho) \simeq 0.5$. A diminuição do valor da concorrência é

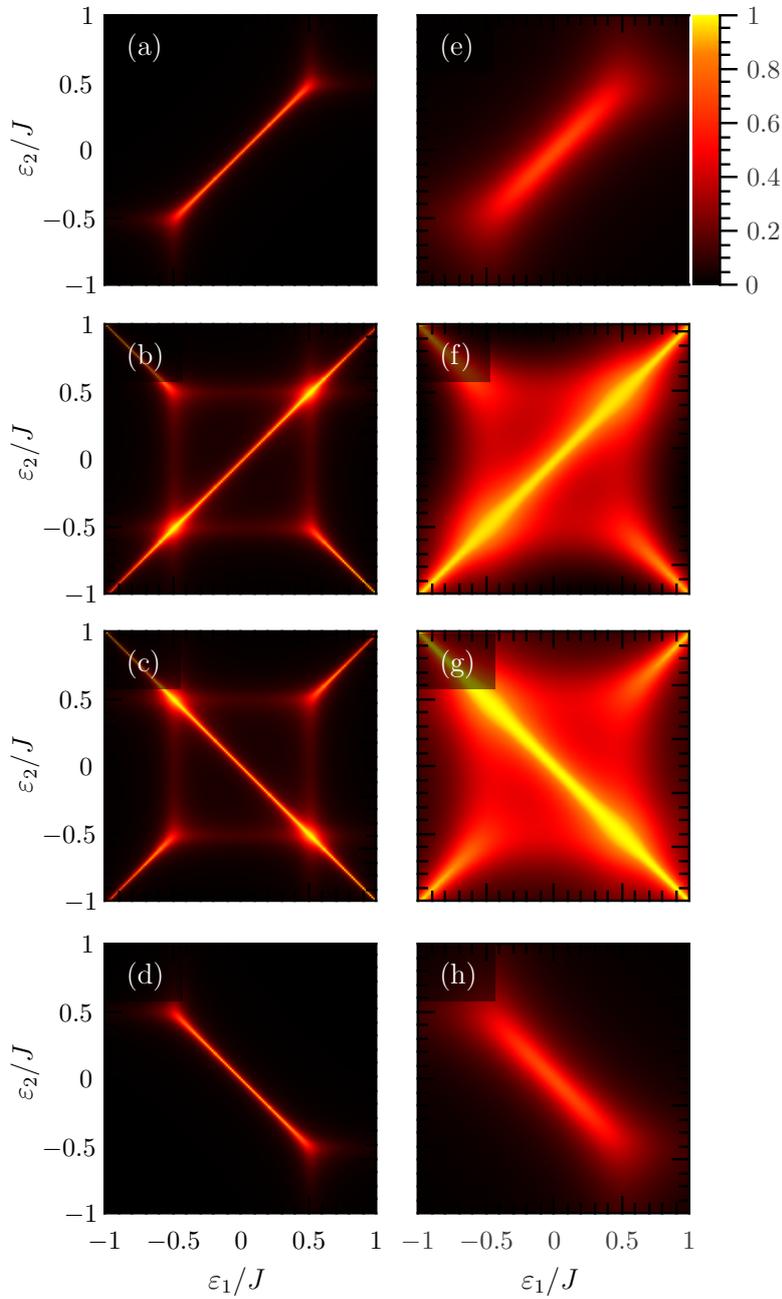


Figura 3.3: Comportamento da Concorrência de elétrons em duas moléculas quânticas acopladas como função da razão entre as dessintonias dos níveis eletrônicos e o acoplamento de Coulomb, ε_1/J e ε_2/J , considerando dois regimes de tunelamento: Para o primeiro regime de tunelamento $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta = J/16$, os resultados se encontram nas figuras: (a) $|0\rangle$, (b) $|1\rangle$, (c) $|2\rangle$ e (d) $|3\rangle$. Os resultados referentes ao segundo regime de tunelamento, $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta = J/4$, correspondem as figuras: (e) $|0\rangle$, (f) $|1\rangle$, (g) $|2\rangle$ e (h) $|3\rangle$.

a assinatura do acoplamento entre os subespaços M_+ com um dos estados de Bell: para o estado fundamental $|0\rangle$, os estados $|\psi_-^\Delta\rangle$ e $|\Phi_-\rangle$ estão acoplados, enquanto para o estado $|3\rangle$ o acoplamento ocorre entre os estados $|\psi_+^\Delta\rangle$ e $|\Psi_-\rangle$. A expectativa é que os três regimes de dessintonias ε_i que favorecem estados altamente emaranhados como autoestados do sistema afetem a dinâmica de emaranhamento deste sistema.

Para valores de ε_i fora das condições de ressonância, os quatro estados de Bell estão acoplados tanto pelo tunelamento quanto pelas dessintonias, o que implica os valores baixos de concorrência relacionados à essa mistura dos elementos da base. No entanto, ao compararmos os dois regimes de tunelamento, observa-se que os valores da concorrência aumentam com o aumento de Δ . Isto é explicado pelo fato de que o tunelamento favorece o acoplamento entre estados internos a cada subespaço, o que fornece uma superposição menos sensível à ação da dessintonia. Ainda assim, nossos cálculos numéricos mostram que o elevado grau de emaranhamento das superposições $|\psi_+^{\Delta\mp}\rangle$, com $C \sim 0,97$ obtido quando $\Delta = J/16$ na condição de ressonância completa (Figuras 3.3 (a) e (d)), diminui com o aumento da taxa de tunelamento, sendo $C \sim 0,7$ para a mesma condição de ressonância nas figuras 3.3 (e) e (h).

É interessante notar que, no que diz respeito as dessintonias, existem dois conjuntos diferentes de parâmetros: o primeiro definido pela condição $\varepsilon_i \in [-J/2, J/2]$ onde os subespaços M_+ e M_- são acoplados entre si. Para o segundo conjunto de valores, verificamos que as dessintonias tem o efeito de trocar os valores das energias associadas com os estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$ nas ressonâncias pares e ímpares, e ainda acoplam os quatro estados de Bell fora de quaisquer condições de ressonância. Para valores maiores de Δ , figuras 3.3 (e-h), observamos que o aumento da taxa de tunelamento aumenta o acoplamento dentro do subespaço M_+ , o que provoca o aumento da “área” com valores elevados de concorrência, $0,45 < C < 1$, como podemos verificar facilmente, comparando os gráficos (a) e (e) na figura. Deste modo, o conjunto de condições para estados emaranhados para $\Delta = J/16$ expande abrangendo uma região de maior largura, sendo que essa expansão ocorre em torno dos pontos críticos fixos $\varepsilon_i = \pm J/2$.

Afim de demonstrar a conjectura de que as taxas de tunelamento aumentam a região de parâmetros para os quais temos um alto grau de emaranhamento, calculamos a concorrência dos autoestados do Hamiltoniano (1.16), considerando o caso de ressonância completa onde $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$ e $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon$. Os valores negativos de Δ presentes no gráfico podem ocorrer devido a uma fase adicional no processo de tunelamento. Os resultados numéricos estão apresentados na figura 3.4. Podemos observar que o primeiro estado excitado será sempre

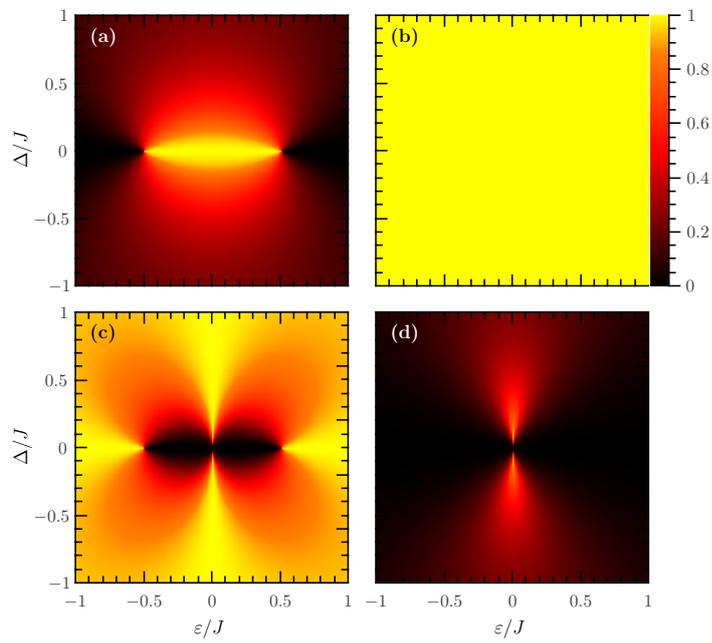


Figura 3.4: Comportamento da Concorrência de elétrons em duas moléculas quânticas acopladas como função da razão entre a dessintonia do nívei eletrônico e o acoplamento de Coulomb, ε/J , e da razão entre a taxa de tunelamento e o acoplamento de Coulomb, Δ/J , sendo $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$ e $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon$: (a) $|0\rangle$, (b) $|1\rangle$, (c) $|2\rangle$ e (d) $|3\rangle$.

um estado maximamente emaranhado, descrito pelo estado de Bell $|\Psi_{\pm}\rangle$, o que esta de acordo com os resultados da figura 3.3. Notamos que o aumento de Δ aumenta de fato o grau de emaranhamento dos autoestados, sendo possível controlar o emaranhamento de uma forma mais eficiente ao considerarmos a condição de $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$. Ao observarmos o estado fundamental, verificamos que quando $\Delta \rightarrow 0$ a influencia da dessintonia no emaranhamento é maior, sendo que no intervalo definido por $\varepsilon \in [-J/2, J/2]$ o estado $|0\rangle$ tem um alto grau de emaranhamento, e o estado $|2\rangle$, com exceção de $\varepsilon \rightarrow 0$, não apresenta emaranhamento. Observamos também a influência da região definida por $\varepsilon \in [-J/2, J/2]$ no terceiro estado excitado, onde os maiores valores de concorrência estão contidos em cones definidos por essa região. Vemos que quando Δ é da ordem de J todos os autoestados apresentam um certo grau de emaranhamento, sendo o estado $|3\rangle$ o único estado completamente separável nos pontos onde ε se aproximam de $|J|$.

Diferentes taxas de tunelamento

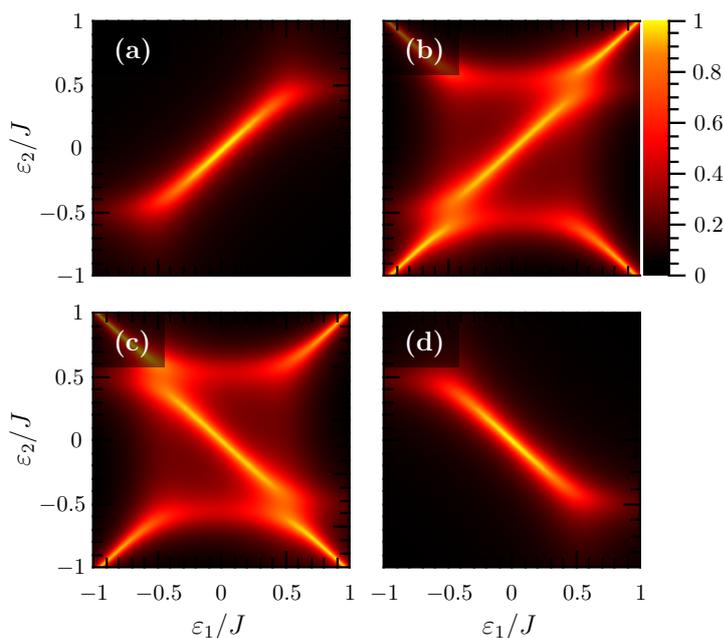


Figura 3.5: Comportamento da Concorrência de elétrons em duas moléculas quânticas acopladas como função da razão entre as dessintonias dos níveis eletrônicos e o acoplamento de Coulomb, ε_1/J e ε_2/J , considerando taxas de tunelamento diferentes $\Delta_1 = J/4$ e $\Delta_2 = J/8$: (a) $|0\rangle$, (b) $|1\rangle$, (c) $|2\rangle$ e (d) $|3\rangle$.

Na figura 3.5, apresentamos a concorrência para $\Delta_1 \neq \Delta_2$, considerando $\Delta_1 = J/4$ e $\Delta_2 = J/8$. Neste caso, não existe um estado de Bell puro como autoestado do sistema em

qualquer condição de ressonância, como pode ser verificado revisando as soluções para o caso ressonante completo são dadas pelas equações (3.4). Dentro da região $\varepsilon_i \in [-J/2, J/2]$, observamos os efeitos entre os subespaços M_+ e M_- : em torno das condições $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$ e $\varepsilon_2 = -\varepsilon_1$, não existe uma região com maior grau de emaranhamento para todos os autoestados, embora a concorrência seja maior para os estados associados a M_- , $|1\rangle$ e $|2\rangle$. Isto é explicado pelo fato de que o tunelamento efetivo Δ_- é mais fraco do que Δ_+ . Fora desses limites, não existe uma região com um elevado grau de emaranhamento para os autoestados $|1\rangle$ e $|2\rangle$, uma nova característica se comparado com a figura 3.3. Isso significa que considerar diferentes taxas de tunelamento expande o conjunto de parâmetros para os quais se obtém estados com alto grau de emaranhamento ($C > 0.7$), apesar de não ser mais possível obter estados de Bell.

Diferente dos casos anteriores, onde as taxas de tunelamento são iguais, não observamos para os estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$ uma expansão no grau de emaranhamento em torno dos pontos $\varepsilon_i = \pm J/2$. O que observamos é que exatamente nos pontos $\varepsilon_i = \pm J/2$ o grau de emaranhamento diminui com a diferença das taxas de tunelamento e que nas proximidades dessas regiões os máximos na concorrência vão sofrendo um desvio em relação as condições de ressonância; $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ para o primeiro estado excitado, e $\varepsilon_1 = -\varepsilon_2$ para o segundo estado excitado. Esses desvios nos máximos de emaranhamento também são observados no estado fundamental e terceiro estado excitado, e aumentam a medida que aumenta a diferença entre Δ_1 e Δ_2 . Estes resultados estão de acordo com os resultados apresentados na figura 3.2, onde observamos um desvio nos picos de emaranhamento relacionado a diferença entre as taxas de tunelamento.

Capítulo 4

Geração dinâmica de estados emaranhados

Neste capítulo, mapeamos os efeitos dos parâmetros físicos, com o objetivo de gerar dinamicamente estados altamente emaranhados e demonstramos os requisitos físicos necessários para obter oscilações coerentes entre estados separáveis e um estado de Bell específico.

4.1 Geração dinâmica de estados emaranhados

Nesta seção, discutimos a geração dinâmica de estados altamente emaranhados. Experimentalmente é possível inicializar o sistema por meio da manipulação das dessintonias afim de estabelecer uma configuração específica nas moléculas quânticas acopladas. Este processo é altamente controlado (SHINKAI *et al*, 2009) e o estado inicial $|\Psi(0)\rangle$ pode ser preparado como um dos estados da base posicional, $\{|LL\rangle, |LR\rangle, |RL\rangle, |RR\rangle\}$. Os parâmetros de tunelamento são definidos pela construção da nanoestrutura, e também por portas adicionais que inibem ou aumentam o tunelamento coerente. A configuração é aberta à manipulação dos parâmetros de dessintonia ε_i . A leitura do estado evoluído é realizada através da medida da contribuição de um elétron à corrente em cada uma das moléculas (SHINKAI, 2009).

Vamos, agora, analisar os efeitos da taxa de tunelamento na condição $\varepsilon_2 = \varepsilon_1 = 0$. A partir da análise dos resultados numéricos, queremos obter uma escolha de parâmetros físicos específicos para que o sistema execute oscilações coerentes entre estados puros e estados de Bell. Em seguida, exploraremos a robustez destas oscilações coerentes fora da condição de ressonância.

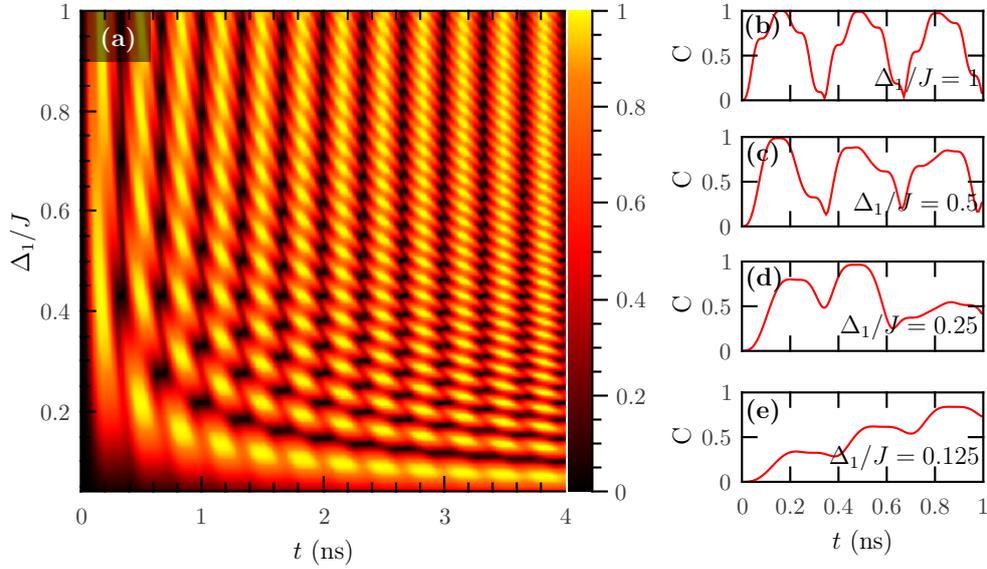


Figura 4.1: Comportamento da dinâmica da concorrência de elétrons em moléculas quânticas acopladas como função da razão entre a taxa de tunelamento e o acoplamento de Coulomb, Δ_1/J , considerando a condição de ressonância, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$, e que as taxas de tunelamento nas moléculas são iguais $\Delta_2 = \Delta_1$ sendo $|\Psi(0)\rangle = |RL\rangle$. (a) Concorrência como função do tempo e da razão Δ/J considerando $\Delta_1 = \Delta_2$ para $0 < t < 3$ ns; (b-e) Dinâmica da concorrência $0 < t < 1$ ns considerando escolhas específicas para a razão Δ/J .

4.1.1 Efeitos do tunelamento sobre a dinâmica do emaranhamento

A abordagem numérica fornece conhecimentos sobre a preparação dinâmica de estados altamente emaranhados. Na figura 4.1 (a), apresentamos os resultados numéricos da concorrência como uma função do tempo e da razão Δ_1/J considerando $|\Psi(0)\rangle = |RL\rangle$, $\Delta_1 = \Delta_2$ e a condição ressonante dada por $\varepsilon_2 = \varepsilon_1 = 0$. Nossos resultados mostram que a taxa de tunelamento tem um grande efeito sobre a dinâmica do emaranhamento: o estado evoluído passa de separável para um estado altamente emaranhado após o período de evolução t_e . Isto pode ser verificado através da comparação dos quatro perfis nas figuras 4.1(b-e). Notamos que os tempos em que a concorrência tem um máximo local são tempos que dependem de Δ_1/J , também mostrados nas figuras 4.1(b-e). É interessante observar que as oscilações não são totalmente periódicas. Esse tipo de comportamento é uma assinatura da competição dinâmica entre diferentes acoplamentos, cada um com uma frequência característica. Isto é melhor visto nas figuras 4.1(b-e), onde os padrões se assemelham aos batimentos obtidos em uma superposição de dois osciladores harmônicos.

Para conhecer melhor as origens físicas por trás dos batimentos na concorrência, vamos resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo considerando a condição $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$. Podemos fazer isso usando os resultados anteriores para as autoenergias, equação (3.3), e autoestados, equação(3.4). Se o estado inicial é dado por $|\Psi(0)\rangle = |RL\rangle$, as populações para os estados da base computacional, $P_{ij} = |\langle ij|\Psi(t)\rangle|^2$ são escritas como,

$$\begin{aligned}
P_{RL} &= \frac{1}{4} \left[\left(\frac{J}{\beta_+} \sin \Omega_+ t + \frac{J}{\beta_-} \sin \Omega_- t \right)^2 \right. \\
&\quad \left. + (\cos \Omega_+ t + \cos \Omega_- t)^2 \right], \\
P_{LR} &= \frac{1}{4} \left[\left(\frac{J}{\beta_+} \sin \Omega_+ t - \frac{J}{\beta_-} \sin \Omega_- t \right)^2 \right. \\
&\quad \left. + (\cos \Omega_+ t - \cos \Omega_- t)^2 \right], \\
P_{RR} &= 4 \left[\frac{\Delta_+}{\beta_+} \sin \Omega_+ t + \frac{\Delta_-}{\beta_-} \sin \Omega_- t \right]^2, \\
P_{LL} &= 4 \left[\frac{\Delta_+}{\beta_+} \sin \Omega_+ t - \frac{\Delta_-}{\beta_-} \sin \Omega_- t \right]^2,
\end{aligned} \tag{4.1}$$

com os novos parâmetros físicos Ω_{\pm} definidos como

$$\Omega_{\pm} = \frac{\beta_{\pm}}{4} = \frac{\sqrt{J^2 + 16\Delta_{\pm}^2}}{4}. \tag{4.2}$$

Estas duas frequências são responsáveis pelos batimentos na concorrência observados na figura 4.1. Devido a Ω_{\pm} ser uma função dos parâmetros de tunelamento Δ_{\pm} , conclui-se que o mecanismo por trás da rica dinâmica do emaranhamento mostrado na figura 4.1 é o acoplamento entre os estados de Bell contidos nos subespaços M_{\pm} . Isso significa que o tunelamento pode ser usado para manipular a obter estados altamente emaranhados.

Existe uma condição exata para oscilações coerentes periódicas entre estados separáveis e estados de Bell: notamos que os estados $|LL\rangle$ e $|RR\rangle$ não são populados para tempos de evolução correspondentes a

$$t_e = \frac{n\pi}{\Omega_+}, \tag{4.3}$$

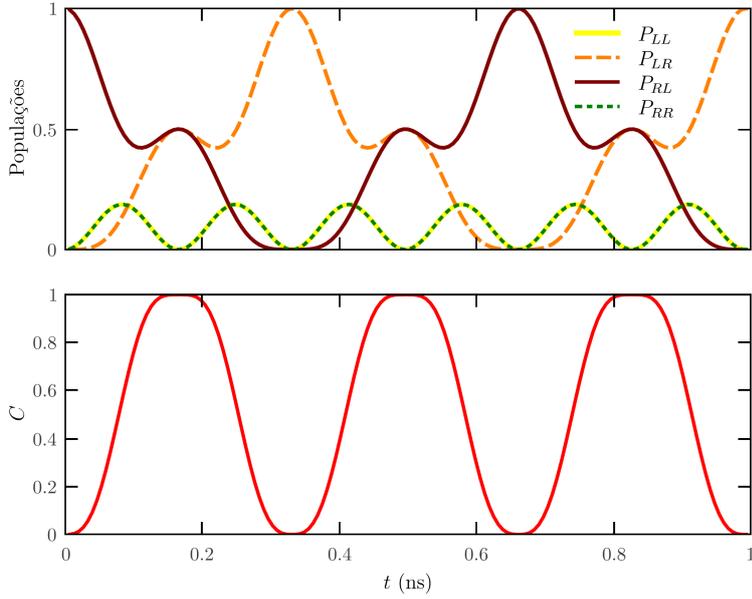


Figura 4.2: Comportamento da dinâmica das Populações e da Concorrência de elétrons em moléculas quânticas acopladas considerando o estado inicial $|\Psi(0)\rangle = |RL\rangle$. Onde $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$ e $\Delta_1 = \Delta_2$ sendo $\Delta_1/J = \sqrt{3}/4$ que satisfaz a condição de oscilações periódicas na dinâmica da Concorrência. (a) Populações dos quatro estados posicionais $|M_1M_2\rangle$ como função do tempo; (b) Dinâmica da Concorrência com oscilações periódicas.

com n sendo um número inteiro. Neste tempo específico, as expressões P_{LR} e P_{RL} na equação (4.1) se reduzem para

$$\begin{aligned}
 P_{RL} &= \frac{1}{4} \left\{ \sin^2 \Omega_- t_e + [(-1)^n + \cos \Omega_- t_e]^2 \right\}, \\
 P_{LR} &= \frac{1}{4} \left\{ \sin^2 \Omega_- t_e + [(-1)^n - \cos \Omega_- t_e]^2 \right\}.
 \end{aligned}
 \tag{4.4}$$

Desta forma, o comportamento da função $\cos(\Omega_- t_e)$ define a condição para a criação de estados de Bell $|\Psi_{\pm}\rangle$ da equação (3.1). Se este valor é zero, a população de ambos os estados vai para $1/2$, indicando que o sistema se encontra em um estado de Bell. O tempo de evolução também será dado por

$$t_e = \frac{m\pi}{2\Omega_-}, \quad m \text{ ímpar.}
 \tag{4.5}$$

Comparando a equação (4.3) com a equação (4.5), ambos os tempos de evolução serão iguais se a condição $\frac{n}{m} = \frac{\Omega_+}{2\Omega_-}$ for satisfeita. Em termos dos parâmetros de acoplamento,

esta condição é equivalente a

$$\frac{\Delta_1}{J} = \frac{1}{4} \sqrt{4 \frac{n^2}{m^2} - 1}, \quad (4.6)$$

que tem uma solução real para $m < 2n$. Na figura 4.2, mostramos a dinâmica das populações e da concorrência considerando parâmetros físicos que seguem as condições dadas pela equação (4.6). Observe que, nos tempos de purificação, o estado inicial $|RL\rangle$ troca de população com o estado $|LR\rangle$, e retorna ao estado inicial novamente após dois períodos de oscilação. Nos tempos definidos pela equação (4.5), estados de Bell com valores de concorrência $C = 1$ são obtidos como uma superposição dos estados $|RL\rangle$ e $|LR\rangle$. Os resultados numéricos e analíticos obtidos, considerando os outros três estados da base posicional $|M_1M_2\rangle$, estabelecem que se o estado inicial corresponde a $|LR\rangle$ ou $|RL\rangle$, estes evoluem para estados de Bell $|\Psi_{\pm}\rangle$. De forma análoga, os estados de Bell $|\Phi_{\pm}\rangle$ são gerados dinamicamente quando o estado inicial é dado por $|LL\rangle$ ou $|RR\rangle$.

4.1.2 Efeitos das dessintonias sobre a dinâmica da Concorrência

Nesta seção, discutimos os efeitos do parâmetro físico ε_i fora da condição de ressonância completa. A análise do comportamento da concorrência dos autoestados é um guia para verificar os efeitos das dessintonias, uma vez que, fora da condição de ressonância completa, determinamos que estados com alto grau de emaranhamento tornam-se autoestados do sistema em condições fixadas por $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$ e $\varepsilon_2 = -\varepsilon_1$. Ao considerarmos a dinâmica, a presença de tais autoestados nestas condições específicas poderia favorecer a geração dinâmica de estados de Bell.

Para obter um conhecimento completo sobre os efeitos das dessintonias, realizamos simulações numéricas de doze situações diferentes, considerando como estados iniciais os quatro elementos $|M_1M_2\rangle$ da base posicional e as condições $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$ e $\varepsilon_2 = -\varepsilon_1$ para $\varepsilon_1 \in [-J, J]$, escolhidos com base na análise de espectro, como discutido na Seção 3.2. Nossos resultados são mostrados na figura 4.3. Cada uma das doze situações físicas se encaixam em um dos três padrões diferentes, como segue:

- Figura 4.3(a):
 1. $|\Psi(0)\rangle = |RL\rangle$ e $|LR\rangle$ com $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$;
 2. $|\Psi(0)\rangle = |LL\rangle$ e $|RR\rangle$ com $\varepsilon_2 = -\varepsilon_1$
- Figura 4.3(b):

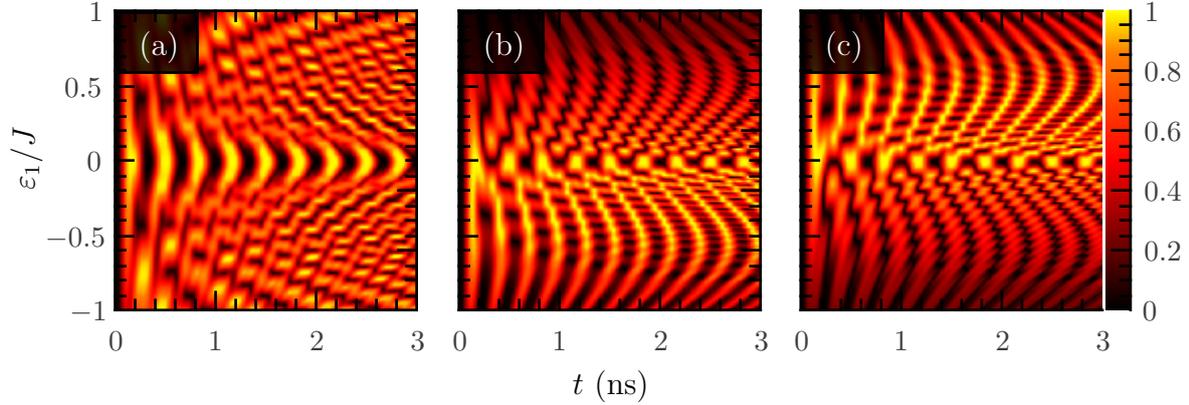


Figura 4.3: Comportamento de três padrões distintos da Concorrência dos elétrons em duas moléculas quânticas acopladas como função da razão entre a dessintonia dos níveis eletrônicos e a interação de Coulomb, ε_i/J , e do tempo, considerando as taxas de tunelamento em cada molécula são iguais ($\Delta_1 = \Delta_2$) e que sua razão com o acoplamento de Coulomb é $\Delta_1/J = \sqrt{3}/4$. (a) Os resultados deste gráfico são válidos para as seguintes condições: $|\Psi(0)\rangle = \{|RL\rangle, |LR\rangle\}$ para $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$ e $|\Psi(0)\rangle = \{|LL\rangle, |RR\rangle\}$ para $\varepsilon_2 = -\varepsilon_1$; (b) Os resultados deste gráfico são válidos para as seguintes condições: $|\Psi(0)\rangle = |RL\rangle$ considerando $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$ e $|\Psi(0)\rangle = |LL\rangle$ para a condição $\varepsilon_2 = -\varepsilon_1$; (c) Os resultados deste gráfico são válidos para as seguintes condições: $|\Psi(0)\rangle = |LR\rangle$ considerando $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$ e $|\Psi(0)\rangle = |RR\rangle$ para $\varepsilon_2 = -\varepsilon_1$.

1. $|\Psi(0)\rangle = |RL\rangle$ e $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$;
2. $|\Psi(0)\rangle = |LL\rangle$ e $\varepsilon_2 = -\varepsilon_1$.

• Figura 4.3(c):

1. $|\Psi(0)\rangle = |LR\rangle$ com $\varepsilon_2 = -\varepsilon_1$;
2. $|\Psi(0)\rangle = |RR\rangle$ com $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$.

Baseados nestes resultados, concluímos que as escolhas de dessintonias fora da condição de ressonância não desfaz o vínculo entre os estados $\{|RL\rangle, |LR\rangle\}$ e $\{|LL\rangle, |RR\rangle\}$, cada um com uma condição específica sobre a dessintonia associada com as oscilações entre um produto de estados separáveis e os correspondentes estados de Bell. Isto está relacionado com as características dos autoestados discutidos na Seção 3.2: a formação de estados de Bell $|\Psi_{\pm}\rangle$ ($|\Phi_{\pm}\rangle$), a superposição dos estados $|RL\rangle$ e $|LR\rangle$ ($|RR\rangle$ e $|LL\rangle$), são favorecidas pela condição $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$ ($\varepsilon_2 = -\varepsilon_1$).

No entanto, a condição de ressonância completa otimiza as oscilações coerentes para todos os casos, como mostrado pelas regiões amarelas entre $-J/4 < \varepsilon_1 < J/4$ na figura

4.3(a). Fora desta escolha de parâmetros, o sistema cai em um dos padrões assimétricos mostrados na figura 4.3(b) e na figura 4.3(c). Dependendo do estado inicial, a criação de estados altamente emaranhados é favorecida pelos valores positivos ou negativos de ε_1 . Uma característica comum entre os três padrões é a variação do comportamento das oscilações em valores de $|\varepsilon_1| > J/2$. Isto está também explicado pela característica de autoestados, o qual mostra um comportamento diferente dos valores fora de $\varepsilon_i \in [-J/2, J/2]$, como mostrado nas figuras 3.3 e 3.5.

Capítulo 5

Perspectivas

Neste capítulo, apresentamos as perspectivas de estudo do emaranhamento no sistema ao considerarmos alguns possíveis processos de perda. Na seção 5.1 introduzimos o conceito de decoerência devido ao acoplamento entre sistemas físicos e o ambiente que o cerca. Descrevemos também um dos métodos matemáticos utilizado para incluir os efeitos de dissipação à dinâmica quântica do sistema, a equação mestra de Lindblad. Na seção 5.2, apresentamos o novo Hamiltoniano do sistema de moléculas de pontos quânticos acoplado a reservatórios eletrônicos. Apresentaremos também os mecanismos de dissipação que serão considerados em nossos cálculos.

5.1 Sistemas quânticos abertos

5.1.1 Decoerência

Todo sistema interage com o meio ambiente ao seu redor. Esta interação faz com que estes se correlacionem, causando transferência irreversível de informação do sistema para o meio ambiente. Desta forma, o estado do sistema perde sua coerência com o passar do tempo, tendendo assim para uma mistura estatística. Na literatura, esse fenômeno é denominado um processo de *decoerência*, sendo considerado o principal obstáculo a ser superado para a implementação prática de um processador de informação baseado em portas lógicas quânticas (NIELSEN, 2000; OLIVEIRA, 2000). Desta forma, o futuro da comunicação e computação quântica esbarram no problema da decoerência (HAROCHE, 1998), não somente devido a inevitável ação do meio ambiente, mas também às flutuações inerentes aos parâmetros de interação requeridos para a realização das operações lógicas

(SCHNEIDER, 1998, 1999). A necessidade de grandes superposições de estados de *qubits*, na implementação prática das operações lógicas, impõe o requerimento de que os sistemas quânticos deveriam ser, em princípio, totalmente isolados de seu meio ambiente e que os parâmetros de interação envolvidos sejam rigorosamente controlados. Por esta razão, as investigações sobre possíveis processos de decoerência em sistemas quânticos promissores é uma necessidade para a construção de um processador lógico quântico.

O formalismo padrão para o estudo da decoerência é a teoria de sistemas quânticos abertos. Essa abordagem considera a interação do sistema de interesse, S , com um reservatório, R , de maneira tal que o comportamento irreversível do sistema seja contemplado. Um Hamiltoniano geral a fim de reproduzir um sistema acoplado a um reservatório externo pode ser escrito como

$$H(t) = H_S(t) + H_R(t) + H_I(t), \quad (5.1)$$

onde $H_S(t)$ é o Hamiltoniano do sistema reduzido, $H_R(t)$ é o Hamiltoniano do reservatório e $H_I(t)$ é o Hamiltoniano que introduz as perturbações provenientes do reservatório sobre o sistema quântico reduzido, acoplando-o, assim, de forma irreversível com o reservatório.

O sistema quântico em questão é geral, podendo ser dado por spins, fótons, polarização da luz, ou como no nosso caso estados de carga. Da mesma forma o reservatório pode ser dado por um ganho ou perda de bosóns, de spins ou qualquer outro que acople com o sistema quântico reduzido. Neste ponto, é necessário revisar uma ferramenta fundamental da Mecânica Quântica que auxilia o estudo destes problemas: o formalismo da representação de interação.

Sabemos que a evolução dos estados quânticos pode ser descrita pela equação de Schrödinger, onde o Hamiltoniano e a condição inicial do sistema determinam uma dinâmica bem definida. Além da equação de Schrödinger, outras equações equivalentes foram desenvolvidas afim de calcular a dinâmica dos observáveis do sistema, originando outros formalismos dentro da Mecânica Quântica. Um deles é o formalismo de Heisenberg onde a dinâmica do sistema é imposta aos operadores quânticos mantendo os estados estáticos, diferente da representação de Schrödinger em que a dependência temporal é carregada pelo estado. O formalismo de Dirac, ou a representação de interação, por sua vez, é um formalismo intermediário entre o formalismo de Schrödinger e o de Heisenberg, pois tanto o estado do sistema como os observáveis carregam parte desta dependência temporal.

Considere um sistema quântico cujo Hamiltoniano é escrito como:

$$H(t) = H_S + H_I(t), \quad (5.2)$$

onde H_S é o Hamiltoniano do sistema estudado e $H_I(t)$ tem duas partes o Hamiltoniano do reservatório mais o Hamiltoniano de interação, que a acopla o sistema ao reservatório. Desta forma, a equação de Schrödinger é dada por:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle = [H_S + H_I(t)] |\Psi(t)\rangle. \quad (5.3)$$

A fim de resolver a equação, introduzimos um novo vetor de estado $|\Phi(t)\rangle$ relacionado com $|\Psi(t)\rangle$ tal que:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iH_S t/\hbar} |\Phi(t)\rangle. \quad (5.4)$$

Este novo vetor de estado $|\Phi(t)\rangle$ é igualmente válido para representar o estado do sistema. A transformação de operadores nesta representação é feita de forma análoga à equação acima, observando que um operador P na representação de Schrödinger pode ser escrito como:

$$P = \sum_{i,j} |\psi_i\rangle \langle \psi_j|, \quad (5.5)$$

onde $|\psi_{i,j}\rangle$ são os elementos da base de $|\Psi(t)\rangle$. Assim, utilizando a equação (5.4), podemos escrever o operador P na nova base,

$$P(t) = \sum_{i,j} e^{-iH_S t/\hbar} |\phi_i\rangle \langle \phi_j| e^{iH_S t/\hbar}, \quad (5.6)$$

implicando que,

$$\tilde{P}(t) = \sum_{i,j} |\phi_i\rangle \langle \phi_j| = e^{iH_S t/\hbar} P e^{-iH_S t/\hbar}, \quad (5.7)$$

onde \tilde{P} representa o operador P no formalismo de interação. A dinâmica neste caso pode ser calculada substituindo a equação (5.4) na equação de Schrödinger,

$$\begin{aligned} [H_S + H_I(t)] e^{-iH_S t/\hbar} |\Phi(t)\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{-iH_S t/\hbar} |\Phi(t)\rangle \right), \\ e^{iH_S t/\hbar} H_I(t) e^{-iH_S t/\hbar} |\Phi(t)\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi(t)\rangle, \end{aligned} \quad (5.8)$$

ou, de acordo com a equação (5.7),

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi(t)\rangle = \tilde{H}_I(t) |\Phi(t)\rangle, \quad (5.9)$$

sendo $\tilde{H}_I(t)$ o Hamiltoniano escrito no formalismo de interação e $|\Phi(t)\rangle$ representa o sistema quântico. O formalismo é muito utilizado quando se trata de dinâmicas controladas em sistemas abertos, visto que através deste podemos facilmente estudar somente as dinâmicas impostas pelo Hamiltoniano $\tilde{H}_I(t)$, desprezando as dinâmicas impostas pelo Hamiltoniano do sistema. De fato, quando $\tilde{H}_I(t) = 0$, o estado quântico representado no formalismo de interação é constante no tempo.

O operador densidade no formalismo de interação é escrito como

$$\tilde{\rho}(t) = |\Phi(t)\rangle \langle \Phi(t)|. \quad (5.10)$$

Assim, podemos calcular sua dinâmica neste formalismo:

$$\frac{d\tilde{\rho}(t)}{dt} = \frac{d|\Phi(t)\rangle}{dt} \langle \Phi(t)| + |\Phi(t)\rangle \frac{d\langle \Phi(t)|}{dt}, \quad (5.11)$$

onde substituindo a equação (5.9), temos:

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{\rho}(t)}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \tilde{H}_I(t) |\Phi(t)\rangle \langle \Phi(t)| + \frac{i}{\hbar} |\Phi(t)\rangle \langle \Phi(t)| \tilde{H}_I(t), \\ \frac{d\tilde{\rho}(t)}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \tilde{H}_I(t) \tilde{\rho}(t) + \frac{i}{\hbar} \tilde{\rho}(t) \tilde{H}_I(t), \\ \frac{d\tilde{\rho}(t)}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} [\tilde{H}_I(t), \tilde{\rho}(t)], \end{aligned} \quad (5.12)$$

e finalmente obtemos a dinâmica para o operador densidade na representação de interação.

5.1.2 Equação mestra

Diferentemente de sistemas fechados, a dinâmica quântica de um sistema aberto não pode, em geral, ser representada em termos de uma evolução unitária. Devido a isso em muitos casos é útil formular a dinâmica de um sistema aberto usando equações mestras no lugar de usar a equação de von Neumann. De modo geral, uma equação mestra é um conjunto de equações que descrevem a evolução temporal de probabilidades de um determinado sistema, podendo incluir os processos de evolução não unitários introduzidos pelo acoplamento entre o sistema e o reservatório.

Afim de deduzirmos a equação mestra, consideramos o Hamiltoniano total do sistema quântico incluindo o Hamiltoniano do sistema, do reservatório e a interação entre eles,

$$H(t) = H_S(t) + H_R(t) + H_I(t). \quad (5.13)$$

A dinâmica do sistema na representação de interação, incluindo os estados do ambiente, é dada pela equação (5.12). Definindo H_0 como sendo a soma dos termos desacoplados do sistema e do reservatório, $H_0 = H_S + H_R$, e $\hat{U}_0 = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H_0t\right]$ temos,

$$\tilde{H}_I(t) = \hat{U}_0^\dagger(t)H_I\hat{U}_0;$$

$$\tilde{\rho}(t) = \hat{U}_0^\dagger(t)\hat{\rho}(t)\hat{U}_0.$$

Uma solução formal para equação (5.12) é dada por:

$$\tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho}(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' [\tilde{H}_I(t'), \tilde{\rho}(t')], \quad (5.14)$$

onde substituindo $\tilde{\rho}(t)$ no comutador em (5.12), temos

$$\frac{d\tilde{\rho}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\tilde{H}_I(t), \tilde{\rho}(0)] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' [\tilde{H}_I(t), [\tilde{H}_I(t'), \tilde{\rho}(t')]]. \quad (5.15)$$

Esta equação é equivalente à equação (5.12), aplicada ao caso particular de um sistema em contato com um reservatório. Para encontrar a solução da mesma pode ser necessário o uso de aproximações. Uma delas é supor que o operador densidade global pode ser escrito como um produto direto dos operadores do sistema e do reservatório, para qualquer tempo t . Consideramos ainda que o reservatório possui capacidade térmica infinita, de modo que o operador densidade do reservatório é constante no tempo. Esta consideração, conhecida como a aproximação de Born, pode ser feita assumindo que há um acoplamento fraco entre o sistema e o reservatório (CARMICHAEL, 1991). Assim,

$$\tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0). \quad (5.16)$$

Traçando as variáveis pertinentes ao reservatório obtemos:

$$\frac{d\tilde{\rho}_S(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \text{Tr}_R [\tilde{H}_I(t), \tilde{\rho}(0)] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \text{Tr}_R [\tilde{H}_I(t), [\tilde{H}_I(t'), \tilde{\rho}(t')]]. \quad (5.17)$$

Da equação acima, é importante notar que sempre podemos incluir termos no Hamiltoniano do sistema $H_S(t)$ de forma a garantir que o valor médio do Hamiltoniano de interação, quando ponderado sobre as variáveis do operador densidade do reservatório, seja zero (CARMICHAEL, 1991). Assim, assumimos que $\text{Tr}_R [\tilde{H}_I(t), \tilde{\rho}(0)] = 0$. Outra aproximação considerada é que a escala de tempo característica da memória do sistema, representada pela integral na equação (5.17), é curta o suficiente de maneira que o operador densidade

do sistema é insignificamente diferente do seu valor atual, $\tilde{\rho}(t') \rightarrow \tilde{\rho}(t)$. Assim podemos reescrever a equação (5.17) de uma forma mais simplificada,

$$\frac{d\tilde{\rho}_S(t)}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' Tr_R [\tilde{H}_I(t), [\tilde{H}_I(t'), \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0)]] . \quad (5.18)$$

A equação (5.18) é conhecida como equação mestra de Redfield que é uma equação que ainda contém uma referência explícita com o tempo inicial e o tempo local (BREUER, PETRUCCIONE, 2002). Neste ponto, usamos a aproximação de Markok, que considera que qualquer correlação quântica dinamicamente estabelecida entre as variáveis internas do reservatório são destruídas em uma escala de tempo muito menor do que a escala de tempo associada à evolução do estado do sistema (PURI, 2001). Quando o limite de integração é expandido para o infinito, $t \rightarrow \infty$ é obtida a equação mestra de Born-Markov

$$\frac{d\tilde{\rho}_S(t)}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dt' Tr_R [\tilde{H}_I(t), [\tilde{H}_I(t'), \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0)]] . \quad (5.19)$$

Lembrando da transformação dada pela equação (5.7), podemos usar

$$\tilde{\rho}_S = e^{iH_S t/\hbar} \rho_S e^{-iH_S t/\hbar},$$

e reescrever a equação (5.19) na representação de Schrödinger

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dt' Tr_R [H_S(t), [H_S(t'), \rho_S(t) \otimes \rho_R(0)]] . \quad (5.20)$$

Sendo ρ_S o operador densidade do sistema escrito na representação de Schrödinger.

5.1.3 Equação mestra de Lindblad

A equação de Lindblad é uma equação diferencial para o operador densidade reduzido $\rho_S(t)$ equivalente à função que a equação de von Neumann desempenha para o operador densidade total $\rho(t)$, mas que emprega a aproximação markoviana para simplificar a evolução do sistema (LINDBLAD, 1976). Esta equação é de extrema importância para tratar processos irreversíveis da dissipação.

A equação mestra de Lindblad surge da condição de positividade da matriz densidade reduzida para todo o tempo t , ou seja

$$\langle \psi | \rho_S(t) | \psi \rangle \geq 0, \quad (5.21)$$

sendo $|\psi\rangle$ qualquer estado puro do sistema, para todos os tempos t .

Foi demonstrado que a equação mestra mais geral que garante a positividade da matriz densidade reduzida $\rho_S(t)$ é escrita como (LINDBLAD, 1976; GORINI, 1978)

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -i[H_S, \rho_S(t)] + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \gamma_{\alpha\beta} \{ [S_\alpha, \rho_S(t) S^\dagger] + [S_\alpha \rho_S(t), S^\dagger] \}. \quad (5.22)$$

Os operadores S_α são os operadores do sistema que aparecem na decomposição diagonal do Hamiltoniano de interação

$$H_I = \sum_{\alpha} S_\alpha \otimes R_\alpha. \quad (5.23)$$

Os coeficientes independentes do tempo $\gamma_{\alpha\beta}$ armazenam toda a informação sobre os parâmetros físicos do processo de decoerência e definem uma matriz coeficiente $\Gamma \equiv (\gamma_{\alpha\beta})$. Podemos simplificar a equação (5.22) diagonalizando a matriz Γ . Assim, podemos reescrever a equação de Lindblad na forma diagonal

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -i[H_S, \rho_S(t)] + \frac{1}{2} \sum_i \Gamma_i (2L_i \rho_S(t) L_i^\dagger - \rho_S(t) L_i^\dagger L_i - L_i^\dagger L_i \rho_S(t)), \quad (5.24)$$

onde Γ_i são autovalores da matriz Γ e L_i combinações lineares dos operadores originais S_α , com coeficientes determinados pela diagonalização da matriz Γ .

A equação mestra de Lindblad fornece uma maneira simplificada de monitorar sistemas quânticos abertos. De fato, se os operadores de Lindblad forem escolhidos de modo a não terem dimensão, os coeficientes Γ_i representam diretamente as taxas de decoerência, uma vez que têm unidades inversas ao tempo (SCHLOSSHAUER, 2007). Portanto, geralmente a tarefa mais difícil e importante em estimar as taxas de decoerência usando a equação na forma de Lindblad consiste em determinar os coeficientes Γ_i , o que é feito de forma experimental.

5.2 Sistema e modelo

No capítulo 2, vimos que um sistema constituído por dois pontos quânticos duplos acoplados e bem isolados, fornece em determinado regime um sistema de dois níveis eletrônicos simples, em que cada elétron pode ocupar o ponto esquerdo ou o ponto direito da molécula quântica. No entanto, ter um sistema físico efetivamente isolado é uma aproximação irrealista do ponto de vista experimental, pois estão presentes diversos mecanismos de perda. No

nosso sistema de interesse, estes processos podem ocorrer por meio de emissão e absorção de fônons, flutuação de carga, ou perda e ganho de elétrons para o reservatório (HAYASHI, *et al.* 2003 ;FUJISAWA, *et al.* 2011).

Os resultados apresentados no capítulo 3, consideram um regime de bloqueio de Coulomb, onde os únicos estados eletrônicos acessíveis para uma única molécula são os estados $|L\rangle$ e $|R\rangle$. Mas, conforme discutido na subseção 2.2.1, este regime não pode ser mantido nos processos de inicialização e medida do sistema (FUJISAWA, *et al.*, 2004). Assim, é importante verificar quais os efeitos dos acoplamentos entre as moléculas e seus reservatórios. Tal acoplamento introduz no sistema dois níveis eletrônicos, a ausência de elétrons na molécula $|0\rangle$, e a dupla ocupação com um elétron em cada ponto $|2\rangle$, de modo que cada subsistema tem agora 4 níveis eletrônicos: $|0\rangle$, $|L\rangle$, $|R\rangle$ e $|2\rangle$. Consideraremos um sistema composto por duas moléculas quânticas acopladas eletrostaticamente, cada uma acoplada a uma fonte e um dreno individual, figura 5.1 (a). A base computacional do sistema composto pelas moléculas quânticas e os reservatórios como:

$$\begin{aligned} & \{|00\rangle, |0L\rangle, |0R\rangle, |02\rangle, |L0\rangle, |LL\rangle, |LR\rangle, |L2\rangle, \\ & |R0\rangle, |RL\rangle, |RR\rangle, |R2\rangle, |20\rangle, |2L\rangle, |2R\rangle, |22\rangle\}. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Nesta base, o Hamiltoniano para o sistema de 16 níveis será dado por

$$\begin{aligned} H = & \frac{\varepsilon_1}{2}(|L0\rangle\langle L0| - |R0\rangle\langle R0|) + \frac{\varepsilon_2}{2}(|0L\rangle\langle 0L| - |0R\rangle\langle 0R|) \\ & + \frac{\Delta_1}{2}(|L0\rangle\langle R0| + |LL\rangle\langle RL| + |LR\rangle\langle RR| + |L2\rangle\langle R2| + h.c.) \\ & + \frac{\Delta_2}{2}(|0L\rangle\langle 0R| + |LL\rangle\langle LR| + |RL\rangle\langle RR| + |2L\rangle\langle 2R| + h.c.) \\ & + \left(\frac{\varepsilon_S}{2} + \frac{J}{4}\right) |LL\rangle\langle LL| + \left(\frac{\varepsilon_d}{2} + \frac{J}{4}\right) |LR\rangle\langle LR| \\ & - \left(\frac{\varepsilon_d}{2} + \frac{J}{4}\right) |RL\rangle\langle RL| + \left(\frac{-\varepsilon_d}{2} + \frac{J}{4}\right) |RR\rangle\langle RR|, \end{aligned} \quad (5.26)$$

onde J é o acoplamento de Coulomb entre as moléculas, ε_i ($i = 1, 2$) é a dessintonia na molécula i , com $\varepsilon_s = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$ e $\varepsilon_d = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$, e Δ_i representa os processos de tunelamento coerentes entre os pontos da esquerda e da direita da molécula i , figura 5.1 (b).

O acoplamento com os reservatórios acrescentara à dinâmica do sistema processos de tunelamento incoerentes, devido a entrada e saída de elétrons nas moléculas, controlados por Γ_{ij} ($i = 1, 2$; $j = L, R$). Trataremos estes processos usando o formalismo de Lindblad,

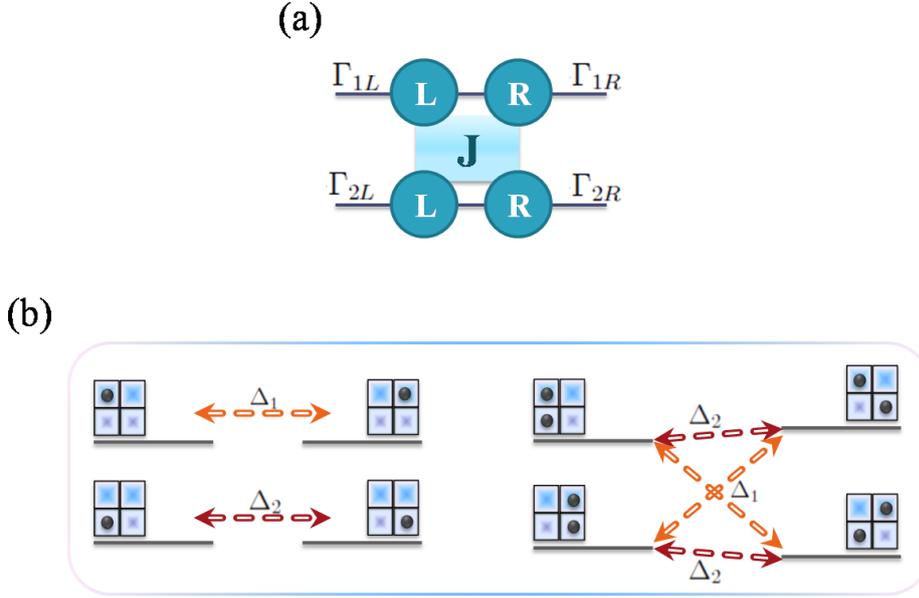


Figura 5.1: (a) Sistema constituído por duas moléculas quânticas, cada uma acoplada a seus reservatórios por Γ_{ij} , onde cada molécula pode assumir os seguintes estados eletrônicos: $|0\rangle$, $|L\rangle$, $|R\rangle$ e $|2\rangle$. (b) Diagrama esquemático do acoplamento dos níveis dos estados eletrônicos devido aos processos de tunelamento coerentes descritos por Δ_i .

apresentado na seção 1.2. Estes processos são incluídos à dinâmica por meio do operador Lindbladiano que é descrito da seguinte forma,

$$\begin{aligned}
L_{ress} = & \Gamma_{1L} (|00\rangle\langle L0| + |0L\rangle\langle LL| + |0R\rangle\langle LR| + |02\rangle\langle L2| \\
& + |R0\rangle\langle 20| + |RL\rangle\langle 2L| + |RR\rangle\langle 2R| + |R2\rangle\langle 22| + h.c.) \\
& + \Gamma_{1R} (|00\rangle\langle R0| + |0L\rangle\langle RL| + |0R\rangle\langle RR| + |02\rangle\langle R2| \\
& + |L0\rangle\langle 20| + |LL\rangle\langle 2L| + |LR\rangle\langle 2R| + |L2\rangle\langle 22| + h.c.) \\
& + \Gamma_{2L} (|00\rangle\langle 0L| + |0R\rangle\langle 0R| + |L0\rangle\langle LL| + |LR\rangle\langle LR| \\
& + |R0\rangle\langle RL| + |RR\rangle\langle RR| + |20\rangle\langle 2L| + |2R\rangle\langle 2R| + h.c.) \\
& + \Gamma_{2R} (|00\rangle\langle 0R| + |0L\rangle\langle 0L| + |L0\rangle\langle LR| + |LL\rangle\langle LR| \\
& + |R0\rangle\langle RL| + |RL\rangle\langle RL| + |20\rangle\langle 2R| + |2L\rangle\langle 2R| + h.c.). \quad (5.27)
\end{aligned}$$

Aqui os parâmetros Γ_{ij} ($i = 1, 2; j = 0, L, R$) descrevem a transição incoerente entre os estados.

Além do tunelamento incoerente de elétrons para os reservatórios, podemos considerar um processo de *dephasing*, introduzido devido a flutuação nas dessintonias ε_i (SHINKAI,

et al. 2009; FUJISAWA, *et al.* 2011). O Lindbladiano que descreve este processo é dado por

$$L_{deph} = \gamma_{LL}|LL\rangle\langle LL| + \gamma_{LR}|LR\rangle\langle LR| + \gamma_{RL}|RL\rangle\langle RL| + \gamma_{RR}|RR\rangle\langle RR|, \quad (5.28)$$

onde γ_{ij} ($i, j = L, R$) são as taxas de *dephasing* entre os níveis eletrônicos.

Estamos interessados em investigar os efeitos do acoplamento com os reservatórios e das flutuações nas dessintonias sobre a dinâmica das correlações quânticas no sistema. A evolução temporal para a nova base de nove níveis é descrita pela equação mestra de Lindblad 5.24. Devido ao aumento da dimensionalidade do problema utilizaremos a negatividade, equação 2.33, para quantificar o emaranhamento no sistema aberto. Queremos em uma primeira análise verificar isoladamente o efeito do *dephasing* puro na dinâmica das correlações, neste caso o sistema ainda estaria em um regime de bloqueio de Coulomb pois somente os quatro níveis eletrônicos $|LL\rangle$, $|LR\rangle$, $|RL\rangle$ e $|RR\rangle$ são ocupados. Em seguida verificaremos os efeitos do acoplamento aos reservatórios sobre a dinâmica do emaranhamento, afim de determinar se existe um conjunto de parâmetros físicos capazes de favorecer estados emaranhados no sistema. Existe ainda outros processos de decoerência nesse sistema como a emissão espontânea de fônons que pode ocorrer nos processos de tunelamento coerente (FUJISAWA, 2011), como por exemplo na transição do estado $|RR\rangle$ para o estado $|RL\rangle$. Este mecanismo de perda também é um dos objetivos de estudo deste trabalho.

Capítulo 6

Conclusões

Neste trabalho, estudamos as propriedades do emaranhamento de um sistema composto por duas moléculas quânticas acopladas utilizando duas medidas de emaranhamento: a concorrência e o negatividade. Verificamos o comportamento do emaranhamento ao manipularmos os parâmetros físicos como o tunelamento e a dessintonia entre os pontos contidos nas moléculas, e o acoplamento de Coulomb entre as moléculas.

Inicialmente, considerando o regime de bloqueio de Coulomb, analisamos o espectro de energia do sistema e exploramos a relação de seus anti-cruzamentos de energia com o emaranhamento nos autoestados do sistema. Através dessa análise verificamos uma relação direta entre os picos de emaranhamento com as taxas de tunelamento Δ_i . Demonstramos que os estados de Bell são autoestados do Hamiltoniano (1.16) e formam uma base completa, o que nos permite reescrever o Hamiltoniano do sistema em uma nova base. A nova forma deixa em evidência o seguinte: existem dois subespaços M_{\pm} , que dependem do acoplamento de Coulomb e do tunelamento, além das matrizes D , que descrevem o acoplamento entre os dois subespaços feito através das dessintonias dos níveis eletrônicos. Dentro desta representação tivemos vantagens na descrição do emaranhamento do sistema, pois é possível separar o efeito do tunelamento Δ_{\pm} , que é o responsável pelas oscilações entre os estados de Bell $|\Psi_{+}\rangle$ ($|\Psi_{-}\rangle$) e $|\Phi_{+}\rangle$ ($|\Phi_{-}\rangle$) dentro dos subespaços M_{\pm} , do efeito das dessintonias ε_s e ε_d , responsáveis pelas oscilações entre os subespaços.

Consideramos o caso ressonante $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$, obtivemos os autovalores e autovetores do Hamiltoniano (1.16) como uma superposição dos estados de Bell. Com isso, verificamos algumas condições sobre as taxas de tunelamento: quando $\Delta_1 = \Delta_2 = 0$ os autoestados do sistema são os estados de Bell; no caso de $\Delta_1 = \Delta_2$ o primeiro estado excitado $|\psi_{-}^0\rangle$ será sempre o estado $|\Psi_{-}\rangle$, um estado de emaranhamento máximo; se $\varepsilon_1 = -\varepsilon_2$ o terceiro

estado excitado $|\psi_+^0\rangle$ será o estado de Bell $|\Phi_-\rangle$; quando as dessintonias entre os níveis eletrônicos são nulas ($\epsilon_1 = \epsilon_2 = 0$), teremos dois autoestados do sistema correspondendo a dois dos estados de Bell $|\Psi_-\rangle$ e $|\Phi_-\rangle$ com energias $-J/4$ e $J/4$ respectivamente. Os outros dois autoestados serão dados por $|\psi_{\mp}^{\Delta}\rangle$ com energias E_{\mp}^{Δ} . Por meio de cálculos numéricos, quantificamos o emaranhamento dos autoestados do sistema como função das dessintonias ϵ_1 e ϵ_2 . Analisamos primeiramente o caso onde as taxas de tunelamento das moléculas são iguais $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$, para os regimes de acoplamento fraco e forte. Foi possível verificar que os estados que apresentam maior grau de emaranhamento são o primeiro e segundo estados excitados, o valor do emaranhamento aumenta com o aumento de Δ , sendo possível obter estados emaranhados para um conjunto maior de valores de dessintonias; o inverso ocorre com o estado fundamental e o terceiro estado excitado.

Em seguida, analisamos a dinâmica da concorrência, considerando o caso ressonante, $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 0$, e o estado $|RL\rangle$ como a configuração inicial do sistema. No caso em que os valores de tunelamento nas moléculas são iguais, $\Delta_1 = \Delta_2$, calculamos analiticamente as probabilidades de ocupação dos estados da base $\{|LL\rangle, |LR\rangle, |RL\rangle, |RR\rangle\}$. Através da análise das expressões obtidas foi possível determinarmos condições sobre os parâmetros Δ_i e J para as quais podemos obter estados emaranhados ou separáveis. Observamos que quando a razão entre esses dois parâmetros satisfaz a condição geral da equação (4.6), as oscilações entre os máximos e mínimos no emaranhamento sofrem a influência de apenas um período dependente do inverso de J . Fora dessa região há a sobreposição de dois períodos, um dependente de J^{-1} e outro de $(J^2 + 16\Delta_i^2)^{-1/2}$. Com os resultados obtidos para a dinâmica do emaranhamento foi possível verificar que, para valores de $\Delta_i < J/8$, o sistema atinge um estado com máximo emaranhamento somente após um tempo de aproximadamente 1,2 ns, enquanto que para $\Delta_i > J/4$ esse tempo é consideravelmente menor sendo da ordem de 0,1 ns. Foi também verificado o que ocorre quando fixamos o tunelamento nas moléculas e variamos o parâmetro J , onde observamos que nos regimes de $J \ll \Delta_i$ o sistema apresenta um grau elevado de emaranhamento por um intervalo de tempo maior, a medida em que J se aproxima de Δ_i esses intervalos de tempo se tornam cada vez menores, sendo que em alguns casos quando $J > \Delta_i$ não é possível obter estados maximamente emaranhados.

Devido a necessidade de se conhecer os efeitos dos processos de decoerência no sistema, temos como objetivo futuro estudar os possíveis mecanismos de perda no sistema composto pelas moléculas de pontos quânticos semicondutores. O acoplamento do sistema com reservatórios eletrônicos introduz na dinâmica dos elétrons processos de tunelamento

incoerentes que afetam o emaranhamento no sistema e acrescenta níveis eletrônicos ao nosso problema, pretendemos verificar numericamente o quão afetada é a dinâmica das correlações quânticas nos *qubits*. Outros processos de decoerência como o *dephasing* puro, introduzido por flutuações nas dessintonias de energia, e a emissão espontânea de fônons também são perspectivas de estudo do nosso trabalho.

Referências Bibliográficas

- ASPECT, A. *et al.* Experimental test of Bell inequalities using time-varying analyzers. *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1804 (1982).
- BARENCO, A. *et al.* Conditional Quantum Dynamics and Logic Gates. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4083 (1995).
- BELL, J.S. On the Einstein-Podolsky-Rosen paradox. *Physics* **1** 195 (1964).
- BENNETT, C.H.; BRASSARD, Proceedings of IEEE International Conference on Computers Systems and Signal Processing, Bangalore, Índia, Dezembro p. 175, (1984).
- BENNETT, C.H.; WIESNER S.J. Communication via one- and two-particle operators on Einstein-Podolsky-Rosen states. *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2881 (1992).
- BENNETT, C. H. *et al.* Experimental quantum cryptography. *Journal of Cryptology* 5:3, (1992a).
- BENNETT, C.H. *et al.* Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels. *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1895 (1993).
- BENNETT, C.H. *et al.* Concentrating partial entanglement by local operations. *Phys. Rev. A* **53**, 2046 (1996).
- BOEHI, P. *et al.* Coherent manipulation of Bose-Einstein condensates with state-dependent microwave potentials on an atom chip. *Nature Physics*, **5**, n. 8, p. 592–597, (2009).
- BREUER, H. P. and PETRUCCIONE, F. The theory of open quantum systems. *Oxford: Oxford University Press* p. 625 (2002).
- BRUM, J. A. and HAWRYLAK, P. Coupled quantum dots as quantum exclusive-OR gate. *Superlattices Microstruct.* **22**, 431 (1997).
- BRUN, T. A., WANG, H. Entanglement in quantum dots via photon exchange. *Phys. Rev. A* **61**, 032307 (2000).
- BRUSS, D. Characterizing Entanglement. *J. Math. Phys.* **43**, 4237 (2002).

- BORGES, H.S. et al. Robust states in semiconductor quantum dot molecules. *Phys. Rev. B*, **81**, p. 075322, 2010
- BORRI, P. et al. Rabi oscillations in the excitonic ground-state transition of InGaAs quantum dots. *Phys. Rev. B*, **66**, 081306 (2002).
- BORRI, P. et al. Exciton Dephasing in Quantum Dot Molecules *Phys. Rev. Lett.* **91**, 267401 (2003).
- BRACKER, A.S. et al. Engineering electron and hole tunneling with asymmetric InAs quantum dot molecules. *Appl. Phys. Lett.* **89**, 233110 (2006).
- CARMICHAEL, H. An open systems approach to quantum optics. *Springer*, (1993).
- CAVES, C.M. et al. Physical-resource requirements and the power of quantum computation. *J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt.* **6**, S801 (2004).
- CHANG L. L.; ESAKY L.; TSU, R. Resonant tunneling in semiconductor double barriers. *Appl. Phys. Lett.* **24**, 593 (1974).
- CHIQUITO, A.J., Pontos Quânticos: Átomos artificiais e transistores atômicos. *Revista Brasileira do Ensino de Física*, vol.23 n° 2, (2001).
- CHU, W. and ZHU, J. Entangled exciton states and their evaluation in coupled quantum dots. *Appl. Phys. Lett.* **89**, 053122 (2006).
- COFFMAN, V.; KUNDU, J. and WOOTTERS, W. K. Distributed entanglement, *Phys. Rev. A* **61**, pp. 052306 (1999).
- COHEN-TANOUDJI, C. et al. Quantum Mechanics, volume I. *John Wiley e Sons*, (1978).
- CORCORAN, E. and ZORPETTE, G. Diminishing dimensions. *Scientific American*, p 23-33 (1998).
- CRONENWETT, S. M.; OOSTERKAMP, T. H. and KOUWENHOVEN, L. P. A Tunable Kondo Effect in Quantum Dots. *Science* **281**, 540 (1998).
- DEUTSH, D. Quantum theory, the Church-Turing principle and the universal quantum computer, *Proceedings of the Royal Society of London*, **A 400**, pp97-117, (1985).
- DINGLE, R.; WIEGMAN, W.; HENRY, C. H. Quantum States of Confined Carriers in Very Thin $Al_xGa_{1-x}As - GaAs - Al_xGa_{1-x}As$ Heterostructures. *Phys. Rev. Lett.* **33**, 827 (1974).
- DIVINCENZO, D. P. Quantum computation. *Science*, 270:255, (1995).
- DIVINCENZO, D. P. The physical implementation of quantum computation. *Fortschritte der Physik*, **48**, 771, (2000).

EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B. and ROSEN, N. Can quantum Mechanics description of Physical be considered complete theory?, *Phys. Rev.* **47**, 777 (1935).

EKERT, A.; JOZSA R. Quantum algorithms: entanglement-enhanced information processing. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **356**, 1769 (1998).

EKERT, A. Quantum cryptography based on Bell's Theorem. *Phys. Rev. Lett.* **67**, 661 (1991).

EMARY, C. Measuring the entanglement between double quantum dot charge qubits. *Phys. Rev. B* **80**, 161309R (2009).

ESAKY, L. and CHANG, L. L. New Transport Phenomenon in a Semiconductor "Superlattice". *Phys. Rev. Lett.* **33**, 495 (1974).

ESAKY, L. and TSU, R. Superlattice and Negative Differential Conductivity in Semiconductors. *IBM J. Res. Dev.* **14**, 61 (1970).

FANCHINI, F.F. et al. Entanglement versus quantum discord in two coupled double quantum dots. *New Journal of Physics*, **12**, 073009 (2010).

FEYNMAN R. P. Simulating physics with computers. *International Journal of Theoretical Physics* **21**, 467 (1982).

FUJISAWA T.; HAYASHI T.; HIRAYAMA Y. Controlled decoherence of a charge qubit in a double quantum dot. *J. Vac. Sci. Technol. B*, **22(4)**, 2035 (2004).

FUJISAWA T.; SHINKAI G.; HAYASHI T. and OTA T. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **43**, 730 (2011).

GOLDHABER-GORDON D. et al. Kondo effect in a single-electron transistor. *Nature* **391**, 156 (1998).

GORINI, V.; FRIGERIO, A.; VERRI, M.; KOSSAKOWSKI, A.; SUDARSHAN E. C. G. Properties of quantum Markovian master equations *Rep. Math. Phys.* **13**, 149-173 (1978).

GROVER, M. et al. Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 325 (1997).

HAYASHI T. et al. Coherent Manipulation of Electronic States in a Double Quantum Dot. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 226804 (2003).

HERMAN, M. A. and SITTER, H. Molecular Beam Epitaxy. *Spring Series in Materials Science*, **7** (1996).

HORODECKI, R. et al., Quantum entanglement. *Rev. Mod. Phys.*, **81**:865, 2009.

JACAK, L. et al. Unavoidable decoherence in semiconductor quantum dots. *Phys. Rev. B*, **72**, 245309 (2005).

- JOZSA, R. Quantum Algorithms and the Fourier Transform, *Submitted to Proc. Roy. Soc. Lond. A for the Proceedings of the Santa Barbara Conference on Quantum Coherence and Decoherence* (1997).
- KANE, B.E. A silicon-based nuclear spin quantum computer. *Nature* (London) **393**, 133 (1998).
- KASTNER, M. Artificial Atoms. *Phys. Today* **46** (1), 24 (1993).
- KITTEL, C. Introdução à Física do Estado Sólido. *Rio de Janeiro: Guanabara Dois* (1978).
- KOUWENHOVEN, L. and MARKUS, C. Quantum dots. *Physics World* June 35 (1998).
- KRENNER, J.H. *et al.* Direct Observation of Controlled Coupling in an Individual Quantum Dot Molecule. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 057402 (2005).
- LEE, S. *et al.* Convex-roof extended negativity as an entanglement measure for bipartite quantum systems. *Phys. Rev. A* **68**, 062304 (2003).
- LINDBLAD, G. On the generators of quantum dynamical semigroups. *Communications in Mathematical Physics*, Berlin **48** n.2, 119-130 (1976).
- LINDEN, N.; POPESCU, S. Good dynamics versus bad kinematics: is entanglement needed for quantum computation? *Phys. Rev. Lett.* **87**, 047901 (2001).
- LIVERMORE, C. *et al.* The Coulomb Blockade in Coupled Quantum Dots. *Science* **274**, 1332 (1996).
- LOSS, D.; DIVINCENZO, D.P. Quantum computation with quantum dots. *Phys. Rev. A* **57**, 120 (1998).
- MARK, A. Quantum Dots *Scientific American Magazine*, January, page 118 (1993).
- MEYER, D. A. Sophisticated quantum search without entanglement. *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2014 (2000).
- MICHLER, P., *Topics in Applied Physics (Vol. 90) - Single Quantum Dots: Fundamentals, applications and new concepts.* Editora Springer (2003).
- NIELSEN, M.A.; CHUANG, I.L. Quantum Computation and Quantum Information. [S.I.]: *Cambridge Univ. Press*, 2000.
- OLIVEIRA, M. C. and MUNRO, W. J. Quantum computation with mesoscopic superposition states. *Phys. Rev. A* **61**, 42309 (2000).
- PURI, R. R. Mathematical Methods of Quantum Optics. *USA: Springer* (2001).
- REIMANN, S. M. and MANNEINEN, M. Electronic structure of quantum dots. *Rev. Mod. Phys.* **74**, 1283 (2002).

- ROOS, C. F. et al. Control and measurement of three-qubit entangled states. *Science*, **304**, n. 5676, p. 1478–80, (2004).
- RUNGTA, P. *et al.* Universal state inversion and concurrence in arbitrary dimensions. *Phys. Rev. A* **64** 042315 (2001).
- SHINKAI, G. et al. Correlated Coherent Oscillations in Coupled Semiconductor Charge Qubits. *Phys. Rev. Lett.* **103**, 056802 (2009).
- SHOR, P. W. Algorithms for Quantum Computation: Discrete Logarithms and Factoring, *Proceedings, 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science* (IEEE Press, November 1994).
- STIEVATER, T. et al. Rabi Oscillations of Excitons in Single Quantum Dots. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 133603 (2001).
- TERRA CUNHA, M. O. Emaranhamento: caracterização manipulação e consequências. Tese de Doutorado UFMG (2005).
- VAN HOVE, L., The Occurrence of Singularities in the Elastic Frequency Distribution of a Crystal. *Phys. Rev.* **89**, 1189 (1953).
- VEDRAL, V. Introduction to Quantum Information Science. *Oxford University Press*, Oxford, U.K. (2006).
- VIDAL, G, and WERNER, R. F., Computable measure of entanglement. *Physical Review A* **65**, 032314-032324 (2002).
- VILLAS-BOAS, J.M. *et al.*, *Phys. Rev. B*, **69**, 125342 (2004).
- VILLAS-BOAS, J.M. et al. Coherent control of tunneling in a quantum dot molecule. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 057404 (2005).
- WARBURTON, R. J. Self-assembled semiconductor quantum dots. *Contemporary Physics* **43**(5), 351-364 (2002).
- WOOTTERS, W.K., Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2245 (1998).
- XIAO-SONG, *et al.* Quantum teleportation over 143 kilometres using active feed-forward. *Nature* **489**, 269–273 (2012).
- ZANARDI, P. and ROSSI, F. Production of φ and ω Mesons in Near-Threshold pp Reactions. *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4572 (1998).