



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE FÍSICA

PATRÍCIA A. ALMEIDA DE OLIVEIRA

**Dinâmica e Emaranhamento em Moléculas Quânticas
Acopladas**

Uberlândia
2012

PATRÍCIA A. ALMEIDA DE OLIVEIRA

Dinâmica e Emaranhamento em Moléculas Quânticas Acopladas

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Instituto de Física da Universidade Federal de Uberlândia em preenchimento parcial dos requisitos para obtenção do título de licenciado em Física.

Orientador:

PROFA. DRA. LILIANA SANZ DE LA TORRE

Uberlândia
2012



Universidade Federal de Uberlândia
Instituto de Física

Coordenação de Física – Licenciatura
Av. João Naves de Ávila, 2121 – C.P. 593 – CEP 38400-902 – Uberlândia - MG - Brasil
Fone: (034) 3239-4055 – Fax: (034) 3239-4106 – email: cofis@ufu.br

ATA DA DEFESA DE
TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

Na data de 30 de janeiro de 2013, a Banca Examinadora abaixo assinada (aprovou/reprovou) Aprovou a Defesa do Trabalho de Conclusão de Curso intitulado “Dinâmica e emaranhamento em moléculas quânticas acopladas” defendido pela estudante Patrícia Aparecida Almeida de Oliveira, matrícula 98759.

Uberlândia, 30 de janeiro de 2013.

– Prof.ª Dr.ª Liliana Sanz de la Torre (Orientadora) –

Instituto de Física - UFU

– Prof. Dr. José Maria Villas Bôas –

Instituto de Física - UFU

– Prof. Dr. Fabrício Macedo Souza –

Instituto de Física - UFU

Agradecimentos

Agradeço aos meus pais 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 minha irmã Nathália, por todo o apoio fornecido nestes últimos anos e também pela grande amizade e companheirismo. 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 alegam cada um dos meus dias.

À professora Liliana Sanz agradeço não só pela orientação é paciência, essenciais ao desenvolvimento deste trabalho, mas também pelo muito que contribuiu na minha formação pessoal e profissional.

Ao professor Augusto Alcalde pelas discussões e esclarecimentos relacionados a alguns aspectos deste trabalho.

Gostaria de agradecer à Halyne Borges por toda colaboração no desenvolvimento deste trabalho, e pela grande amizade que desenvolvemos nestes quase quatro anos de convivência.

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

Nas décadas recentes, tem-se concentrado esforços no desenvolvimento de pesquisa na área de Informação Quântica. Isto se deve, principalmente, por esta área fornecer métodos superiores para processamento e armazenamento de dados do que os já conhecidos pela teoria clássica de informação. Dentre os protocolos de maior sucesso estão o teletransporte de estados quânticos, a criptografia quântica e a computação quântica. Em todos estes processos, o principal recurso que traz a vantagem ao processamento quântico de informação é o denominado emaranhamento quântico. Neste trabalho, realizamos um estudo teórico das propriedades do emaranhamento em um sistema de estado sólido constituído de duas moléculas quânticas acopladas por interação coulombiana. 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. Utilizamos o Emaranhamento de Formação afim de verificar o comportamento da 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, Pontos Quânticos, Moléculas Quânticas.

Abstract

In recent decades, efforts have been concentrated in the development of research in Quantum Information. This interest comes from the fact that quantum mechanics properties introduce several advantages while processing information if compared with classical methods. Examples of successful protocols are teleportation of quantum states, quantum cryptography and quantum computing. In all these cases, the main feature that brings the advantage of quantum information processing is the quantum entanglement. In this work, we studied the properties of entanglement in a system composed of two solid-state quantum molecules coupled by Coulomb interaction. We use concurrence, a measure of quantum correlation, to analyze the characteristics of the entanglement of eigenstates of the system obtained by exact diagonalization of the Hamiltonian describing the quantum molecules. We investigated the entanglement dynamics, using the Entanglement of Formation (EoF), through of the manipulation physical parameters of the system such as: the tunneling between the dots of the molecules and the Coulomb interaction between them. We identified a set of parameters where it is possible to obtain maximally entangled states and conditions in which it is not possible to entangle the subsystems.

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

Sumário

Lista de Figuras	vii
Introdução	1
1 Fundamentos teóricos	5
1.1 Mecânica Quântica	5
1.2 Operador densidade	9
1.2.1 Propriedades gerais do operador densidade	10
1.2.2 Descrição de sistemas compostos usando operador densidade	12
1.3 Emaranhamento	12
1.3.1 Emaranhamento de estados puros	13
1.3.2 Emaranhamento de estados mistos	14
1.3.3 Critérios de separabilidade e quantificação de emaranhamento	15
1.3.4 Emaranhamento de Formação e Concorrência	16
2 Moléculas Quânticas acopladas	18
2.1 Heteroestruturas Semicondutoras	18
2.2 Pontos quânticos	23
2.2.1 Pontos quânticos duplos	25
3 Emaranhamento em moléculas quânticas acopladas	28
3.1 Espectro, autoestados e emaranhamento	28
3.2 Dinâmica e Emaranhamento para o caso ressonante	39
4 Conclusões	46
Referências bibliográficas	48

Lista de Figuras

2.1	(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_c	20
2.2	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 <i>bulk</i> ; (b) Densidade de estados em poços quânticos; (c) Densidade de estados em fios quânticos; (d) Densidade de estados de pontos quânticos (CORCORAN, E. and ZORPETTE, G., 1998).	22
2.3	(a) Junção de amostras GaAs/AlGaAs na formação de um gás de elétrons bidimensional; (b) Figura esquemática de um ponto quântico; (c) Imagem de um ponto quântico feita por microscopia eletrônica.	24
2.4	Imagem, feita através de microscopia eletrônica, da amostra utilizada por Hayashi <i>et al.</i> Os eletrodos G_L , G_l , G_C , G_r e G_R são tensionados negativamente, afim de definir os dois pontos quânticos (L e R, do inglês <i>left</i> e <i>right</i>) entre a fonte (S, do inglês <i>Source</i>) e o dreno (D, do inglês <i>Drain</i>).	25
2.5	Imagem feita através de microscopia eletrônica do dispositivo utilizado por Shinkai <i>et al.</i> . 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 <i>et al</i> , 2009).	27
3.1	(a) Espectro de energia do sistema como função de ε_1 ; (b) concorrência dos autoestados de H como função de ε_1 . Considerando $\Delta_1 = \Delta_2 = 10^{-2}\mu\text{eV}$, $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$ e $J = 25\mu\text{eV}$	29

3.2	(a) Espectro de energia do sistema como função de ε_1 ; (b) concorrência dos autoestados de H como função de ε_1 . Parâmetros utilizados: $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$, $\Delta_1 = \Delta_2 = J/16$ e $J = 25\mu\text{eV}$.	31
3.3	Concorrência dos autoestados de H como função de ε_1 e ε_2 . Parâmetros utilizados: $\Delta_1 = \Delta_2 = J/16$ e $J = 25\mu\text{eV}$. (a) Concorrência do estado $ 0\rangle$; (b) concorrência do estado $ 1\rangle$; (c) concorrência do estado $ 2\rangle$; (d) concorrência para o estado $ 3\rangle$	33
3.4	Concorrência dos autoestados de H como função de ε_1 e ε_2 . Parâmetros utilizados: $\Delta_1 = \Delta_2 = J/4$ e $J = 25\mu\text{eV}$. (a) Concorrência do estado $ 0\rangle$; (b) concorrência do estado $ 1\rangle$; (c) concorrência do estado $ 2\rangle$; (d) concorrência para o estado $ 3\rangle$	35
3.5	(a) Espectro de energia do sistema como função de ε_1 ; (b) concorrência dos autoestados de H como função de ε_1 . Parâmetros considerados: $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$, $\Delta_1 = J/4$, $\Delta_2 = J/8$ e $J = 25\mu\text{eV}$	36
3.6	Concorrência dos autoestados de H como função de ε_1 e ε_2 . Parâmetros utilizados: $\Delta_1 = J/4$, $\Delta_2 = J/8$ e $J = 25\mu\text{eV}$. (a) Concorrência do estado $ 0\rangle$; (b) concorrência do estado $ 1\rangle$; (c) concorrência do estado $ 2\rangle$; (d) concorrência para o estado $ 3\rangle$	38
3.7	Espectro de energia do sistema como função de Δ_1 , considerando $\Delta_2 = \Delta_1$, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ e $J = 25\mu\text{eV}$	40
3.8	(a) Probabilidade de ocupação do nível $ ij\rangle$ ($i, j = L, R$) como função do tempo; (b) Dinâmica do EoF considerando o estado inicial $ \Psi(0)\rangle = RL\rangle$. Parâmetros utilizados: $\Delta_1 = \Delta_2 = 7\mu\text{eV}$, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ e $J = 25\mu\text{eV}$	42
3.9	(a) Probabilidade de ocupação do nível $ ij\rangle$ ($i, j = L, R$) como função do tempo; (b) Dinâmica do EoF considerando o estado inicial $ \Psi(0)\rangle = RL\rangle$. Parâmetros utilizados: $\Delta_1 = \Delta_2 \approx 10.8\mu\text{eV}$, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ e $J = 25\mu\text{eV}$	43
3.10	Dinâmica do Emaranhamento de Formação, considerando o estado inicial $ \Psi(0)\rangle = RL\rangle$: (a) EoF como função do tempo e de Δ_1 , sendo $\Delta_2 = \Delta_1$, $J = 25\mu\text{eV}$ e $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$. (b) EoF como função do tempo e de J , considerando $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ e $\Delta_1 = \Delta_2 \approx 10.8\mu\text{eV}$. . .	44

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 seu 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.

As possíveis vantagens dos computadores quânticos se devem principalmente a um dos princípios da Mecânica Quântica: a superposição coerente de estados. 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*, pode ainda ser uma combinação linear de ambos. A possibilidade de preparar superposições permite o chamado paralelismo quântico, o algoritmo de Shor, entre outros, é baseado neste princípio (GROVER, 1997; JOZSA).

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 é uma das características da Mecânica Quântica que 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 *et al.*, 2004), além de estar

presente em diversos protocolos de informação, como por exemplo, a codificação superdensa, o teletransporte quântico e a criptografia quântica (BENNETT; WIESNER, 1992; BENNETT *et al.*, 1993; ROOS, *et al.*, 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, *et al.*, 2004), condensados de Bose-Einstein (BOEHI, *et al.*, 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; DIVINCENZO, 1998).

As tecnologias de nanofabricação atuais permitem projetar os denominados *pontos quânticos*, ou átomos artificiais. Nestes dispositivos são usados materiais semicondutores cujas brechas entre as bandas de condução e valência são tais que tornam possível o confinamento espacial de elétrons e buracos (MARK, 1998). 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; DIVINCENZO, 1998; BORGES *et al.*, 2010). Oscilações de Rabi entre dois níveis, condição necessária para a definição de um *qubit*, têm sido reportadas neste tipo de sistema (STIEVATER *et al.*, 2001; BORRI, 2002). O processo de decoerência, fenômeno responsável pela destruição dos estados quânticos de superposição, tem sido bastante explorado em pontos quânticos (JACAK *et al.*, 2005; VILLAS-BOAS, *et al.*, 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 pontos quânticos acoplados via tunelamento (KRENNER, *et al.*, 2005; BRACKER, A.S. *et al.*, 2006; VILLAS-BOAS, *et al.*, 2004). Estamos interessados num segundo sistema onde os elétrons pertencentes a duas moléculas quânticas diferentes interagem via interação coulombiana (HAYASHI *et al.*, 2003; SHINKAI *et al.*, 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, G. et al, 2009) e alguns trabalhos teóricos têm explorado aspectos relacionados com emaranhamento e decoerência (CLIVE EMARY, 2009; FANCHINI *et al*, 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 essencialmente necessário para construção de um processador lógico quântico.

Neste trabalho de conclusão de curso tivemos como principal objetivo verificar como se comporta o emaranhamento no sistema de duas moléculas quânticas acopladas ao manipularmos seus parâmetros físicos. Na primeira etapa do trabalho, 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 utilizando a *Concorrência* como medida de emaranhamento. Em seguida, descrevemos teoricamente a dinâmica do sistema em função do tunelamento entre os pontos contidos nas moléculas e da interação de Coulomb entre ambas considerando especificamente o caso ressonante onde as dessintonias nas moléculas são nulas. Para este caso, analisamos a dinâmica do emaranhamento nas moléculas acopladas utilizando como quantificador de emaranhamento a medida denominado *Emaranhamento de Formação* que pode ser definida como uma função da *Concorrência*. Ambas as medidas de emaranhamento utilizadas nesse trabalho são quantificadores eficazes de emaranhamento em sistemas compostos por dois *qubits*.

O trabalho desenvolvido está disposto da seguinte forma: No capítulo 1, começamos definindo alguns dos conceitos fundamentais da Mecânica Quântica necessários para o desenvolvimento deste trabalho, como a descrição de um sistema composto no formalismo da Mecânica Quântica e o *operador densidade*, que é uma maneira amplamente utilizada na literatura para descrever estados quânticos; particularmente na seção 1.3 abordamos o problema de determinar se um estado quântico geral possui ou não emaranhamento, descrevendo as características gerais do emaranhamento e as medidas de emaranhamento utilizadas, o *Emaranhamento de Formação* e a *Concorrência*. No capítulo 2, faremos uma discussão breve sobre as propriedades das nanoestruturas semicondutoras. Após apresentar os aspectos gerais deste tipo de dispositivo descrevemos de forma detalhada o nosso sistema físico de interesse a saber, duas moléculas quânticas acopladas. Os resultados obtidos neste trabalho estão dispostos no Capítulo 3, sendo organizados em duas seções: seção 3.1, onde

discutimos o comportamento do espectro de energia do sistema e o comportamento do emaranhamento nos autoestados. Na seção 3.2 discutimos a dinâmica e o emaranhamento no sistema. Por fim, no Capítulo 4 apresentamos as conclusões.

Capítulo 1

Fundamentos teóricos

Neste capítulo apresentamos os conceitos fundamentais para o desenvolvimento deste trabalho, começando com uma breve revisão da estrutura matemática por trás da Mecânica Quântica, seção 1.1 (GRIFFITHS, D., 2005). Na seção 1.2, fazemos uma descrição das propriedades do *operador densidade*, uma forma útil para se representar estados quânticos (COHEN-TANOUDJI, C. *et al*, 1978). O problema de determinar se um estado quântico geral possui emaranhamento é apresentado na seção 1.3, descrevemos duas das medidas de emaranhamento utilizadas para sistemas de dois *qubits*, o Emaranhamento de Formação e a Concorrência (WOOTTERS, W.K., 1998)

1.1 Mecânica Quântica

Em 1900, o físico alemão Max Planck propôs uma solução a um dos problemas experimentais que intrigava os físicos, a radiação do corpo negro. Planck sugeriu que a emissão e absorção da energia das ondas eletromagnéticas não se dava de forma contínua, como previsto pela teoria clássica, mas sim de modo discreto, em pequenos pacotes (*quantos*) de energia. A suposição de Planck foi o pontapé inicial rumo ao desenvolvimento da teoria quântica; no entanto, o salto mais decisivo para o desenvolvimento da Mecânica Quântica foi dado em 1924 na tese de doutorado do francês Louis de Broglie, onde ele propõe que se ondas eletromagnéticas podem se comportar como partículas, partículas (como elétrons, prótons, etc) também podem se comportar como ondas, introduzindo assim o conceito de ondas de matéria. Para descrever esta situação pouco usual com precisão, necessitamos de ferramentas matemáticas diferentes daquelas utilizadas na Mecânica Clássica. Dois formalismos distintos foram desenvolvidos com este objetivo: a mecânica quântica matricial

de Heisenberg onde a dinâmica do sistema é imposta aos operadores quânticos mantendo os estados estacionários; e a mecânica quântica ondulatória de Schrödinger onde a dependência temporal é carregada pelo estado quântico. Ambos os formalismos nos levam a resultados equivalentes.

Na representação de Schrödinger, a função que descreve as ondas de matéria é chamada *função de onda*, e é representada na base do operador de posição do estado mais geral dado por $\Psi(\mathbf{r}, t)$, esta função é obtida através da solução da *equação de Schrödinger*:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial^2 t} \Psi(\mathbf{r}, t) + \hat{V} \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (1.1)$$

onde \hbar é a constante de Planck, m a massa do elétron e \hat{V} o potencial de confinamento. No caso geral, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ é uma função complexa. É importante ressaltar que embora $\Psi(\mathbf{r}, t)$ descreva a partícula, a função em si não possui uma “realidade física”. Ou seja, não é possível ter acesso experimental direto a função de onda.

A interpretação probabilística da função de onda foi feita em 1926 pelo físico Max Born. Born postulou que a conexão entre as propriedades ondulatórias de $\Psi(\mathbf{r}, t)$, e as propriedades mecânicas de uma partícula, não estava na função de onda em si, mas no seu módulo quadrado:

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (1.2)$$

onde $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$ é o complexo conjugado da função de onda.

A quantidade $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ é interpretada como uma *densidade de probabilidade*. Devido a essa interpretação, dentro da Mecânica Quântica, só podemos falar de probabilidades: probabilidade da partícula estar em um intervalo de valores de posição, probabilidade da partícula ter um certo valor do momento, ou uma certa energia, e assim por diante. A função $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ representa a probabilidade da partícula ser encontrada na posição \mathbf{r} , no instante t .

A teoria quântica é baseada em dois conceitos: estados quânticos e operadores. A função de onda representa o estado de um sistema, e os observáveis são representados por operadores hermitianos. Com base nestes dois conceitos, podemos enunciar alguns dos postulados da Mecânica Quântica:

Postulado 1: Associado a todo sistema quântico isolado existe um espaço vetorial complexo \mathcal{H} , denominado espaço de Hilbert¹. Os elementos do espaço de Hilbert são vetores complexos $|\Psi\rangle$, chamados *ket*², e representam o estado do sistema. Todas as informações físicas obtidas do sistema estão contidas neste *vetor de estado*.

Os estados devem ser normalizáveis, ou seja:

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = 1. \quad (1.3)$$

Pode-se demonstrar que sempre é possível definir um conjunto completo de estados ortonormais formando uma base do espaço de *Hilbert*. Então, se $\{|\psi_k\rangle\}$ é uma destas bases, qualquer vetor de estado $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ pode ser expresso como uma combinação linear dos *kets* da base,

$$|\Psi\rangle = \sum_k c_k |\psi_k\rangle, \quad (1.4)$$

onde os coeficientes c_k são *amplitudes de probabilidade*, ou seja, o sistema tem probabilidade $|c_k|^2$ de estar no estado $|\psi_k\rangle$. Essas amplitudes satisfazem a relação:

$$\sum_k |c_k|^2 = 1, \quad (1.5)$$

que expressa o fato de $|\Psi\rangle$ ser normalizável.

Postulado 2: A evolução temporal de um sistema, descrito pelo vetor de estado $|\Psi\rangle$, é dada pela equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle, \quad (1.6)$$

em que \hat{H} é o operador *Hamiltoniano*, e está associado à energia total do sistema.

¹Dizemos que um espaço vetorial é um espaço de Hilbert se ele é um espaço métrico completo com produto interno, definido sobre o conjunto dos números complexos. É sobre esse tipo de espaço vetorial que a Mecânica Quântica se constrói.

²Na notação de Dirac, um vetor de estado pertencente a \mathcal{H} é descrito por $|\rangle$, chamado *ket*. Associado a cada espaço \mathcal{H} , existe um espaço dual \mathcal{H}^\dagger , cujo os elementos são descritos por $\langle|$, chamados *bra*. O produto escalar dos vetores de estado $|a\rangle$ e $|b\rangle$ é denotado por $\langle b|a\rangle$.

Postulado 3: Cada observável, ou seja, qualquer característica física do sistema que pode ser medida, é representado por um operador hermitiano³ que atua sobre vetores do espaço de estados \mathcal{H} .

Um operador é um mapa linear entre dois espaços de Hilbert. Para a Mecânica Quântica são importantes os operadores lineares que mapeiam o espaço de estados \mathcal{H} no próprio \mathcal{H} .

Postulado 4: Os únicos resultados possíveis da medida A sobre um sistema físico, são os autovalores do observável \hat{A} associado a esta medida. Assim, expressamos a equação de autovalores do observável \hat{A} da forma:

$$\hat{A} |\psi_n^m\rangle = a_n |\psi_n^m\rangle, \quad (1.7)$$

onde a_n são os autovalores de \hat{A} . Note que, como todo observável é um operador hermitiano, os resultados possíveis de uma medida serão sempre reais.

Postulado 5: Quando se mede a quantidade física A sobre um sistema caracterizado pelo estado $|\psi\rangle$, a probabilidade de obter o autovalor a_n é dada por:

$$Pr(a_n) = \sum_{m=1}^{d_n} |\langle \psi_n^m | \psi \rangle|^2, \quad (1.8)$$

sendo d_n o índice de degenerescência do autovalor a_n .

Uma vez realizada a medida e obtido como resultado um autovalor a_n qualquer, o estado do sistema, a partir do instante de medida, passa a ser:

$$|\psi_n\rangle = \frac{\hat{P}_n |\psi\rangle}{\langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle^{1/2}} \quad (1.9)$$

onde \hat{P}_n é o projetor sobre o espaço formado pelos autoestados de \hat{A} associados ao autovalor a_n .

Postulado 6: O espaço de estados de um sistema físico composto é o produto tensorial⁴ 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:

³Podemos definir o hermitiano conjugado de um operador A da seguinte forma: Se $A|f\rangle = |g\rangle$, $\langle g|h\rangle = \langle f|A^\dagger|h\rangle$, e A^\dagger é chamado hermitiano conjugado de A .

⁴O 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 $m \times n$.

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

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. Conforme veremos adiante, esta novidade está diretamente relacionada com a caracterização do emaranhamento, uma propriedade física puramente quântica do sistema composto.

1.2 Operador densidade

Na mecânica quântica, dado um certo Hamiltoniano com autovalores e autoestados definidos, podemos descrever qualquer estado puro como uma superposição de autoestados dado pela equação (1.5). Assim, toda a informação sobre o estado está reunida no vetor $|\Psi\rangle$ e os coeficientes c_k são interpretados como amplitudes de probabilidade. Porém, na maioria dos casos de interesse, lidamos com a 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* onde tem uma probabilidade estatística relacionada à ocupação de um determinado estado. Consequentemente, não é possível escrever uma mistura estatística na forma de um vetor de estado e nestes casos é conveniente utilizarmos uma descrição alternativa baseada no *operador matriz densidade*.

A representação de um sistema por uma matriz 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,

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle \langle\psi(t)|. \quad (1.10)$$

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

$$\hat{\rho}(t) = \sum_k p_k \hat{\rho}_k(t) = \sum_k p_k |\psi_k(t)\rangle \langle\psi_k(t)|, \quad (1.11)$$

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.

1.2.1 Propriedades gerais do operador densidade

Conforme vimos, um sistema pode ser representado por uma matriz densidade (equação 1.11), com as probabilidades p_k satisfazendo as seguintes condições:

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 \leq p_1, p_2, \dots, p_k, \dots \leq 1; \\ \sum_k p_k = 1. \end{array} \right. \quad (1.12)$$

Seja uma base ortonormal definida pelos estados $|\psi_k\rangle$. O operador densidade é representado como uma matriz definida como:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{kk'} \langle \psi_k | \hat{\rho} | \psi_{k'} \rangle |\psi_k\rangle \langle \psi_{k'}| = \sum_{kk'} \rho_{kk'}(t) |\psi_k\rangle \langle \psi_{k'}|, \quad (1.13)$$

onde $\rho_{kk'}(t) = \langle \psi_k | \hat{\rho} | \psi_{k'} \rangle$ representam seus elementos de matriz.

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:

$$\hat{\rho}^\dagger = \left(\sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \right)^\dagger = \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k| = \hat{\rho}. \quad (1.14)$$

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

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle &= \langle \psi | \left(\sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \right) | \psi \rangle \\ &= \sum_i p_k \langle \psi | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \psi \rangle \\ &= \sum_k p_k |\langle \psi | \psi_k \rangle|^2 \geq 0. \end{aligned} \quad (1.15)$$

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

$$\sum_k |c_k(t)|^2 = \sum_k \rho_{kk}(t) = 1. \quad (1.16)$$

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:

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)], \quad (1.17)$$

onde $[\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)]$ é o comutador⁵ 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:

$$\hat{\rho}^2(t) = \hat{\rho}(t). \quad (1.18)$$

6. 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,

$$\text{tr}(\hat{\rho}^2) \leq 1. \quad (1.19)$$

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.

7. Os elementos de matriz do operador densidade tem 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*.

⁵Definimos 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.

1.2.2 Descrição de sistemas compostos usando operador densidade

No postulado 6 (subseção 1.1.2), vimos que é possível descrever um sistema composto em função dos vetores de estados de cada um dos subsistemas. 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. De acordo com o postulado 6, o espaço de estados de tal sistema é:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B, \quad (1.20)$$

onde \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_B são os espaços de estados de cada um dos subsistemas. Poderemos descrever tanto os estados dos subsistemas como o estado do sistema bipartite, pelos operadores densidade $\hat{\rho}_A$, $\hat{\rho}_B$ e $\hat{\rho}_{AB}$, respectivamente.

Quando não há correlações, tanto o subsistema A quanto o subsistema B podem ser descritos de forma independente,

$$\hat{\rho}_{A(B)} = |\psi_{A(B)}\rangle\langle\psi_{A(B)}|.$$

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 $\hat{\rho}_{AB}$,

$$\hat{\rho}_{A(B)} = Tr_B(\hat{\rho}_{AB}), \quad (1.21)$$

estes são chamados operadores densidade reduzidos e, em alguns casos essas matrizes reduzidas podem ser utilizadas em medidas de emaranhamento.

1.3 Emaranhamento

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

quânticos interagem⁶, o estado final de um deles pode depender do estado final dos outros. É desta idéia 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. Porém 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, o emaranhamento passa a desenvolver um papel fundamental no processamento quântico de informação. Nesta seção, faremos uma breve introdução ao estudo dos estados quânticos emaranhados.

1.3.1 Emaranhamento de estados puros

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

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

$$|\psi\rangle = \otimes_{i=1}^n |\psi_i\rangle, \quad (1.22)$$

onde $|\psi_i\rangle \in \mathcal{H}_i$.

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:

$$|\phi\rangle = \frac{1}{2} [(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)], \quad (1.23)$$

e o estado 2 por:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle). \quad (1.24)$$

⁶Mesmo 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.

O estado descrito pela equação (1.23), é um exemplo de estado não emaranhado, pois pode ser escrito como produto de 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:

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

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.

1.3.2 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:*

$$\hat{\rho} = \sum_{j=0}^k p_j \otimes_{i=1}^n \hat{\rho}_j^i = \sum_{j=0}^k p_j \left(\hat{\rho}_j^1 \otimes \hat{\rho}_j^2 \otimes \dots \otimes \hat{\rho}_j^n \right), \quad (1.25)$$

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.

1.3.3 Critérios de separabilidade e quantificação de emaranhamento

Determinar se um estado quântico geral possui emaranhamento não é uma tarefa fácil, por essa razão fez-se necessário o desenvolvimento de alguns critérios para esse fim. Ainda não existe um critério geral para sabermos se um sistema está ou não emaranhado, o que temos são métodos que geralmente se aplicam a casos específicos. No caso de sistemas bipartites, as primeiras tentativas de estabelecer se existe ou não emaranhamento em estados puros foi a *decomposição de Schmidt* (NIELSEN; CHUANG, 2000), e o *critério de transposição parcial positiva*, também conhecido como *critério de Peres-Horodecki* (HORODECKI, 2009). Em sistemas compostos por mais de duas partes, um dos métodos utilizados são as chamadas *testemunhas de emaranhamento* que, por definição, são operadores hermitianos os quais podem ser, em casos particulares, um observável físico. Devido a isso as testemunhas se tornam interessantes já que é possível a implementação de experimentos que medem de forma indireta o emaranhamento de sistemas (BOURENNANE, 2004).

Sendo um recurso físico útil em várias tarefas computacionais, torna-se importante não só determinar se um estado quântico está ou não emaranhado mas também quantificar o grau de emaranhamento que há nesse estado. Nos últimos anos diversas propostas foram feitas nesse sentido, sendo essa uma tarefa extremamente não trivial. Mesmo para o caso mais simples possível, o caso de dois *qubits* acoplados, há uma vasta gama de

quantificadores propostos⁷. Para este tipo de sistemas, uma contribuição importante em termos de apresentar um método prático de quantificar o emaranhamento foi proposta por Hill e Wootters em 1997, o Emaranhamento de Formação (EoF) que é uma medida eficiente tanto para sistemas bipartites puros quanto para mistos (HILL, S.; WOOTTERS, W.K., 1997). Essa medida de emaranhamento é um dos poucos quantificadores a possuir uma interpretação física, pois como o nome sugere o Emaranhamento de Formação se destina a quantificar os recursos necessários para criar um determinado estado emaranhado. Medidas de emaranhamento para sistemas de muitas partículas ainda é um problema em aberto na literatura. Para nosso caso, onde lidamos com um sistema de dois *qubits* eletrônicos, utilizamos como medida o Emaranhamento de Formação.

1.3.4 Emaranhamento de Formação e Concorrência

O Emaranhamento de Formação é definido da seguinte forma: Dada uma matriz densidade de um sistema quântico composto pelos subsistemas A e B, considere todos os estados puros nos quais é possível decompô-la, ou seja, todos os conjuntos de estados $|\psi_i\rangle$ com probabilidade p_i , tal que

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|, \quad (1.26)$$

Para cada estado puro, o emaranhamento $E(\psi)$ é definido como a entropia de um dos dois subsistemas A e B

$$E(\psi) = -\text{Tr}(\hat{\rho}_A \log_2 \hat{\rho}_A) = -\text{Tr}(\hat{\rho}_B \log_2 \hat{\rho}_B) \quad (1.27)$$

Onde $\hat{\rho}_{A(B)}$ é o traço da matriz $|\psi\rangle \langle \psi|$ sobre o subsistema B(A). O emaranhamento de formação de um estado misto $\hat{\rho}$, é definido como o emaranhamento médio dos estados puros, minimizado sobre todas as possíveis decomposições de $\hat{\rho}$

$$EoF(\hat{\rho}) = \min \sum p_i E(\psi). \quad (1.28)$$

Quando o EoF é zero podemos dizer que o estado é separável. No entanto, caímos aqui em um problema de minimização que nem sempre é fácil de se resolver. Afim de facilitar o cálculo do EoF, Wootters fez uma generalização de seu método introduzindo outra medida

⁷Uma boa revisão sobre *critérios de separabilidade e quantificadores de emaranhamento* pode ser feita no artigo de HORODECKI *et al.*, 2009.

denominada *concorrência* (do inglês, *concurrence*), que pode ser utilizada afim de facilitar o cálculo do emaranhamento de formação (WOOTTERS, W.K., 1998), além de ser por si só um bom quantificador de emaranhamento para estados puros e mistos em sistemas de dois *qubits*. Embora o método introduzido por Wootters torne menos trabalhoso o cálculo do EoF ele só é válido para sistemas de dois *qubits*.

Defini-se a concorrência de um estado ρ como

$$C(\rho) = \max \{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\}, \quad (1.29)$$

sendo λ_i as raízes quadradas dos autovalores, em ordem decrescente, da matriz não hermitiana $R = \rho\tilde{\rho}$. Onde $\tilde{\rho}$ é obtida através do *spin-flip* do complexo conjugado da matriz densidade, $\tilde{\rho} = (\sigma_y^A \otimes \sigma_y^B)\rho^*(\sigma_y^A \otimes \sigma_y^B)$. 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.

Podemos relacionar o emaranhamento de formação com a concorrência através da seguinte expressão

$$\text{EoF}(\rho) = f\{C(\rho)\}, \quad (1.30)$$

onde $f(C(\rho))$ é dada por

$$f(C) = - \left(\frac{1+\sqrt{1-C^2}}{2} \right) \log_2 \left(\frac{1+\sqrt{1-C^2}}{2} \right) - \left(1 - \frac{1+\sqrt{1-C^2}}{2} \right) \log_2 \left(1 - \frac{1+\sqrt{1-C^2}}{2} \right).$$

Com o uso desse método é possível, em alguns casos, obter soluções analíticas para o emaranhamento de formação (WOOTTERS, W.K., 1998). Além de fornecer um método operacional de quantificação de emaranhamento para estados de dois *qubits*, a concorrência também tem se mostrado útil em medidas de emaranhamento em sistemas multipartites (COFFMAN, 1999).

Capítulo 2

Moléculas Quânticas acopladas

Neste capítulo apresentamos, 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, onde cada molécula é constituída por dois pontos quânticos acoplados por tunelamento.

2.1 Heteroestruturas Semicondutoras

Após a demonstração do efeito transistor por J. Bardeen e W. Brattain em 1947, os materiais semicondutores têm sido os 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, L.; TSU, R., 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 L. L.; ESAKY L.; TSU, R., 1974), Esaky e Chang mediram propriedades de transporte (ESAKY, L.; CHANG, L. L., 1974) e Dingle, Wiegman e Henry observaram a quantização no espectro de energia em poços quânticos (DINGLE, R.; WIEGMAN, W.; HENRY, C. H., 1974).

Os métodos de crescimento até então disponíveis possibilitavam o crescimento de cristais de alta qualidade. No entanto, havia necessidade de uma melhora nas técnicas de cresci-

mento 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, M. A.; SITTER, H., 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, R. J., 2002).

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, C., 1978).

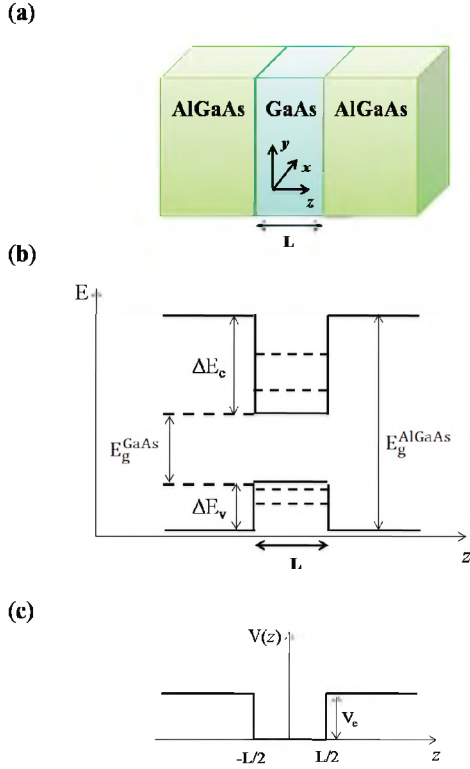


Figura 2.1: (a) Representação esquemática de uma heteroestrutura AlGaAs/GaAs crescida na direção z , sendo L a espessura da camada intermediária. (b) Representação do perfil de potencial dos poços quânticos, onde ΔE_c e ΔE_v são respectivamente a diferença de energia das bandas de condução e de valência 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 .

A redução de dimensionalidade que ocorre nas heteroestruturas semicondutoras, pode ser tratada utilizando um problema bastante conhecido dentro da Mecânica Quântica: o poço quântico quadrado unidimensional. A figura 2.1(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 2.1(b)). A presença da heteroestrutura gera na banda de condução² um poço de potencial na direção z conforme mostrado na figura 2.1(c). A equação de Schrödinger, na aproximação de massa efetiva³, para um elétron de massa m^* neste caso pode ser aproximada por

$$-\frac{\hbar}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi + V(z)\Psi = E\Psi \quad (2.1)$$

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

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, C., 1978).

equações para cada direção:

$$-\frac{\hbar}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_x(x) = E_x \psi_x(x) \quad (2.2)$$

$$-\frac{\hbar}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \psi_y(y) = E_y \psi_y(y) \quad (2.3)$$

$$-\frac{\hbar}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi_z(z) + V(z) \psi_z(z) = E_z \psi_z(z) \quad (2.4)$$

A solução das equações (2.2) e (2.3) 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

$$\psi_z(z) = \begin{cases} Ae^{kz}, & z \leq -L/2; \\ B \cos(k_z z), & -L/2 \leq z \leq L/2; \\ Ae^{-kz}, & L/2 \leq z, \end{cases} \quad (2.5)$$

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 em sistemas bidimensionais (poços quânticos) é dada por

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) + E_z^{(n)}, \quad (2.6)$$

com $n = 1, 2, 3, \dots$, onde o espectro de energia é quantizado somente na direção onde há confinamento. Já em um sistema unidimensional, como no caso dos fios quânticos, onde

os portadores estão livres apenas na direção x , temos

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} k_x^2 + E_y^{(m)} + E_z^{(n)}, \quad (2.7)$$

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

$$E = E_x^{(l)} + E_y^{(m)} + E_z^{(n)}, \quad (2.8)$$

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

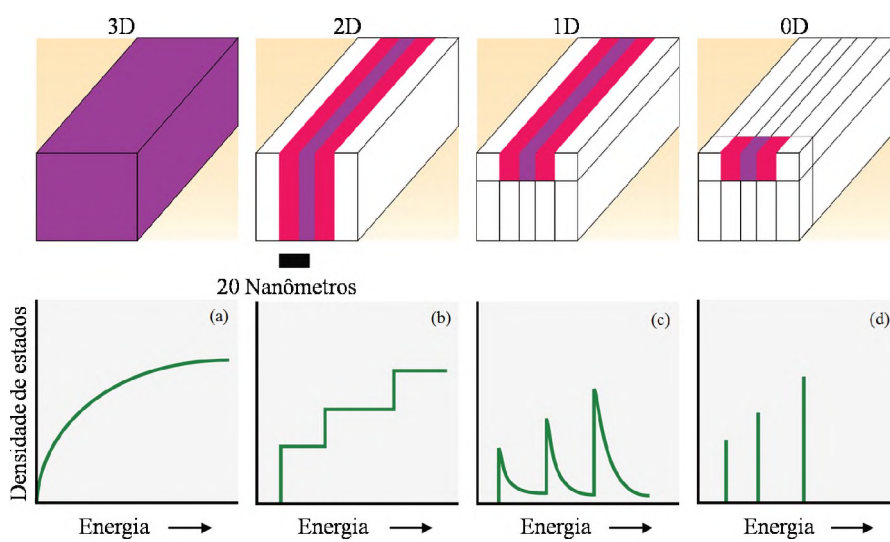


Figura 2.2:

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, E. and ZORPETTE, G., 1998).

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

$$\rho(E) = \frac{2}{V} \frac{dN}{dE} \quad (2.9)$$

O fator 2 leva em conta o fato de que dois elétrons de spin oposto podem ocupar cada estado de energia e V é o volume do cristal. Para um sistema tridimensional (semicondutor *bulk*) a densidade de estados é proporcional à raiz quadrada da energia

$$\rho^{3D}(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - \varepsilon_i}, \quad (2.10)$$

onde ε_i são as energias discretas dos níveis. Para um sistema bidimensional (poços quânti-

cos) é uma função degrau

$$\rho^{2D}(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \sigma(E - \varepsilon_i); \quad (2.11)$$

para um sistema unidimensional (fios quânticos) temos

$$\rho^{1D}(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar} \sqrt{m^*} 2(E - \varepsilon_i); \quad (2.12)$$

e para sistemas zero-dimensionais (pontos quânticos) tem a forma

$$\rho^{0D}(E) = 2\delta(E - \varepsilon_i). \quad (2.13)$$

A figura 2.2 mostra os efeitos da redução da dimensionalidade sobre a densidade de estados, de acordo com a equação 2.10 a densidade de estados de semicondutores tipo *bulk* é uma função contínua como mostra a figura 2.2(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 2.11) o que podemos ver na figura 2.2(b). No caso dos fios quânticos (1D), vemos na figura 2.2(c) que a densidade de estados é caracterizada por singularidades (VAN HOVE, L., 1953). Já a densidade de estados dos pontos quânticos é simplesmente dada por uma série de funções delta (figura 2.2(d)) e, como nos átomos, depende apenas do número de níveis confinados, sendo por isso muitas vezes chamados de *átomos artificiais* (KASTNER, M., 1993).

2.2 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, P., 2003). Os diferentes tipos de pontos quânticos e suas diferentes propriedades são definidos por seus processos de formação. A auto-organização é o modo 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*). Esta técnica tem boa reprodutibilidade 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.

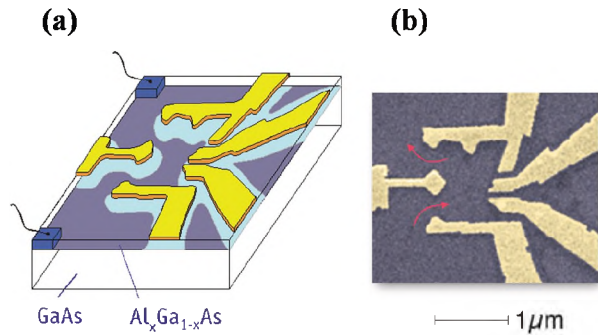


Figura 2.3: (a) Junção de amostras GaAs/AlGaAs na formação de um gás de elétrons bidimensional; (b) Figura esquemática de um ponto quântico; (c) Imagem de um ponto quântico feita por microscopia eletrônica.

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 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 2.3 (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, S. M. and MANNEINEN, M., 2002). Transporte eletrônico, efeitos de bloqueio de Coulomb e regime Kondo também têm sido investigados nestes sistemas (CRONENWETT, S. M. *et al.*, 1998; GOLDHABER-GORDON, D. *et al.*, 1998).

2.2.1 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 idéia 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*⁴ (LOSS, D.; DiVincenzo, 1998). Existem também propostas de pontos quânticos nos quais o grau de liberdade da carga eletrônica é explorada para definir o *qubit* (BARENCO, A. et al, 1995; BRUM, J. A., HAWRYLAK, P., 1997; ZANARDI, P., ROSSI, F., 1998).

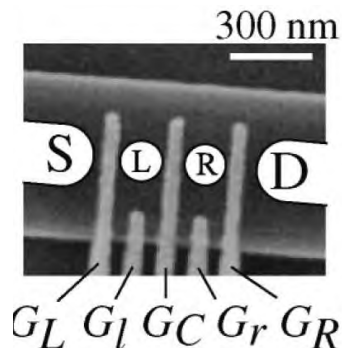


Figura 2.4: Imagem, feita através de microscopia eletrônica, da amostra utilizada por Hayashi *et al.* Os eletrodos G_L , G_l , G_C , G_r e G_R são tensionados negativamente, afim de definir os dois pontos quânticos (L e R, do inglês *left* e *right*) entre a fonte (S, do inglês *Source*) e o dreno (D, do inglês *Drain*).

Em 2003, Hayashi e seus colaboradores demonstraram que é possível manipular coherentemente um *qubit* de carga em um sistema constituído por dois pontos quânticos acoplados por tunelamento (HAYASHI, T., *et al.*, 2003). Neste trabalho, os pontos foram definidos por portas metálicas no gás de elétrons bidimensional em uma heteroestrutura de GaAs/AlGaAs, conforme mostrado na figura 2.4. Assim como pontos quânticos isolados são considerados como átomos artificiais, dois pontos quânticos acoplados podem ser considerados uma molécula artificial.

O ponto da esquerda (direita) é fracamente acoplado à fonte (dreno) por meio de uma barreira de tunelamento. A condutância através do dispositivo é fortemente influenciada pela interação coulombiana (VAN DER WIEL, W. G., *et al.*, 2003). No regime de acoplamento fraco entre a fonte e o dreno, uma corrente finita é observada apenas nas três regiões onde os processos de tunelamento através das três barreiras de tunelamento são permitidos. Sobre condições apropriadas onde há apenas tunelamento entre os pontos, interações de Coulomb isolam de maneira eficaz a molécula da fonte e do dreno, efeito que é conhecido

⁴Um 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: $c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$

na literatura como bloqueio de Coulomb (LIVERMORE, C. *et al.*, 1996). 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

$$H = \frac{1}{2}\varepsilon(t)\sigma_z + \frac{1}{2}\Delta\sigma_x, \quad (2.14)$$

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

Em um importante experimento recente, Shinkai *et al.* construíram um dispositivo, onde duas moléculas quânticas estão acopladas eletrostaticamente mas isoladas por condução, cada uma contendo um *qubit* de carga (SHINKAI, *et al.*, 2009). Nesse sistema a corrente de tunelamento ressonante através de cada molécula é influenciada pelo estado de carga da segunda molécula (SHINKAI, *et al.*, 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. Em nosso trabalho estamos interessados em estudar as propriedades de emaranhamento desse sistema.

Na figura 2.5, 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 estados de carga, as moléculas são ajustadas em um regime de acoplamento fraco.

A base computacional das moléculas acopladas pode ser definida por:

$$\{|L, L\rangle, |L, R\rangle, |R, L\rangle, |R, R\rangle\}, \quad (2.15)$$

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 *et al.*, 2009):

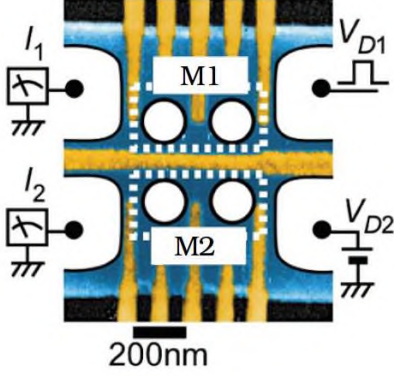


Figura 2.5: Imagem feita através de microscopia eletrônica do dispositivo utilizado por Shinkai *et al.*. Os círculos representam os pontos quânticos nas moléculas **M1** e **M2**. Todas as medidas foram realizadas à temperatura $T = 100\text{mK}$ e a um campo magnético de 0.6T . As dessintonias nas 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 *et al.*, 2009).

$$\hat{H}_{2M} = \frac{1}{2} \sum_i \left(\varepsilon_i \sigma_z^{(i)} + \Delta_i \sigma_x^{(i)} \right) + \frac{J}{4} \sigma_z^{(1)} \otimes \sigma_z^{(2)} \quad (2.16)$$

onde ε_i e a dessintonia entre os níveis eletrônicos dos pontos, Δ_i representa o tunelamento dentro de cada uma das moléculas $M(i = 1, 2)$ e J está associado à interação de Coulomb entre os elétrons. Utilizando o seguinte ordenamento de base $\{|LL\rangle, |LR\rangle, |RL\rangle, |RR\rangle\}$ podemos escrever o Hamiltoniano na forma matricial:

$$\hat{H}_{2M} = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon_s}{2} + \frac{J}{4} & \frac{\Delta_2}{2} & \frac{\Delta_1}{2} & 0 \\ \frac{\Delta_2}{2} & \frac{\varepsilon_d}{2} - \frac{J}{4} & 0 & \frac{\Delta_1}{2} \\ \frac{\Delta_1}{2} & 0 & -\frac{\varepsilon_d}{2} - \frac{J}{4} & \frac{\Delta_2}{2} \\ 0 & \frac{\Delta_1}{2} & \frac{\Delta_2}{2} & -\frac{\varepsilon_s}{2} + \frac{J}{4} \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

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

No capítulo 3, apresentaremos os nossos resultados do estudo das propriedades do emaranhamento nesse sistema, como função dos parâmetros do Hamiltoniano 2.16. Primeiro analisamos o espectro de energia do sistema, afim de determinar para quais valores de dessintonia e tunelamento é possível obter superposições de estados. Considerando o caso onde o sistema é puro, determinamos primeiramente o grau de correlação dos autoestados do sistema, obtidos através da diagonalização exata do Hamiltoniano, utilizando a concorrência, equação (1.29), como medida de emaranhamento. Em seguida, analisamos a dinâmica do emaranhamento considerando como estado inicial o $|RL\rangle$. Desta forma, conseguimos determinar condições para obtenção de estados emaranhados.

Capítulo 3

Emaranhamento em moléculas quânticas acopladas

Neste capítulo apresentamos nossos resultados referentes a análise do emaranhamento no sistema composto por duas moléculas quânticas acopladas. Na seção 3.1, analisamos o do espectro de energia do sistema como função das dessintonias nas moléculas e para diferentes taxas de tunelamento e verificamos o comportamento do emaranhamento dos autoestados do sistema obtidos através da diagonalização do Hamiltoniano (2.16). Na seção 3.2, analisamos a dinâmica do emaranhamento em função dos parâmetros de tunelamento, Δ_1 e Δ_2 , e do acoplamento de Coulomb entre as moléculas, J , considerando o caso ressonante onde as dessintonias nas moléculas 1 e 2 são nulas.

3.1 Espectro, autoestados e emaranhamento

Na discussão do comportamento do emaranhamento dos autoestados do sistema obtidos através da diagonalização exata do Hamiltoniano (2.16), utilizamos a concorrência, equação (1.29), para quantificar o emaranhamento. A seguir usaremos $|0\rangle$ para o estado fundamental do espectro e $|i\rangle$ para o i -ésimo estado excitado.

Ao considerar que não há tunelamento entre os pontos, ou seja $\Delta_1 = \Delta_2 = 0$, o Hamiltoniano (2.16) é diagonal

$$\hat{H}_{2M} = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon_s}{2} + \frac{J}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\varepsilon_d}{2} - \frac{J}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\varepsilon_d}{2} - \frac{J}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\varepsilon_s}{2} + \frac{J}{4} \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

de modo que os autovalores do sistema são os elementos da diagonal, cujos autoestados são os elementos da base computacional e não são emaranhados. Se os valores de ε_1 e ε_2 são nulos, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$, obtemos um Hamiltoniano diagonal cujas autoenergias são dadas por $-J/4$ e $J/4$. Desta forma, temos um espectro degenerado onde os autoestados com mais baixa energia correspondem a $|LR\rangle$ e $|RL\rangle$, e aqueles com energia $J/4$ correspondem aos estados $|LL\rangle$ e $|RR\rangle$.

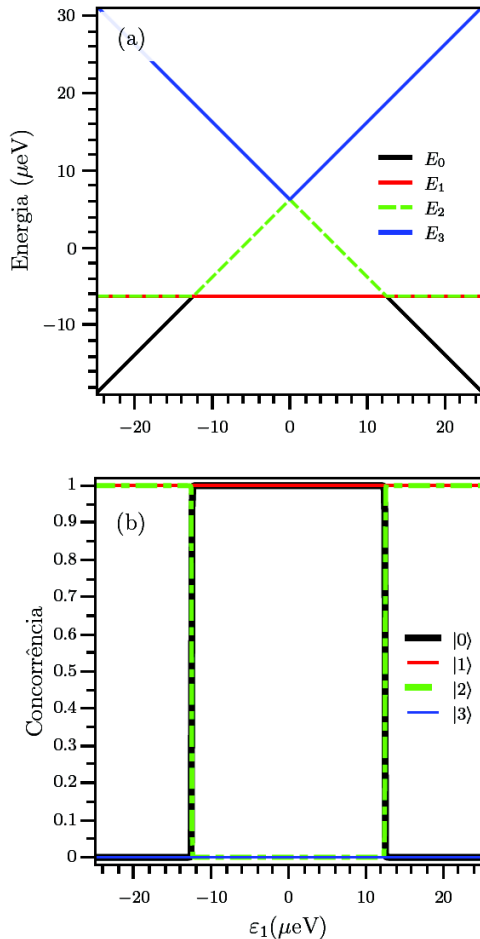


Figura 3.1: (a) Espectro de energia do sistema como função de ε_1 ; (b) concorrência dos autoestados de H como função de ε_1 . Considerando $\Delta_1 = \Delta_2 = 10^{-2}\mu\text{eV}$, $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$ e $J = 25\mu\text{eV}$.

Considerando a condição em que as dessintonias nas moléculas 1 e 2 são iguais, $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$, e que o tunelamento nas moléculas é fraco, $\Delta_1 = \Delta_2 = 10^{-2}\mu\text{eV}$ com um acoplamento de

	Estado Fundamental $ 0\rangle$	1º Estado excitado $ 1\rangle$	2º Estado excitado $ 2\rangle$	3º Estado excitado $ 3\rangle$
$-J \leq \varepsilon_1 < -\frac{J}{2}$	$ LL\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(LR\rangle - RL\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(LR\rangle - RL\rangle)$	$ RR\rangle$
$-\frac{J}{2} \leq \varepsilon_1 < 0$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(- LR\rangle + RL\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(LR\rangle - RL\rangle)$	$ LL\rangle$	$ RR\rangle$
$0 \leq \varepsilon_1 < \frac{J}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(- LR\rangle + RL\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(LR\rangle - RL\rangle)$	$ RR\rangle$	$ LL\rangle$
$\frac{J}{2} \leq \varepsilon_1 \leq J$	$ RR\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(LR\rangle - RL\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(LR\rangle + RL\rangle)$	$ LL\rangle$

Tabela 3.1: Autoestados do Hamiltoniano (2.16). Parâmetros utilizados: $\Delta_1 = \Delta_2 = 10^{-16}\mu\text{eV}$, $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$ e $J = 25\mu\text{eV}$.

Coulomb entre as moléculas de $J = 25\mu\text{eV}$, apresentamos na figura 3.1 os gráficos para o espectro de energia do sistema e para a concorrência dos autoestados de H como função de ε_1 . Podemos observar no gráfico do espectro, figura 3.1 (a), que o estado fundamental possui degenerescência com o primeiro estado excitado no intervalo de $-J/2 < \varepsilon_1 < J/2$, e além de apresentar degenerescência como o estado fundamental, a energia do primeiro estado excitado é degenerada com a do segundo estado excitado nas regiões em que $\varepsilon_1 < -J/2$ e $\varepsilon_2 > J/2$. Analisando o gráfico da concorrência dos autoestados de H, figura 3.1 (b), verificamos que o estado $|1\rangle$ tem emaranhamento máximo para qualquer escolha de dessintonia, em contraste com o estado $|3\rangle$, que é sempre um estado separável. Os estados $|0\rangle$ e $|2\rangle$ tem um comportamento diferente: o estado fundamental tem emaranhamento máximo no intervalo $-J/2 \leq \varepsilon_1 \leq J/2$ sendo puro para outros valores de ε_1 enquanto $|2\rangle$ tem o comportamento inverso. Neste ponto da análise, é interessante contrastar os nossos resultados do grau de emaranhamento com a forma do espectro de energia e seus autovetores. Analisando os autovetores do Hamiltoniano, tabela 3.1, podemos determinar sobre quais estados da base computacional há emaranhamento e em quais intervalos de ε_1 . Observamos que o estado $|3\rangle$ na região $-J \leq \varepsilon_1 < 0$ corresponde ao estado $|RR\rangle$ e para $\varepsilon_1 \geq 0$ é dado pelo autoestado $|LL\rangle$. O estado fundamental para valores de $\varepsilon_1 < -J/2$ é, na base computacional, o estado $|RR\rangle$ e para $\varepsilon_1 \geq J/2$ o estado $|LL\rangle$. O estado $|2\rangle$ na região $-\frac{J}{2} \leq \varepsilon_1 < 0$ é dado por $|LL\rangle$ e no intervalo $0 \leq \varepsilon_1 < \frac{J}{2}$ é o autoestado $|RR\rangle$. No estado $|1\rangle$ e nas regiões dos estados $|0\rangle$ e $|2\rangle$ onde há um estado maximamente emaranhado, ou estado de Bell, formado pela superposição dos estados $|LR\rangle$ e $|RL\rangle$.

Na figura 3.2, podemos verificar o que ocorre com o espectro de energia e o emaranhamento dos autoestados quando passamos a ter um tunelamento considerável nas moléculas, $\Delta_1 = \Delta_2 = J/16$, mantendo a condição $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$ e $J = 25\mu\text{eV}$. Através da análise do espectro de energia, figura 3.2 (a), podemos ver que o primeiro e terceiro estados excitados

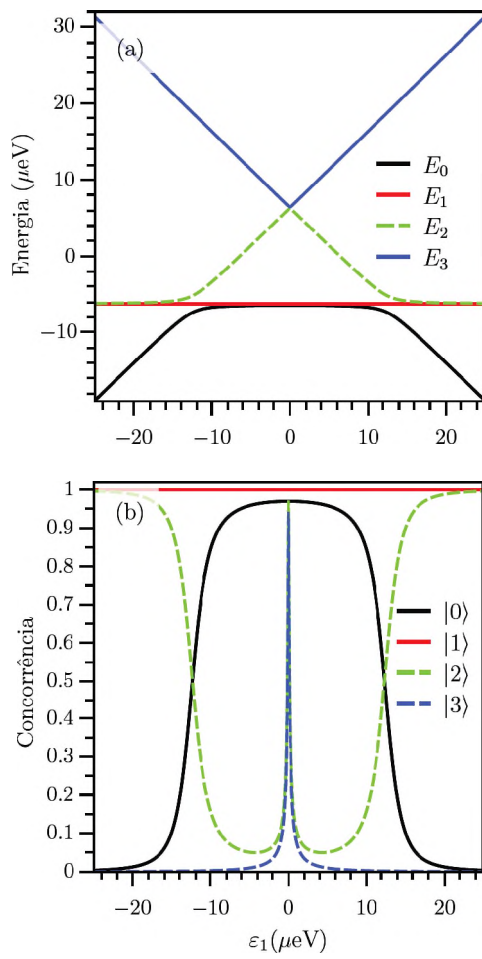


Figura 3.2: (a) Espectro de energia do sistema como função de ε_1 ; (b) concorrência dos autoestados de H como função de ε_1 . Parâmetros utilizados: $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$, $\Delta_1 = \Delta_2 = J/16$ e $J = 25\mu\text{eV}$.

não sofrem alterações em suas energias, enquanto que o anti-cruzamento de energia entre o estado fundamental e o segundo estado excitado cresce com o aumento de Δ_i . Ambas energias, E_0 e E_2 , apresentam degenerescência com a energia do primeiro estado excitado, sendo que no estado fundamental essa degenerescência ocorre no intervalo $-10\mu\text{eV} < \varepsilon_1 < 10\mu\text{eV}$ e no segundo estado excitado ocorre nos intervalos $\varepsilon_1 < -15\mu\text{eV}$ e $\varepsilon_1 > 15\mu\text{eV}$. Essas degenerescências são quebradas a medida que aumentamos as taxas de tunelamento nas moléculas. Uma relação entre os anti-cruzamentos de energia e o emaranhamento dos autoestados do sistema foi apontada na literatura em 2006 por Chu e Zhu (CHU, W. and ZHU, J., 2006).

No que diz respeito ao emaranhamento dos autoestados podemos através dos resultados da concorrência, na figura 3.2 (b), que o emaranhamento do estado $|1\rangle$ permanece inalterado, sendo sempre uma superposição do tipo $|1\rangle = \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{2}}(|LR\rangle - |RL\rangle)$, enquanto que em todos os outros autoestados o comportamento do emaranhamento muda com o aumento do tunelamento. O estado fundamental passa a apresentar algum grau de emaranhamento fora da região $-J/2 < \varepsilon_1 < J/2$, e nestes pontos apresenta um emaranhamento da ordem de $C = 0.5$, sendo em $\varepsilon_1 = -J/2$ uma superposição da forma $|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}(|LR\rangle + |RL\rangle) - \frac{1}{\sqrt{2}}|LL\rangle$, e em $\varepsilon_1 = J/2$ uma combinação linear dada por $|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}(|LR\rangle + |RL\rangle) - \frac{1}{\sqrt{2}}|RR\rangle$, no intervalo $-10\mu\text{eV} < \varepsilon_1 < 10\mu\text{eV}$, os estados $|LR\rangle$ e $|RL\rangle$ são dominantes. Ao compararmos os gráficos da concorrência das figuras 3.1 (b) e 3.2 (b), vemos que as mudanças mais notáveis no comportamento do emaranhamento ocorrem para o segundo e terceiro estados excitados: no caso do estado $|2\rangle$ vemos que no intervalo $-J/2 < \varepsilon_1 < J/2$, onde anteriormente não era possível obter nenhum grau de emaranhamento, passa a ser sempre um estado não separável e, no ponto $\varepsilon_1 = 0$, apresenta um elevado grau de emaranhamento, $C \approx 0.95$, onde predominam os estados $|LL\rangle$ e $|RR\rangle$. Nos intervalos $\varepsilon_1 < -15\mu\text{eV}$ e $\varepsilon_1 > 15\mu\text{eV}$, os estados dominantes continuam sendo $|LR\rangle$ e $|RL\rangle$. Fora destas regiões as superposições ocorrem entre os quatro estados da base computacional. No estado $|3\rangle$, que no caso de $\Delta_i = 10^{-2}$ não apresentava nenhum grau de emaranhamento, observamos um pico na concorrência onde o valor máximo ocorre em $\varepsilon_1 = 0$ e é dado por $C \approx 0.93$, neste caso a superposição ocorre entre os estados $|LL\rangle$ e $|RR\rangle$ sendo quase desprezível as contribuições dos outros dois estados da base.

Afim de verificar o que ocorre com o emaranhamento no sistema fora da condição $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$, apresentamos o na figura 3.3 os resultados da concorrência como função destes dois parâmetros, considerando $\Delta_1 = \Delta_2 = J/16$ e $J = 25\mu\text{eV}$. Vemos, que é possível obter algum grau de emaranhamento fora da condição $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$, o que não é observado para

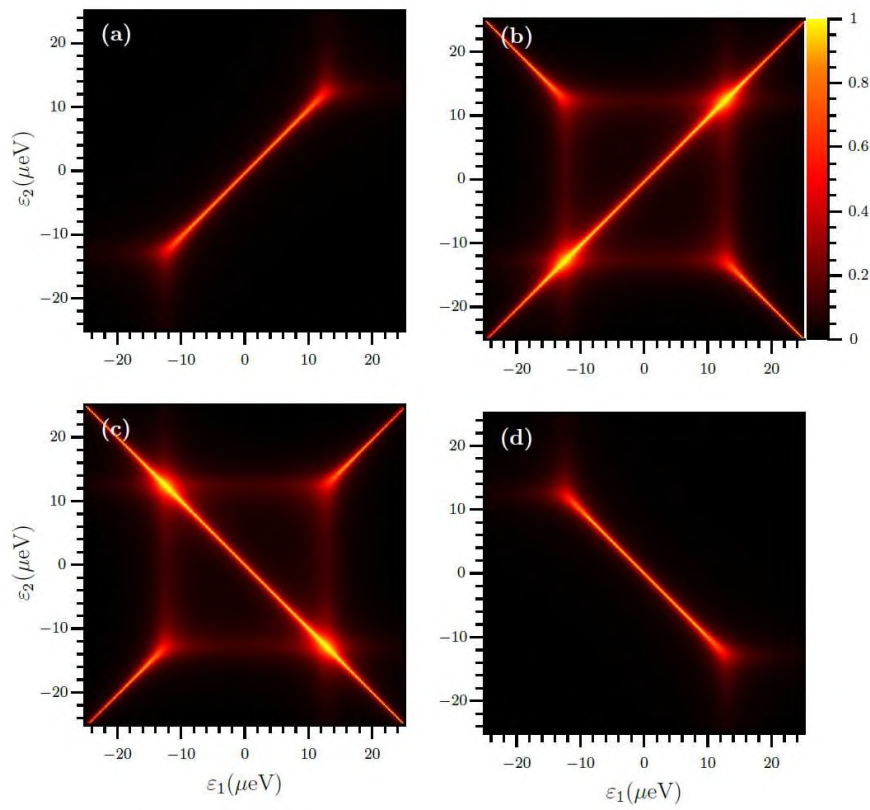


Figura 3.3: Concorrência dos autoestados de H como função de ε_1 e ε_2 . Parâmetros utilizados: $\Delta_1 = \Delta_2 = J/16$ e $J = 25\mu\text{eV}$. (a) Concorrência do estado $|0\rangle$; (b) concorrência do estado $|1\rangle$; (c) concorrência do estado $|2\rangle$; (d) concorrência para o estado $|3\rangle$.

$\Delta_1 = \Delta_2 = 10^{-2}\mu\text{eV}$. O estado fundamental e o terceiro estado excitado, figuras 3.3 (a) e (d) respectivamente, apresentam emaranhamento quando ε_1 e ε_2 se encontram no intervalo entre $-9J/16$ e $9J/16$. No caso do estado $|0\rangle$, é possível obter estados emaranhados para valores de $\varepsilon_2 \simeq \varepsilon_1$, sendo uma superposição dos quatro estados da base em que predominam os estados $|LR\rangle$ e $|RL\rangle$. No estado $|3\rangle$, vemos que há emaranhamento próximo a $\varepsilon_2 \simeq -\varepsilon_1$, neste caso os estados predominantes são $|LL\rangle$ e $|RR\rangle$. O estado $|1\rangle$, assim como o estado $|0\rangle$, possui emaranhamento na região onde $\varepsilon_2 \simeq \varepsilon_1$, é na condição específica $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$, possui um alto grau de emaranhamento entre os estados $|LR\rangle$ e $|RL\rangle$. Vemos ainda que o grau de emaranhamento aumenta nas regiões próximas aos pontos $\varepsilon_2 = \varepsilon_1 = \pm J/2$. Na condição $\varepsilon_2 \simeq -\varepsilon_1$, o estado $|1\rangle$ também apresenta emaranhamento para valores de $\varepsilon_1 < -7J/16$ e para $\varepsilon_1 > 7J/16$, onde os estados mais populados são os estados $|LL\rangle$ e $|RR\rangle$. O segundo estado excitado possui um comportamento antissimétrico com relação ao estado $|1\rangle$ ¹. Assim como no estado $|1\rangle$, o estado $|2\rangle$ tem maior população dos estados $|LR\rangle$ e $|RL\rangle$ na condição $\varepsilon_2 \simeq \varepsilon_1$, e na região onde $\varepsilon_2 \simeq -\varepsilon_1$ os estados $|LL\rangle$ e $|RR\rangle$ são predominantes, sendo que em $\varepsilon_2 = -\varepsilon_1$ o estado é uma superposição somente destes dois estados.

A medida que aumentamos os valores do tunelamento, observamos que o intervalo de valores de ε_1 e ε_2 onde há um grau de emaranhamento aumentam. Isto pode ser visto na figura 3.4, onde o tunelamento nas moléculas 1 e 2 são dados por $\Delta_1 = \Delta_2 = J/4 = 7.25\mu\text{eV}$. Ao compararmos os gráficos (a) e (d) da figura 3.4 com a figura 3.3 (a) e (d), vemos que o grau de emaranhamento dos estados $|0\rangle$ e $|3\rangle$ na condição $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ decresce com o aumento de Δ_i , sendo que para valores de Δ_i maiores que $J/16$ não é mais possível obter emaranhamento máximo para estes estados. Fora desta condição, vemos que a região de emaranhamento é ampliada, porém com um grau de emaranhamento cada vez menor. Neste caso o valor máximo da concorrência é de aproximadamente 0.7 e, diferente do caso em que $\Delta_1 = \Delta_2 = J/16$, o estado é uma superposição dos quatro estados da base computacional. Considerando agora o primeiro e segundo estado excitado, comparamos os gráficos (b) e (c) das figuras 3.4 com a figura 3.3 (b) e (c), e observamos que, para $\Delta_1 = \Delta_2 = J/4$, as duas regiões de emaranhamento máximo, distintas no caso de $\Delta_1 = \Delta_2 = J/16$ começam a se sobrepor, de forma que o emaranhamento nos estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$ é maior e se intensifica a medida que aumentamos os valores de Δ_i . O estado $|1\rangle$, na condição $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ é ainda um estado de emaranhamento máximo entre $|LR\rangle$ e $|RL\rangle$;

¹Na condição $\varepsilon_2 \simeq \varepsilon_1$, o estado possui emaranhamento nas regiões de $\varepsilon_1 < -7J/16$ e $\varepsilon_1 > 7J/16$, e quando $\varepsilon_2 \simeq -\varepsilon_1$ o estado sempre apresenta emaranhamento, próximo aos pontos $\varepsilon_2 = -\varepsilon_1 = \pm J/2$ essas regiões de emaranhamento são ampliadas.

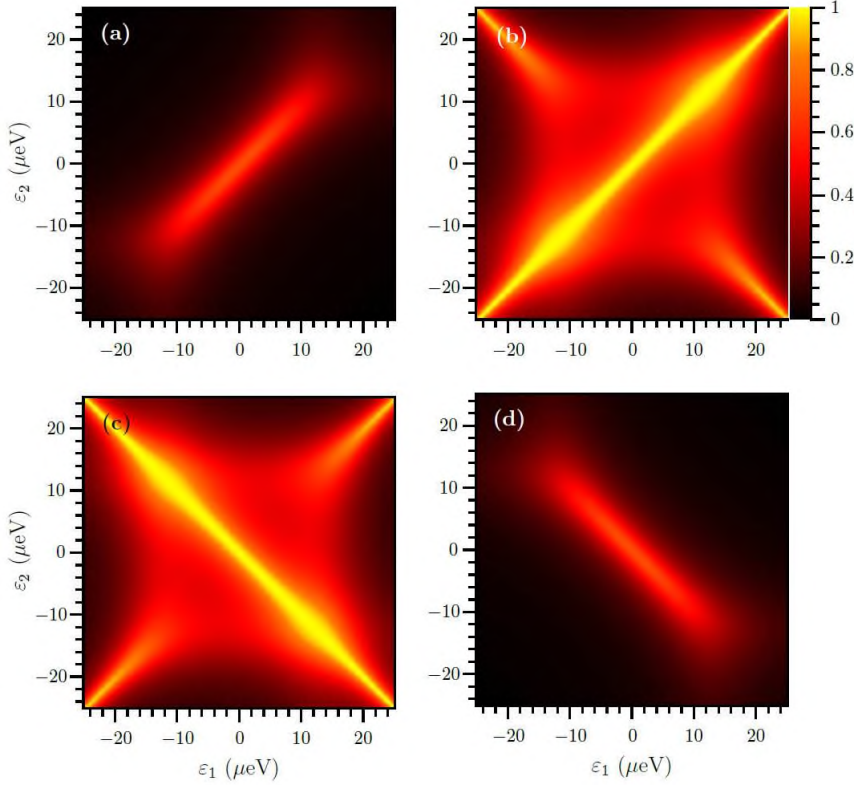


Figura 3.4: Concorrência dos autoestados de H como função de ε_1 e ε_2 . Parâmetros utilizados: $\Delta_1 = \Delta_2 = J/4$ e $J = 25\mu\text{eV}$. (a) Concorrência do estado $|0\rangle$; (b) concorrência do estado $|1\rangle$; (c) concorrência do estado $|2\rangle$; (d) concorrência para o estado $|3\rangle$.

e o estado $|2\rangle$, na condição $\varepsilon_1 = -\varepsilon_2$ tem emaranhamento máximo entre os estados $|LL\rangle$ e $|RR\rangle$. Fora destas condições, os estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$ são superposição dos quatro estados da base. A medida que Δ_i se aproxima de J , os estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$ apresentam um alto grau de emaranhamento, sendo os valores mínimos da concorrência da ordem de 0.7, e nas condições $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ e $\varepsilon_1 = -\varepsilon_2$ esses estados serão sempre estados de Bell.

Na figura 3.5, apresentamos nossos resultados para o espectro de energias e concorrência ao considerarmos diferentes taxas tunelamentos para as moléculas 1 e 2, $\Delta_1 = J/4$ e $\Delta_2 = J/8$, ainda considerando $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$ e $J = 25\mu\text{eV}$. No gráfico (a), observamos o comportamento do espectro de energia do sistema, onde vemos que para os parâmetros considerados não existe degenerescência entre as energias do sistema. O primeiro estado excitado não sofre grandes variações de energia se compararmos com os casos onde os tunelamentos nas moléculas são iguais, nas figuras 3.1 (a) e 3.2(a), e mudanças nesse comportamento só acontecem quando há uma maior diferença entre as taxas de tunelamento da molécula 1 e da molécula 2.

No gráfico (b) da figura 3.5 verificamos o comportamento da concorrência nos quatro autoestados do Hamiltoniano (2.16). O estado fundamental apresenta emaranhamento

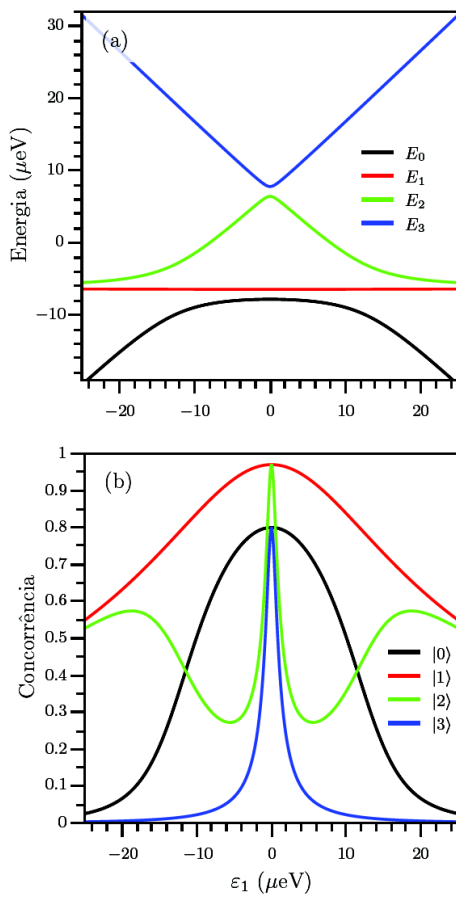


Figura 3.5: (a) Espectro de energia do sistema como função de ε_1 ; (b) concorrência dos autoestados de H como função de ε_1 . Parâmetros considerados: $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$, $\Delta_1 = J/4$, $\Delta_2 = J/8$ e $J = 25\mu\text{eV}$.

entre os estados $|LL\rangle$, $|LR\rangle$ e $|RL\rangle$ quando $\varepsilon_1 < 0$, e para $\varepsilon_1 > 0$ entre os estados $|LR\rangle$, $|RL\rangle$ e $|RR\rangle$. Se $\varepsilon_1 = 0$ o emaranhamento ocorre entre os quatro estados da base sendo os estados $|LR\rangle$ e $|RL\rangle$ os que possuem maior população. O primeiro estado excitado, que no caso de $\Delta_1 = \Delta_2$ é sempre um estado com máximo emaranhamento, apresenta agora uma queda no grau do emaranhamento, entretanto, o emaranhamento no estado $|1\rangle$ continua elevado tendo um valor mínimo de $C \approx 0.54$, é um valor máximo de $C = 0.97$. Os estados predominantes neste caso continuam sendo o $|LR\rangle$ e o $|RL\rangle$, sendo que para $\varepsilon_1 < 0$ a população do estado $|LR\rangle$ é maior e para $\varepsilon_1 > 0$ o estado mais populado é o $|RL\rangle$. No ponto $\varepsilon_1 = 0$ o estado é dado por $|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|LR\rangle - |RL\rangle)$. O segundo estado excitado apresenta sempre um grau de correlação, sendo uma superposição dos quatro estados da base como exceção do ponto $\varepsilon_1 = 0$, onde o grau do emaranhamento é de $C \approx 0.97$, e o autoestado é predominantemente dado por uma superposição dos estados $|LL\rangle$ e $|RR\rangle$. O estado $|3\rangle$ é o único que possui intervalos onde pode ser descrito como um estado separável: para $\varepsilon_1 < -15\mu\text{eV}$ o estado é dado por $|3\rangle = |RR\rangle$ e para $\varepsilon_1 > 15\mu\text{eV}$ por $|3\rangle = |LL\rangle$. Fora destes intervalos o estado passa a ser uma superposição da forma $|3\rangle = c_{LL}|LL\rangle + c_{LR}|LR\rangle + c_{RL}|RL\rangle + c_{RR}|RR\rangle$. O máximo de emaranhamento atingido pelo o terceiro estado excitado ocorre no ponto $\varepsilon_1 = 0$ e é de aproximadamente 0.8, neste ponto $|c_{LL}|^2 \simeq 0.42$ e $|c_{RR}|^2 \simeq 0.48$.

Com o intuito de verificar o que acontece com o emaranhamento do sistema fora da condição $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$ para diferentes taxas de tunelamento para as moléculas 1 e 2, apresentamos na figura 3.6 os resultados para a concorrência dos autoestados, ainda considerando $J = 25\mu\text{eV}$, $\Delta_1 = J/4$ e $\Delta_2 = J/8$. Ao compararmos os gráficos da figura 3.4, onde $\Delta_1 = \Delta_2 = J/4$, com os resultados obtidos na figura 3.6 podemos notar que, ao considerarmos diferentes taxas de tunelamento nas moléculas, temos uma queda no grau de emaranhamento nos quatro autoestados do sistema, sendo essa queda maior no primeiro e segundo estados excitados. No caso do estado $|1\rangle$, apresentado na figura 3.6 (b) observamos que, nas regiões ao redor da condição $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \pm J/2$, o grau de emaranhamento é menor para a condição $\Delta_1 \neq \Delta_2$, se comparado com o caso de tunelamentos iguais. Verificamos também que o valor da concorrência é menor quando aumentamos a diferença entre os valores das taxas de tunelamento. Este comportamento também é observado para o estado $|2\rangle$ nas regiões ao redor dos pontos $\varepsilon_1 = -\varepsilon_2 = \pm J/2$. Além disto podemos notar, em ambos os casos, que as regiões emaranhamento máximo, que no caso de $\Delta_1 = \Delta_2$ coincidem com as retas $\varepsilon_1 = \pm\varepsilon_2$, sofrem um desvio que também aumenta com uma diferença maior entre os tunelamentos nas moléculas. No caso em que os estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$ apresentam algum grau

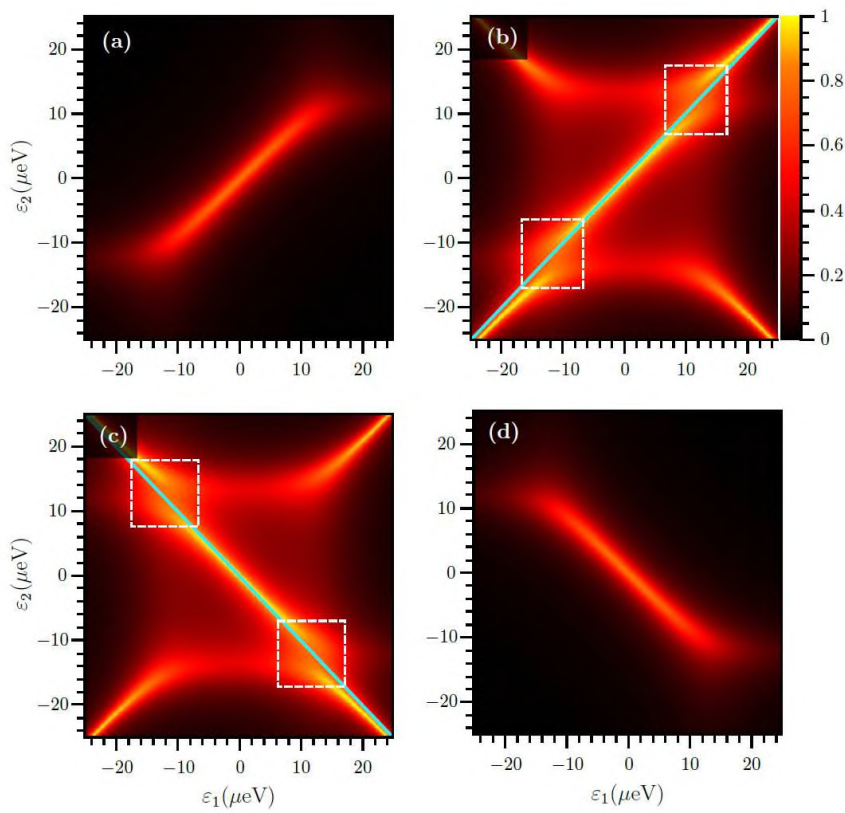


Figura 3.6: Concorrência dos autoestados de H como função de ε_1 e ε_2 . Parâmetros utilizados: $\Delta_1 = J/4, \Delta_2 = J/8$ e $J = 25\mu\text{eV}$. (a) Concorrência do estado $|0\rangle$; (b) concorrência do estado $|1\rangle$; (c) concorrência do estado $|2\rangle$; (d) concorrência para o estado $|3\rangle$.

de emaranhamento, eles são superposições dos quatro estados da base: quando os máximos de emaranhamento estão próximos a região onde $\varepsilon_1 \approx \varepsilon_2$, os estados predominantes são $|LR\rangle$ e $|RL\rangle$. Se $\varepsilon_1 \approx -\varepsilon_2$, os estados mais populados são $|LL\rangle$ e $|RR\rangle$.

3.2 Dinâmica e Emaranhamento para o caso ressonante

A dinâmica do sistema pode ser descrita pela equação de Schrödinger dependente do tempo (equação 1.6). Esta equação descreve a evolução do estado $|\Psi(t)\rangle$ e tem solução analítica para o caso ressonante: $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$. A função de onda das moléculas acopladas pode ser escrita como uma combinação linear dos estados $|LL\rangle$, $|LR\rangle$, $|RL\rangle$ e $|RR\rangle$. Assim, os autoestados $|\psi_k\rangle$ ($k = 1, 2, 3, 4$) são dados por: $|\psi_k\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |ij\rangle$ onde c_{ij} são constantes ($i, j = L, R$). A dependência temporal de cada estado do sistema é obtida através da diagonalização do Hamiltoniano (2.16) cujos autovalores E_k e autovetores $|\psi_k\rangle$, são relacionados pela seguinte equação:

$$\hat{H} |\psi_k\rangle = E_k |\psi_k\rangle \quad (3.2)$$

Resolvemos este problema através da diagonalização numérica e analítica e, obtendo os autovalores e autovetores correspondentes para cada estado k do caso ressonante. Para o caso ressonante, com $\Delta_1 = \Delta_2$, os autovalores e autovetores correspondentes são dados por:

$$\begin{aligned} E_0 &= -\frac{1}{4} \sqrt{J^2 + 16\Delta_1^2}; & |\psi_0\rangle &= \Gamma_+ (|LL\rangle - \Omega_+ |LR\rangle - \Omega_+ |RL\rangle + |RR\rangle), \\ E_1 &= -\frac{J}{4}; & |\psi_1\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (|LR\rangle - |RL\rangle), \\ E_2 &= \frac{J}{4}; & |\psi_2\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (|LL\rangle - |RR\rangle), \\ E_3 &= \frac{1}{4} \sqrt{J^2 + 16\Delta_1^2}; & |\psi_3\rangle &= \Gamma_- (|LL\rangle - \Omega_- |LR\rangle - \Omega_- |RL\rangle + |RR\rangle), \end{aligned} \quad (3.3)$$

onde

$$\Omega_{\pm} = \frac{J \pm \sqrt{J^2 + 16\Delta_1^2}}{4\Delta_1}, \quad (3.4)$$

e

$$\Gamma_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2 + 2\Omega_{\pm}^2}}. \quad (3.5)$$

Afim de verificar os resultados analíticos, realizamos a diagonalização exata do Hamiltoniano (2.16), através deste cálculo numérico obtivemos o espectro de energia do sistema,

figura 3.7, como função do tunelamento na molécula 1, considerando $\Delta_2 = \Delta_1$, $J = 25\mu\text{eV}$ e $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$. Vemos que inicialmente há uma degenerescência entre as energias do estado fundamental e do primeiro estado excitado, E_0 e E_1 respectivamente, e entre as energias do segundo e terceiro estados excitados, E_2 e E_3 .

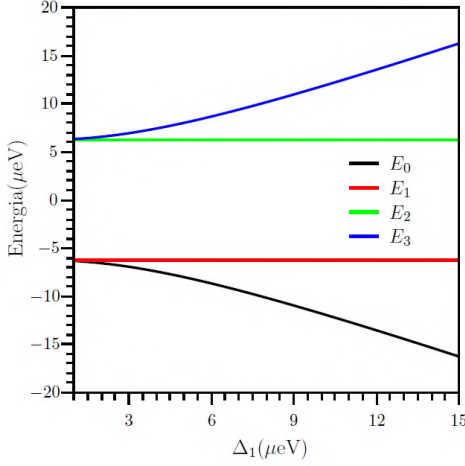


Figura 3.7: Espectro de energia do sistema como função de Δ_1 , considerando $\Delta_2 = \Delta_1$, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ e $J = 25\mu\text{eV}$.

No caso ressonante é possível obter a forma analítica das probabilidades de ocupação para os estados do Hamiltoniano ao longo do tempo, considerando o estado inicial do sistema como $|\Psi(0)\rangle = |RL\rangle$. A probabilidade de ocupação para cada estado $|ij\rangle$ é dada por:

$$P_{ij} = |\langle ij|\Psi(t)\rangle|^2 \quad (3.6)$$

Utilizando a equação (3.6) obtemos os seguintes valores para a probabilidade de ocupação para cada um dos autoestados do Hamiltoniano (2.16):

$$P_{LL} = P_{RR} = 4 \frac{\Delta_1^2}{\beta^2} \sin^2 \left(\frac{\beta t}{4} \right), \quad (3.7)$$

$$P_{LR} = \frac{1}{4} \left[1 - 2 \cos \left(\frac{\beta t}{4} \right) \cos \left(\frac{Jt}{4} \right) - 2 \frac{J}{\beta} \sin \left(\frac{\beta t}{4} \right) \sin \left(\frac{Jt}{4} \right) + \cos^2 \left(\frac{\beta t}{4} \right) + \frac{J^2}{\beta^2} \sin^2 \left(\frac{\beta t}{4} \right) \right], \quad (3.8)$$

$$P_{RL} = \frac{1}{4} \left[1 + 2 \cos \left(\frac{\beta t}{4} \right) \cos \left(\frac{Jt}{4} \right) + 2 \frac{J}{\beta} \sin \left(\frac{\beta t}{4} \right) \sin \left(\frac{Jt}{4} \right) + \cos^2 \left(\frac{\beta t}{4} \right) + \frac{J^2}{\beta^2} \sin^2 \left(\frac{\beta t}{4} \right) \right], \quad (3.9)$$

onde $\beta = \sqrt{J^2 + 16\Delta_1^2}$.

Podemos notar através da equação (3.7) que os estados $|LL\rangle$ e $|RR\rangle$ não são populados sempre que t é dado por

$$t = \frac{4n_1\pi}{\sqrt{J^2 + 16\Delta_1^2}}, \quad (3.10)$$

com $n_1 = 1, 2, 3, \dots$. Para os estados $|LR\rangle$ e $|RL\rangle$ as probabilidades de ocupação passam a ser dadas por:

$$P_{LR} = \frac{1}{2} \left[1 - \cos \left(\frac{Jt}{4} \right) \right], \quad (3.11)$$

$$P_{RL} = \frac{1}{2} \left[1 + \cos \left(\frac{Jt}{4} \right) \right]. \quad (3.12)$$

Assim das equações (3.11) e (3.12) temos algumas condições sobre $\cos(Jt/4)$ que elucidam o comportamento do emaranhamento para os parâmetros considerados. Se n_1 é par, a primeira condição nos diz que quando $\cos(Jt/4) = 1$, a probabilidade de ocupação do estado $|LR\rangle$ é nula e sendo $P_{LL} = P_{RR} = 0$, o sistema volta ao estado inicial $|RL\rangle$. No caso em que $\cos(Jt/4) = -1$ não há probabilidade de ocupação do estado $|RL\rangle$ e o estado do sistema passa a ser dado pelo autoestado $|LR\rangle$. Se n_1 é ímpar há, em ambos os casos, uma inversão de população entre os estados $|LR\rangle$ e $|RL\rangle$. Uma destas duas condições ocorre quando

$$t = \frac{4n_2\pi}{J}; \quad \text{onde } n_2 = 1, 2, 3, \dots \quad (3.13)$$

Para que (3.10) e (3.13) sejam simultaneamente satisfeitas a seguinte relação deve se cumprir

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{\sqrt{J^2 + 16\Delta_1^2}}{J}. \quad (3.14)$$

Como os parâmetros Δ_1 e J são reais e devem ser diferentes de zero para que possa haver emaranhamento no sistema, temos ainda que $n_1 > n_2$. Com esta condição devemos

encontrar combinações de n_1 e n_2 que satisfaçam a igualdade em (3.14) para diferentes valores de J e Δ_1 considerados.

Uma outra situação interessante são as condições sobre os tempos e os parâmetros do sistema para os quais o termo $\cos(Jt/4)$ é nulo. Neste caso o tempo é dado por:

$$t = \frac{2m\pi}{J}, \quad (3.15)$$

onde $m = 1, 3, 5, \dots$. Igualando as expressões (3.10) e (3.15), temos que

$$\frac{2n_1}{m} = \frac{\sqrt{J^2 + 16\Delta_1^2}}{J}, \quad (3.16)$$

sendo que $2n_1$ deve ser maior que m para que J e Δ_1 sejam reais e não nulos. Quando conseguimos combinações dos valores de n_1 e m que satisfaçam a igualdade em (3.16) podemos dizer que as probabilidades de ocupação dos estados $|LR\rangle$ e $|RL\rangle$ são iguais e o estado do sistema pode ser escrito como uma superposição do tipo

$$|\Psi\rangle = \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{2}} (|LR\rangle + |RL\rangle), \quad (3.17)$$

onde $e^{i\phi}$ é uma fase global. O estado descrito por (3.17) é um estado maximamente emaranhado. A condição contida na equação (3.16) pode nos auxiliar na análise do emaranhamento no sistema, pois através dela podemos determinar para quais combinações de valores dos parâmetros Δ_1 e J é possível obter estados maximamente emaranhados. Inicialmente fixamos o valor do acoplamento de Coulomb em $J = 25\mu\text{eV}$, e verificamos para quais valores de Δ_1 é possível satisfazer a equação (3.16).

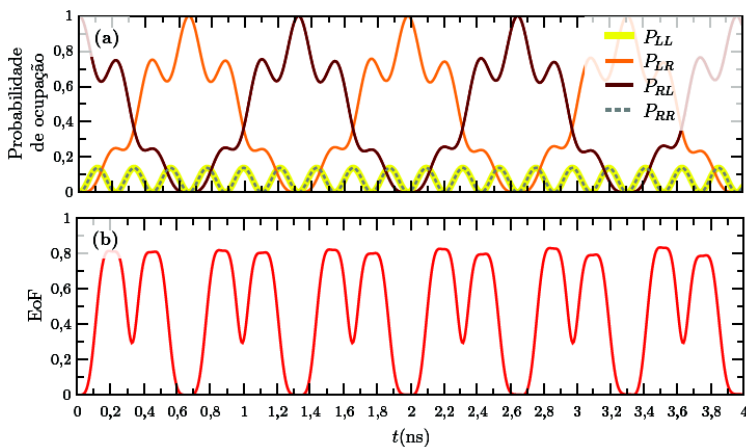


Figura 3.8: (a) Probabilidade de ocupação do nível $|ij\rangle$ ($i, j = L, R$) como função do tempo; (b) Dinâmica do EoF considerando o estado inicial $|\Psi(0)\rangle = |RL\rangle$. Parâmetros utilizados: $\Delta_1 = \Delta_2 = 7\mu\text{eV}$, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ e $J = 25\mu\text{eV}$.

Na figura 3.8 apresentamos os nossos resultados da dinâmica das probabilidades de ocupação de cada nível $|i, j\rangle$, figura 3.8(a), e do emaranhamento de formação, figura 3.8(b), considerando $\Delta_1 = 7\mu\text{eV}$. Para a escolha de parâmetros deste caso em particular, não é possível satisfazer a equação (3.16). Vemos, no gráfico das populações, que o sistema apresenta oscilações entre o estado inicial $|RL\rangle$ e o estado $|LR\rangle$. O tempo de recorrência do sistema é de aproximadamente 1,3ns. Ao analisar a dinâmica do emaranhamento, figura 3.8(b), notamos que não é possível criar um estado maximamente emaranhado, embora o sistema atinja um grau elevado de emaranhamento, sendo o valor máximo aproximadamente igual a 0.8. A razão disto é que embora a condição contida na equação (3.16) não seja cumprida de maneira exata, para este valor de Δ_1 , podemos obter combinações de n_1 e m que façam com que a razão entre eles seja aproximadamente igual ao lado direito da equação, $\beta/2J \approx 0.75$.

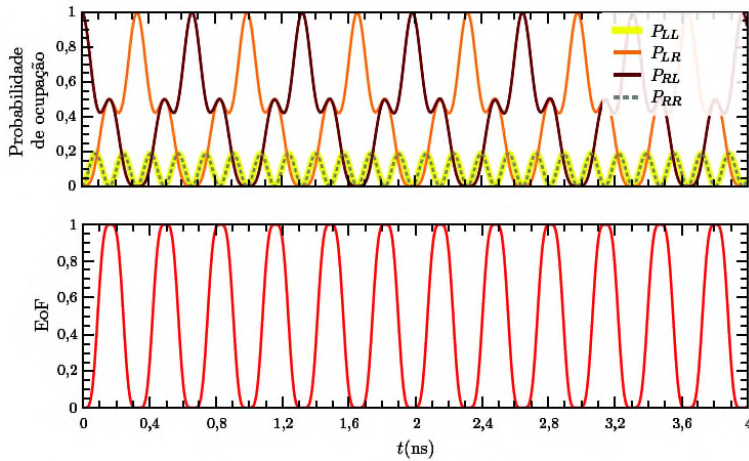


Figura 3.9: (a) Probabilidade de ocupação do nível $|ij\rangle$ ($i, j = L, R$) como função do tempo; (b) Dinâmica do EoF considerando o estado inicial $|\Psi(0)\rangle = |RL\rangle$. Parâmetros utilizados: $\Delta_1 = \Delta_2 \approx 10.8\mu\text{eV}$, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ e $J = 25\mu\text{eV}$.

Quando a razão n_1/m da equação (3.16) é igual à unidade, ou seja quando $n_1 = m$, temos que:

$$\Delta_1 = \frac{\sqrt{3}J}{4},$$

para o valor de acoplamento de Coulomb considerado, $J = 25\mu\text{eV}$, temos que o tunelamento entre os pontos contidos nas moléculas deve assumir o valor $\Delta_1 \approx 10.8\mu\text{eV}$. Para este caso, apresentamos na figura 3.9 os gráficos da dinâmica da probabilidade de ocupação dos níveis, figura 3.9(a), e do emaranhamento de formação, 3.9(b). Assim como no caso anterior, observamos que o sistema apresenta oscilações entre o estado inicial $|RL\rangle$ e o estado $|LR\rangle$, e ainda podemos notar um aumento na probabilidade de ocupação dos níveis $|LL\rangle$ e $|RR\rangle$. Analisando a dinâmica do EoF vemos que o sistema consegue atingir o

grau máximo de emaranhamento, o que era esperado, uma vez que a condição (3.16) foi satisfeita. Ao compararmos os gráficos (a) e (b) da figura 3.9, notamos que os máximos de emaranhamento são obtidos sempre que $P_{LL} = P_{RR} = 0$ e $P_{LR} = P_{RL} = 0.5$, o que caracteriza um estado conforme o descrito pela equação (3.17). Quando o grau de emaranhamento no sistema é nulo ele passa a ser descrito, de maneira alternada, pelo estado $|LR\rangle$ ou $|RL\rangle$.

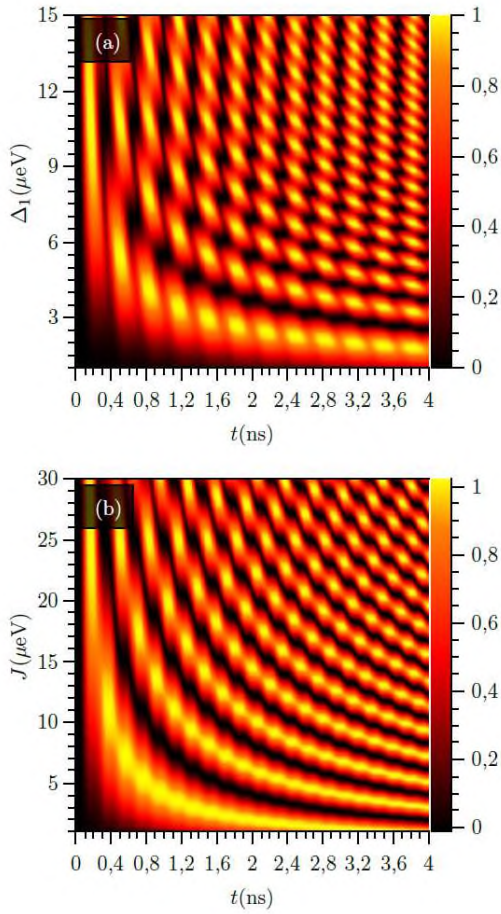


Figura 3.10: Dinâmica do Emaranhamento de Formação, considerando o estado inicial $|\Psi(0)\rangle = |RL\rangle$: (a) EoF como função do tempo e de Δ_1 , sendo $\Delta_2 = \Delta_1$, $J = 25\mu\text{eV}$ e $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$. (b) EoF como função do tempo e de J , considerando $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ e $\Delta_1 = \Delta_2 \approx 10.8\mu\text{eV}$

Com o intuito de aprofundar nossa análise do comportamento efetivo do emaranhamento no sistema para o caso ressonante ($\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$), apresentamos os nossos resultados numéricos da dinâmica do EoF como função do tunelamento Δ_1 na condição $\Delta_2 = \Delta_1$, figura 3.10 (a), e como função do acoplamento de Coulomb, figura 3.10 (b). No primeiro caso, observamos que o sistema oscila entre um estado não emaranhado e um estado maximamente emaranhado, com período dependente do valor do parâmetro de tunelamento. Em particular notamos que existem três comportamentos diferentes correspondentes a três intervalos de valores do tunelamento: no primeiro, para valores de

$\Delta_1 < J/8 = 3.125\mu\text{eV}$, o sistema atinge o estado maximamente emaranhado após $t \approx 1.2\text{ns}$. Se $\Delta_1 > J/4 = 6.25\mu\text{eV}$, o emaranhamento máximo é atingido num tempo de evolução significativamente menor, inferior à 0.1ns . Por último, para $\Delta_1 \approx 10.8\mu\text{eV}$, o sistema oscila de forma periódica uma vez que cumpre-se a condição $n_1/m = 1$. Fora desta região podemos notar que há uma quebra de periodicidade nas oscilações do emaranhamento, isto ocorre devido a dificuldade encontrada em satisfazer a condição imposta na equação (3.16), visto que n_1 e m são inteiros por definição e do outro lado da igualdade temos um número racional.

Vemos na figura 3.10 (b) o comportamento da dinâmica do emaranhamento quando fixamos o tunelamento nas moléculas, $\Delta_1 = \Delta_2 \approx 10.8\mu\text{eV}$, e manipulamos o parâmetro J . Observamos no gráfico um comportamento semelhante ao EoF em função de Δ_1 (figura 3.10(a)), o que era esperado pois a condição contida em (3.16) se aplica tanto a Δ_1 como a J . Neste caso, porém, é possível notar comportamentos distintos no EoF relacionados ao parâmetro J , tomando como referência o valor de Δ_1 : primeiro, notamos que para $J \ll \Delta_1$ o sistema apresenta um grau de emaranhamento elevado durante um intervalo de tempo maior. A medida que J se aproxima de Δ_1 há um aumento de oscilação no emaranhamento de formação e uma diminuição no período do mesmo. É por último, vemos que para valores de J maiores que Δ_1 , há uma diminuição do emaranhamento no sistema e, em alguns casos, nesta região não é possível obter estados maximamente emaranhados. Em ambos os gráficos, o estado maximamente emaranhado é caracterizado pelo descrito na equação (3.17).

Capítulo 4

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 emaranhamento de formação. 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.

Primeiro, analisamos o espectro de energia do sistema e exploramos a relação deste com as propriedades do emaranhamento dos autoestados do Hamiltoniano do sistema, equação (2.16). Estudamos os efeitos da variação das dessintonias nas moléculas, ε_1 e ε_2 , considerando inicialmente que o tunelamento na molécula 1 e na molécula 2 são iguais ($\Delta_1 = \Delta_2$) e em seguida que $\Delta_1 \neq \Delta_2$. Em ambos os casos o acoplamento de Coulomb, J , entre as moléculas foi mantido fixo. Nossos resultados mostram que quando as taxas de tunelamento nas moléculas são iguais o sistema apresenta maior grau de emaranhamento, sendo que o primeiro estado excitado, na condição $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$, é sempre um estado maximamente emaranhado. Tanto no caso em que os tunelamentos nas moléculas são iguais, quanto no caso em que são diferentes, podemos concluir que os autoestados apresentam elevados graus de emaranhamento nas condições $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ e $\varepsilon_1 = -\varepsilon_2$, sendo que na primeira os estados mais populados são o $|LR\rangle$ e o $|RL\rangle$, na segunda condição os estados $|LL\rangle$ e $|RR\rangle$ são os mais populados.

Na segunda parte do nosso trabalho, analisamos a dinâmica do emaranhamento de formação, EoF, considerando o caso ressonante, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$, 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 é dada por $\Delta_i = \sqrt{3}J/4$, 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 1,2ns, enquanto que para $\Delta_i > J/4$ esse tempo é consideravelmente menor sendo da ordem de 0,1ns. 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.

O conhecimento dos efeitos das manipulações dos parâmetros físicos na dinâmica do emaranhamento no sistema é de fundamental importância dentro da área de Informação Quântica principalmente no que diz respeito à implementação de algoritmos quânticos que requerem algum grau de emaranhamento no sistema. Neste sentido é também importante conhecer os efeitos dos processos de decoerência sobre as correlações quânticas no sistema. O estudo dos possíveis canais de decoerência no sistema de moléculas quânticas acopladas, bem como os efeitos sobre as correlações quânticas do sistema fazem parte das perspectivas futuras deste trabalho.

Referências Bibliográficas

- BARENCO, A. et al. Conditional Quantum Dynamics and Logic Gates. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4083 (1995).
- BENNETT, C.H.; BRASSARD, Proceedings of IEEE International Conference on Computers Systems and Signal Processinf, 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. Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels. *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1895 (1993).
- 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).
- BRUM, J. A. and HAWRYLAK, P. Coupled quantum dots as quantum exclusive-OR gate. *Superlattices Microstruct.* **22**, 431 (1997).
- 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).
- BOURENNANE, M. et al. Experimental Detection of Multipartite Entanglement using Witness Operators. *Phys. Rev. Lett.*, **92**, 087902 (2004).
- 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 nº 2, (2001).
- CHU, W. and ZHU, J. Entangled exciton states and their evaluation in coupled quantum dots. *Appl. Phys. Lett.* **89**, 053122 (2006).
- CLIVE EMARY, Measuring the entanglement between double quantum dot charge qubits. *Phys. Rev. B* **80**, 161309R (2009).
- 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. 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).
- 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).
- GRIFFITHS, D. Introduction to Quantum Mechanics. *Pearson Education International*, 2a. Edição, (2005).
- GOLDHABER-GORDON, D. et al. Kondo effect in a single-electron transistor. *Nature* **391**, 156 (1998).
- 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).
- HILL, S. and WOOTTERS, W.K., Entanglement of a pair of quantum bits, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 5022 (1997).
- 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*.
- 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). KRENNER, J.H. et al. Direct Observation of Controlled Coupling in an Individual Quantum Dot Molecule. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 057402 (2005).
- 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).
- 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).
- REIMANN, S. M. and MANNEINEN, M. Electronic structure of quantum dots. *Rev. Mod. Phys.* **74**, 1283 (2002).
- REZENDE, S. M., *Materiais e Dispositivos Eletrônicos*, Editora Livraria da Física, 2a Edição, São Paulo, (2004).
- ROOS, C. F. et al. Control and measurement of three-qubit entangled states. *Science*, **304**, n. 5676, p. 1478–80, (2004).
- 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).
- SZE, S.M. *Physics of Semiconductor Devices*, Wiley, New York (1981).
- VAN DER WIEL, W. G. et al. Electron transport through double quantum dots. *Rev. Mod. Phys.* **75**, 1 (2003).
- VAN HOVE, L., The Occurrence of Singularities in the Elastic Frequency Distribution of a Crystal. *Phys. Rev.* **89**, 1189 (1953).
- 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).
- ZANARDI, P. and ROSSI, F. Production of φ and ω Mesons in Near-Threshold pp Reactions. *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4572 (1998).