

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

PATRÍCIA A. ALMEIDA DE OLIVEIRA

**Emaranhamento em moléculas de pontos quânticos
semicondutores**

Uberlândia
2019

PATRÍCIA A. ALMEIDA DE OLIVEIRA

Emaranhamento eletrônico em moléculas de pontos quânticos
semicondutores

Tese de Doutorado apresentado ao Instituto de Física da Universidade Federal de Uberlândia em preenchimento parcial dos requisitos para obtenção do título de Doutora em Física.

Orientador:

PROFA. DRA. LILIANA SANZ DE LA TORRE

Uberlândia
2019

Ficha Catalográfica Online do Sistema de Bibliotecas da UFU
com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).

O48 Oliveira, Patrícia Aparecida Almeida de, 1985-
2019 Emaranhamento em moléculas de pontos quânticos
semicondutores [recurso eletrônico] / Patrícia Aparecida Almeida
de Oliveira. - 2019.

Orientadora: Liliana Sanz.

Coorientador: Fabrício Macedo de Souza.

Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Uberlândia, Pós-
graduação em Física.

Modo de acesso: Internet.

Disponível em: <http://doi.org/10.14393/ufu.te.2020.164>

Inclui bibliografia.

Inclui ilustrações.

1. Física. I. Sanz, Liliana ,1974-, (Orient.). II. Souza, Fabrício
Macedo de ,1975-, (Coorient.). III. Universidade Federal de
Uberlândia. Pós-graduação em Física. IV. Título.

CDU: 53

Bibliotecários responsáveis pela estrutura de acordo com o AACR2:
Gizele Cristine Nunes do Couto - CRB6/2091
Nelson Marcos Ferreira - CRB6/3074



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



PATRÍCIA APARECIDA ALMEIDA DE OLIVEIRA

Tese apresentada a coordenação do
Programa de Pós-graduação em física,
do Instituto de Física da Universidade
Federal de Uberlândia, para obtenção do
título de Doutor em Física.

Uberlândia, 19 de dezembro de 2019.

BANCA EXAMINADORA

Prof.ª. Dra. Liliana Sanz de La Torre
Universidade Federal de Uberlândia – UFU

Prof. Dr. Antonino di Lorenzo
Universidade Federal de Uberlândia – UFU

Prof. Dr. George Balster Martins
Universidade Federal de Uberlândia - UFU

Prof. Dr. Fernando Luis da Silva Semião
Universidade Federal do ABC - UFABC

Prof. Dr. José Antônio Roversi
Universidade de Campinas - UNICAMP

Resumo

Nessa tese analisamos fenômenos de emaranhamento quântico em sistemas compostos por moléculas quânticas de pontos semicondutores, considerando dois modelos distintos. No primeiro, N moléculas, cada uma com um único elétron em excesso, interagem por meio do acoplamento de Coulomb. Esta interação está restrita ao caso de primeiros vizinhos. No segundo sistema, os elétrons de duas moléculas distintas interagem entre si por meio do acoplamento elétron-fônon. Considerando o sistema de N moléculas, ampliamos nossos estudos iniciados no mestrado e verificamos as características do espectro e dos autoestados de energia para o sistema de moléculas onde tivemos como foco a escalabilidade do sistema e seu efeito no emaranhamento, identificando regiões de energia as quais estão associadas a estados maximamente emaranhados, independente do número de moléculas. Na segunda parte do trabalho, exploramos o emaranhamento tanto do subsistema eletrônico quanto do subsistema dos fônons, definimos uma nova base composta pelos estados eletrônicos de Bell associados aos estados de excitações nos modos vibracionais, o que permite reescrever o Hamiltoniano para o sistema composto. Essa nova interpretação possibilitou determinar um conjunto de subespaços de matrizes $4 \otimes 4$ que elucidou o comportamento do emaranhamento em ambos os subsistemas, possibilitando determinar conjuntos distintos de parâmetros eficazes em gerar estados altamente emaranhados ora no subsistema eletrônico ora no subsistema fonônico.

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

Abstract

In this thesis, we will analyze quantum entanglement phenomena in systems composed of quantum molecules, considering two different models. In the first, N molecules, each with a single excess electron, interact via Coulomb coupling. This interaction is restricted to the first neighbors. In the second system, electrons from distinct molecules interact with each other through the electron-phonon coupling. Considering the N -molecule system, we broadened our studies started in the master's degree to verify the characteristics of the energy spectrum and eigenstates for the molecule system. We focus on the scalability of the system and its effect on entanglement, showing that some specific eigenstates are systematically associated with the maximally entangled $|GHZ\rangle$ states, regardless of the number of molecules. In the second part of the work, we explore the entanglement of both the electronic subsystem and the phonon subsystem, defining a new base composed of Bell's electronic states associated with the excitation states in vibrational modes, which allows rewriting the Hamiltonian to the composite system. From this point of view, it is possible to determine a set of 4×4 matrix subspaces that elucidated the study of the entanglement behavior in both subsystems, allowing the determination of distinct sets of parameters effective in generating highly entangled states in the electronic subsystem and now in the phononic subsystem.

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

Agradecimentos

Como não poderia ser diferente, quero iniciar agradecendo a Liliana pela orientação, paciência, dedicação e confiança. Agradeço pela grande amiga que se tornou nesses 10 anos de convivência e por ser uma das pessoas mais incríveis que passaram por minha vida, tendo um papel fundamental na minha formação como profissional e como ser humano.

Agradeço ao professor Fabrício Macedo de Souza, pela coorientação que teve um papel decisivo no desenvolvimento deste trabalho.

Aos professores Antonino Di Lorenzo e George Balster Martins, membros da banca que constituíam a comissão julgadora, pelas sugestões e críticas que apresentaram com relação a esta proposta, contribuindo, desta forma, para que a versão final deste trabalho fosse aprimorada.

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 Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, CAPES, pelo apoio financeiro.

Sumário

Lista de símbolos	viii
Lista de Figuras	xvii
Lista de Tabelas	xviii
Introdução	1
1 Moléculas quânticas: características fundamentais e modelos	6
1.1 Heteroestruturas semicondutoras	7
1.2 Pontos quânticos	9
1.2.1 Moléculas Quânticas	11
1.3 Descrição teórica de moléculas quânticas usando <i>simple toy models</i>	13
1.4 Modelo para descrição da interação elétron-fônon	15
1.4.1 Hamiltoniano efetivo	17
1.4.2 Parâmetros físicos	19
2 Conceitos teóricos fundamentais	21
2.1 Operador densidade	21
2.1.1 Descrição de sistemas compostos usando operador densidade	24
2.1.2 Operação transposição parcial	25
2.2 Emaranhamento	26
2.2.1 Definição e aplicações de um estado emaranhado	28
2.2.2 Classes não equivalentes de estados emaranhados	30
2.2.3 Aplicações do emaranhamento	32
2.2.4 Critérios de separabilidade	35
2.2.5 Quantificadores de emaranhamento	37

3	Escalabilidade de emaranhamento	43
3.1	Espectro de energia e emaranhamento nos autoestados para 3 moléculas acopladas	45
3.2	Espectro de energia e emaranhamento nos autoestados para 4 moléculas acopladas	49
3.2.1	Estados GHZ ^{4qubits} associados às bordas do espectro de energia . .	50
3.2.2	Estados de cluster $ \Phi^4\rangle^c$ internos às bandas de energia	51
3.2.3	Superposições de estados emaranhados	56
3.2.4	Conclusões e perspectivas futuras	57
4	Emaranhamento eletrônico mediado por fônons	60
4.1	Hamiltoniano de dois qubits na base rotacionada Bell-MV	60
4.2	Análise espectral	64
4.2.1	Sensibilidade do emaranhamento à mudanças nos parâmetros físicos do sistema	70
4.3	Geração dinâmica de estados maximamente emaranhados	76
4.3.1	Sensibilidade da dinâmica do emaranhamento à mudanças nos parâmetros físicos do sistema	82
5	Modos vibracionais: dinâmica e emaranhamento	85
5.1	Emaranhamento dos modos vibracionais	85
6	Conclusões	96
	Referências bibliográficas	101

Lista de símbolos

α_k - Razão entre o acoplamento elétron-fônon g_k e a frequência dos modos vibracionais ω_k da molécula k ;

B_i (B_i^\dagger) - Operador que cria (aniquila) uma excitação no subespaço do modo vibracional correspondente;

B_{ml} - Matrizes quadridimensionais representada na base Bell-modos vibracionais contendo termos de energia do modelo de interação elétron-fônon;

C - Concorrência;

δ_i Dessintonia eletrônica entre os pontos quânticos da molécula i ;

δ_\pm - Soma (subtração) das dessintonias entre as moléculas 1 e 2;

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

$D_i(\alpha_i)$ - Operador deslocamento do oscilador quântico do modo vibracional i ;

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

Δ_{ij} - Taxas de tunelamento intra-molecular entre os pontos quânticos i e j ;

Δ_\pm - Soma (subtração) das taxas de tunelamento das moléculas 1 e 2 do modelo de interação elétron-fônon;

$\Delta_{\mathcal{DP}}$ - Matriz de acoplamento entre os pontos quânticos e os modos vibracionais do modelo de interação elétron-fônon; $\Delta_{\mathcal{DP}}^q$ - Matriz de acoplamento entre os pontos quânticos e os modos vibracionais considerando a base de qubits;

E_{ml} - Energia associadas aos estados da base Bell-modos vibracionais;

EoF - Emaranhamento de formação;

ε_i - Níveis eletrônicos para cada ponto do modelo de interação elétron-fônon;

$\varepsilon_{ij,ml}$ - Energias livres para o modelo de interação elétron-fônon na base de dois qubits;

$\tilde{\varepsilon}_{i(j)}$ - Nível de energia deslocado devido à efeitos da interação elétron-fônon;
 $\mathcal{F}(t)$ - Fidelidade;
 g_i - Acoplamento elétron-fônon;
 G_v - Matrizes quadridimensionais representada na base Bell-modos vibracionais, contendo termos de acoplamento elétron-fônon;
 $H_{\mathcal{D}}$ - Hamiltoniano livre dos pontos quânticos no modelo de interação elétron-fônon;
 $\bar{H}_{\mathcal{D}}$ - Hamiltoniano transformado para os pontos quânticos do modelo de interação elétron-fônon;
 $\bar{H}_{\mathcal{D}}^q$ - Hamiltoniano do subsistemas dos pontos quânticos na base de qubit do modelo de interação elétron-fônon;
 $H_{\mathcal{P}}$ - Hamiltoniano livre dos modos vibracionais do modelo de interação elétron-fônon;
 J_{ij} - Acoplamento de Coulomb entre as moléculas de pontos quânticos;
 l - Dimensão do modo vibracional 2;
 m^* - Massa efetiva do elétron;
 m - Dimensão do modo vibracional 1;
 $MV1$ e $MV2$ - Modos vibracionais 1 e 2;
 $\mathbf{M1}$ - Primeira molécula do sistema composto;
 $\mathbf{M2}$ - Segunda molécula do sistema composto;
 $N_{i(j)}^{\mathcal{D}}$ - Operador número para o ponto quântico $i(j)$ -th;
 $\mathcal{N}(\rho)$ - Negatividade;
 $\mathcal{N}_{Log}(\rho)$ - Negatividade logarítmica;
 N_{VT} - Número total de excitações nos modos vibracionais 1 e 2;
 ν_i - Autovalores negativos da matriz transposta parcial do operador densidade;
 \mathcal{N} - Negatividade;
 ω_i - frequência do modo vibracional i ;
 $S_{i(j)}^{\dagger}$ ($S_{i(j)}$) - Operador de criação (aniquilação) para o $i(j)$ -th ponto quânticos;
 $Q(\rho)$ - Quantificador de emaranhamento;
 ρ - Operador densidade;

σ_i - Matrizes de Pauli;

$\mathcal{S}_{B,(ml)}$ - Matrizes quadridimensionais definidas pela escolha do número total de vibrações nos modos vibracionais;

U_{ij} - Matriz de acoplamento de Coulomb entre o elétron da molécula i e o elétron da molécula j ;

V_{eff} - Matriz de interação efetiva entre os elétrons das moléculas 1 e 2 do modelo de interação elétron-fônon;

V_{eff}^q - Termo de interação elétron-elétron entre as moléculas na base de qubits;

\mathbb{X}_{12} - Matriz resultante da transformação de Lang-Firsov;

Lista de Figuras

- 1.1 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. 10
- 1.2 (a) Imagem representativa de uma junção de amostras dos materiais semicondutores GaAs/AlGaAs que formam, devido a diferença do *gap* de energia entre esses materiais, um gás de elétrons bidimensional. O confinamento nas outras duas direções ocorre com a aplicação de tensões de voltagem nos eletrodos formados sobre a camada de AlGaAs; (b) Imagem de um ponto quântico eletrostático similar ao da figura (a), feita através de microscopia eletrônica. 11
- 1.3 (a) Imagem, feita através de microscopia eletrônica, da amostra utilizada por Fujisawa et al. Os eletrodos V_L , V_l , V_C , V_r e V_R são tensionados negativamente, afim de definir os dois pontos quânticos (L e R, do inglês *left* e *right*) entre a fonte (S, do inglês *Source*) e o dreno (D, *Drain*). V_{SD} é a diferença de potencial entre a fonte e o dreno. (b) Diagrama esquemático do regime de transporte eletrônico. Γ_L e Γ_R são, respectivamente, as taxas de tunelamento da fonte para a $|L\rangle$ e de $|R\rangle$ para o dreno, δ é a dessintonia entre os níveis eletrônicos do ponto da direita e do ponto da esquerda. (c) Regime de bloqueio de Coulomb. (d) Imagem feita através de microscopia eletrônica do dispositivo utilizado por Shinkai et al. As dessintonias nas moléculas, δ_1 e δ_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. 12

1.4	Representação esquemática do sistema considerado: quatro pontos quânticos dispostos em duas moléculas, sendo a primeira composta pelos pontos 1 e 3 e a segunda pelos pontos 2 e 4. Os pontos 1 (3) e 2 (4) estão acoplados por tunelamento, e os níveis eletrônicos estão acoplados com os graus de liberdade dos modos vibracionais das moléculas 1 e 2. O qubit é definido como a posição do elétron nos pontos 1-2 (3-4).	16
1.5	Possível implementação experimental do sistema descrito pelo Hamiltoniano (3.1): os pontos quânticos 1 e 3 (2 e 4) estão acoplados, respectivamente, com os modos vibracionais 1 e 2 de nanotubos de carbono. Além disso, os pontos 1 (3) e 2 (4) estão acoplados entre si por tunelamento, definindo assim o sistema de dois níveis associado ao qubit de carga.	20
3.1	Representação esquemática do sistema de N moléculas. Cada molécula é composta por dois pontos quânticos acoplados por tunelamento, como demonstrado no primeiro esquema a esquerda. É considerada uma interação coulombiana entre os primeiros vizinhos.	44
3.2	(a) Espectro de energia em função da dessintonia da molécula 1, δ_1 , do sistema composto por 3 moléculas quânticas acopladas, considerando $\delta_2 = \delta_3 = 0$. (b) Tangle-3, τ_{123} , relacionado aos quatro autoestados referentes aos anticruzamentos de energia indicados na figura pelas letras A-B. A linha cinza pontilhada está associada ao anticruzamento A, contendo o estado fundamental e ao primeiro estado excitado, que são dados, respectivamente, pelos estados $ \text{FLIP}_{\mp}\rangle_{\text{GHZ}}^{(2)}$; a linha sólida vermelha se relaciona ao anticruzamento B, com o sexto e o sétimo estado excitado correspondendo, respectivamente, aos estados $ \text{GHZ}\rangle_{\mp}$; a linha pontilhada preta indica o tangle-3 para os estados intermediários do espectro de energia. Para essas simulações consideramos as taxas de tunelamento como $\Delta_i = J/8$ sendo $i = 1, 2, 3$. . .	46

3.3	Representação gráfica dos coeficientes c_K dos autoestados do Hamiltoniano (3.2) correspondente ao sistema de 3 moléculas quânticas acopladas ($k = \{LLL, LLR, LRL, LRR, RLL, RLR, RRL, RRR\}$). Consideramos em todos os casos que o sistema esta em ressonância completa, onde $\delta_1 = \delta_2 = \delta_3 = 0$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta_3 = J/8$. (a) Estado fundamental, correspondente ao estado $ \text{FLIP}_3\rangle_-^{\text{GHZ}}$; (b) primeiro estado excitado, correspondente ao estado $ \text{FLIP}_3\rangle_+^{\text{GHZ}}$; (c) segundo estado excitado; (d) terceiro estado excitado; (e) quarto estado excitado; (f) quinto estado excitado; (g) sexto estado excitado, correspondente ao estado $ \text{GHZ}_3\rangle_-$; (h) setimo estado excitado, correspondente ao estado $ \text{GHZ}_3\rangle_+$	47
3.4	Espectro de energia em função da dessintonia da molécula 1, δ_1 , do sistema composto por 4 moléculas quânticas acopladas, considerando $\delta_2 = \delta_3 = \delta_4 = 0$ além da condição $\Delta_i = J/8$ para os parâmetros de tunelamento sento $i = 1, 2, 3, 4$	49
3.5	(a) Grau de emaranhamento dos autoestados do Hamiltoniano do sistema de 4 moléculas, calculado usando o tangle τ_{1234} como definido na equação (3.6), em função da dessintonia da molécula 1, considerando $\delta_2 = \delta_3 = \delta_4 = 0$ e $\Delta_i = J/8$. Painéis (b)-(e): decomposição dos autoestados do Hamiltoniano do sistema de 4 moléculas na base computacional, considerando o ponto onde $\tau_{1234} \approx 1$ ($\delta_1 = 0$), do (b) estado fundamental, (c) primeiro estado excitado, (d) décimo quarto estado excitado e (e) décimo quinto estado excitado. . .	52
3.6	Decomposição na base computacional do sistema de 4 moléculas dos autoestados relacionados com os anticruzamentos C' da figura 3.4 correspondendo ao (a) quarto, (b) quinto, (c) décimo e (d) décimo primeiro estado excitado. Os parâmetros físicos utilizados são os mesmos da figura 3.4	54
3.7	(a) Espectro de energia em função da dessintonia da molécula 1, δ_1 , do sistema composto por 3 moléculas quânticas acopladas, considerando $\delta_2 = \delta_3 = 0$. (b) Espectro de energia em função da dessintonia da molécula 1, δ_1 , do sistema composto por 4 moléculas quânticas acopladas, considerando $\delta_2 = \delta_3 = \delta_4 = 0$. (c) Espectro de energia em função da dessintonia da molécula 1, δ_1 , do sistema composto por 5 moléculas quânticas acopladas, considerando $\delta_2 = \delta_3 = \delta_4 = \delta_5 = 0$. Nos três gráficos, os parâmetros do tunelamento obedecem $\Delta_i = J/8$ sendo $i = 1, N$ com $N = 3, 4, 5$	58

3.8 (a) Espectro de energia para o sistema composto por 2, 3, 4, 5 e 10 moléculas, em função das dessintonias entre os níveis eletrônicos das moléculas que compõem cada sistema. Foi considerado um pequeno intervalo de variação de forma que $-10^{-4} \leq \delta \leq 10^{-4}$, o tunelamento entre os pontos das moléculas utilizado foi de $\Delta_i = \Delta = J/8$ em todos os casos. (b) Generalização dos resultados obtidos para um sistema de N moléculas, onde os estados de borda, $|\text{FLIP}_N\rangle_{\mp}^{\text{GHZ}}$ e $|\text{GHZ}_N\rangle_{\mp}$, estão respectivamente alocados nos níveis de energia $E = \mp J(N - 1)$ 59

4.1 Primeiros 24 autovalores de energia do Hamiltoniano (3.1) como função da dessintonia na molécula 1, $\delta_1 = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$, considerando $\delta_2 = 0$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega$ e $g_1 = g_2 = 0,1\omega$. O ramo preto comporta os quatro estados (o estado fundamental e os três primeiros estados excitados) correspondentes ao subespaço $\mathcal{S}_{B,(00)}$; o ramo vinho comporta oito estados (do 4º ao 11º estado excitado) relacionados aos subespaços $\mathcal{S}_{B,(10)}$ e $\mathcal{S}_{B,(01)}$ e o ramo azul comporta doze estados (do 12º ao 23º estado excitado) correspondentes aos subespaços $\mathcal{S}_{B,(11)}$, $\mathcal{S}_{B,(20)}$, e $\mathcal{S}_{B,(02)}$ 66

4.2 Espectro de energia e concorrência eletrônica como função de δ_1 , para o primeiro (linha sólida preta), o segundo (linha preta pontilhada), o terceiro (linha marrom sólida) e o quarto (linha marrom pontilhada) autoestados do Hamiltoniano (3.1): (a) energias e (c) a concorrência dos estados, considerando $\delta_2 = 0$; (c) energias e (d) a concorrência, para $\delta_2 = 0,1\omega$. Os anticruzamentos de energia são indicados com setas e identificados por letras (veja o texto principal para mais detalhes). Os parâmetros físicos utilizados nas simulações foram $g = 0,1\omega$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega$. Em todas as figuras as linhas amarelas estão associados ao estado fundamental, as linhas laranjas ao primeiro estado excitado, a linha vinho ao segundo estado excitado e a linha verde oliva ao terceiro estado excitado. O ponto de anticruzamento C' , destacado no gráfico (b) está associado ao estado eletrônico de Bell $|\Psi_{-}\rangle$ que é vestido por modos vibracionais. 68

- 4.3 Espectro de energia e concorrência eletrônica como função de δ_1 , para os quatro primeiros autoestados do Hamiltoniano (3.1): (a) energias e (c) a concorrência dos estados, considerando $\delta_2 = 0$; (c) energias e (d) a concorrência, para $\delta_2 = 0,1\omega_1$. Os anticruzamentos de energia são indicados com setas e identificados por letras (veja o texto principal para mais detalhes). Os parâmetros físicos utilizados nas simulações foram $\omega_1 = 1\text{meV}$, $\omega_2 = 0,6\omega_1$, $g = 0,1\omega_1$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega_1$. Em todas as figuras as linhas amarelas estão associados ao estado fundamental, as linhas laranjas ao primeiro estado excitado, a linha vinho ao segundo estado excitado e a linha verde oliva ao terceiro estado excitado. 71
- 4.4 Espectro de energia e concorrência eletrônica como função de δ_1 , considerando $g_1 \neq g_2$, para os quatro primeiros autoestados do Hamiltoniano (3.1): (a) energias e (d) a concorrência dos estados, considerando $\delta_2 = 0$; (b) energias e (e) a concorrência, para $\delta_2 = 0,1\omega_1$; (c) energias e (f) a concorrência para $\delta_2 = 0,2\omega_1$. Os anticruzamentos de energia são indicados com setas e identificados por letras (veja o texto principal para mais detalhes). Os parâmetros físicos utilizados nas simulações foram $\omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$, $g_1 = 0,1\omega_1$, $g_2 = 0,4\omega_1$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega_1$. Em todas as figuras as linhas amarelas estão associados ao estado fundamental, as linhas laranjas ao primeiro estado excitado, a linha vinho ao segundo estado excitado e a linha verde oliva ao terceiro estado excitado. 72
- 4.5 Espectro de energia e concorrência eletrônica como função de δ_1 , para os quatro primeiros autoestados do Hamiltoniano (3.1): (a) energias e (c) a concorrência dos estados, considerando $\delta_2 = 0$; (c) energias e (d) a concorrência, para $\delta_2 = 0,1\omega_1$. Os anticruzamentos de energia são indicados com setas e identificados por letras (veja o texto principal para mais detalhes). Os parâmetros físicos utilizados nas simulações foram $\omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$, $g_1 = g_2 = 0,1\omega_1$, $\Delta_1 = 5 \times 10^{-3}\omega_1$ e $\Delta_2 = \Delta_1/2$. Em todas as figuras as linhas amarelas estão associados ao estado fundamental, as linhas laranjas ao primeiro estado excitado, a linha vinho ao segundo estado excitado e a linha verde oliva ao terceiro estado excitado. 75

- 4.6 Dinâmica do emaranhamento eletrônico como função de θ para diferentes valores de g , considerando os parâmetros físicos do anticruzamento de energia C' : $\Delta = \Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega$ and $\delta = \delta_1 = \delta_2 = 0,1\omega$. Aqui, os resultados numéricos de C (pontos em preto) e a expressão analítica $C_{2ls}(t)$ conforme definido na equação (4.23) (linha cinza) foram obtidas considerando (a) $g = 0,05\omega$, (b) $g = 0,10\omega$, (c) $g = 0,15\omega$, (d) $g = 0,22\omega$, (e) $g = 0,40\omega$, e (f) $g = 0,50\omega$ 77
- 4.7 Razão $r = \Omega/\Omega_0$ como função do acoplamento elétron-fônon, g , fornecida pela equação (4.20), considerando os parâmetros físicos referentes ao anticruzamento C' da figura 4.2: $\Delta = \Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega$ e $\delta = \delta_1 = \delta_2 = 0,1\omega$. 79
- 4.8 Evolução temporal da fidelidade, \mathcal{F} , considerando o estado alvo $|\Psi(\varphi_{tar})\rangle$ para duas escolhas de fase relativa, $\varphi_{tar} = -\pi/2$ (pontos em marrom), e $\varphi_{tar} = \pi/2$ (triângulos em preto). Os parâmetros físicos considerados são os mesmos escolhidos na figura 4.6 com (a) $g = 0,1\omega$ e (b) $g = 0,4\omega$. As linhas representam a evolução da $\mathcal{F}_{2ls}(\theta)$ considerando as mesmas condições físicas $\varphi_{tar} = -\pi/2$ (linha sólida preta) e $\varphi_{tar} = \pi/2$ (linha preta pontilhada). . . 81
- 4.9 Dinâmica do emaranhamento eletrônico como função de θ considerando os efeitos de se ter diferenças entre parâmetros de frequência e de acoplamento elétron-fônon relacionados aos modos vibracionais 1 e 2. (a) Considerando o caso em que as frequências dos modos vibracionais são diferentes, sendo $\omega_1 = 1\text{meV}$ e $\omega_2 = 0,6\omega_1$, os demais parâmetros utilizados foram: $g_1 = g_2 = 0,1\omega_1$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega_1$, os mesmos do anticruzamento C' da figura 4.3. (b) Considerando os acoplamentos elétron-fônon dos modos vibracionais diferentes, sendo $g_2 = 0,4g_1$, foram utilizados os mesmos parâmetros do anticruzamento C'' presente na figura 4.4, onde $\omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$, $\delta_1 = \delta_2 = 0,2\omega_1$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega_1$ 82
- 4.10 Dinâmica do emaranhamento eletrônico como função de θ para diferentes valores de ω_2 , considerando taxas de tunelamentos para as moléculas 1 e 2 diferentes, sendo $\Delta_1 = 5 \times 10^{-3}\omega$ e $\Delta_2 = \Delta_1/2$. Os demais parâmetros do anticruzamento C' da figura 4.5 (b) onde: $\omega_1 = 1\text{meV}$; $\delta_1 = \delta_2 = 0,1\omega$ e $g_1 = g_2 = 0,1\omega$. Aqui, os resultados numéricos de C foram obtidas considerando (a) $\omega_2 = \omega_1$, (b) $\omega_2 = 0,6\omega_1$, (c) $\omega_2 = 0,3\omega_1$, e (d) $\omega_2 = 0,25\omega_1$ 84

- 5.1 Primeiros 24 autovalores de energia do Hamiltoniano (3.1) como função da dessintonia na molécula 1, $\delta_1 = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$, em ambos os casos foi considerado $\delta_2 = 0$. Em (a) consideramos: $\omega = \omega_1 = \omega_2 = 10\text{meV}$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-2}\omega$, e $g_1 = g_2 = 2\omega$; em (b) $\omega = \omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$, $\delta_2 = 0$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-1}\omega$, e $g_1 = g_2 = 2\omega$. É possível notar, comparando com o gráfico 4.1, que uma vez que reduzimos a frequência dos modos vibracionais a separação entre os ramos de energia não é apreciável. 87
- 5.2 Cálculo numérico para a negatividade logarítmica dos modos vibracionais MV1 e MV2, demonstrando os efeitos da combinação de δ_{\pm} e Δ_{\pm} na dinâmica do emaranhamento fonônico. Para a linha sólida preta foram considerados $\delta_1 = -\delta_2 = \delta$ e $\Delta_1 = -\Delta_2 = \Delta$ o que nos leva a combinação $\delta_- = 2\delta$; $\Delta_- = 2\Delta$. A linha pontilhada cinza teve como parâmetros $\delta_1 = -\delta_2 = \delta$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$ o que nos leva a combinação $\delta_- = 2\delta$; $\Delta_+ = 2\Delta$. A combinação $\delta_1 = \delta_2 = \delta$ e $\Delta_1 = -\Delta_2 = \Delta$ resultando em $\delta_+ = 2\delta$; $\Delta_- = 2\Delta$ foi utilizada para calcular o resultado representado pela linha sólida em cinza. E a linha pontilhada em verde foi obtida com $\delta_1 = \delta_2 = \delta$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$ de modo que $\delta_+ = 2\delta$; $\Delta_+ = 2\Delta$. Em todos os casos foram considerados os seguintes parâmetros: $\omega = \omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$, $\delta = 1,0\omega$, $\Delta = 0,5\omega$, e $g_1 = g_2 = 2\omega$ 89
- 5.3 Efeitos do tunelamento sob a dinâmica da negatividade logarítmica dos modos vibracionais considerando $\Delta = 0,1\omega$ (linha sólida cinza claro), $\Delta = 0,25\omega$ (linha sólida cinza escuro) e $\Delta = 0,5\omega$ (linha sólida vinho). Os restantes dos parâmetros físicos são $\omega = 1\text{meV}$, $\delta = \omega$ e $g = 2\omega$ 91
- 5.4 Cálculo numérico para a negatividade logarítmica dos modos vibracionais $\mathcal{VM}1$ e $\mathcal{VM}2$ considerando $\omega = 1\text{meV}$, $\delta = \omega$ e o parâmetro de tunelamento $\Delta = 0,5\omega$. Consideramos $g = 0,25\omega$ sendo $\alpha = 0,25$ (linha sólida preta), $g = 2\omega$ sendo $\alpha = 2$ (linha sólida cinza) e $g = 5\omega$ sendo $\alpha = 5$ (linha sólida vermelha). O inset na figura representa a função $e^{-\alpha}$ como função de valores de $\alpha = g/\omega$, com os pontos ilustrando as escolhas para o cálculo da negatividade logarítmica. 93
- 5.5 Dinâmica da negatividade logarítmica como função: (a) do parâmetro α , considerando $\omega = \omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$; $\delta_1 = \delta_2 = 1\omega$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = 0,5\omega$; (b) da taxa de tunelamento Δ com os demais parâmetros fixos em $\omega = \omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$; $\delta_1 = \delta_2 = 1\omega$; $g_1 = g_2 = 2\omega$ e $\alpha = 2$ 94

Lista de Tabelas

2.1	Tabela de convenções associando cada estado de Bell (coluna esquerda) medido pelo receptor a uma mensagem de dois bits (coluna direita) enviada pelo transmissor.	33
2.2	Tabela que relaciona a medida obtida pelo transmissor T com a operação unitária a ser realizada pelo receptor R com o objetivo de determinar o estado $ \eta\rangle$, teletransportado de T para R.	35
3.1	Tabela que relaciona os valores numéricos do tangle para estados de cluster de 4 qubits com as respectivas proposições de medidas, considerando situações análogas àquelas definidas para 3 qubits, conforme discutido na subseção 2.2.5.	55
3.2	Tabela que relaciona os valores numéricos do tangle para os oito autoestados intermediários parcialmente emaranhados com as respectivas proposições de medidas, considerando situações análogas àquelas definidas para 3 qubits, conforme discutido na subseção 2.2.5.	56

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 (1) apontou o fato de que sistemas clássicos não seriam capazes de modelar eficientemente os sistemas quânticos e que estes só poderiam ser modelados utilizando-se outros sistemas quânticos. Em 1985, Deutsch (2) 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, (3) publica sua proposta de algoritmo quântico referente à fatoração de números inteiros grandes, e desde então a pesquisa nessa área tem despertado interesse devido as suas possíveis aplicações tecnológicas em segurança, comunicações, etc.

A possibilidade de definir superposições coerentes de estados quânticos é um dos fatores por trás das vantagens do uso de computadores quânticos. Diferentemente da computação clássica na qual um bit, unidade básica de informação, pode assumir unicamente os valores lógicos 0 ou 1, na computação quântica um bit quântico, ou qubit¹, pode ainda ser uma combinação linear de ambos. Essa superposição de estados permite que os computadores quânticos possam realizar operações simultâneas o que é chamado de *paralelismo quântico* e não tem análogo na computação clássica. O algoritmo de Deutsch foi o primeiro a utilizar esse recurso e demonstrar a maior eficiência dos computadores quânticos, ao corroborar que o mesmo resolveria o problema de determinar se uma função é constante ou balanceada após uma única operação (2). O recurso do *paralelismo quântico* também foi utilizado por Shor em seu algoritmo quântico para fatoração de números inteiros, algoritmo que apresenta um ganho de velocidade exponencial sobre sua contrapartida clássica (4, 5).

Outra consequência do princípio de superposição é a criação de estados quânticos ema-

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

ranhados, onde a interação entre diferentes subsistemas mistura os graus de liberdade das partes constituintes. O emaranhamento permite que dois ou mais subsistemas estejam correlacionados de tal forma que um subsistema não pode ser corretamente descrito sem que a sua contra-parte seja levada em conta. Este fenômeno tem importantes aplicações no processo de transmissão e processamento quântico de informação, sendo considerado um ingrediente indispensável na construção de um computador quântico escalável (6), além de estar presente em diversos protocolos de informação, como por exemplo, a codificação superdensa, o teletransporte quântico e a criptografia quântica (7, 8, 9).

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 (9), condensados de Bose-Einstein (10) e spins nucleares (11). Sistemas de estado sólido tem atraído grande interesse devido à sua potencial aplicabilidade na implementação de processamento quântico de informação (12).

Os pontos quânticos semicondutores tem se mostrado sistemas promissores para a implementação de computação quântica (12, 13). Embora a maioria das propostas teóricas e implementações físicas apareçam no contexto pontos quânticos com excitações ópticas (14, 15, 16, 17), pontos quânticos carregados são uma boa opção para definir qubits de carga acoplados por tunelamento (18, 19, 20, 21). Sistemas baseados em uma única molécula quântica tem sido amplamente explorados devido às suas potenciais aplicações como transistores de um único elétron que além de apresentarem maior eficiência teriam baixo custo (22, 23). Existem muitos exemplos bem-sucedidos de dispositivos com uma única molécula operando em regimes de bloqueio de Coulomb que apresentam um comportamento semelhante a de um transistor (24). Para aumentar ainda mais as funcionalidades desse transistor de um único elétron, é possível acoplar os estados eletrônicos à graus de liberdade nanomecânicos (25, 26, 27). Esse tipo de interação desempenha um papel significativo, trazendo vários efeitos interessantes, como transporte quântico em pontos quânticos (28, 29, 30), resfriamento local (31), transporte assistido por fônons em junções de moléculas quânticas (32, 33) e bloqueio de Franck-Condon (34), entre outros.

Uma vez definido o qubit, o acoplamento do sistema de dois níveis aos campos de ra-

dição se torna um caminho natural para sua manipulação. O modelo de maior sucesso foi proposto por Rabi (35, 36), que pode ser tratado tanto numericamente quanto analiticamente (37, 38, 39). Em uma aproximação específica, o modelo de Jaynes-Cummings, se torna um suporte teórico útil para o estudo de vários fenômenos quânticos, incluindo a formação de gatos Schrödinger e portas lógicas quânticas (40, 41). Nesse contexto, operações lógicas de um único qubit podem ser implementadas por meio do controle da interação elétron-boson (42). Outro resultado interessante que a interação entre partículas e campos bosônicos pode trazer é a formação de polarons (43, 44). Utilizar polarons para codificar qubits traz desafios, pois a interação elétron-fônon geralmente atua como um mecanismo de perda de coerência (45, 46, 47). No que diz respeito ao problema do surgimento de correlações quânticas entre qubits, mediadas por modos bosônicos, alguns trabalhos teóricos são encontrados na literatura (48, 49, 50). Em trabalhos experimentais recentes, a geração de correlações quânticas é demonstrada considerando o acoplamento entre estados de exciton e fônons (51). Outra possibilidade é utilizar o acoplamento com fótons para controlar operações lógicas de dois qubits (52). No entanto no que diz respeito ao estudo do emaranhamento em pontos quânticos existe uma escassez de propostas que auxiliem na geração de estados nos quais os qubits eletrônicos possam ser maximamente emaranhados.

Dentre as possíveis implementações experimentais onde os estados de carga contidos em pontos quânticos apresentam uma interação com modos vibracionais podemos analisar dois contextos distintos: pontos quânticos definidos no interior de nanotubos de carbono (CNT, do inglês *carbon nanotubes*) aos quais os modos vibracionais dos nanotubos se acoplam, ou pontos quânticos acoplados a uma cavidade. Os sistemas baseados em CNT apresentam ser mais interessantes devido ao amplo conjunto de aplicações diretas (53). Isso inclui a implementação de ressonadores sintonizáveis de frequência ultra rápida (54, 55), *nanoradios* (56), e sensores de massa ultrassensíveis (57, 58). Além disso, quando operados como ressonadores mecânicos, os nanotubos apresentam fatores de alta qualidade (27, 59, 60) tornando possível, por exemplo, excitar, detectar e controlar modos vibracionais específicos de um CNT injetando uma corrente a partir de uma ponta de microscopia de tunelamento (61). Outro fato interessante é que foram observados regimes de acoplamento forte entre as oscilações de um elétron e os modos vibracionais de um CNT em suspensão, sintonizáveis pelo uso de portas de tensão (62). No que diz respeito às aplicações em micro e nanoeletrônica, os nanotubos de carbono apresentam fenômenos físicos interessantes como condução balística (63) e efeitos de bloqueio de Coulomb em dispositivos quânticos baseados em nanotubos simples e duplos (26). Outra proposta de aplicação interessante, apresentada

por Wang, é a possibilidade de utilizar modos vibracionais mecânicos para induzir portas lógicas quânticas de dois qubits e gerar emaranhamento entre estados de *spin* nos CNT's (64). Outra possibilidade de uso dos fônons contidos nos nanotubos de carbono é utilizá-los como qubits “viajantes” que propiciariam a troca de informação entre *spins* eletrônicos, mesmo que a longas distâncias (55).

Em relação ao segundo cenário experimental, onde os graus de liberdade eletrônicos interagem com modos vibracionais, também podemos considerar as cavidades fonônicas piezoelétricas, com base nos espelhos de Bragg nos quais um modo vibracional está confinado (65, 66). O acoplamento elétron-fônon deste tipo de sistema foi demonstrado experimentalmente por meio de medidas de transporte em uma estrutura quântica de pontos duplos inseridos em uma cavidade no qual o tunelamento eletrônico é assistido por fônons. O fator de acoplamento elétron-fônon neste sistema é dez vezes maior se compararmos aos acoplamentos encontrados em eletrodinâmica de cavidades (66).

Neste trabalho, tivemos como principal objetivo continuar os estudos iniciados no mestrado a respeito do emaranhamento quântico em sistemas compostos por moléculas quânticas acopladas. Até o momento, investigamos e caracterizamos as propriedades do emaranhamento eletrônico em um sistema de moléculas quânticas compostas por dois subsistemas de pontos quânticos que interagem entre si via interação coulombiana. Cada um desses subsistemas é composto por uma dupla de pontos quânticos semicondutores acoplados por tunelamento. Dando sequência a esse estudo, iniciamos nossa análise verificando como o emaranhamento do eletrônico das moléculas se comporta a medida que aumentamos o número de subsistemas que compõem o sistema completo, uma vez que considerarmos a escalabilidade de sistemas quânticos é um dos requisitos fundamentais para a implementação de dispositivos de computação quântica. Seguimos nosso estudo do emaranhamento em moléculas quânticas inserindo uma maior complexidade ao nosso problema passando a considerar os subsistemas de moléculas agregados a modos vibracionais, uma vez que esse tipo de sistema possui uma aplicação mais ampla podendo abranger uma gama maior de sistemas baseados em pontos quânticos. Utilizando os conhecimentos adquiridos, iniciamos nossa investigação do emaranhamento eletrônico do sistema verificando o espectro de energia do sistema como função da dessintonia eletrônica entre os pontos quânticos contidos nas moléculas, e verificamos o comportamento do emaranhamento dos autoestados correspondentes. Reescrevemos o Hamiltoniano do sistema em uma base combinada de estados eletrônicos de Bell e estados de fônons, sendo este formalismo utilizado para elucidar muitas das características apresentadas na dinâmica do sistema. Nossos resultados ana-

líticos a respeito do sistema nos levaram a verificar o comportamento do emaranhamento dos fônons gerados pelas oscilações eletrônicas das moléculas, o que nos levou a determinar dois regimes de frequências vibracionais que dissociam a possibilidade de se obter estados fonônicos com certo grau de emaranhamento dos estados de Bell dos qubits de carga.

A tese está disposta da seguinte forma: No capítulo 1, discutimos brevemente as propriedades das nanoestruturas semicondutoras e descrevemos a peça fundamental para construção de nossos modelos teóricos: a molécula quântica. Seguimos descrevendo como essas moléculas estão dispostas e como interagem entre si nos dois modelos distintos, o primeiro com uma interação elétron-elétron e o segundo considerando uma interação elétron-fônon, que utilizaremos no desenvolvimento dos nossos resultados. No capítulo 2, começamos discutindo brevemente o formalismo do operador densidade, muito útil nos estudos de correlações quânticas. Em seguida, apresentamos as definições de emaranhamento para sistemas puros e mistos, e apresentamos os quantificadores de emaranhamento utilizados neste trabalho. No capítulo 3, consideramos o modelo no qual as moléculas interagem por Coulomb e considerando configurações contendo $N = 3, 4, 5, ..$ subsistemas de moléculas em uma configuração paralela nas quais cada qubit de carga se acopla ao seus primeiros vizinhos via interação de Coulomb. No capítulo 4, apresentamos os resultados obtidos acerca do emaranhamento eletrônico nas moléculas quânticas considerando o sistema no qual os pontos quânticos das moléculas estão acoplados a modos vibracionais. Passamos, no capítulo 5, ao estudo do emaranhamento considerando não os estados dos qubits eletrônicos, mas sim entre os dois modos vibracionais do sistema composto. As conclusões desta tese se encontram no capítulo 6.

Capítulo 1

Moléculas quânticas: características fundamentais e modelos

Apresentamos neste capítulo, os conceitos fundamentais e modelos que usaremos na descrição do nosso sistema físico de interesse: as moléculas quânticas. Com o objetivo de entender melhor esse tipo de sistema, faremos na seção 1.1 uma discussão breve sobre as propriedades de confinamento presentes em heteroestruturas semicondutoras. Na seção 1.2, após apresentar os aspectos gerais dos pontos quânticos semicondutores, descrevemos detalhadamente um sistema composto por duas moléculas quânticas acopladas. O Hamiltoniano efetivo de uma única molécula quântica é apresentado na seção 1.3 o Hamiltoniano efetivo de uma única molécula composta por dois pontos quânticos, que é o componente principal de todos os nossos modelos, e apresentamos uma das formas de interação entre duas ou mais moléculas, o acoplamento de Coulomb, que será convenientemente utilizado para estudar a escalabilidade de emaranhamento em um sistema com N moléculas quânticas. Na seção 1.4, apresentamos o nosso modelo de brinquedo, que será extensivamente utilizado no estudo do emaranhamento molecular do capítulo 4, e na análise do emaranhamento vibracional do capítulo 5. Este outro modelo insere outro tipo de acoplamento entre as moléculas quânticas no qual a interação entre os estados eletrônicos acontece por meio de um acoplamento com modos vibracionais nos quais os pontos quânticos moleculares estão inseridos.

1.1 Heteroestruturas semicondutoras

Desde 1947, quando J. Bardeen e W. Brattain demonstraram o efeito transistor em materiais semicondutores, a comunidade científica voltou sua atenção ao estudo desses materiais, o que resultou em inúmeros avanços, seja no campo tecnológico ou na área de pesquisa em ciência básica. Daí em diante começou-se a explorar as propriedades físicas dos dispositivos semicondutores 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 (67). 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 (68), Esaky e Chang mediram propriedades de transporte (69) e Dingle, Wiegman e Henry observaram a quantização no espectro de energia em poços quânticos (70).

Nas décadas seguintes, anos 80 e 90, os físicos experimentais voltaram seus esforços em aprimorar técnicas de crescimento afim de aumentar a qualidade dos cristais e de conseguir camadas com espessuras nanométricas. Dentre as técnicas desenvolvidas, 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 (71). 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.

¹A população eletrônica de qualquer cristal é agrupada em bandas de energia separadas por regiões

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 restringem o movimento dos portadores de carga. 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 (73). Os maiores avanços tecnológicos vieram quando se obteve o confinamento total dos portadores de carga, de modo que estes passaram a ter seus movimentos restritos nas três dimensões gerando assim um sistema 0-dimensional, os denominados pontos quânticos (74, 75, 76).

A redução na dimensionalidade desses dispositivos tem um efeito direto nas propriedades eletrônicas do sistema. Isso pode ser verificado ao analisarmos a densidade de estados do sistema. Esse parâmetro físico é uma função que descreve o número N de estados disponíveis por energia por unidade de volume, e é definida como

$$g(E) = \frac{2}{\mathcal{V}} \frac{dN}{dE}. \quad (1.1)$$

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

$$g^{3D}(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - \epsilon_i}, \quad (1.2)$$

onde ϵ_i são as energias discretas dos níveis, \hbar é a constante de Planck e m^* é a massa

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 (72).

efetiva² do elétron. Para os poços quânticos a densidade de estados é uma função degrau

$$g^{2D}(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \sigma(E - \epsilon_i); \quad (1.3)$$

para os fios quânticos temos

$$g^{1D}(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar} \sqrt{m^*} 2(E - \epsilon_i); \quad (1.4)$$

e para pontos quânticos a densidade tem a forma

$$g^{0D}(E) = 2\delta(E - \epsilon_i). \quad (1.5)$$

A figura 1.1 mostra os efeitos da redução da dimensionalidade sobre a densidade de estados. De acordo com a equação (1.2) a densidade de estados de semicondutores tipo *bulk* é uma função contínua como mostra a figura 1.1 (a). Quando os portadores estão livres para se mover apenas em duas dimensões como no caso dos poços quânticos há quebras na continuidade da função (equação 1.3) o que podemos ver na figura 1.1 (b). No caso dos fios quânticos (1D), vemos na figura 1.1 (c) que a densidade de estados é caracterizada por singularidades (77). Já a densidade de estados dos pontos quânticos é simplesmente dada por uma série de funções delta (figura 1.1 (d)) e, como nos átomos, depende apenas do número de níveis confinados, sendo por isso muitas vezes chamados de átomos artificiais (74).

1.2 Pontos quânticos

Assim como os átomos naturais, os pontos quânticos possuem um espectro discreto de níveis de energia e podem conter um número discreto de elétrons. Átomos artificiais, no entanto, possuem uma propriedade única: a corrente através do ponto e a capacitância entre os condutores podem variar em muitas ordens de grandeza quando a carga é alterada por um único elétron (78). 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 por processos como o MBE e o MOVPE (*Metalorganic Vapour Phase Epitaxy*). Esta técnica tem boa reprodutividade e a densidade de pontos

²Massa 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 (72).

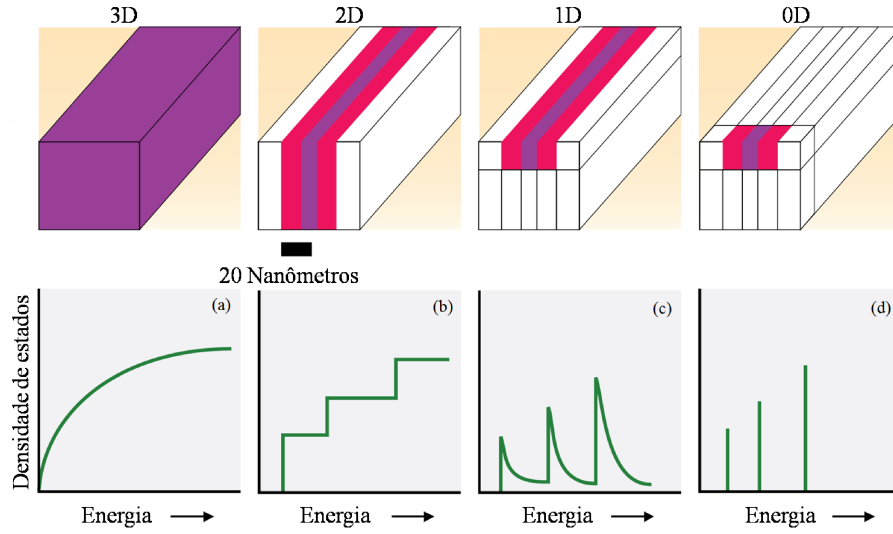


Figura 1.1: Comparação entre as densidades de estados em função da energia para sistemas de dimensão três (3D), dois (2D), um (1D) e zero (0D). (a) Densidade de estados em semiconductor tipo *bulk*; (b) Densidade de estados em poços quânticos; (c) Densidade de estados em fios quânticos; (d) Densidade de estados de pontos quânticos.

quânticos é tipicamente da ordem de 10^9cm^{-2} a 10^{11}cm^{-2} , sendo sua principal desvantagem a posição aleatória dos pontos quânticos. Técnicas de litografia, como a litografia por feixe de elétrons e a litografia por feixe de íons, e a técnica de campo elétrico modulado também são bastante utilizadas.

Como foi mencionado anteriormente, utilizando técnicas de MBE é possível construir heteroestruturas com níveis de energia quantizados na direção do crescimento, enquanto os elétrons ficam livres para se moverem nas outras duas direções. Esses elétrons livres nesse plano constituem o que se chama de gás de elétrons bidimensional (2DEG) cujos valores típicos da densidade eletrônica são de $(1 - 5) \cdot 10^{15} \text{m}^{-2}$. 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, 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 1.2 (a) e (b) mostram um ponto quântico construído pelo confinamento de elétrons no plano do gás

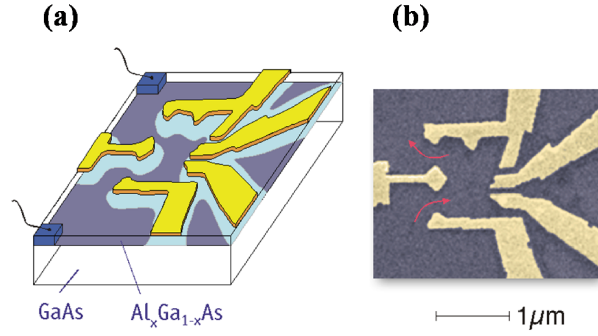


Figura 1.2: (a) Imagem representativa de uma junção de amostras dos materiais semicondutores GaAs/AlGaAs que formam, devido a diferença do *gap* de energia entre esses materiais, um gás de elétrons bidimensional. O confinamento nas outras duas direções ocorre com a aplicação de tensões de voltagem nos eletrodos formados sobre a camada de AlGaAs; (b) Imagem de um ponto quântico eletrostático similar ao da figura (a), feita através de microscopia eletrônica.

bidimensional onde, quando uma voltagem é aplicada aos eletrodos, o campo resultante expelle 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 (79). Transporte eletrônico, efeitos de bloqueio de Coulomb e regime Kondo também têm sido investigados nestes sistemas (80, 81).

1.2.1 Moléculas Quânticas

Após analisar as propriedades físicas e de obter o controle de fabricação de pontos quânticos individuais, iniciou-se o estudo de sistemas compostos onde dispositivos são formados com mais de um ponto quântico, que podem interagir entre si. Nesse tipo de sistema, uma unidade básica de informação quântica (um qubit ou bit quântico) pode ser definida de diferentes formas. Um exemplo disto é o trabalho de Loss e DiVincenzo em que o spin dos elétrons em cada ponto atua como um qubit (12). Existem também propostas de pontos quânticos nos quais o grau de liberdade da carga eletrônica é explorada para definir o qubit (82, 83, 84).

Dentre as propostas experimentais já implementadas, onde o grau de liberdade da carga elétrica foi utilizada, encontramos o dispositivo construído por Hayashi e colaboradores,

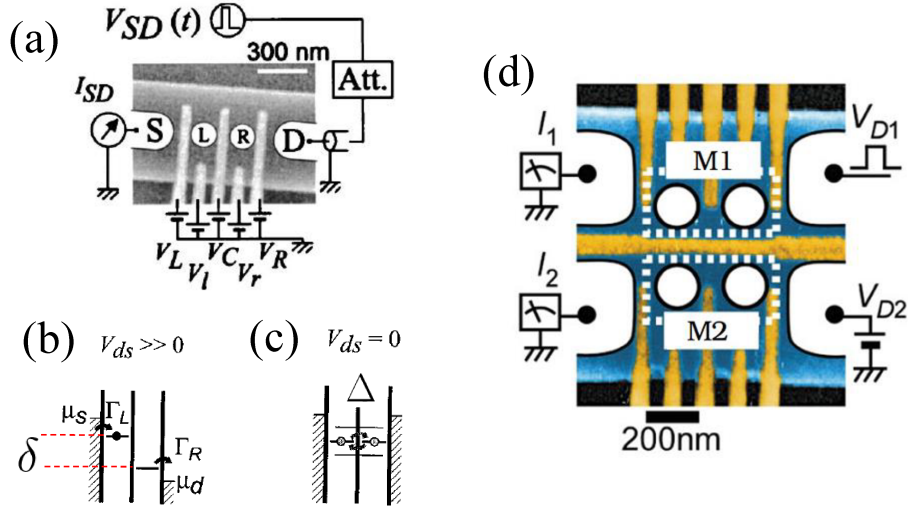


Figura 1.3: (a) Imagem, feita através de microscopia eletrônica, da amostra utilizada por Fujisawa et al. Os eletrodos V_L , V_L , V_C , V_r e V_R são tensionados negativamente, afim de definir os dois pontos quânticos (L e R, do inglês *left* e *right*) entre a fonte (S, do inglês *Source*) e o dreno (D, *Drain*). V_{SD} é a diferença de potencial entre a fonte e o dreno. (b) Diagrama esquemático do regime de transporte eletrônico. Γ_L e Γ_R são, respectivamente, as taxas de tunelamento da fonte para a $|L\rangle$ e de $|R\rangle$ para o dreno, δ é a dessintonia entre os níveis eletrônicos do ponto da direita e do ponto da esquerda. (c) Regime de bloqueio de Coulomb. (d) Imagem feita através de microscopia eletrônica do dispositivo utilizado por Shinkai et al. As dessintonias nas moléculas, δ_1 e δ_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.

onde foi demonstrada a possibilidade de manipular coerentemente um único elétron excedente em um sistema constituído por dois pontos quânticos acoplados por tunelamento (18, 85). Os pontos foram definidos por portas metálicas no gás de elétrons bidimensional em uma heteroestrutura de GaAs/AlGaAs, conforme mostrado na figura 1.3 (a). Assim como pontos quânticos isolados são considerados como átomos artificiais, dois pontos quânticos acoplados podem ser considerados uma molécula artificial. Os autores demonstraram que o qubit pode ser inicializado, manipulado e medido, pela manipulação da diferença de voltagem entre a fonte e o dreno, V_{SD} .

Na figura 1.3 (b) apresentamos o diagrama esquemático do regime de transporte, onde o sistema é inicializado com o tunelamento do elétron da fonte para o ponto da esquerda, isso ocorre quando $V_{SD} \gg 0$ ($\sim 650\mu\text{eV}$) e a taxa de tunelamento Γ_L é muito maior que a dessintonia na molécula. Após a inicialização, a diferença de voltagem entre a fonte e o

dreno é desligada $V_{SD} = 0$, por um tempo de manipulação, onde a molécula é ajustada em um regime de bloqueio de Coulomb, figura 1.3 (c) (86). Neste caso, é permitido apenas tunelamento de primeira ordem (Δ) entre os pontos da molécula, de modo que o elétron pode oscilar entre o ponto da esquerda e o ponto da direita. Durante este tempo de manipulação, temos um sistema artificial de dois níveis que define o qubit de carga (85): o elétron em excesso ocupa ou o ponto da esquerda (do inglês *left*, $|L\rangle$) ou o ponto da direita (*right*, $|R\rangle$), o que define o nosso qubit.

Após o tempo de manipulação, V_{SD} é restaurada para o processo de medida, figura 1.3 (b) (85), e o elétron tunela do ponto da direita para o dreno contribuindo para a medida de corrente. Assim, com exceção do tempo de manipulação, o sistema perde e recebe elétrons para os reservatórios, de modo que possui quatro níveis eletrônicos: $|L\rangle$, $|R\rangle$, nenhum elétron na molécula $|0\rangle$ e um elétron em excesso em cada ponto da molécula $|2\rangle$.

1.3 Descrição teórica de moléculas quânticas usando *simple toy models*

Em nosso trabalho, consideraremos inicialmente o regime de bloqueio de Coulomb, onde temos apenas os estados $|L\rangle$ e $|R\rangle$ que definem o nosso qubit. Neste caso, podemos considerar dois estados de carga, em que um elétron em excesso ocupa o ponto da esquerda, que daqui em diante será definido como o estado $|1\rangle$, ou o ponto da direita, definido como estado $|0\rangle$. O Hamiltoniano efetivo de uma única molécula pode ser escrito como

$$H_{1M} = \delta(|L\rangle\langle L| - |R\rangle\langle R|) + \Delta(|L\rangle\langle R| + |R\rangle\langle L|) \quad (1.6)$$

onde δ é a dessintonia entre os níveis eletrônicos, definida como $\delta = \varepsilon_R - \varepsilon_L$, sendo ε_R e ε_L os níveis eletrônicos do ponto da direita e da esquerda respectivamente, figura 1.3 (b). O termo Δ descreve o tunelamento entre pontos da molécula. Podemos reescrever este Hamiltoniano na forma matricial podemos como

$$H = \begin{pmatrix} \delta & 0 \\ 0 & \delta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \Delta \\ \Delta & 0 \end{pmatrix} = \delta\sigma_z + \Delta\sigma_x, \quad (1.7)$$

onde o ordenamento da base utilizada foi $\{|L\rangle, |R\rangle\}$ o que nos leva a representação do Hamiltoniano utilizando operadores de pseudo-spin através das matrizes de Pauli σ_j ($j = x, y, z$).

Uma das vantagens importantes desse tipo de sistema é sua escalabilidade, ou seja, a possibilidade de acoplar duas ou mais moléculas. Isso foi demonstrado pelo mesmo grupo que, em 2009, construíram um dispositivo, onde duas moléculas quânticas estão acopladas eletrostaticamente mas isoladas por condução, cada uma contendo um qubit de carga (20). Nesse sistema a corrente de tunelamento ressonante através de cada molécula é influenciada pelo estado de carga da segunda molécula (19), 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.

Na figura 1.3 (d), a imagem feita com uso de microscopia eletrônica mostra o sistema integrado pelas duas moléculas, **M1** e **M2**, utilizadas no experimento de Shinkai et al. 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 parâmetro dos qubits podem ser bem controlados através das 11 portas de voltagem que integram o sistema. Afim de preservar a interação de Coulomb entre os dois qubits, as moléculas são ajustadas em um regime de acoplamento fraco.

O Hamiltoniano que descreve este sistema é dado por:

$$\hat{H}_{2M} = \sum_i \left(\delta_i \sigma_z^{(i)} + \Delta_i \sigma_x^{(i)} \right) + U_{12}, \quad (1.8)$$

onde δ_i é a dessintonia entre os níveis eletrônicos dos pontos de cada molécula individual e Δ_i representa o tunelamento dentro de cada uma das moléculas $M(i = 1, 2)$. O último termo é o que acopla as duas moléculas e esta relacionado à interação de Coulomb entre o elétron da molécula 1 e o elétron da molécula 2, e tem sua forma explícita dada pela equação

$$U_{12} = \begin{pmatrix} J & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -J & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J \end{pmatrix} = J \sigma_z^{(1)} \otimes \sigma_z^{(2)}, \quad (1.9)$$

onde J é o parâmetro que quantifica a interação coulombiana.

1.4 Modelo para descrição da interação elétron-fônon

Vamos agora descrever um sistema um pouco mais complexo, onde algumas das características do sistema descrito na seção anterior serão preservadas muito embora visamos aqui uma descrição teórica ampliada onde os resultados obtidos sejam passíveis de uma aplicação mais ampla e que possam abranger uma gama maior de sistemas baseados em pontos quânticos, como por exemplo sistemas onde os pontos quânticos estão confinados a nanotubos de carbono (53, 61, 32, 87, 33). Outros sistemas onde nossos resultados podem ser explorados são os dispositivos híbridos, onde pontos quânticos estão acoplados com nano resonadores. Estes sistemas, além de fornecerem um ótimo cenário para a exploração da fronteira entre a física clássica e quântica, têm aberto perspectivas atraentes para as tecnologias de informação quântica (88, 89, 90, 91).

O atual sistema, é também constituído por moléculas que são definidas por pontos quânticos confinados em modos vibracionais, como mostra a figura 1.4. A molécula 1 é formada pelo ponto quântico 1, que tem seus níveis eletrônicos acoplados ao modo vibracional 1 (MV1), e pelo ponto quântico 2, que interage com o segundo modo vibracional (MV2). Do mesmo modo a molécula 2 é definida pelos pontos 3 e 4, cada um vinculado a um dos modos vibracionais (3-MV1 e 4-MV2). Assumimos que os pontos 1-2 (3-4) estão acoplados por tunelamento e que cada par contém um único elétron que pode ocupar o ponto da esquerda ou o ponto da direita. Deste modo, esses dois níveis definem um qubit de carga, cujos estados 0 e 1 estão conectados com a posição do elétron.

Ao se acoplarem com os modos vibracionais das moléculas, os elétrons podem, a cada transição por tunelamento, criar ou aniquilar vibrações nos modos fonônicos. Essa interação, não muda diretamente a população eletrônica das moléculas, mas propicia uma troca de informações físicas entre o subsistema da molécula 1 e o da molécula 2, o que pode trazer resultados interessantes mesmo em casos em que a distância entre as moléculas faça com que a interação coulombiana, descrita pela equação (1.9), seja suficientemente fraca podendo ser, em alguns casos, desconsiderada.

O hamiltoniano geral do nosso sistema da figura 1.4 é escrito da seguinte forma

$$H = H_{\mathcal{D}} + H_{\mathcal{P}} + \Delta_{\mathcal{DP}}. \quad (1.10)$$

Onde $H_{\mathcal{D}}$ e $H_{\mathcal{P}}$ são, respectivamente, os hamiltonianos livres dos pontos quânticos e dos modos vibracionais, $V_{\mathcal{DP}}$ descreve o acoplamento entre os pontos e os modos fonônicos. Enquanto cada par de pontos quânticos formam um subespaço bidimensional, os modos

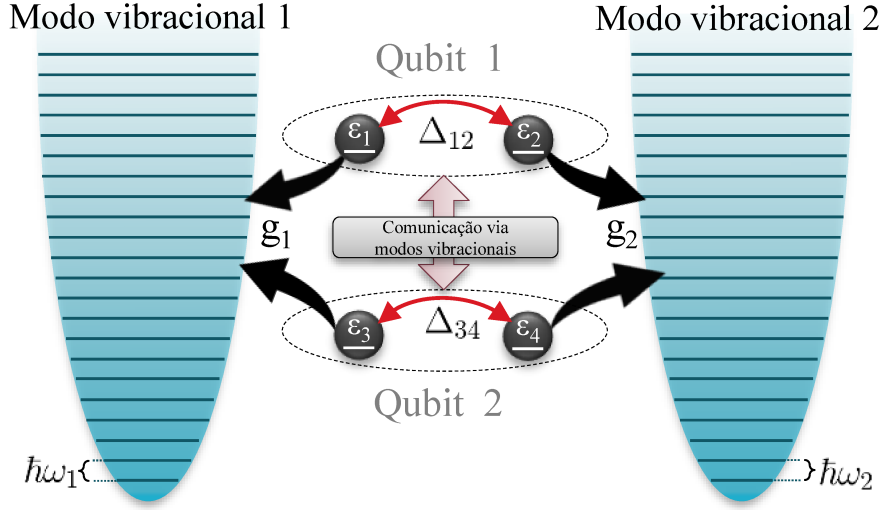


Figura 1.4: Representação esquemática do sistema considerado: quatro pontos quânticos dispostos em duas moléculas, sendo a primeira composta pelos pontos 1 e 3 e a segunda pelos pontos 2 e 4. Os pontos 1 (3) e 2 (4) estão acoplados por tunelamento, e os níveis eletrônicos estão acoplados com os graus de liberdade dos modos vibracionais das moléculas 1 e 2. O qubit é definido como a posição do elétron nos pontos 1-2 (3-4).

vibracionais são descritos usando o modelo de oscilador harmônico quântico, cada um com dimensão infinita m e l , onde $m(l) \rightarrow \infty$ para o subespaço de fônons.

O Hamiltoniano livre que descreve o subsistema composto pelos quatro pontos quânticos é escrito da seguinte forma ($\hbar = 1$):

$$H_D = \sum_{i=1}^4 \varepsilon_i N_i^D + \Delta_{12} (S_1^\dagger S_2 + S_2^\dagger S_1) + \Delta_{34} (S_3^\dagger S_4 + S_4^\dagger S_3), \quad (1.11)$$

onde $S_{i(j)}^\dagger$ ($S_{i(j)}$) é o operador de criação (aniquilação) para o $i(j)$ -th ponto quântico e $N_{i(j)}^D = S_{i(j)}^\dagger S_{i(j)}$. Os parâmetros $\varepsilon_{i(j)}$ representam os níveis eletrônicos para cada ponto enquanto $\Delta_{12(34)}$ descreve o tunelamento entre os pontos. Se considerarmos um único modo vibracional por molécula, o Hamiltoniano livre para os modos vibracionais é dado por

$$H_P = \omega_1 B_1^\dagger B_1 + \omega_2 B_2^\dagger B_2, \quad (1.12)$$

onde $\omega_{1(2)}$ é a energia do modo vibracional. O operador B_k^\dagger (B_k) cria (aniquila) uma excitação no subespaço do modo vibracional correspondente.

Vamos agora analisar o termo Δ_{DP} , que é responsável pelo acoplamento elétron-fônon. Esse acoplamento acontece quando um único elétron no ponto i interage com o subsistema

dos nanotubos criando ou aniquilando uma excitação no modo vibracional correspondente. Consideramos que o acoplamento elétron-fônon é o mesmo para ambas as moléculas, com um intensidade controlada pelo parâmetro g . A matriz $V_{\mathcal{DP}}$ é escrita da seguinte forma

$$\Delta_{\mathcal{DP}} = g_1 (N_1^{\mathcal{D}} + N_3^{\mathcal{D}}) \otimes (B_1^\dagger + B_1) + g_2 (N_2^{\mathcal{D}} + N_4^{\mathcal{D}}) \otimes (B_2^\dagger + B_2), \quad (1.13)$$

Sowa et. al. (33) demosntraram a possibilidade de haver uma diferença de fase nos parâmetros de acoplamento, onde $\phi_m = \mathbf{k}_m \cdot \mathbf{d}_m$, com \mathbf{k}_m é o vetor de onda do modo vibracional e \mathbf{d}_m é a distância entre os pontos na molécula m . Aqui, assumimos que a distância entre os pontos dentro da molécula é menor que comprimento de onda do modo vibracional.

Para tornar possível a generalização do sistema, ao considerarmos parâmetros individuais de cada um dos pontos quânticos como no Hamiltoniano (1.11), definimos a base do sistema utilizando a seguinte convenção: para os estados dos pontos quânticos, definimos o estado $|0\rangle$ para o caso onde o ponto não é populado, e $|1\rangle$ quando o ponto esta ocupado por um elétron. De modo que o ponto quântico i pode ter seu estado geral descrito por $|n_i\rangle$, em que $n_i = 0, 1$, e a base composta para os quatro pontos quânticos será dada por $|n_1 n_2, n_3 n_4\rangle$. Assim o sistema composto pelos 4 pontos acoplados aos modos vibracionais terá a base computacional definida, de modo geral, como $|n_1 n_2, n_3 n_4; N_1 N_2\rangle$, sendo $N_{1(2)}$ o número de fônons no nanotubo 1 (2). Como exemplo, consideremos o estado $|10, 10; 00\rangle$ que representa a situação onde temos um elétron no ponto 1, um elétron no ponto 2 e nenhuma excitação nos modos vibracionais.

No entanto, afim de facilitar a discussão e leitura dos resultados, retornaremos a nossa definição inicial para a base das moléculas por meio do seguinte mapeamento: $|10, 10\rangle = |LL\rangle$; $|10, 01\rangle = |LR\rangle$; $|01, 10\rangle = |RL\rangle$ e $|01, 01\rangle = |RR\rangle$. Assim, por simplicidade, o sistema composto pelas moléculas e os modos vibracionais passarão a ser descrito pela base $|ij, N_1 N_2\rangle$, sendo $i(j) = L, R$.

1.4.1 Hamiltoniano efetivo

Afim de obter mais informações referentes ao sistema, vamos explorar alguns recursos analíticos sobre modelo completo. Aqui faremos uso de um recurso matemático utilizado no estudo de sistemas onde a interação elétron-fônon está presente como, por exemplo, em sistemas fortemente correlacionados (92) e modelos de pólarons (93). Essa transformação é

conhecida como transformação de Lang-Firsov e é definida como (94)

$$S = \alpha_1 (N_1^{\mathcal{D}} + N_3^{\mathcal{D}}) \otimes (B_1^\dagger - B_1) + \alpha_2 (N_2^{\mathcal{D}} + N_4^{\mathcal{D}}) \otimes (B_2^\dagger - B_2), \quad (1.14)$$

sendo $\alpha_k = g_k/\omega_k$ com $k = 1, 2$ indicando os modos vibracionais. O operador S é aplicado sobre o Hamiltoniano (3.1) seguindo a seguinte regra para transformações unitárias $\bar{H} = e^S H e^{-S}$, considerando todos os elementos do Hamiltoniano geral escritos nas equações (1.11), (1.12) e (1.13) encontramos o seguinte Hamiltoniano

$$\bar{H} = (\bar{H}_{\mathcal{D}} + V_{\text{eff}}) + H_{\mathcal{P}} + \Delta_{\mathcal{DP}}, \quad (1.15)$$

onde

$$\bar{H}_{\mathcal{D}} = \sum_{i=1,2} \tilde{\varepsilon}_i N_i^{\mathcal{D}} + \sum_{j=3,4} \tilde{\varepsilon}_j N_j^{\mathcal{D}}, \quad (1.16)$$

é o Hamiltoniano transformado para os pontos quânticos com $\tilde{\varepsilon}_{i(j)}$ sendo um nível de energia deslocado devido à efeitos da interação elétron-fônon, assim $\tilde{\varepsilon}_{1(3)} = \varepsilon_{1(3)} - \alpha_1^2 \omega_1$ enquanto $\tilde{\varepsilon}_{2(4)} = \varepsilon_{2(4)} - \alpha_2^2 \omega_2$. O termo V_{eff} descreve a interação efetiva entre os elétrons das moléculas 1 e 2, e tem a seguinte forma

$$V_{\text{eff}} = -2\alpha_1^2 \omega_1 N_1^{\mathcal{D}} \otimes N_3^{\mathcal{D}} - 2\alpha_2^2 \omega_2 N_2^{\mathcal{D}} \otimes N_4^{\mathcal{D}}, \quad (1.17)$$

e o último termo

$$\Delta_{\mathcal{DP}} = [(\Delta_{12} S_1^\dagger S_2) + (\Delta_{34} S_3^\dagger S_4)] \otimes \mathbb{X}_{12} + [(\Delta_{12} S_1 S_2^\dagger) + (\Delta_{43} S_3 S_4^\dagger)] \otimes \mathbb{X}_{12}^\dagger, \quad (1.18)$$

descreve a interação elétron-fônon efetiva que acopla os dois subsistemas. Definimos o operador \mathbb{X}_{12} como

$$\mathbb{X}_{12} = e^{-\alpha_1 (B_1 - B_1^\dagger)} \otimes e^{-\alpha_2 (B_2^\dagger - B_2)} = D_1(\alpha_1) \otimes D_2(\alpha_2), \quad (1.19)$$

sendo um produto tensorial de operadores de deslocamento e operadores do oscilador harmônico (95). O Hamiltoniano obtido na equação (1.15) destaca alguns efeitos importantes da interação elétron-fônon sobre esse sistema físico particular. O primeiro que podemos destacar é a mudança no valor dos níveis eletrônicos que depende de parâmetros relacionados aos modos vibracionais, o parâmetro de acoplamento g_k e a energia dos fônons ω_k . O segundo efeito, a interação efetiva dos elétrons que compõe cada qubit, torna-se um

ingrediente principal quando analisamos a dinâmica do emaranhamento entre os qubits eletrônicos.

Podemos ainda simplificar o Hamiltoniano transformado da equação (1.15) ao considerarmos o caso onde o acoplamento elétron-fônon é o mesmo em todos os pontos quânticos, de modo que $g_1 = g_2 = g$, e também que a energia do modo vibracional 1 é igual a energia do modo 2, $\omega_1 = \omega_2 = \omega$, logo $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$. Nesse caso o operador \mathbf{X}_{12} passaria a ser dado por $D(\alpha) \otimes D(-\alpha)$, e as equações (1.16) e (1.17) reescritas, respectivamente, como

$$\bar{H}_{\mathcal{D}} = \sum_{i=1}^4 \tilde{\varepsilon}_i N_i^{\mathcal{D}}; \quad V_{\text{eff}} = -2\alpha\omega(N_1^{\mathcal{D}} \otimes N_3^{\mathcal{D}} + N_2^{\mathcal{D}} \otimes N_4^{\mathcal{D}}). \quad (1.20)$$

1.4.2 Parâmetros físicos

Antes de passarmos aos nossos resultados faremos uma breve discussão dos parâmetros físicos considerados em nosso trabalho. Em nossos cálculos, assumiremos parâmetros que estão de acordo com as implementações experimentais. Consideramos, por exemplo, configurações experimentais onde os pontos quânticos das moléculas são definidos em dois nanotubos de carbono posicionados paralelamente, conforme ilustrado na figura 1.5. Neste caso, assume-se que os modos vibracionais possuem a mesma frequência, ou seja, $\omega_1 = \omega_2 = \omega$ (32). O tunelamento entre os pontos contidos nos nanotubos em paralelo são da ordem de $\Delta_{12} = \Delta_{34} = 0.005\omega = 0.1 \text{ meV}$ (87). Estes valores são consistentes com $\omega = 20\text{meV}$, sendo uma energia que depende fortemente do diâmetro do nanotubo (61). Os valores dos níveis eletrônicos, $\varepsilon_{i(j)}$, podem ser controlados por portas de tensão aplicadas aos pontos quânticos. O acoplamento entre os elétrons contidos nos pontos quânticos e os modos vibracionais, g_v , também podem ser ajustados experimentalmente (62). Do ponto de vista teórico, esse parâmetro pode ser manipulado no intervalo de 0.4ω a 2ω , de modo a controlar a corrente que passa pelos pontos quânticos contidos no nanotubo (32). Além disso, a temperatura é considerada baixa o suficiente para garantir que os modos vibracionais permaneçam no estado $|0\rangle \otimes |0\rangle$. Normalmente, a temperatura utilizada em experimento de transporte eletrônico envolvendo nanotubos de carbono gira em torno de $T = 5 \text{ K}$ (61).

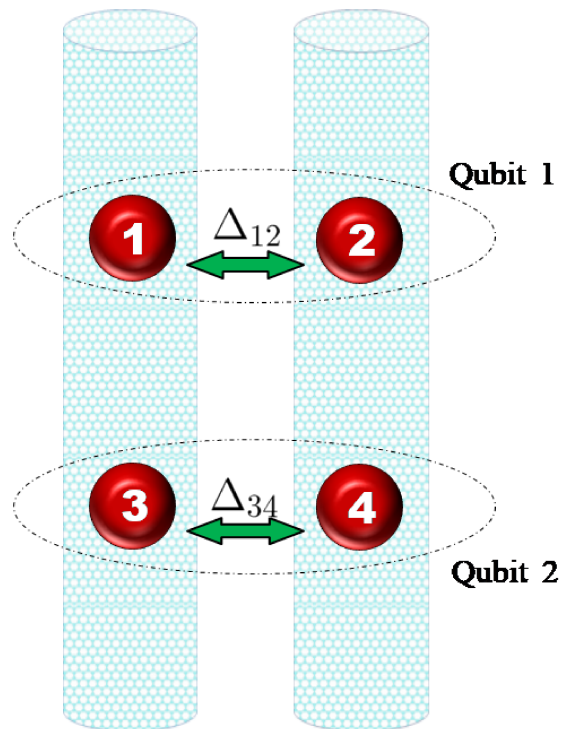


Figura 1.5: Possível implementação experimental do sistema descrito pelo Hamiltoniano (3.1): os pontos quânticos 1 e 3 (2 e 4) estão acoplados, respectivamente, com os modos vibracionais 1 e 2 de nanotubos de carbono. Além disso, os pontos 1 (3) e 2 (4) estão acoplados entre si por tunelamento, definindo assim o sistema de dois níveis associado ao qubit de carga.

Capítulo 2

Conceitos teóricos fundamentais

Neste capítulo, revisaremos brevemente algumas das ferramentas essenciais para o desenvolvimento desta tese. Na seção 2.1, introduzimos o operador densidade, sua definição, interpretação e propriedades, que será utilizado em todos os estudos apresentados. Na seção 2.2, abordamos o conceito de emaranhamento em sistemas quânticos e definimos três, dentre os diversos quantificadores de emaranhamento, que serão utilizados em nossos resultados: a Concorrência, que tem o uso bem definido para sistemas quânticos bipartites de dois níveis; o tangle quantificador de emaranhamento para estados de três qubits e que utiliza a concorrência como base para seu cálculo; e a Negatividade logarítmica um quantificador eficaz para sistemas bosônicos com N níveis.

2.1 Operador densidade

Um dos primeiros conceitos aprendidos no estudo da Mecânica Quântica é que um sistema quântico, em seu estado puro, pode ser descrito por um vetor de estado $|\Psi\rangle$, também chamado *ket*, que pertence a um espaço vetorial denominado espaço de Hilbert. Esses estados fornecem o melhor conhecimento possível sobre um sistema quântico. No caso onde é dado um certo Hamiltoniano com autovalores e autoestados definidos, podemos descrever qualquer estado puro como uma superposição de autoestados dada pela equação

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

De modo que o sistema tem uma probabilidade $|c_k|^2$ de estar no estado $|\psi_k\rangle$. Onde os termos $|c_k|^2$ são denominados amplitudes de probabilidade que satisfazem a relação $\sum_k |c_k|^2 = 1$.

Porém, na maioria dos casos de interesse onde o sistema físico interage com o ambiente que o cerca, lidamos com informação incompleta sobre o estado do sistema. Este fato está relacionado ao conceito de probabilidade dentro da física estatística. Neste formalismo, o sistema é descrito com um estado *misto*. Consequentemente, não é possível descrever uma mistura estatística na forma de um vetor de estado e nestes casos é conveniente utilizarmos uma descrição alternativa baseada no *operador densidade* (96).

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

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

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

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

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

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

1. $\hat{\rho}$ é hermitiano:

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

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

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

3. $\hat{\rho}$ tem a propriedade de conservar a probabilidade. Considerando a normalização do

estado em que o sistema se encontra, temos que

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

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

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

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

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

5. Grau de mistura de um estado - Entropia linear

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

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

A *entropia linear* é uma medida do grau de mistura de um estado quântico e consequentemente uma medida do nosso desconhecimento sobre o mesmo. Ela é definida por

$$E_L(\rho) = 1 - \text{Tr}(\rho^2), \quad (2.9)$$

onde $\text{Tr}(\rho^2)$ é a chamada *pureza* do estado. De 2.9 concluímos que $E_L(\rho) = 0$ se, e somente se, ρ é um estado puro. Quanto maior a entropia linear mais misturado é um estado. O valor máximo da entropia linear é $E_L = 1 - 1/N$, onde N é a dimensão do espaço de Hilbert do sistema, é associado a um estado maximamente misto, o que corresponde a uma distribuição igualmente provável ($p_k = 1/N$) de estados mutuamente ortogonais $\{|\psi^k\rangle\}$.

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

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

2.1.1 Descrição de sistemas compostos usando operador densidade

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

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

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

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

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

onde \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_B são os espaços de estados de cada um dos subsistemas. A matriz densidade

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

do sistema composto é escrita como

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

onde

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

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

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

estes são chamados operadores densidade reduzidos.

2.1.2 Operação transposição parcial

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

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

Sendo seus elementos de matriz relacionados por

$$\langle i_A, j_B | \rho^{T_A} | k_A, l_B \rangle = \langle k_A, j_B | \rho | i_A, l_B \rangle. \tag{2.15}$$

A operação de transposição parcial é uma operação que preserva o traço, portanto ρ_{T_A} , que também é um operador hermitiano, satisfaz a condição $Tr(\rho^{T_A}) = 1$. A transposição parcial será muito útil adiante, visto que é fundamental para a definição da negatividade (97).

2.2 Emaranhamento

Logo após a década de 1920, a maioria das características da Mecânica Quântica que a torna distinta da Mecânica Clássica, até então conhecidas, já haviam sido discutidas na literatura. Uma das peculiaridades da Mecânica Quântica que a torna tão divergente à sua contrapartida clássica é o fato de que o processo de medida de uma grandeza física sobre o sistema quântico modifica o estado do sistema. Outra particularidade é que, devido ao caráter vetorial do conjunto de estados quânticos, um estado pode ser descrito não só por um dos vetores do espaço vetorial mas também por uma superposição de dois ou mais vetores que compõem o espaço vetorial completo do sistema. Essa possibilidade de superpor estados levou, em 1935, à publicação de um artigo intitulado *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?* (98), de autoria de Albert Einstein, Boris Podolsky e Nathan Rosen, no qual eles aplicam o princípio da superposição, a hipótese de localidade e uma definição de realidade física para demonstrar a incompletude da teoria quântica. No artigo de EPR eles trazem como exemplo um sistema bipartite que é descrito pela seguinte função de onda

$$\psi(x_1, x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{(2i\pi/\hbar)(x_1 - x_2 + x_0)p} dp, \quad (2.16)$$

no qual ao se realizar uma medida do *momentum* na partícula 1 e for determinado que o *momentum* dela é igual a p , a partícula 2 passa a ter *momentum* igual a $-p$, sem que nenhuma operação seja realizada sobre a segunda partícula. De posse desse resultado, os autores formularam alguns postulados sobre realidade física e concluem que a teoria da Mecânica Quântica é incompleta.

Ainda em 1935, dois físicos publicam artigos distintos a respeito do mesmo tema abordado por Einstein e seus companheiros. O primeiro, exatamente com o mesmo título, foi publicado por Neils Bohr e consiste em uma refutação das conclusões de seus colegas considerando uma outra definição para realidade física, que é a de que não existe uma realidade física até que se tenha um observador (99). O último considera um experimento mental de Erwin Schrödinger onde um gato se encontra confinado dentro de uma caixa juntamente

com um átomo radioativo e supondo que o átomo está inicialmente instável $|i\rangle$ e que pode decair para um estado mais estável $|e\rangle$, mas nesse processo de decaimento liberaria energia suficiente para matar o gato. Como na mecânica quântica temos o conhecimento apenas da probabilidade do decaimento sem afirmar quando e se ele ocorre, o que podemos afirmar é que o estado do sistema composto (gato + átomo) é dado por

$$|\psi\rangle = |v, i\rangle + |m, e\rangle, \quad (2.17)$$

onde $|v, i\rangle$ representa o gato vivo com o átomo instável e $|m, e\rangle$ o gato morto mais o átomo estável. Para essa correlação entre o gato e o átomo, Schrödinger utilizou o termo alemão *Verschänkung*, que traduzido para português resulta em *emaranhamento* (100). Esse assunto retorna à literatura em 1964 quando John Bell, utilizando um sistema bipartite de dois níveis, apresenta um teorema de desigualdades que só podem ser violadas por estados quânticos emaranhados (101). Esse teorema ficou conhecido como desigualdades de Bell e, em 1982, serviu como base para a prova experimental da existência do emaranhamento quântico (102).

No início da década de 1990, passou-se a se perguntar se esta propriedade de sistemas quânticos poderia ser útil de alguma forma. Como resposta a esta indagação, a ideia de emaranhamento entre bits quânticos passou a ser usada para implementar diversos protocolos quânticos de informação, relacionando assim duas áreas até então distintas, a computação e a física quântica. Dentre estes protocolos podemos citar a codificação superdensa, teletransporte quântico e código de correção de erros, alguns já implementados experimentalmente (8, 12, 103). As propostas de computadores quânticos e de protocolos de informação quântica desenvolvidas desde então tem apontado para uma maior capacidade e velocidade de processamento de informação que um computador quântico teria sobre a sua contrapartida clássica. Uma possível explicação por trás do ganho exponencial de velocidade de processamento dos computadores quânticos foi introduzida por Ekert e (104). Posteriormente, Linden e Popescu demonstraram que o emaranhamento é uma condição necessária para que haja ganho exponencial de velocidade em uma grande classe de algoritmos, tal como o de Shor (105). No entanto, eles não puderam determinar se o emaranhamento é condição suficiente, e deixaram em aberto a possibilidade de existirem outros algoritmos tão eficientes quanto o de Shor que não utilizam o emaranhamento. Um ponto importante é o fato de que o emaranhamento não está presente em todos os algoritmos, pois existem propostas de algoritmos de busca com um ganho *polinomial* sobre os algoritmos clássicos que nunca acessam um estado emaranhado (106).

2.2.1 Definição e aplicações de um estado emaranhado

Emaranhamento de estados puros

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

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

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

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

$$|\psi\rangle = \otimes_{i=1}^n |\psi_i\rangle, \quad (2.18)$$

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

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

$$|\phi\rangle = \frac{1}{2} [(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)], \quad (2.19)$$

e o estado 2 por:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle). \quad (2.20)$$

O estado descrito pela equação (2.19), é um exemplo de estado não emaranhado, pois pode ser escrito como o produto dos estados,

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

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

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= |\varphi_1\rangle \otimes |\varphi_2\rangle = (a_1|0\rangle_1 + b_1|1\rangle_1) \otimes (a_2|0\rangle_2 + b_2|1\rangle_2) \\
&= a_1a_2|00\rangle + a_1b_2|01\rangle + b_1a_2|10\rangle + b_1b_2|11\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle),
\end{aligned}$$

em que as únicas possibilidades são:

$$\begin{aligned}
a_1a_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}; \\
a_1b_2 &= 0; \\
b_1a_2 &= 0; \\
b_1b_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}.
\end{aligned}$$

Mas, para $a_1b_2 = 0$, temos que ou $a_1 = 0$, o que implica em $a_1a_2 = 0 \neq \frac{1}{\sqrt{2}}$, ou $b_2 = 0$ e portando $b_1b_2 = 0 \neq \frac{1}{\sqrt{2}}$. O mesmo ocorre com a terceira possibilidade. Assim, vemos que não é possível escrever o estado $|\psi\rangle$, como um produto entre os estados $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$, ou seja, $|\psi\rangle$ é um estado emaranhado.

Emaranhamento de estados mistos

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

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

$$\hat{\rho} = \sum_{j=0}^k p_j \bigotimes_{i=1}^n \hat{\rho}_j^i = \sum_{j=0}^k p_j \left(\hat{\rho}_j^1 \otimes \hat{\rho}_j^2 \otimes \dots \otimes \hat{\rho}_j^n \right), \quad (2.21)$$

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

Um exemplo de estado misto parcialmente emaranhado é o estado de Werner

$$\rho_W = \frac{1}{8}\mathbb{I} + \frac{1}{2}|\Psi_-\rangle\langle\Psi_-|, \quad (2.22)$$

sendo \mathbb{I} a identidade e $|\Psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle)$ (107). Já 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.

2.2.2 Classes não equivalentes de estados emaranhados

Quando consideramos um sistema formado apenas por dois qubits, os estados de Bell dados por

$$\begin{aligned} |\Psi^\pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[(|00\rangle \pm |11\rangle)], \\ |\Phi^\pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[(|01\rangle \pm |10\rangle)]; \end{aligned} \quad (2.23)$$

formam a única classe existente de estados emaranhados. Isso porque, por definição, dois estados com o mesmo grau de emaranhamento pertencem a mesma classe de estados emaranhados quando é possível transformar um deles no outro por meio de uma transformação unitária local e comunicações clássicas (LOCC). Isso é facilmente verificado nos estados de Bell através das seguintes operações unitárias:

$$\begin{aligned} |\Phi_\pm\rangle &= \pm\sigma_x^{(1)}|\Psi_\pm\rangle = \sigma_x^{(2)}|\Psi_\pm\rangle \\ |\Phi_\mp\rangle &= \pm i\sigma_y^{(1)}|\Psi_\pm\rangle = -i\sigma_y^{(2)}|\Psi_\pm\rangle, \end{aligned} \quad (2.24)$$

onde as matrizes de Pauli $\sigma_x^{(i)}$ e $\sigma_y^{(i)}$ atuam como operadores que giram (*flipam*) o estado do qubit i da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \sigma_x^{(i)}|0\rangle_i &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |1\rangle_i; \quad \sigma_x^{(i)}|1\rangle_i = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |0\rangle_i, \\ \sigma_y^{(i)}|0\rangle_i &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = i|1\rangle_i; \quad \sigma_y^{(i)}|1\rangle_i = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -i|0\rangle_i. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Outra possível transformação unitária entre estados de Bell é a que estado associada a matriz de Pauli $\sigma_z^{(i)}$, chamada de porta de fase, que atua criando uma fase relativa entre

os dois estados que formam o estado de Bell uma vez que $\sigma_z^{(i)} |0\rangle_i = |0\rangle_i$ e $\sigma_z^{(i)} |1\rangle_i = -|1\rangle_i$. Logo: $\sigma_z^{(i)} |\Psi_{\pm}\rangle = |\Psi_{\mp}\rangle$ e $\sigma_z^{(i)} |\Phi_{\pm}\rangle = |\Phi_{\mp}\rangle$.

A medida que aumentamos o número de qubits que compõem o sistema total é possível obter mais de uma classe de estados emaranhados. Quando consideramos 3 qubits, Dür et al. demonstraram que existem apenas duas classes de estados tripartites genuinamente emaranhados (DÜR, 2000). Uma dessas classes é representada pelos estados GHZ (108, 109),

$$|\text{GHZ}\rangle_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|000\rangle \pm |111\rangle), \quad (2.26)$$

e a segunda classe é descrita pelos estados W,

$$|W\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|100\rangle + |010\rangle + |001\rangle). \quad (2.27)$$

Estas duas classes de estados são classes não equivalentes uma vez que não é possível transformar um estado no outro por meio de operações clássicas de comunicação local (LOCC) (110).

Quando passamos a considerar um sistema formado por quatro qubits, temos três classes não equivalentes de estados puros que apresentam emaranhamento máximo. Duas dessas classes são a extensão dos estados $|\text{GHZ}\rangle$ e $|W\rangle$ para o caso com quatro qubits:

$$|\text{GHZ}^4\rangle_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0000\rangle \pm |1111\rangle) \quad (2.28)$$

e

$$|W^4\rangle = \frac{1}{2} (|1000\rangle + |0100\rangle + |0010\rangle + |0001\rangle). \quad (2.29)$$

A terceira classe possui os estados denominados estados de *cluster*, sendo uma de suas possíveis formas para estados de quatro qubits escritas como

$$|\Phi_4\rangle^c = \frac{1}{2} (|0000\rangle + |0011\rangle + |1100\rangle - |1111\rangle). \quad (2.30)$$

Assim, a medida que o sistema de qubits se torna escalável temos também um aumento no número de classes de estados distintos maximamente emaranhados. Os estados GHZ e W, descritos nas equações (2.26) e (2.27), se estendem para além dos sistemas de quatro qubits, tendo suas formas generalizadas para N qubits da seguinte forma

$$|\text{GHZ}^N\rangle_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle^{\otimes N} \pm |1\rangle^{\otimes N}), \quad (2.31)$$

e

$$|W^N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}(|100\dots 00\rangle + |0100\dots 0\rangle + |0010\dots 0\rangle + \dots + |00\dots 001\rangle). \quad (2.32)$$

Os estados *cluster*, definidos para sistemas com $N \geq 4$ qubits foram propostos em 2001 por Robert Raussendorf e Hans Briegel, e formam a base para uma das propostas para o processamento quântico de informação que é inteiramente baseada em processos de medidas chamada de *One-Way Quantum Computer*, ou Computação Quântica unidirecional, uma vez que os processos de medida tornam esse tipo de computação irreversível (111). Os estados de *cluster* tem sido amplamente aplicados em sistemas de qubits fotônicos (112, 113).

2.2.3 Aplicações do emaranhamento

Conforme já mencionado o estudo das propriedades do emaranhamento, critérios de separabilidade e quantificação de emaranhamento, são realizados visando principalmente a aplicação que este recurso quântico traz à ciência da Computação Quântica. Um dos primeiros protocolos de informação onde se aplica o conceito de emaranhamento quântico é a criptografia quântica, que tem como objetivo gerar um conjunto de chaves que codificam e decodificam informação. Estas chaves são compostas por estados emaranhados e dão ao emissor e ao receptor a certeza de que a transmissão de informação foi realizada com segurança total (114). A partir de então começaram a surgir outros protocolos que também se utilizam do emaranhamento quântico, dentre os quais destacamos, a codificação superdensa (7) e o teletransporte quântico (8).

Codificação superdensa

O protocolo de codificação superdensa foi proposto em 1992 por Bennett e Wiesner (7), e recebe esse nome pois por meio dele se demonstra que usando estados quânticos emaranhados é possível condensar a transmissão de bits clássicos. Enquanto que no processo de comunicação clássica para transmitir dois bits de informação é necessário que se manipule e transmita pelo menos duas unidades de informação, na codificação superdensa podemos transmitir dois bits de informação clássica por meio de um único qubit, para isso é necessário que entre o transmissor (T) e o receptor (R) exista um canal quântico de comunicação que deve ser composto por um estado de dois qubits maximamente emaranhado, ou seja um estado de Bell.

Suponha que um sistema bipartite, é preparado no estado de Bell $|\Phi_+\rangle$, dado pela

equação (2.23). Em seguida envia-se um dos qubits emaranhados para T e o outro qubit para R, de modo que agora transmissor e receptor compartilham um estado maximamente emaranhado. O transmissor pode realizar sobre o seu qubit um conjunto de quatro transformações unitárias locais que são capazes de gerar os quatro estados de Bell da equação (2.23). Esse conjunto de operações relaciona os estados de Bell da seguinte forma

$$\begin{aligned} I |\Phi_+\rangle &= |\Phi_+\rangle, \\ \sigma_z^T |\Phi_+\rangle &= |\Phi_-\rangle, \\ \sigma_x^T |\Phi_+\rangle &= |\Psi_+\rangle, \\ \sigma_y^T |\Phi_+\rangle &= |\Psi_-\rangle. \end{aligned} \tag{2.33}$$

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

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

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

Após implementar uma dessas quatro operações unitárias locais, o transmissor envia seu qubit ao receptor. Este por sua vez pode determinar qual estado recebeu por realizar uma medida de Bell nos dois qubits que agora possui. Esta medida de Bell permitirá que o receptor diferencie entre os quatro estados de Bell, e através da convenção descrita na tabela 2.1, associe cada um dos estados da equação (2.23) a uma mensagem de dois bits enviada pelo transmissor.

Teletransporte quântico

Em 1993, Bennett e colaboradores apontaram outra aplicação para os estados emaranhados na teoria de informação, que é a possibilidade de teletransportar toda a informação contida em um qubit de uma região do espaço para outra (8).

O teletransporte de um qubit $|\eta\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ é efetuado do seguinte modo: Temos um transmissor (T) e um receptor (R) que inicialmente compartilham um estado bipar-

tite maximamente emaranhado, que neste caso adotaremos como sendo o estado $|\Psi_-\rangle$ da equação (2.23). Este estado de Bell é o canal quântico necessário para teletransportar $|\eta\rangle$. O sistema total tem então três qubits e inicialmente esta convencionado da seguinte forma $|T_1 T_2 R\rangle$, onde os primeiros dois qubits (T_1 é o qubit a ser teletransportado, e T_2 o qubit do estado de Bell compartilhado com o receptor) estão com o transmissor T e o terceiro pertence ao receptor R. O estado inicial e descrito então da seguinte forma

$$\begin{aligned} |\beta\rangle &= |\eta\rangle \otimes |\Psi_-\rangle, \\ |\beta\rangle &= \frac{a}{\sqrt{2}}(|001\rangle - |010\rangle) + \frac{b}{\sqrt{2}}(|101\rangle - |110\rangle). \end{aligned} \quad (2.34)$$

Podemos reescrever a equação (2.34) em termos dos quatro estados de Bell, de modo que

$$\begin{aligned} |\beta\rangle &= \frac{1}{2} \{ -|\Psi_-\rangle (a|0\rangle + b|1\rangle) + |\Psi_+\rangle (-a|0\rangle + b|1\rangle) \\ &\quad + |\Phi_-\rangle (a|1\rangle + b|0\rangle) + |\Phi_+\rangle (a|1\rangle - b|0\rangle) \}. \end{aligned} \quad (2.35)$$

O transmissor deve realizar uma medida projetiva nos dois qubits que possui, o qubit a ser teletransportado e o qubit do estado de Bell compartilhado com o receptor. A chance de se obter quaisquer dos estados de Bell (2.23) é de 1/4, e o transmissor não tem qualquer controle sobre o resultado dessa medida. Esse processo consome o emaranhamento compartilhado com o receptor. A única informação que o transmissor tem e a de que o estado $|\eta\rangle$ foi destruído e suas duas partículas foram emaranhadas. Após a medida, através de uma projeção do resultado da medição no estado descrito pela equação (2.35), podemos saber o estado dos três qubits do sistema composto:

$$\begin{aligned} |\Psi_-\rangle &\rightarrow |\Psi_-\rangle \otimes (-a|0\rangle - b|1\rangle); \\ |\Psi_+\rangle &\rightarrow |\Psi_+\rangle \otimes (-a|0\rangle + b|1\rangle); \\ |\Phi_-\rangle &\rightarrow |\Phi_-\rangle \otimes (a|1\rangle + b|0\rangle); \\ |\Phi_+\rangle &\rightarrow |\Phi_+\rangle \otimes (a|1\rangle - b|0\rangle). \end{aligned} \quad (2.36)$$

O transmissor tem agora dois bits de informação que deve comunicar classicamente ao receptor. Com essa informação o receptor finaliza o protocolo aplicando uma operação unitária apropriada ao seu estado, conforme descrito na tabela 2.2, e finalmente obtém o estado $|\eta\rangle$. O envio do dois bits clássicos pelo transmissor e essencial para este protocolo, pois sem ele o receptor não poder ter a informação completa sobre seu qubit final. Neste

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

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

processo é como se toda informação do qubit $|\eta\rangle$ fosse separada em duas partes, uma clássica que é transmitida pelos dois bits enviados, e outra parte quântica que viaja para o receptor pelo canal quântico que é definido pelo estado de Bell compartilhado entre o transmissor e receptor, consumindo este estado de emaranhamento máximo no processo.

Assim, uma vez estabelecido um canal quântico, ou estado de Bell, entre o transmissor e o receptor, bastam operações locais e comunicação clássica para teletransportar o qubit. É importante salientar que o processo de teletransporte quântico não transfere o qubit em si, mas sim toda a informação nele contida; outro fato é preservação da causalidade relativística, pois como existe a necessidade de uma comunicação clássica entre o processo de teletransporte não é instantâneo. O teletransporte quântico motivou o desenvolvimento de alguns quantificadores de emaranhamento como o *custo de emaranhamento*, o *emaranhamento destilável* e a *fidelidade* (115). Tentativas de se implementar o teletransporte quântico vem sendo realizada com teletransporte de informação em subsistema separados por uma distância de aproximadamente 143 Km (116).

2.2.4 Critérios de separabilidade

Uma vez definido o que são estados emaranhados, podemos tentar estabelecer critérios com os quais podemos identificar quando um estado é separável. Podemos dizer que o primeiro critério de separabilidade surgiu em 1965, quando John Bell demonstrou uma incompatibilidade entre a Mecânica Quântica e a teoria de variáveis ocultas (101). Esta incompatibilidade tomou a forma de um conjunto de desigualdades de Bell, que podem ser violadas apenas por sistemas emaranhados. Embora para qualquer estado puro emaranhado seja sempre possível encontrar algum tipo de desigualdade de Bell que será violada,

essa afirmação não é válida para estados mistos³. As desigualdades de Bell hoje se encaixam em um conjunto de critérios de separabilidade que são chamados de *testemunhas de emaranhamento* (117). A definição geral de uma testemunha de emaranhamento é que esta deve ser definida como um operador hermitiano e por isso pode em alguns casos ser um observável físico do sistema, como foi o caso das desigualdades de Bell observadas experimentalmente por medidas de polarização de fótons (102). Esses observáveis “testemunham” o emaranhamento no sistema através de violações de desigualdades previamente definidas, e cada testemunha de emaranhamento é definida de acordo com o tipo de estado de interesse. Todos os critérios de separabilidade propostos até o momento são limitados pelas condições do problema a ser estudado, como por exemplo a dimensionalidade do sistema, sendo que ainda não existe um critério geral para se determinar se um estado é emaranhado ou separável (118). Nesta tese, apresentaremos dois exemplos de critério de separabilidade: a decomposição de Schmidt e o critério de Peres-Horodecki.

Decomposição de Schmidt

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

$$|\phi_{AB}\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |i_A\rangle \otimes |j_B\rangle \equiv \sum_i |i_A\rangle \otimes |\tilde{i}_B\rangle, \quad (2.37)$$

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

$$\rho_A = \sum_i \lambda_i^2 |i_A\rangle \langle i_A| = \text{Tr}_B |\phi_{AB}\rangle \langle \phi_{AB}| = \sum_{i,j} |i_A\rangle \langle j_A| \langle \tilde{i}_B | \tilde{j}_B \rangle, \quad (2.38)$$

³Devido a essa demonstração, os estados de dois qubits maximamente emaranhados ($|\Psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle \pm |10\rangle)$, $|\Phi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle \pm |11\rangle)$) recebem o nome de *estados de Bell*. Estes estados são de particular interesse no contexto de informação quântica sendo utilizados em diversos protocolos de informação, dentre eles o teletransporte quântico.

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

$$|\phi_{AB}\rangle = \sum_i \lambda_i |i_A\rangle \otimes |i_B\rangle, \quad (2.39)$$

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

Critério de Peres-Horodecki

Nos casos de estados mistos, onde a decomposição de Schmidt não se aplica, o critério de Peres-Horodecki é uma condição necessária e suficiente para determinar se um estado é emaranhado ou separável. Este critério mostrou que a operação de transposição da matriz densidade de um sistema composto está ligada ao emaranhamento (118). Se tomarmos a operação de transposição total ρ^T de uma matriz densidade ρ , esta matriz ainda terá autovalores positivos assim como a matriz densidade. No entanto, ao aplicarmos a transposição parcial com definida na seção 1.1,

$$\rho^{TA} = \sum_{i,j,k,l} (\langle k_A, j_B | \rho | i_A, l_B \rangle) |i_A, j_B\rangle \langle k_A, l_B|. \quad (2.40)$$

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

2.2.5 Quantificadores de emaranhamento

Uma vez que se estabeleceu a possibilidade de estados quânticos emaranhados iniciou-se a investigação de como determinar se um estado estaria ou não emaranhado. Assim, a princípio, foram desenvolvidos alguns critérios de separabilidade e um dos primeiros desenvolvidos nesse sentido foi o conjunto de desigualdades de Bell (101), que seriam violadas

apenas por sistemas quânticos puros em que o emaranhamento estaria presente. Nas décadas seguintes foram desenvolvidos foram propostos um grande número de quantificadores, mas a medida que o estudo teórico e experimental desse tipo de estados evoluía houve a necessidade de não só determinar se um estado estaria emaranhado mais o quanto de emaranhamento esse sistema contém. Uma das áreas que mais impulsionou esse estudo foi a teoria de Informação Quântica que via o emaranhamento como um recurso físico importante com o qual se poderia realizar tarefas de processamento e transmissão de informação.

A quantificação do emaranhamento não é uma tarefa trivial, e mesmo para o caso de dois qubits que é o sistema mais simples possível em que existe emaranhamento, há vários quantificadores de emaranhamento propostos. Sendo assim o problema de medição do emaranhamento em um sistema físico ainda é um problema em aberto na teoria quântica. No entanto, existem alguns requerimentos que são essenciais para se definir um quantificador de emaranhamento Q (119):

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

A seguir, apresentaremos alguns dos quantificadores de emaranhamento que satisfazem os requisitos acima e que foram utilizados na obtenção dos resultados apresentados nessa tese.

Concorrência

Quando tratamos de sistemas com dois qubits, a concorrência, definida por William Wootters para facilitar o cálculo de um outro quantificador de emaranhamento para estados puros (o emaranhamento de formação, EoF), demonstrou ser um bom quantificador de emaranhamento tanto para estados puros, quanto para estados mistos, sendo recentemente estendida para atuar em dimensões arbitrárias (120), o que não ocorre com o EoF que serve apenas para sistemas $2 \otimes 2$ ou $2 \otimes 3$.

Defini-se a concorrência de um estado ρ como

$$C(\rho) = \max \{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\}, \quad (2.41)$$

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

$$\tilde{\rho} = (\sigma_y^A \otimes \sigma_y^B) \rho^* (\sigma_y^A \otimes \sigma_y^B). \quad (2.42)$$

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.

Tangle

Além de ser um bom quantificador de emaranhamento para sistemas puro e mistos de dois qubits, a concorrência é utilizada dentro da definição de uma série de outros quantificadores, como por exemplo a I -concorrência, utilizada como medida de emaranhamento bipartite em estados isotrópicos, (120). Ao considerarmos um sistema com três qubits, o trabalho de Coffman, Kundu e Wothers em 1999, utilizando a concorrência como base, apresentou uma nova abordagem para os quantificadores de emaranhamento em sistemas bipartites onde se tem a possibilidade de não só de calcular a quantidade total de emaranhamento entre os três qubits que formam o sistema, mas também de determinar o emaranhamento entre os pares de qubits que compõem o sistema tripartite, ao que deram o nome de emaranhamento distribuído (121).

Para entendermos essa nova abordagem, vamos considerar um sistema de três qubits denotados pelos índices A, B e C. Uma das formas de se obter estados maximamente emaranhados nesse sistema é aquela na qual os três qubits estão completamente correlacionados entre si, ou seja, um emaranhamento na forma ABC . A segunda possibilidade é um emaranhamento restrito a apenas dois (AB ou AC ou BC) dos três qubits, ou ainda, um dos qubits correlacionado simultaneamente aos outros dois qubits nas formas $A(BC)$, $B(CA)$ e $C(AB)$. Essas duas alternativas de estados maximamente emaranhados para sistemas de três qubits é o que divide os estados emaranhados tripartites nas duas classes discutidas da subseção 2.2.2. Tendo como base as possíveis formas de se emaranhar o sistema de três qubits, Coffman et al. definiram um conjunto de operadores *tangle* que mensura cada uma das formas de emaranhamento

$$\begin{aligned} \tau_{A(BC)} &\rightarrow \text{qubit A emaranhado simultaneamente com os qubits B e C;} \\ \tau_{B(AC)} &\rightarrow \text{qubit B emaranhado simultaneamente com os qubits A e C;} \\ \tau_{C(AB)} &\rightarrow \text{qubit C emaranhado simultaneamente com os qubits A e B;} \\ \tau_{ABC} &\rightarrow 3 \text{ qubits completamente emaranhados entre si;} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tau_{AB} &\rightarrow \text{qubit A emaranhado com o qubit B;} \\
\tau_{AC} &\rightarrow \text{qubit A emaranhado com o qubit C;} \\
\tau_{BC} &\rightarrow \text{qubit B emaranhado com o qubit C.}
\end{aligned}$$

Vamos inicialmente definir o *tangle* para o emaranhamento entre dois qubits da forma τ_{ij} com $i(j) = A, B, C$ e $i \neq j$ como

$$\tau_{ij} = \text{tr}(\rho_{ij}\tilde{\rho}_{ij}) - 2\lambda_1\lambda_2, \quad (2.43)$$

onde ρ_{ij} é a matriz reduzida obtida através do traço parcial com a relação ao terceiro qubit. A matriz $\tilde{\rho}_{ij}$ é obtida usando a operação *spin-flip* definida na equação (2.25), e λ_1 e λ_2 são raízes quadradas dos autovalores da matriz $R = \rho_{ij}\tilde{\rho}_{ij}$.

O segundo a ser definido é o que mede o emaranhamento simultâneo do qubit i com os qubits j e k , sendo ele calculado como

$$\tau_{i(jk)} = 4 \times \det|\rho_i|, \quad (2.44)$$

onde ρ_i é a matriz reduzida do qubit i . Os *tangles* definidos nas equações (2.43) e (2.44) seguem a seguinte relação (121):

$$\tau_{ij} + \tau_{ik} \leq \tau_{i(jk)}. \quad (2.45)$$

Essa desigualdade nos informa que, o emaranhamento entre o qubit i e o par jk representa o máximo valor para o soma entre $\tau_{ij} + \tau_{ik}$. Para o caso onde se prova a igualdade, define-se a classe de estados maximamente emaranhados do tipo W definidos na equação (2.27), para os quais $\tau_{ij} = 4/9$, $\tau_{ik} = 4/9$ e $\tau_{i(jk)} = 8/9$. Para o caso em que $\tau_{ij} + \tau_{ik} < \tau_{i(jk)}$, define-se os estados com emaranhamento residual.

Por fim, definimos o terceiro *tangle*, utilizado para cálculo do emaranhamento entre os três qubits como

$$\tau_{ijk} = \tau_{i(jk)} - (\tau_{ij} + \tau_{ik}), \quad (2.46)$$

que apresenta o valor máximo de $\tau_{ijk} = 1$ para os estados maximamente emaranhados do tipo GHZ, equação (2.26), com $\tau_{ij} = 0$, $\tau_{ik} = 0$ e $\tau_{i(jk)} = 1$. Observe que, para os estados do tipo W a equação (2.46) retorna um valor nulo, isso nos mostra que o *tangle* τ_{ijk} , também chamado de 3-tangle, pode ser nulo mesmo para estados maximamente emaranhados, tornando-o assim um bom quantificador somente para os estados da família GHZ.

Usando a relação de desigualdade apresentada na equação (2.45), estudos subsequentes apresentaram uma forma generalizada, para sistemas bipartites⁴, dessa equação que pode ser definida como

$$\tau_{12} + \tau_{13} + \dots + \tau_{1N} \leq \tau_{1(2,3,\dots,N)}, \quad (2.47)$$

que serve para sistemas com número arbitrário de qubits. Nesse caso, o tangle $\tau_{1(2,3,\dots,N)}$ representa o emaranhamento entre o subsistema um, que contém o qubit (1), e o subsistema dois, que engloba os demais qubits (2, 3, ..., N). Ainda referente ao tangle 3, foi demonstrado que a definição utilizada na equação (2.46), quando usada exclusivamente para os estados GHZ, pode ser extendida para N qubits e sempre que o estado pertencer à classe $\text{GHZ}^{N \text{ qubits}}$ de estados maximamente emaranhados o valor de $\tau_{123\dots N}$ será igual a unidade (122, 123, 124).

Negatividade e Negatividade Logarítmica

A negatividade pode ser interpretada como uma quantificação do critério de Peres-Horodecki (118). Essa medida quantifica o quanto a matriz parcialmente transposta ρ^{TA} viola este critério de separabilidade.

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

$$\|\rho^{TA}\|_1 = 1 + 2|\sum_i \nu_i|, \quad (2.48)$$

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

Vidal e Werner (97) definiram a negatividade de um estado bipartite como sendo

$$\mathcal{N}(\rho) = \frac{\|\rho^{TA}\|_1 - 1}{2} = |\sum_i \nu_i|. \quad (2.49)$$

Eles demonstraram que a negatividade satisfaz os requisitos para um quantificador de ema-

⁴Essa definição é considerada para sistemas bipartites pois considera o sistema total composto por uma produto tensorial do subsistema referente ao primeiro qubit e outro subsistema que engloba os demais qubits. Assim, a bipartição considerada esta associada ao seguinte produto de espaços de Hilbert $\mathcal{H}_{1 \text{ qubit}} \otimes \mathcal{H}_{(N-1) \text{ qubits}}$

ranhamento. Caso o estado ρ seja separável, a matriz ρ^{TA} apresentará apenas autovalores positivos e $\mathcal{N}(\rho) = 0$, caso contrário $\mathcal{N}(\rho) \neq 0$ e o estado é emaranhado.

No entanto, dependendo da dimensão do problema, a negatividade como definida na equação (2.49), para estados puros maximamente emaranhados tem valor menor que um, isto é, não está normalizada. Para que esta quantidade seja normalizada e tenha valor igual a um para estados maximamente emaranhados em um sistema $d \otimes d'$ ($d \leq d'$) ela deve ser definida como (125)

$$\mathcal{N}(\rho) = \frac{\|\rho^{TA}\|_1 - 1}{d - 1} = \frac{2}{d - 1} |\sum_i \nu_i|. \quad (2.50)$$

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

Outra medida, também proposta por Vidal e Werner, que se baseia na norma do traço da matriz ρ^{TA} é a negatividade logarítmica, essa medida é importante ao considerarmos sistemas com dimensões maiores do que as consideradas na equação (2.50). Assim, a negatividade logarítmica para um sistema de dimensão $d \otimes d$ e definida como

$$\mathcal{N}_{Log}(\rho) = \log \|\rho^{TA}\|_1, \quad (2.51)$$

onde $\|\rho^{TA}\|_1$ é ainda a norma do traço da transposição parcial que está definido na equação (2.48), de modo que explicitamente a negatividade logarítmica fica

$$\mathcal{N}_{Log}(\rho) = \log[1 + 2|\sum_i \nu_i|]. \quad (2.52)$$

Assim como no caso da negatividade, a negatividade logarítmica é nula para estados não emaranhados e, para estados mistos inseparáveis, apresenta um limite superior de $\log_2 d$ para estados mistos maximamente emaranhados.

Um exemplo de estado misto emaranhado é o estado de Werner, equação (2.22), que aplicando a negatividade logarítmica como quantificador podemos saber o grau de emaranhamento deste estado: $\mathcal{N}_{Log}(\rho_W) = 0.223$. Sendo que a negatividade logarítmica máxima para esse estado é igual a 1, uma vez que $d = 2$.

Capítulo 3

Escalabilidade de emaranhamento

Em estudos prévios, desenvolvemos uma exploração completa das propriedades do emaranhamento de um sistema isolado composto por dois qubits de eletrônicos (21). Nesse trabalho, foi considerada a configuração do sistema que está demonstrada na figura 1.3, e que experimentalmente foi implementado por Shinkai *et al.* Em nossos resultados demonstramos que estados maximamente emaranhados de dois qubits, os estados de Bell da equação (2.23), formam uma base natural do sistema, e que esta abordagem fornece uma descrição útil para o estudo das correlações quânticas. Verificamos que no caso ressonante ($\delta_1 = \delta_2 = \delta$, $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$) e considerando um regime de acoplamento forte entre as moléculas ($J > \Delta$), os estados $\{|\psi_-\rangle, |\psi_+\rangle, |\phi_-\rangle, |\phi_+\rangle\}$, correspondem a autoestados do Hamiltoniano de duas moléculas descrito na equação (1.8). Determinamos também uma relação entre o acoplamento de Coulomb e o parâmetro de tunelamento que favorece uma dinâmica coerente de estados maximamente emaranhados.

Considerar a escalabilidade de sistemas quânticos é um dos requisitos fundamentais para a implementação de dispositivos úteis para a Computação Quântica. Assim, neste capítulo, vamos explorar como se comporta o emaranhamento no sistema de moléculas a partir do momento em que se começa a expandí-lo, passando a um sistema integrado de 3 até chegarmos a N moléculas, conforme pode ser observado na figura 3.1. Para isso, generalizamos o sistema composto a um sistema multipartite formado por N moléculas quânticas, conforme ilustrado na figura 3.1, onde cada uma é formada por dois pontos quânticos com um único elétron em excesso que pode ocupar o ponto superior ou o ponto inferior, $|L\rangle_i$ ou $|R\rangle_i$, sendo estes dois estados acoplados por tunelamento. Essas moléculas se conectam aos vizinhos mais próximos via interação de Coulomb entre os elétrons em cada molécula, o que favorece configurações anti-paralelas $|LRLR...LR\rangle$ e $|RLRL...RL\rangle$

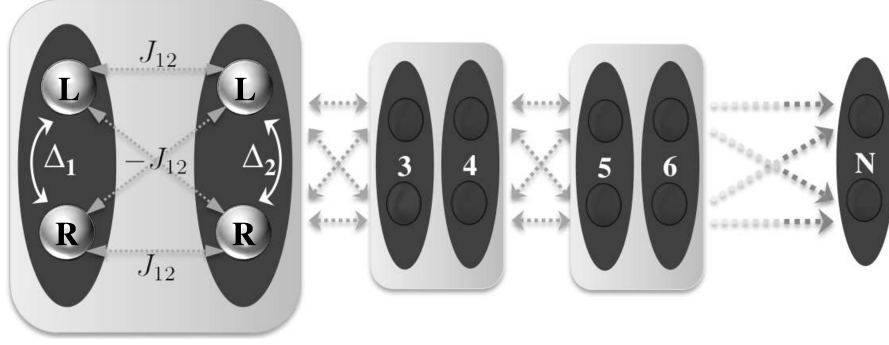


Figura 3.1: Representação esquemática do sistema de N moléculas. Cada molécula é composta por dois pontos quânticos acoplados por tunelamento, como demonstrado no primeiro esquema a esquerda. É considerada uma interação coulombiana entre os primeiros vizinhos.

sobre as paralelas $|LLL...L\rangle$ e $|RRR...R\rangle$ (19, 20). O Hamiltoniano geral que descreve o sistema de N moléculas é

$$\begin{aligned}
 H_N = & \sum_{i=1}^N I^{\otimes i-1} \otimes \left(\delta_i \sigma_z^{(i)} + \Delta_i \sigma_x^{(i)} \right) \otimes I^{\otimes N-i} \\
 & + \sum_{i=1}^{N-1} J_{i,i+1} I^{\otimes i-1} \sigma_z^{(i)} \otimes \sigma_z^{(i+1)} \otimes I^{\otimes N-(i+1)}, \quad (3.1)
 \end{aligned}$$

onde δ_i é a dessintonia entre os níveis eletrônicos dos pontos de cada molécula individual e Δ_i é o parâmetro que controla o tunelamento entre os pontos quânticos da molécula i -th ($i = 1, 2, \dots, N$). O último termo, $J_{i,i+1}$, está associado com o acoplamento eletrostático entre os qubits mais próximos da configuração molecular paralela, figura 3.1

Os resultados obtidos nessa análise, estarão dispostos neste capítulo da seguinte forma: Na seção 3.1, apresentamos os resultados de análise espectral de um sistema composto por 3 moléculas quânticas acopladas, bem como os resultados referentes ao emaranhamento, por meio do *tangle*, dos autoestados do sistema tripartite. Na seção 3.2, consideramos um sistema constituído por quatro moléculas e demonstramos que todos os anticruzamentos presentes na região em que as dessintonias são nulas, $\delta_i = 0$ ($i = 1, 2, 3, 4$), tem autoestados correspondentes relacionados a estados de 4 qubits maximamente emaranhados. Finalizamos esse capítulo, apresentando na seção 3.2.4, as conclusões obtidas até o momento a respeito da escalabilidade do emaranhamento bem como as perspectivas futuras de nossos estudos.

3.1 Espectro de energia e emaranhamento nos autoestados para 3 moléculas acopladas

Um dos primeiros passos a seguirmos quando estamos interessados em estudar o emaranhamento em sistemas quânticos é verificar a estrutura das bandas de energia e determinar regiões e parâmetros onde obtemos anticruzamentos duplos de energia. Essa análise é um recurso útil que pode ser usado para vencer a dificuldade experimental de detectar o emaranhamento quântico (CHU, 2006). Com isso, iniciamos nosso estudo da escalabilidade do sistema, analisando o espectro de energia de um sistema contendo 3 moléculas, e calculamos o tangle, definido na equação (2.46), para cada um dos oito autoestados do sistema.

Na figura 3.2, apresentamos o resultado numérico para o espectro de energia e para o tangle dos autoestados de um sistema composto por 3 moléculas quânticas como função da dessintonia na moléculas 1. Escolhemos o caso onde as dessintonias das moléculas 2 e 3 são nulas ($\delta_2 = \delta_3 = 0$) e, consideramos o regime de tunelamento fraco entre os pontos das moléculas, sendo $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta_3 = J/8$. Ao analisarmos o gráfico da figura (a), é possível verificar a formação de dois anticruzamentos A-B (*anticrossings*) importantes, em $\delta_1 = 0$, onde apenas dois autoestados do sistema se cruzam. Nesse caso específico, em que $\delta_1 = \delta_2 = \delta_3 = 0$, o Hamiltoniano para as 3 moléculas apresenta a seguinte forma matricial

$$H_{3mol} = \begin{pmatrix} 2J & \Delta/8 & \Delta/8 & 0 & \Delta/8 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta/8 & 0 & 0 & \Delta/8 & 0 & \Delta/8 & 0 & 0 \\ \Delta/8 & 0 & -2J & \Delta/8 & 0 & 0 & \Delta/8 & 0 \\ 0 & \Delta/8 & \Delta/8 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta/8 \\ \Delta/8 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta/8 & \Delta/8 & 0 \\ 0 & \Delta/8 & 0 & 0 & \Delta/8 & -2J & 0 & \Delta/8 \\ 0 & 0 & \Delta/8 & 0 & \Delta/8 & 0 & 0 & \Delta/8 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta/8 & 0 & \Delta/8 & \Delta/8 & 2J \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

escrito na base $\{|LLL\rangle, |LLR\rangle, |LRL\rangle, |LRR\rangle, |RLL\rangle, |RLR\rangle, |RRL\rangle, |RRR\rangle\}$. No regime de acoplamento forte ($\Delta \ll J$) entre as moléculas o Hamiltoniano (3.2) torna-se aproximadamente uma matriz diagonal, onde podemos verificar uma dupla degenerescência entre os estados $|LLL\rangle$ e $|RRR\rangle$, e os estados $|LRL\rangle$ e $|RLR\rangle$. Esta análise está de acordo como o resultado encontrado nos *anticrossings* A-B da figura 3.2 (a). O nível de mais baixa energia, *anticrossing* A, comporta o estado fundamental do sistema e o primeiro estado excitado, que estão respectivamente representados nas figuras 3.3 (a) e (b), podendo

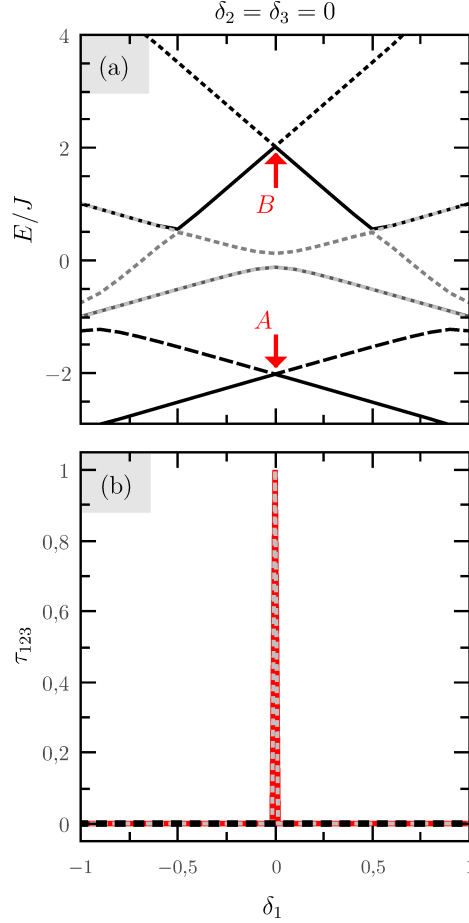


Figura 3.2: (a) Espectro de energia em função da dessintonia da molécula 1, δ_1 , do sistema composto por 3 moléculas quânticas acopladas, considerando $\delta_2 = \delta_3 = 0$. (b) Tangle-3, τ_{123} , relacionado aos quatro autoestados referentes aos anticruzamentos de energia indicados na figura pelas letras A-B. A linha cinza pontilhada está associada ao anticruzamento A, contendo o estado fundamental e ao primeiro estado excitado, que são dados, respectivamente, pelos estados $|\text{FLIP}_{\mp}\rangle_{\text{GHZ}}^{(2)}$; a linha sólida vermelha se relaciona ao anticruzamento B, com o sexto e o sétimo estado excitado correspondendo, respectivamente, aos estados $|\text{GHZ}\rangle_{\mp}$; a linha pontilhada preta indica o tangle-3 para os estados intermediários do espectro de energia. Para essas simulações consideramos as taxas de tunelamento como $\Delta_i = J/8$ sendo $i = 1, 2, 3$.

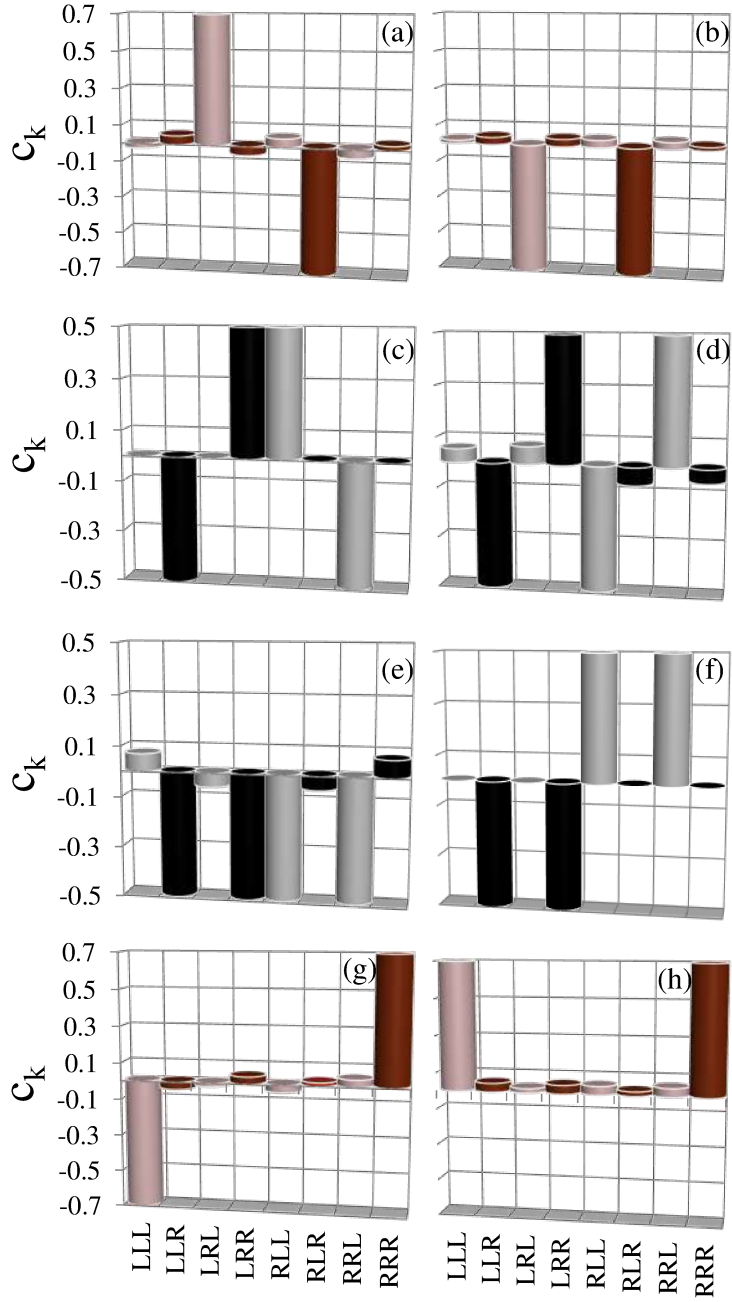


Figura 3.3: Representação gráfica dos coeficientes c_K dos autoestados do Hamiltoniano (3.2) correspondente ao sistema de 3 moléculas quânticas acopladas ($k = \{LLL, LLR, LRL, LRR, RLL, RLR, RRL, RRR\}$). Consideramos em todos os casos que o sistema está em ressonância completa, onde $\delta_1 = \delta_2 = \delta_3 = 0$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta_3 = J/8$. (a) Estado fundamental, correspondente ao estado $|\text{FLIP}_3\rangle_-^{\text{GHZ}}$; (b) primeiro estado excitado, correspondente ao estado $|\text{FLIP}_3\rangle_+^{\text{GHZ}}$; (c) segundo estado excitado; (d) terceiro estado excitado; (e) quarto estado excitado; (f) quinto estado excitado; (g) sexto estado excitado, correspondente ao estado $|\text{GHZ}_3\rangle_-$; (h) sétimo estado excitado, correspondente ao estado $|\text{GHZ}_3\rangle_+$.

ser escritos matematicamente da forma

$$|\text{FLIP}_{\mp}\rangle_{\text{GHZ}}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|LRL\rangle \mp |RLR\rangle). \quad (3.3)$$

Através do cálculo do tangle, verificamos que estes dois estados são maximamente emaranhados apresentando $\tau_{123} \approx 1$, isso pode ser observado ao verificarmos a linha cinza pontilhada da figura 3.2 (b). Já o nível de maior energia corresponde ao sexto e o sétimo estado excitado que, conforme pode ser observado nas figuras 3.3 (g) e (h), correspondem respectivamente aos estados

$$|\text{GHZ}\rangle_{\mp} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|LLL\rangle \mp |RRR\rangle). \quad (3.4)$$

Sabemos que os estados $|\text{GHZ}\rangle_{\mp}$ fazem parte de uma das classes de estados maximamente emaranhados para sistemas de 3 qubits, o que de fato se comprova pelos resultados do cálculo do tangle representados na figura 3.2 (b) pela linha sólida vermelha, onde para $\delta_1 = \delta_2 = \delta_3 = 0$ temos $\tau_{123} = 1$.

De posse do fato de que o tangle é sempre máximo para estados da classe GHZ (122, 123, 124), passamos a analisar os estados $|\text{FLIP}_{\mp}\rangle_{\text{GHZ}}^{(2)}$ é possível verificar que estes podem ser obtidos por meio da aplicação de uma transformação unitária que roda (*flipa*) o estado do segundo qubit do estado $|\text{GHZ}\rangle_{\mp}$:

$$|\text{FLIP}_{\mp}\rangle_{\text{GHZ}}^{(2)} = I \otimes \sigma_x \otimes I |\text{GHZ}\rangle = \sigma_x^{(2)} \frac{|LLL\rangle \mp |RRR\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (3.5)$$

Sendo que o índice superior no operador de Pauli $\sigma_x^{(i)}$, indica qual qubit será girado. Neste caso, os estados $|\text{FLIP}_{\mp}\rangle_{\text{GHZ}}^{(2)}$ são estados equivalentes aos estados da classe GHZ onde o segundo qubit foi girado por uma operação *spin-flip* (110).

Os demais estados, correspondentes aos níveis intermediários de energia, são superposições dos estados $\{|LLR\rangle, |LRR\rangle, |RLL\rangle, |RRL\rangle\}$, como pode ser visto nos gráficos (c), (d), (e) e (f) da figura 3.3. Estes estados não possuem um grau de emaranhamento apreciável, conforme pode ser visto na figura 3.2 (a), onde os resultados do tangle para esses estados estão representados pela linha preta tracejada. Houve tentativas, por meio da manipulação dos parâmetros, de se estabelecer configurações energéticas que favorecessem a formação da segunda classe de estados emaranhados de 3 qubits, os estados tipo *W* descritos pela equação (2.27), no entanto, verificamos que estes estados emaranhados dificilmente são acessados.

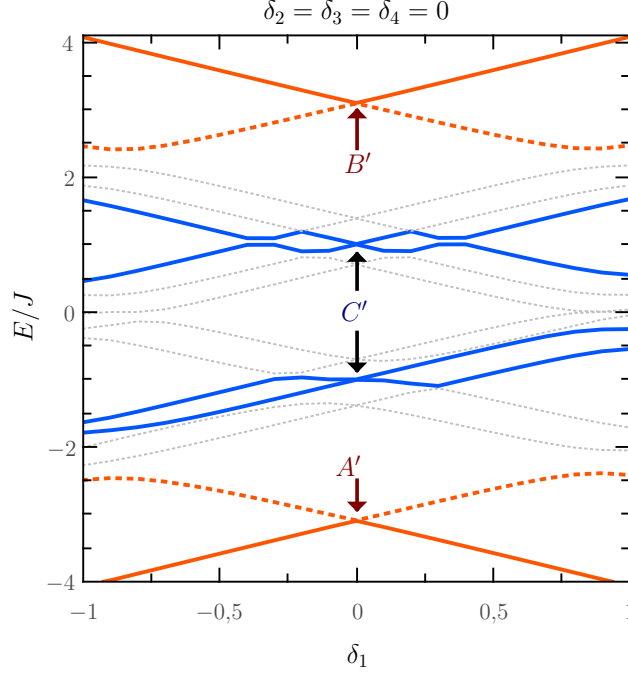


Figura 3.4: Espectro de energia em função da dessintonia da molécula 1, δ_1 , do sistema composto por 4 moléculas quânticas acopladas, considerando $\delta_2 = \delta_3 = \delta_4 = 0$ além da condição $\Delta_i = J/8$ para os parâmetros de tunelamento sendo $i = 1, 2, 3, 4$.

3.2 Espectro de energia e emaranhamento nos autoestados para 4 moléculas acopladas

Prosseguimos nossas considerações a respeito da escalabilidade do emaranhamento em sistemas compostos por moléculas quânticas considerando agora o caso onde temos 4 moléculas acopladas. Neste caso, nossos resultados mostraram que é possível separar os autoestados maximamente emaranhados em duas faixas distintas: os estados de borda, associados aos anticruzamentos A' e B' da figura 3.4, e alguns dos autoestados internos do espectro de bandas de energias, relacionados aos anticruzamentos denotados por C' na mesma figura. As particularidades desses dois grupos serão discutidas nas subseções a seguir.

3.2.1 Estados $\text{GHZ}^{4\text{qubits}}$ associados às bordas do espectro de energia

Na figura 3.5 (a), apresentamos os resultados numéricos do emaranhamento, em função da dessintonia na molécula 1, para cada um dos quatro autoestados contidos nas bordas do espectro e relacionados aos anticruzamentos A' e B' da figura 3.4. Afim de quantificar o emaranhamento utilizamos uma extensão da definição do tangle-3, definido na equação (2.46), para o caso de quatro qubits (122, 123, 124):

$$\tau_{1234} = \tau_{1(234)} - \tau_{12} - \tau_{13} - \tau_{14}. \quad (3.6)$$

Utilizaremos essa definição para determinar quais dentre os dezesseis autoestados do sistema de 4 moléculas pertencem à classe de estados $\text{GHZ}^{4\text{qubits}}$, uma vez que para esse tipo de estado o tangle-4 definido em (3.6) será sempre igual a unidade. Em nossas simulações variamos a dessintonia da molécula 1, fixando as dessintonias nas demais moléculas como sendo nulas, ou seja, $\delta_2 = \delta_3 = \delta_4 = 0$ e as taxas de tunelamento foram consideradas como sendo iguais em todas as moléculas de modo que $\Delta_i = \Delta = J/8$ ($i = 1, \dots, 4$).

Verificamos que os quatro autoestados são estados que apresentam $\tau_{1234} \approx 1$, na condição onde todas as dessintonias são nulas ($\delta_1 = \delta_2 = \delta_3 = \delta_4 = 0$) e, como já mencionado, estados que satisfazem essa condição são classificados como estados da classe GHZ. Assim, nos painéis (b)-(e) da figura 3.5, representamos os coeficientes c_k de cada dupla de autoestados contidos nas bordas do espectro, e observamos que, como no caso tripartite, os estados associados aos níveis mais baixos de energia do anticruzamento A' da figura 3.4 são estados da classe $\text{GHZ}^{4\text{qubits}}$ nos quais os qubits pares foram girados por uma operação *spin-flip* podendo ser escritos como

$$|\text{FLIP}_{\mp}^4\rangle_{\text{GHZ}}^{(2)(4)} = \sigma_x^{(2)} \sigma_x^{(4)} |\text{GHZ}^4\rangle_{\mp} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|LRLR\rangle \mp |RLRL\rangle). \quad (3.7)$$

Esses dois estados estão representados nos painéis (b) e (c) da figura 3.5. Ainda em similaridade com os resultados para as três moléculas, vemos que os autoestados relacionados ao anticruzamento B' da figura 3.4 são os estados GHZ para um sistema de quatro qubits, escritos respectivamente como

$$|\text{GHZ}^4\rangle_{\mp} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|LLLL\rangle \mp |RRRR\rangle). \quad (3.8)$$

Os coeficientes c_k para esses estados estão dispostos, respectivamente, nos painéis (d) e (e) da figura 3.5.

Ao compararmos estes resultados com a nossa discussão para o caso de 3 moléculas, verificamos que os estados dos extremos superior e inferior do espectro de energia seguem a regra de serem estados emaranhados da classe GHZ independentemente do tamanho do sistema de moléculas. Dada esta recorrência, justificamos o nome de *estados de borda* para a classe GHZ que encontramos de forma sistemática ao escalar o sistema de N moléculas¹. A explicação para este comportamento é o efeito do tunelamento que, combinado com a interação Coulombiana, favorece transições de ordens superiores levando a formação destes autoestados específicos.

3.2.2 Estados de cluster $|\Phi^4\rangle^c$ internos às bandas de energia

Em nossos estudos de caracterização de emaranhamento em sistemas compostos por moléculas quânticas, verificamos que sempre que existem anticruzamentos entre dois únicos autovalores de energia do sistema, ocorrem situações onde os autoestados envolvidos são maximamente emaranhados. Nestas condições específicas, é possível encontrar uma dinâmica efetiva entre estados iniciais viáveis do ponto de vista experimental que levem a geração de estados emaranhados (21, 126). Com isso em mente, e observando o comportamento dos autovalores intermediários na região onde $\delta_1 \approx \delta_2 = \delta_3 = \delta_4 = 0$, verificamos que todos os anticruzamentos nesse pequeno intervalo envolvem duplas de autoestados.

Assim, ao continuar a análise do espectro para o sistema de 4 moléculas, verificamos que existem outro anticruzamento, além daqueles referentes aos estados de borda, que merecem atenção em virtude do seu caráter potencial de estados emaranhados pertencentes à outras classes.

Antes de passarmos a essa discussão vamos definir alguns conjuntos de estados que serão úteis nas discussões que se seguem. Primeiramente, definiremos um conjunto de

¹Essa consistência de que os estados da classe GHZ estão sempre contidos nos *estados de borda* do sistema de N moléculas foi testada e comprovada numericamente considerando configurações compostas por $N = 3$ até $N = 10$ moléculas.

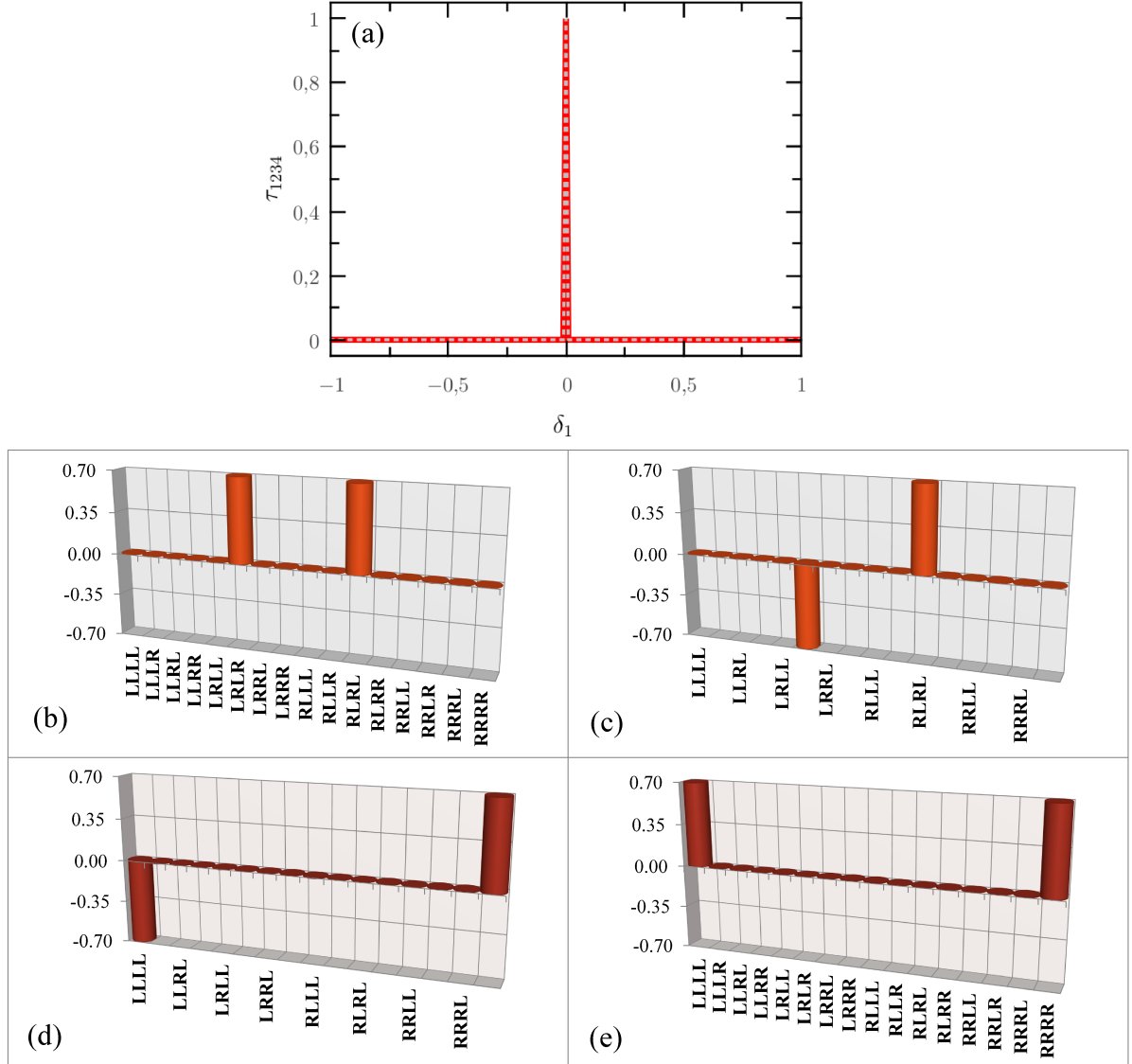


Figura 3.5: (a) Grau de emaranhamento dos autoestados do Hamiltoniano do sistema de 4 moléculas, calculado usando o tangle τ_{1234} como definido na equação (3.6), em função da dessintonia da molécula 1, considerando $\delta_2 = \delta_3 = \delta_4 = 0$ e $\Delta_i = J/8$. Painéis (b)-(e): decomposição dos autoestados do Hamiltoniano do sistema de 4 moléculas na base computacional, considerando o ponto onde $\tau_{1234} \approx 1$ ($\delta_1 = 0$), do (b) estado fundamental, (c) primeiro estado excitado, (d) décimo quarto estado excitado e (e) décimo quinto estado excitado.

estados da classe $\text{FLIP}_{\text{GHZ}}^{4\text{qubits}}$:

$$\begin{aligned}
|\text{FLIP}_{\pm}^4\rangle_{\text{GHZ}}^{(2)(4)} &= \sigma_x^{(2)}\sigma_x^{(4)}|\text{GHZ}^4\rangle_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|LRLR\rangle \pm |RLRL\rangle), \\
|\text{FLIP}_{\pm}^4\rangle_{\text{GHZ}}^{(2)(3)} &= \sigma_x^{(2)}\sigma_x^{(3)}|\text{GHZ}^4\rangle_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|LRRL\rangle \pm |RLLR\rangle), \\
|\text{FLIP}_{\pm}^4\rangle_{\text{GHZ}}^{(3)(4)} &= \sigma_x^{(3)}\sigma_x^{(4)}|\text{GHZ}^4\rangle_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|LLRR\rangle \pm |RRLL\rangle).
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Somado a esse conjunto, consideraremos os estados $|\text{GHZ}^4\rangle_{\pm}$ já definidos na equação (3.8). O segundo conjunto de estados maximamente emaranhados que utilizaremos para discussão dos resultados, será o conjunto de estados de cluster para quatro qubits descritos pelas equações (111)

$$\begin{aligned}
|\Phi^4\rangle_{\pm}^{c1} &= \frac{1}{2}(\pm |LLRL\rangle \pm |LRLR\rangle + |RLRR\rangle + |RRLR\rangle), \\
|\Phi^4\rangle_{\pm}^{c2} &= \frac{1}{2}(\pm |LLRL\rangle \mp |LRLR\rangle + |RLRR\rangle - |RRLR\rangle), \\
|\Phi^4\rangle_{\pm}^{c3} &= \frac{1}{2}(|LLLR\rangle + |LRRR\rangle \pm |RLLL\rangle \pm |RRRL\rangle), \\
|\Phi^4\rangle_{\pm}^{c4} &= \frac{1}{2}(\mp |LLLR\rangle \pm |LRRR\rangle + |RLLL\rangle - |RRRL\rangle).
\end{aligned} \tag{3.10}$$

De posse desses dois conjuntos de estados maximamente emaranhados, passaremos agora a análise dos anticruzamentos internos do espectro de energia apresentado na figura 3.4. Chamaremos atenção, especialmente, para os quatro autoestados alojados nos anticruzamentos apontados pelo ponto C' da figura 3.4, lembrando que para este ponto temos as seguintes condições de parâmetros $\delta_1 = \delta_2 = \delta_3 = \delta_4 = 0$ e $\Delta_i = \Delta = J/8$. O anticruzamento inferior, neste caso, envolve o quarto e o quinto estado excitado e, ao examinar os coeficientes numéricos para estes dois autoestados, verificamos que eles coincidem, respectivamente com os estados de cluster $|\Phi^4\rangle_{\pm}^{c2}$, o que pode ser comprovado pelos resultados numéricos dispostos nos painéis (a) e (b) da figura 3.6. No anticruzamento superior, indicado pelo ponto C' na figura 3.4, temos o decimo e decimo primeiro estado excitado, que também estão associados a estados de cluster maximamente emaranhados, sendo eles dados respectivamente pelos estados $|\Phi^4\rangle_{\pm}^{c4}$, como podemos observar nas figuras 3.6 (c) e (d).

Apesar de sabermos que o tangle-4 τ_{1234} , definido na equação (3.6), tem uma interpretação voltada para os estados da classe GHZ, verificamos os valores numéricos para todas

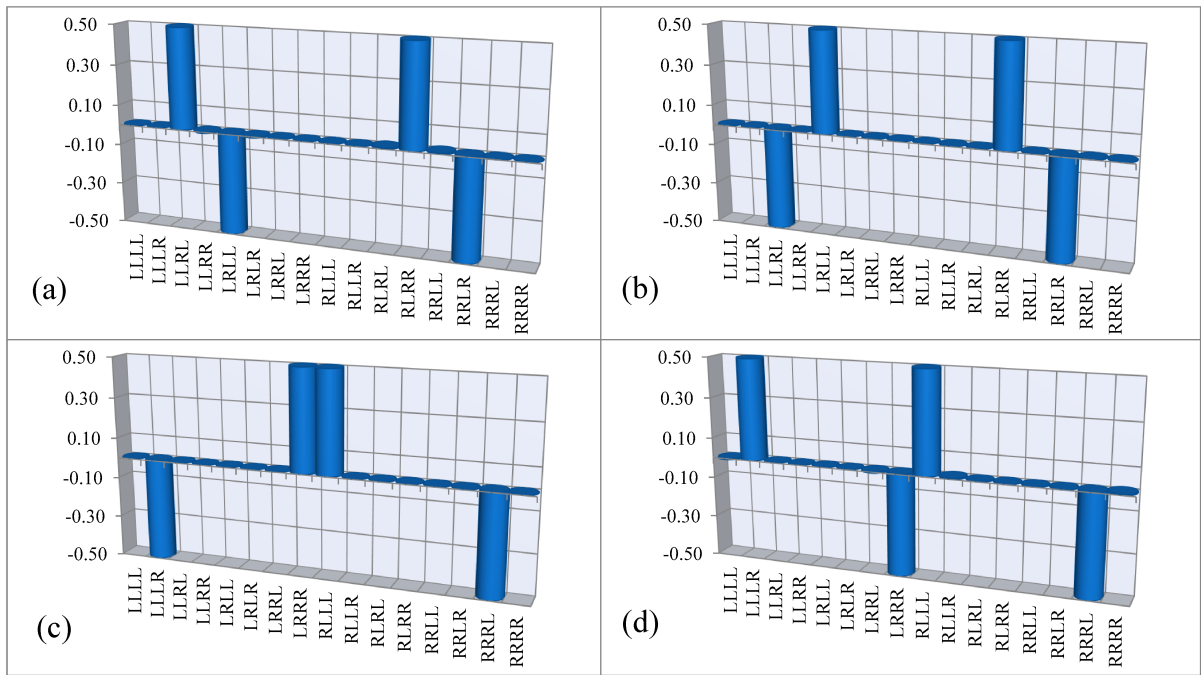


Figura 3.6: Decomposição na base computacional do sistema de 4 moléculas dos autoestados relacionados com os anticruzamentos C' da figura 3.4 correspondendo ao (a) quarto, (b) quinto, (c) décimo e (d) décimo primeiro estado excitado. Os parâmetros físicos utilizados são os mesmos da figura 3.4

Tangle - numérico	Possibilidades medidas
$\tau_{1234} \approx -0,25$	Emaranhamento total do sistema.
$\tau_{1(234)} \approx 1$	Emaranhamento simultâneo do qubit 1 com os qubits 2, 3 e 4.
$\tau_{12} \approx 0,125$	Emaranhamento entre os qubits 1 e 2.
$\tau_{13} \approx 0,125$	Emaranhamento entre os qubits 1 e 3
$\tau_{14} \approx 1$	Emaranhamento entre os qubits 1 e 4

Tabela 3.1: Tabela que relaciona os valores numéricos do tangle para estados de cluster de 4 qubits com as respectivas proposições de medidas, considerando situações análogas àquelas definidas para 3 qubits, conforme discutido na subseção 2.2.5.

as combinações possíveis para os operadores tangle, seguindo o padrão de combinações abordadas na subseção 2.2.5. Além dos quatro autoestados do sistema de quatro moléculas, analisamos os demais estados de cluster definidos em (3.10), e os resultados são sempre os mesmos que estão apresentados na tabela 3.1.

Assim, considerando esses dados referentes ao tangle podemos fazer as seguintes considerações:

- Conforme esperado, o tangle de quatro qubits definido na equação (3.6) não é o melhor quantificador do grau de emaranhamento para estados de cluster de quatro qubits, uma vez que seu valor é negativo.
- Ao considerarmos a relação de desigualdade, apresentada na equação (2.47), para um sistema de quatro qubits

$$\tau_{12} + \tau_{13} + \tau_{14} \leq \tau_{1(2,3,4)}, \quad (3.11)$$

verificamos que sempre que temos um dos estados de cluster definidos nas equações em (3.10) essa desigualdade é violada ($1,25 \leq 1$). Este resultado está de acordo com a classificação dos estados de cluster como uma classe de estados maximamente emaranhados diferente dos estados GHZ.

- O emaranhamento entre o primeiro e o último qubit da “cadeia” de moléculas é uma característica que se destaca, e sobre a qual podemos fazer duas observações: (i) o valor máximo do tangle τ_{14} se comparado com os outros tangles de duas moléculas e (ii) a comparação entre $\tau_{1(234)}$ e τ_{14} , duas medidas que sempre apresentam valor máximo para os estados de cluster considerados.

3.2.3 Superposições de estados emaranhados

Tangle - numérico	Possibilidades medidas
$\tau_{1234} \approx 0,74$	Emaranhamento total do sistema.
$\tau_{1(234)} \approx 1$	Emaranhamento simultâneo do qubit 1 com os qubits 2, 3 e 4.
$\tau_{12} \approx 0,005$	Emaranhamento entre os qubits 1 e 2.
$\tau_{13} \approx 0,005$	Emaranhamento entre os qubits 1 e 3
$\tau_{14} \approx 0,25$	Emaranhamento entre os qubits 1 e 4

Tabela 3.2: Tabela que relaciona os valores numéricos do tangle para os oito autoestados intermediários parcialmente emaranhados com as respectivas proposições de medidas, considerando situações análogas àquelas definidas para 3 qubits, conforme discutido na subseção 2.2.5.

Para finalizar nossa análise sobre o caso de 4 moléculas, cabe estudar as decomposições do restante dos autoestados no espectro de energia. Tomando agora os demais anticruzamentos presentes na região $\delta_1 = \delta_2 = \delta_3 = \delta_4 = 0$, da figura 3.4, associados aos autovalores representados pelas linhas cinzas no espectro. Nossos resultados numéricos revelam que todos os oito autoestados relacionados com esses quatro anticruzamentos são superposições de um dos estados do tipo $\text{FLIP}_{\text{GHZ}}^{4\text{qubits}}$, definidos nas equações em (3.9), com um dos estados de cluster da equação (3.10). Esses oito autoestados, seguindo o ordenamento de energia, podem ser escritos como:

$$\begin{aligned}
|\psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\Phi^4\rangle_+^{c1} + |\text{FLIP}_-^4\rangle_{\text{GHZ}}^{(2)(3)} \right), \\
|\psi_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-|\Phi^4\rangle_-^{c1} + |\text{FLIP}_+^4\rangle_{\text{GHZ}}^{(2)(3)} \right), \\
|\psi_6\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-|\Phi^4\rangle_+^{c1} + |\text{FLIP}_-^4\rangle_{\text{GHZ}}^{(2)(3)} \right), \\
|\psi_7\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\Phi^4\rangle_-^{c1} + |\text{FLIP}_+^4\rangle_{\text{GHZ}}^{(2)(3)} \right), \\
|\psi_8\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\Phi^4\rangle_+^{c3} - |\text{FLIP}_+^4\rangle_{\text{GHZ}}^{(3)(4)} \right), \\
|\psi_9\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-|\Phi^4\rangle_-^{c3} + |\text{FLIP}_-^4\rangle_{\text{GHZ}}^{(3)(4)} \right), \\
|\psi_{12}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\Phi^4\rangle_+^{c3} + |\text{FLIP}_+^4\rangle_{\text{GHZ}}^{(3)(4)} \right), \\
|\psi_{13}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\Phi^4\rangle_-^{c3} + |\text{FLIP}_-^4\rangle_{\text{GHZ}}^{(3)(4)} \right).
\end{aligned} \tag{3.12}$$

Calculamos o tangle-4 τ_{1234} para cada um dos oito autoestados, e também os tangles considerando todas as possíveis bipartições para a molécula 1 e os resultados se encontram na tabela 3.2. Neste caso, vemos que a relação de desigualdade (3.11) se fixa, para todos os oito autoestados, na condição $\tau_{12} + \tau_{13} + \tau_{14} < \tau_{1(2,3,4)}$, o que nos informa que estes estados possuem emaranhamento residual, embora não seja possível, ainda, quantificar esse emaranhamento.

3.2.4 Conclusões e perspectivas futuras

Até agora nossos estudos nos permitiram determinar que em um sistema constituído de moléculas interagindo entre si a primeiros vizinhos, os estados contidos nos anticruzamentos externos do espectro de energia, como os apontados na figura 3.7 (para 3, 4 e 5 moléculas respectivamente) serão sempre estados associados a classe GHZ de estados maximamente emaranhados. Nossas simulações numéricas referentes ao espectro, parcialmente representadas na figura 3.8 para um intervalo de $-10^{-4} \leq \delta \leq 10^{-4}$, onde consideramos sistemas com uma composição de 3 até 10 moléculas, nos permitem fazer uma representação pictórica da situação limite do espectro para N alto, painel (b). Em termos de estrutura espectral, os nossos resultados confirmam a aparição de bandas de estados, distribuídos nas faixas vermelha, preta e verde, separadas por uma brecha (*gap*) energética que depende de Δ .

Ao analisar as características dos autoestados do Hamiltoniano de muitas moléculas, verificamos que o aumento do número de moléculas não afeta o fato das, agora, bandas de energia serem formadas por estados maximamente emaranhados dos tipos $|\text{GHZ}\rangle_{\pm}$ e $|\text{FLIP}_{\pm}\rangle_{\text{GHZ}}$, o que demonstra que o emaranhamento, neste sistema específico, é um recurso escalável: a medida que aumentamos a dimensão do sistema, ao acoplarmos mais moléculas, verificamos que existe sempre uma dupla degenerescência nos níveis de maior e de menor energia, ilustrado com as cores vermelha e verde na figura 3.8 (a), que denominamos estados emaranhados de borda.

A representação pictórica para N arbitrário nos permite apreciar as características principais do escalamento do emaranhamento: na banda superior, de cor vermelho, os dois níveis com energia $-J(N-1)$, fazem parte da classe de estados GHZ, enquanto. Já a faixa verde, também com dois estados e $J(N-1)$ são estados do tipo FLIP. Verifica-se também que o gap de energia δ entre os estados de borda e os níveis intermediários, figura 3.4 (b), varia entre $1, 8J \geq \delta \leq 2J$.

Desta forma, verificamos que a classe de estados GHZ está intrinsecamente vinculada

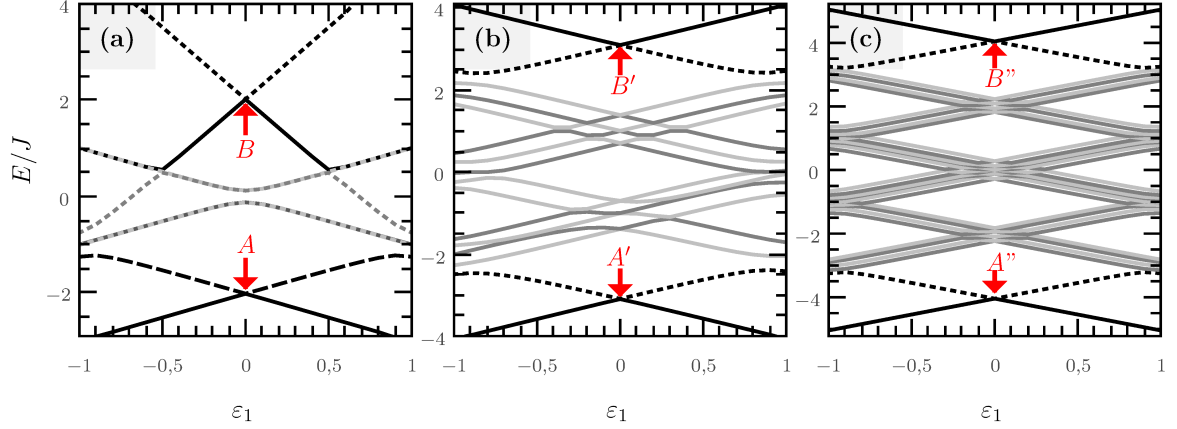


Figura 3.7: (a) Espectro de energia em função da dessintonia da molécula 1, δ_1 , do sistema composto por 3 moléculas quânticas acopladas, considerando $\delta_2 = \delta_3 = 0$. (b) Espectro de energia em função da dessintonia da molécula 1, δ_1 , do sistema composto por 4 moléculas quânticas acopladas, considerando $\delta_2 = \delta_3 = \delta_4 = 0$. (c) Espectro de energia em função da dessintonia da molécula 1, δ_1 , do sistema composto por 5 moléculas quânticas acopladas, considerando $\delta_2 = \delta_3 = \delta_4 = \delta_5 = 0$. Nos três gráficos, os parâmetros do tunelamento obedecem $\Delta_i = J/8$ sendo $i = 1, N$ com $N = 3, 4, 5$.

ao espectro do problema das N moléculas. A interação Coulombiana entre os elétrons favorece a aparição de estados emaranhados que são superposições dos elementos da forma $|0\rangle^{\otimes N} |1\rangle^{\otimes N}$, mesmo que no nível de dois elétrons favorece as configurações da forma $|01\rangle$ e $|10\rangle$. Pretendemos ainda, verificar o que acontece com os estados intermediários, como por exemplo no caso de $N = 5$ moléculas, cujo espectro de energia é apresentados na figura 3.7 (c). Com isso, determinaremos se, na condição de ressonância completa, todos os autoestados do sistema de N moléculas está associado a estados maximamente emaranhados. Outro fato a ser explorado e analisar se os estados de borda associados que na condição de ressonância completa pertencem à classe GHZ, nas condições em que as dessintonias nas moléculas e as taxas de tunelamento apresentam valores distintos, permanecem sendo estados maximamente emaranhados.

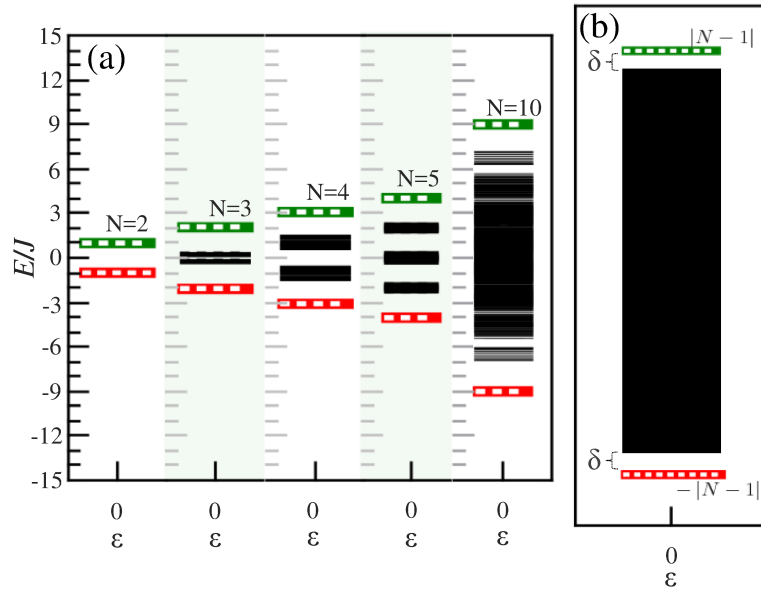


Figura 3.8: (a) Espectro de energia para o sistema composto por 2, 3, 4, 5 e 10 moléculas, em função das dessintonias entre os níveis eletrônicos das moléculas que compõem cada sistema. Foi considerado um pequeno intervalo de variação de forma que $-10^{-4} \leq \delta \leq 10^{-4}$, o tunelamento entre os pontos das moléculas utilizado foi de $\Delta_i = \Delta = J/8$ em todos os casos. (b) Generalização dos resultados obtidos para um sistema de N moléculas, onde os estados de borda, $|\text{FLIP}_N\rangle_{\mp}^{\text{GHZ}}$ e $|\text{GHZ}_N\rangle_{\mp}$, estão respectivamente alocados nos níveis de energia $E = \mp J(N-1)$.

Capítulo 4

Emaranhamento eletrônico mediado por fônons

Passaremos agora a analisar as características do emaranhamento do segundo sistema apresentado na seção 1.4, onde os dois qubits de carga interagem entre si por meio da interação elétron-fônon. Temos por objetivo entender o papel exato do acoplamento com os modos vibracionais na geração de emaranhamento entre os subsistemas de moléculas quânticas. Esta seção está dividida em duas subseções: na primeira subseção verificaremos o comportamento do espectro de energia do sistema e o grau de emaranhamento dos autoestados do Hamiltoniano (3.1); na segunda subseção fornecemos uma prova de princípio de como gerar estados eletrônicos maximamente entrelaçados, usando parâmetros físicos relacionados a pontos quânticos acoplados a nanorressonadores bosônicos de alta frequência.

4.1 Hamiltoniano de dois qubits na base rotacionada Bell-MV

Antes de passarmos ao problema de autovalores e autovetores do Hamiltoniano (3.1), vamos primeiramente reescrevê-lo usando a nossa base convencional em que os qubits de carga são definidos de acordo com sua posição dentro de cada molécula: $|10, 10\rangle = |LL\rangle$; $|10, 01\rangle = |LR\rangle$; $|01, 10\rangle = |RL\rangle$ e $|01, 01\rangle = |RR\rangle$. Nesta nova base o Hamiltoniano efetivo (1.16) passa a ser escrito como

$$\bar{H} = \bar{H}_D^q + H_P + V_{\text{eff}}^q + \Delta_{DP}^q, \quad (4.1)$$

onde $\bar{H}_{\mathcal{D}}^q$ é o termo relacionado aos níveis de energia dos pontos quânticos, e V_{eff}^q é o termo de interação elétron-elétron entre as moléculas e $\Delta_{\mathcal{DP}}^q$ descreve a interação elétron-fônon, todos na nova base dos qubits da seguinte forma

$$\bar{H}_{\mathcal{D}}^q = \sum_{q=1}^2 \frac{\delta_q}{2} \sigma_z^{(q)}; \quad (4.2)$$

$$H_{\mathcal{P}} = \omega_1 B_1^\dagger B_1 + \omega_2 B_2^\dagger B_2; \quad (4.3)$$

$$\Delta_{\mathcal{DP}}^q = \sum_{q=1}^2 \Delta_q \left[\sigma_+^{(q)} \otimes \mathbb{X}_{12} + \sigma_-^{(q)} \otimes \mathbb{X}_{12}^\dagger \right] \quad (4.4)$$

e

$$V_{\text{eff}}^q = -\alpha^2 \omega (\sigma_z \otimes \sigma_z + \mathbb{I}). \quad (4.5)$$

Onde q denota os qubits 1 ou 2, δ_1 e δ_2 são as dessintonias entre os níveis de energia dos pontos que compõem cada uma das moléculas, definidas respectivamente como $\delta_1 = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$ e $\delta_2 = \varepsilon_3 - \varepsilon_4$, e os parâmetros de tunelamento são dados por $\Delta_1 = \Delta_{12}$ e $\Delta_2 = \Delta_{34}$. Aqui vamos considerar o caso onde o acoplamento elétron-fônon é o mesmo em todos os pontos quânticos, de modo que $g_1 = g_2 = g$, e também que a energia do modo vibracional 1 é igual a energia do modo 2, $\omega_1 = \omega_2 = \omega$, logo $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$.

Descrever o sistema de moléculas acopladas aos modos vibracionais nesta nova base fornece uma importante informação a respeito do modo que os elétrons das moléculas interagem. Ao analisarmos o termo efetivo, equação (4.5), relacionado a interação elétron-elétron vemos que o produto tensorial entre as matrizes σ_z é similar ao termo de interação coulombiana presente no Hamiltoniano (1.8) que descreve o sistema isolado de duas moléculas utilizado em nossos estudos do capítulo 3, e nos resultados apresentados na dissertação de mestrado (127). Sabemos que a interação de Coulomb tem um papel fundamental para a formação de estados emaranhados em sistemas de pontos quânticos acoplados, assim vamos verificar quais os efeitos do termo de interação efetiva, V_{eff}^q , no grau do emaranhamento eletrônico.

De posse do Hamiltoniano (4.1) escrito na base dos qubits de carga, vamos analisar as possibilidades do sistema em fornecer estados maximamente emaranhados. Uma das maneiras de fazer isso é, sempre que possível, mudar a base convencional do subsistema de qubits para uma base ortonormal de estados emaranhados escolhendo no nosso caso os estados de Bell

$$|\psi_{\text{Bell}}\rangle_{\mathcal{D}} = \{|\Psi_-\rangle, |\Phi_-\rangle, |\Psi_+\rangle, |\Phi_+\rangle\}_{\mathcal{D}},$$

onde

$$\begin{aligned} |\Psi_{\pm}\rangle_{\mathcal{D}} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|LR\rangle \pm |RL\rangle), \\ |\Phi_{\pm}\rangle_{\mathcal{D}} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|LL\rangle \pm |RR\rangle). \end{aligned} \quad (4.6)$$

O sistema composto será escrito na base Bell-MV $|\psi_{\text{Bell}}, ml\rangle$, com m e l sendo o número de excitações no modo vibracional da esquerda e da direita, respectivamente. Vamos denotar o número total de excitações nos modos vibracionais como $N_{\text{VT}} = m + l$. Esta escolha denota o fato de que cada valor de N_{VT} define um conjunto de subespaços $\mathcal{S}_{\text{B},(ml)}$. Observe que, para $N_{\text{VT}} = 0$, temos um único subespaço $\mathcal{S}_{\text{B},(00)}$ com quatro estados; para $N_{\text{VT}} = 1$ temos $\mathcal{S}_{\text{B},(10)}$ e $\mathcal{S}_{\text{B},(01)}$ (oito estados); $N_{\text{VT}} = 3$ tem doze estados associados com $\mathcal{S}_{\text{B},(11)}$, $\mathcal{S}_{\text{B},(20)}$, e $\mathcal{S}_{\text{B},(02)}$, e assim por diante.

Vamos escrever o Hamiltoniano na representação matricial, considerando os seis primeiros subespaços quadridimensionais $\mathcal{S}_{\text{B},(ml)}$, ordenados da seguinte forma $\{\mathcal{S}_{\text{B},(00)}, \mathcal{S}_{\text{B},(01)}, \mathcal{S}_{\text{B},(10)}, \mathcal{S}_{\text{B},(11)}, \mathcal{S}_{\text{B},(02)}, \mathcal{S}_{\text{B},(20)}\}$:

$$H = \left(\begin{array}{c|cc|ccc} B_{00} & G_2 & G_1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline G_2 & B_{01} & 0 & G_1 & \sqrt{2}G_2 & 0 \\ G_1 & 0 & B_{10} & G_2 & 0 & \sqrt{2}G_1 \\ \hline 0 & G_1 & G_2 & B_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}G_2 & 0 & 0 & B_{02} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}G_1 & 0 & 0 & B_{02} \end{array} \right). \quad (4.7)$$

Usando o ordenamento $|\Psi_-, ml\rangle$, $|\Phi_-, ml\rangle$, $|\Psi_+, ml\rangle$, e $|\Phi_+, ml\rangle$, as matrizes quadridimensionais B_{ml} e G_v são definidas como

$$B_{ml} = \begin{pmatrix} E_{ml} & \Delta_- & \delta_-/2 & 0 \\ \Delta_- & E_{ml} & 0 & \delta_+/2 \\ \delta_-/2 & 0 & E_{ml} & \Delta_+ \\ 0 & \delta_+/2 & \Delta_+ & E_{ml} \end{pmatrix}, \quad (4.8)$$

e

$$G_v = \begin{pmatrix} g_v & 0 & 0 & 0 \\ 0 & g_v/2 & 0 & (-1)^{(v-1)}g_v/2 \\ 0 & 0 & g_v & 0 \\ 0 & (-1)^{(v-1)}g_v/2 & 0 & g_v/2 \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

onde $E_{ml} = \sum_{i=1,2} \sum_{j=3,4} \sum_{v=1,2} (\varepsilon_i + \varepsilon_j + \omega_v)$ são as energias do estado $|\psi_{\text{Bell}}, ml\rangle$, os termos de tunelamento são definidos como $\Delta_{\pm} = \Delta_2 \pm \Delta_1$ e $\delta_{\pm} = \delta_1 \pm \delta_2$, com $\delta_{1(2)}$ sendo a dessintonia para o qubit 1 (2).

A matriz da equação (4.8) tem a mesma estrutura da matriz, também escrita na base de Bell, que descreve o sistema de duas moléculas acopladas estudado durante a realização do mestrado (127). Já as matrizes G_v dependem do parâmetro g_v relacionado ao acoplamento elétron-fônon, onde o fator $\sqrt{N_v}$ aparece em elementos específicos da matriz (4.7) que dependem dos valores de N_v dos subespaços acoplados.

Se $\delta_{\pm} = 0$, os estados do subespaço eletrônico $|\Psi_{-}\rangle_{\mathcal{D}}$ e $|\Phi_{-}\rangle_{\mathcal{D}}$ são desacoplados, ao mesmo tempo em que $|\Psi_{+}\rangle_{\mathcal{D}}$ e $|\Phi_{+}\rangle_{\mathcal{D}}$ não são, em concordância com os resultados previamente discutidos na dissertação de mestrado (127). No entanto, se os elementos das duas primeiras linhas da matriz (4.7), associados a $|\Psi_{-}, 00\rangle$ e $|\Phi_{-}, 00\rangle$, respectivamente, são escritos usando a notação $|\rangle\langle|$ obtemos:

$$\begin{aligned} H = & |\Psi_{-}, 00\rangle \left(E_{00} \langle\Psi_{-}, 00| + g_2 \langle\Psi_{-}, 01| + g_1 \langle\Psi_{-}, 10| \right) + |\Phi_{-}, 00\rangle \times \\ & \left(E_{00} \langle\Phi_{-}, 00| + \frac{g_2}{2} \langle\Phi_{-}, 01| - \frac{g_2}{2} \langle\Phi_{+}, 01| + \frac{g_1}{2} \langle\Phi_{-}, 10| + \frac{g_1}{2} \langle\Phi_{+}, 10| \right) + \dots \end{aligned} \quad (4.10)$$

Concluimos assim que o termo com $|\Psi_{-}\rangle_{\mathcal{D}}$ pode ser reescrito como $\left(|\Psi_{-}\rangle \langle\Psi_{-}| \right)_{\mathcal{D}} \otimes \left(E_{00} |00\rangle \langle 00| + g_2 |00\rangle \langle 01| + g_1 |00\rangle \langle 10| \right)$, enquanto os outros termos não permitem o mesmo.

Dando sequência a nossa análise, verificamos que apenas os termos do Hamiltoniano associados a $|\Psi_{-}\rangle_{\mathcal{D}}$ são desacoplados, pelo menos do ponto de vista eletrônico, do restante da base de Bell. Dessa maneira, existe um único estado de Bell vestido por modos vibracionais, sendo este autoestado do Hamiltoniano (3.1) para a condição específica onde os tunelamentos são iguais, $\Delta_2 = \Delta_1$ e as dessintonias obedecem a regra $\delta_{-} = 0$. Escrevendo

unicamente os termos do Hamiltoniano que contém $|\Psi_{-}\rangle_{\mathcal{D}}$ é fácil observar que

$$\begin{aligned}
H_{|\Psi_{-}\rangle} &= (|\Psi_{-}\rangle \langle \Psi_{-}|)_{\mathcal{D}} \otimes \left\{ \left[|\mathbf{00}\rangle_{\mathcal{V}} (E_{00} \langle 00|_{\mathcal{V}} + g_1 \langle 10|_{\mathcal{V}} + g_2 \langle 01|_{\mathcal{V}}) \right] + \right. \\
&+ \left[|\mathbf{01}\rangle_{\mathcal{V}} (E_{01} \langle 01|_{\mathcal{V}} + g_1 \langle 11|_{\mathcal{V}} + \sqrt{2}g_2 \langle 02|_{\mathcal{V}}) \right] + \\
&+ \left[|\mathbf{10}\rangle_{\mathcal{V}} (E_{10} \langle 10|_{\mathcal{V}} + g_2 \langle 11|_{\mathcal{V}} + \sqrt{2}g_1 \langle 20|_{\mathcal{V}}) \right] + \\
&+ \left[|\mathbf{11}\rangle_{\mathcal{V}} (E_{11} \langle 11|_{\mathcal{V}} + \sqrt{2}g_1 \langle 21|_{\mathcal{V}} + \sqrt{2}g_2 \langle 12|_{\mathcal{V}}) \right] + \\
&+ \left[|\mathbf{02}\rangle_{\mathcal{V}} (E_{02} \langle 02|_{\mathcal{V}} + \dots) + |\mathbf{20}\rangle_{\mathcal{V}} (E_{20} \langle 20|_{\mathcal{V}} + \dots) \right] + \dots + \text{h.c.} \left. \right\}. \quad (4.11)
\end{aligned}$$

Não é possível escrever os outros termos do Hamiltoniano como produtos tensoriais do tipo $|\psi\rangle \langle \psi|_{\mathcal{D}} \otimes \sum \alpha |m'l'\rangle_{\mathcal{V}} \langle ml|$: termos com $|\Psi_{+}\rangle$ estão acoplados à $|\Phi_{+}\rangle$ por interação elétron-fônon, enquanto os elementos $|\Phi_{+}\rangle$ e $|\Phi_{-}\rangle$ estão acoplados um ao outro pelo tunelamento.

O número de autoestados em cada ramificação, ou seja, estados pertencentes a determinado valor de $N_{\mathcal{V}\text{T}}$, e o número de estados eletrônicos maximamente emaranhados em $\delta_1 = 0$, está conectado com a dimensão dos subespaços originais. Embora esses subespaços estejam acoplados um ao outro, cada ramo pode ser visto como estados Bell-MV (modos vibracionais), com maior energia à medida que $N_{\mathcal{V}\text{T}} = m + l$ aumenta.

4.2 Análise espectral

Conforme vimos na seção anterior, a dessintonia eletrônica tem um papel importante para determinarmos regiões de parâmetros onde é possível obter estados maximamente emaranhados. Assim, vamos verificar o comportamento da energia como função da dessintonia da molécula 1 para diferentes valores de δ_2 . Inicialmente consideramos nulo o tunelamento inter-pontos nas moléculas ($\Delta_q = 0$), e escrevemos as energias livres para o modelo de dois qubits, equação (4.1), da seguinte forma

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{LL,ml} &= \frac{\delta_1 + \delta_2}{2} - 2\alpha^2\omega + (m + l)\omega \\
\varepsilon_{RR,ml} &= -\left(\frac{\delta_1 + \delta_2}{2}\right) - 2\alpha^2\omega + (m + l)\omega \\
\varepsilon_{LR,ml} &= \frac{\delta_1 - \delta_2}{2} + (m + l)\omega \\
\varepsilon_{RL,ml} &= -\left(\frac{\delta_1 - \delta_2}{2}\right) + (m + l)\omega. \quad (4.12)
\end{aligned}$$

As equações (4.12) permitem discutir algumas características importantes relativas ao espectro, que lançam luz sobre as condições para a formação de estados maximamente emaranhados. Observe que $\varepsilon_{LL,ml} = \varepsilon_{RL,ml}$ quando $\delta_1 = 2\alpha^2\omega$ e $\varepsilon_{RR,ml} = \varepsilon_{LR,ml}$ em $\delta_1 = -2\alpha^2\omega$. Para esses valores de δ_1 , esperamos a presença de anticruzamentos de energia devido ao termo de tunelamento do Hamiltoniano, que acopla os estados $|LL, 00\rangle$ a $|RL, 00\rangle$ e $|RR, 00\rangle$ com o estado $|LR, 00\rangle$. No entanto, em termos de correlações quânticas, espera-se um baixo grau de emaranhamento, uma vez que esses vetores de estado são separáveis. Além disso, encontramos $\varepsilon_{LR,ml} = \varepsilon_{RL,ml}$ na condição $\delta_1 = \delta_2$ e $\varepsilon_{LL,ml} = \varepsilon_{RR,ml}$ em $\delta_1 = -\delta_2$. O Hamiltoniano não fornece um acoplamento de primeira ordem entre estados como $|LR, 00\rangle$ e $|RL, 00\rangle$. No entanto, esses estados podem ser acoplados através de transições de segunda ordem. Isso significa que, se o sistema for inicializado no estado $|LR, 00\rangle$, ele poderá evoluir para o estado $|RL, 00\rangle$, passando por estados intermediários como $|LL, ml\rangle$ e $|RR, ml\rangle$. Nessa condição específica, estados altamente emaranhados podem ser formados devido a processos virtuais. Esse efeito será usado para gerar dinamicamente estados emaranhados, conforme discutido na próxima seção.

Na figura 4.1 apresentamos os primeiros 24 autovalores de energia do sistema como função da dessintonia da molécula 1, obtidos através da diagonalização exata do Hamiltoniano (3.1). Para os cálculos numéricos consideramos os seguintes parâmetros: $\delta_2 = 0$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega$ e $g_1 = g_2 = 0,1\omega$, considerando um regime fraco em termos do acoplamento elétron-fônon; para os modos vibracionais truncamos ambas as bases associados em $m_{\max} = l_{\max} = 13^1$. A forma com que o espectro de energia se comporta comprovam o estudo analítico feito ao reescrevermos o Hamiltoniano total do sistema na base Bell-MV, equação 4.8. O primeiro ramo de autovalores, denotados pelas linhas pretas do figura 4.1, comporta os quatro estados de menor energia (o estado fundamental e os três primeiros estados excitados), estes estados estão associados ao subespaço $\mathcal{S}_{B,(00)}$. O subespaço $\mathcal{S}_{B,(00)}$ possui um valor médio de número de excitações muito baixo e na condição específica em que $\delta_1 = \delta_2$ tem sua base dada pelos estados de Bell, o que será mostrado com um pouco mais de detalhes adiante. Os ramos de maior energia, demonstrados na figura 4.1, apresentam um número crescente de estados, sendo que o segundo ramo (em vinho) possui oito estados, divididos em duplas degeneradas, que fazem parte dos subespaços $\mathcal{S}_{B,(10)}$ e $\mathcal{S}_{B,(01)}$, enquanto o terceiro ramo, que comporta estados correspondentes aos subespaços $\mathcal{S}_{B,(11)}$, $\mathcal{S}_{B,(20)}$, e $\mathcal{S}_{B,(02)}$, possui quatro trios de estados degenerados somando um total de doze

¹A escolha deste número de estados computacionais é suficiente para garantir a precisão das autoenergias considerados neste capítulo uma vez que estaremos em um regime fraco de acoplamento entre os estados eletrônicos e os modos vibracionais.

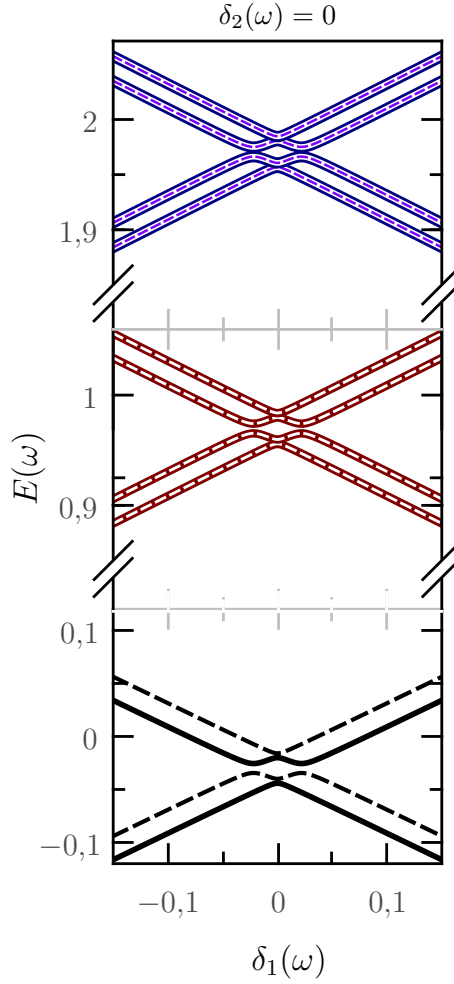


Figura 4.1: Primeiros 24 autovalores de energia do Hamiltoniano (3.1) como função da dessintonia na molécula 1, $\delta_1 = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$, considerando $\delta_2 = 0$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega$ e $g_1 = g_2 = 0,1\omega$. O ramo preto comporta os quatro estados (o estado fundamental e os três primeiros estados excitados) correspondentes ao subespaço $\mathcal{S}_{B,(00)}$; o ramo vinho comporta oito estados (do 4º ao 11º estado excitado) relacionados aos subespaços $\mathcal{S}_{B,(10)}$ e $\mathcal{S}_{B,(01)}$ e o ramo azul comporta doze estados (do 12º ao 23º estado excitado) correspondentes aos subespaços $\mathcal{S}_{B,(11)}$, $\mathcal{S}_{B,(20)}$, e $\mathcal{S}_{B,(02)}$.

autoestados, como já era esperado.

Os resultados apresentados na figura 4.1, além de corroborar a análise feita na subseção anterior, nos fornece algumas informações úteis no sentido de criar condições favoráveis para obtermos estados maximamente emaranhados: a primeira delas é que somente é possível obtermos estados maximamente emaranhados nos níveis de menor energia, uma vez que estados com degenerescência, como observado nos ramos de maior energia, não são convenientes para gerar emaranhamento. A segunda informação importante é que aumentar o acoplamento elétron-fônon, g , diminui o grau de emaranhamento nos autoestados de menor energia. Essa constatação foi obtida ao reproduzirmos a figura 4.1 para diferentes valores observarmos que, apesar dos ramos continuarem separados, os *gaps* de energia entre os quatro primeiros autoestados ficam cada vez mais espaçados e esse fator reflete diretamente no grau de emaranhamento; por fim verificamos que em termos energéticos, os ramos se distribuem em um intervalo de $\Delta E = \omega$. Do ponto de vista do emaranhamento eletrônico no subsistema das moléculas é interessante manter esses ramos afastados, uma vez que a proximidade entre eles destruiria a possibilidade de obtermos estados emaranhados, em contra partida diminuir o *gap* entre os ramos de autoestados traria efeitos interessantes se considerarmos os modos vibracionais.

Passaremos agora a uma análise detalhada do primeiro ramo de auto energias do sistema, associado ao subespaço $\mathcal{S}_{B,(00)}$. Na figura 4.2 reproduzimos o resultado do espectro de energia dos quatro primeiros autovalores do Hamiltoniano (3.1) acrescentando as informações a respeito do emaranhamento eletrônico e considerando um caso adicional onde mudamos o valor da dessintonia na molécula 2, δ_2 . Os anticruzamentos de energia nos espectros apresentados nas figuras 4.2 (a) e (b) foram rotulados da seguinte forma: (A,B) e (A',B'), anticruzamentos que correspondem a transições de primeira ordem que acontecem em $\delta_1 = \pm 2\alpha^2\omega$; e os menores anticrossings indicados pelas letras (C, D) e (C',D') que estão associadas a transições de segunda (ou maior) ordem ocorrendo quando $\delta_1 = \pm\delta_2$.

Para efetuarmos os cálculos de emaranhamento dos qubits de carga traçamos os graus de liberdade dos modos vibracionais

$$\rho_{\mathcal{D}}(t) = \text{Tr}_{\mathcal{V}}[\rho(t)], \quad (4.13)$$

e obtivemos a matriz reduzida do subsistema das moléculas quânticas. Utilizamos como quantificador de emaranhamento a concorrência, definida pela equação (2.41), como função da dessintonia da molécula 1 e os resultados estão apresentados na figura 4.2 (c) e (d). Observe que a concorrência atinge valores próximos a 1, nos pontos correspondentes aos an-

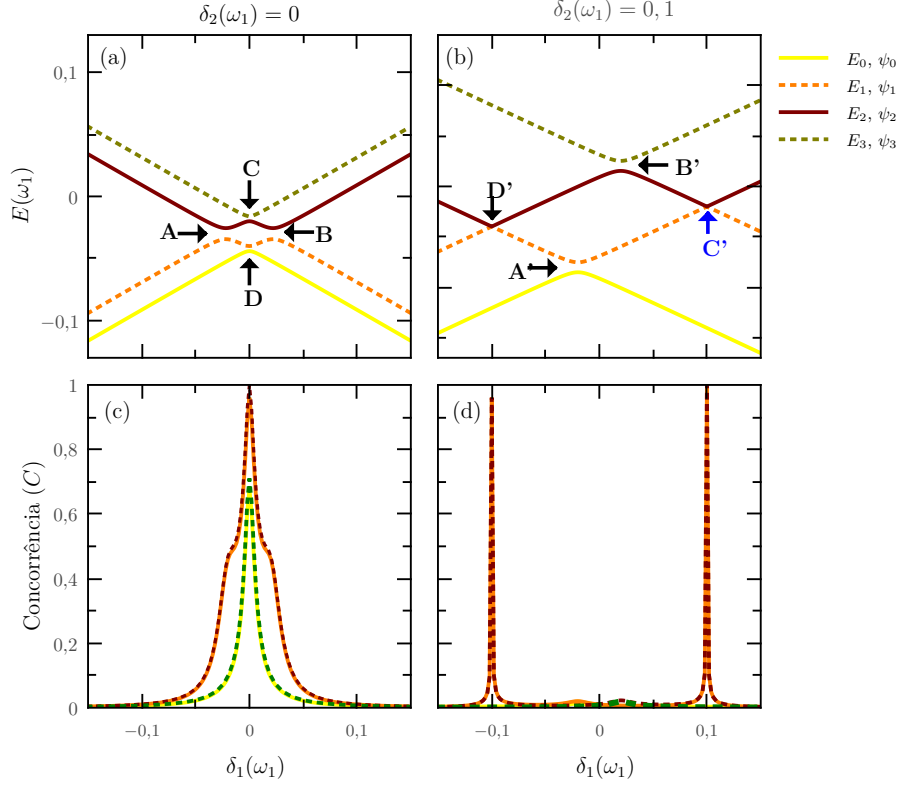


Figura 4.2: Espectro de energia e concorrência eletrônica como função de δ_1 , para o primeiro (linha sólida preta), o segundo (linha preta pontilhada), o terceiro (linha marrom sólida) e o quarto (linha marrom pontilhada) autoestados do Hamiltoniano (3.1): (a) energias e (c) a concorrência dos estados, considerando $\delta_2 = 0$; (b) energias e (d) a concorrência, para $\delta_2 = 0,1\omega$. Os anticruzamentos de energia são indicados com setas e identificados por letras (veja o texto principal para mais detalhes). Os parâmetros físicos utilizados nas simulações foram $g = 0,1\omega$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega$. Em todas as figuras as linhas amarelas estão associados ao estado fundamental, as linhas laranjas ao primeiro estado excitado, a linha vinho ao segundo estado excitado e a linha verde oliva ao terceiro estado excitado. O ponto de anticruzamento C' , destacado no gráfico (b) está associado ao estado eletrônico de Bell $|\Psi_{-}\rangle$ que é vestido por modos vibracionais.

ticruzamentos (C, D) e (C', D'). Os estados associados a esses pontos são, respectivamente dados por

$$\begin{aligned} |\psi_{C-}\rangle &\approx 0.70 |LR, 00\rangle - 0.70 |RL, 00\rangle \approx |\Psi_-\rangle \otimes |00\rangle + \dots \\ |\psi_{D+}\rangle &\approx -0.69 |LL, 00\rangle + 0.69 |RR, 00\rangle + 0.14 |LL, 10\rangle - 0.14 |RR, 01\rangle + \dots \end{aligned} \quad (4.14)$$

quando $\delta_2 = 0$, e

$$\begin{aligned} |\psi_{C'\pm}\rangle &\approx \mp 0,7 |LR, 00\rangle \mp 0,7 |RL, 00\rangle + \dots \approx -|\Psi_{\pm}\rangle \otimes |00\rangle \\ |\psi_{D'\pm}\rangle &\approx \pm(0,69 |LL, 00\rangle - 0,69 |RR, 00\rangle + 0,14 |LL, 10\rangle - 0,14 |RR, 01\rangle + \dots) \end{aligned} \quad (4.15)$$

para $\delta_2 = 0.1\omega$. O autovetor $|\psi_{C'+}\rangle$, em particular, apresenta um alto grau de emaranhamento, $C \approx 1$. Isso era esperado uma vez que, ao observarmos a equação (4.15), vemos que o estado $|\psi_{C'+}\rangle$ corresponde ao estado de Bell $|\Psi_-\rangle$ que na base associada Bell-MV é o estado $|\Psi_-, 00\rangle$ sendo este estado o único estado de Bell vestido por modos vibracionais do sistema conforme observado na equação (4.10). Vale ressaltar, que a condição $\delta_2 = 0.1\omega$, na qual encontramos o anticruzamento C', favorece o isolamento energetico dos dois níveis eletrônicos $\{|LR, 00\rangle, |RL, 00\rangle\}$. Este isolamento traz vantagens que podem ser exploradas quando se está interessado na geração dinâmica de estados emaranhados. Já os autoestados referentes aos anticruzamentos D e D', tem um alto grau de emaranhamento com $C \approx 0,9$, e como podemos observar nas equações (4.15) e (4.16), esses autoestados são aproximadamente estados de Bell do tipo $|\Phi_{\pm}\rangle$ a queda no grau de emaranhamento nesses estado é justificado pela distribuição do acoplamento dos estados eletrônicos $|LL\rangle$ e $|RR\rangle$ com os estados de vibração $|ml\rangle \neq |00\rangle$ dos modos vibracionais.

Desta forma, a condição de dessintonia tem um maior potencial se quisermos gerar dinamicamente estados maximamente emaranhados. Isto porque a manipulação dos níveis energéticos garante um melhor isolamento em termos energéticos, de um subespaço de dois níveis com um anticruzamento, que poderia ser descrito como um sistema de dois níveis efetivo. Passaremos a analisar em detalhe esta questão quando estivermos analisando a dinâmica do emaranhamento no sistema.

4.2.1 Sensibilidade do emaranhamento à mudanças nos parâmetros físicos do sistema

Até o momento, consideramos um caso ideal onde os parâmetros dos subsistemas individuais, das moléculas e dos modos vibracionais, são considerados iguais, ou seja, $\omega_1 = \omega_2$, $g_1 = g_2$, $\Delta_1 = \Delta_2$. Iremos agora verificar o que ocorre com o espectro de energia e com o emaranhamento nos autoestados do subsistema molecular, quando consideramos três tipos de situações separadamente: (i) diferenças entre os valores das frequências dos modos vibracionais ω_i . (ii) parâmetros de acoplamento elétron-fóton g_i diferentes para cada modo vibracional e (iii) taxas de tunelamento diferentes Δ_i para cada qubit.

Os efeitos sobre o espectro de autovalores e o emaranhamento dos autoestados ao considerar $\omega_1 \neq \omega_2$ são ilustrados na figura 4.3, onde fixamos a frequência do segundo modo vibracional como sendo $\omega_2 = 0,6\omega_1$ ($\omega_1 = 1$) e calculamos as autoenergias e a concorrência como funções da dessintonia da molécula 1, δ_1 . Para comparar de forma adequada com os resultados para o caso de frequências iguais, figura 4.2, mantivemos os mesmos valores para o acoplamento elétron-fóton, $g_1 = g_2 = 0,1\omega_1$, e tunelamento $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega_1$, além das mesmas considerações sobre a dessintonia da molécula 2 sendo $\delta_2 = 0$ para os gráficos (a) e (b) e $\delta_2 = 0,1\omega_1$, para os gráficos (c) e (d).

Ao analisarmos os resultados obtidos, podemos observar que: (i) considerar as frequências dos modos vibracionais diferentes sendo $\omega_2 < \omega_1$ faz com que os anticruzamentos (A,B,D), na figura 4.3 (a) e os anticruzamentos (A',B',D'), na figura 4.3 (b), se desloquem para a esquerda quando comparados com os gráficos da figura 4.2 (a) e (b). (ii) Os deslocamentos desses anticruzamentos de energia são acompanhados pelo deslocamento dos picos de emaranhamento associados a esses pontos, figuras 4.3 (c) e (d), que além de se deslocarem apresentam uma pequena queda no grau de emaranhamento máximo quando comparados ao caso ressonante ideal da figura 4.2. (iii) Os anticruzamentos C, da figura (a), e C', da figura (b), permanecem nos mesmos pontos que no caso onde os modos vibracionais tem a mesma frequência, tendo seu autoestados descritos aproximadamente pelas equações (4.15) e (4.16). (iv) os pontos D e D', que anteriormente apresentavam autoestados associados com alto grau de emaranhamento apresentam uma queda na concorrência, sendo essa queda significativamente alta no ponto D', que pode ser observada no gráfico (d), que no caso ressonante tinha um pico máximo com $C \approx 0,9$ passa a ser de $C \approx 0,3$ quando $\omega_1 \neq \omega_2$. (v) Quando consideramos o regime em que $\omega_1 < \omega_2$, o deslocamento dos anticruzamentos de energia se dão para a direita, sendo que os anticruzamentos (C,C') permanecem nos mesmos pontos, $\delta_1 = 0$ para C e $\delta_1 = 0,1\omega_1$ para C', da figura 4.2 onde

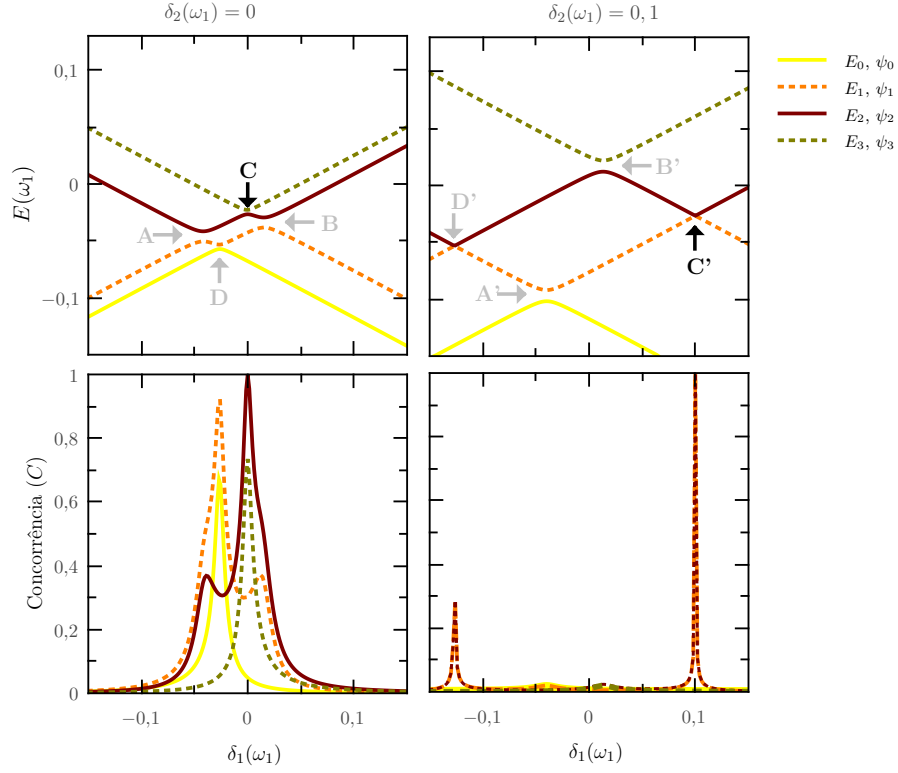


Figura 4.3: Espectro de energia e concorrência eletrônica como função de δ_1 , para os quatro primeiros autoestados do Hamiltoniano (3.1): (a) energias e (c) a concorrência dos estados, considerando $\delta_2 = 0$; (e) energias e (d) a concorrência, para $\delta_2 = 0,1\omega_1$. Os anticruzamentos de energia são indicados com setas e identificados por letras (veja o texto principal para mais detalhes). Os parâmetros físicos utilizados nas simulações foram $\omega_1 = 1\text{meV}$, $\omega_2 = 0,6\omega_1$, $g = 0,1\omega_1$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega_1$. Em todas as figuras as linhas amarelas estão associados ao estado fundamental, as linhas laranjas ao primeiro estado excitado, a linha vinho ao segundo estado excitado e a linha verde oliva ao terceiro estado excitado.

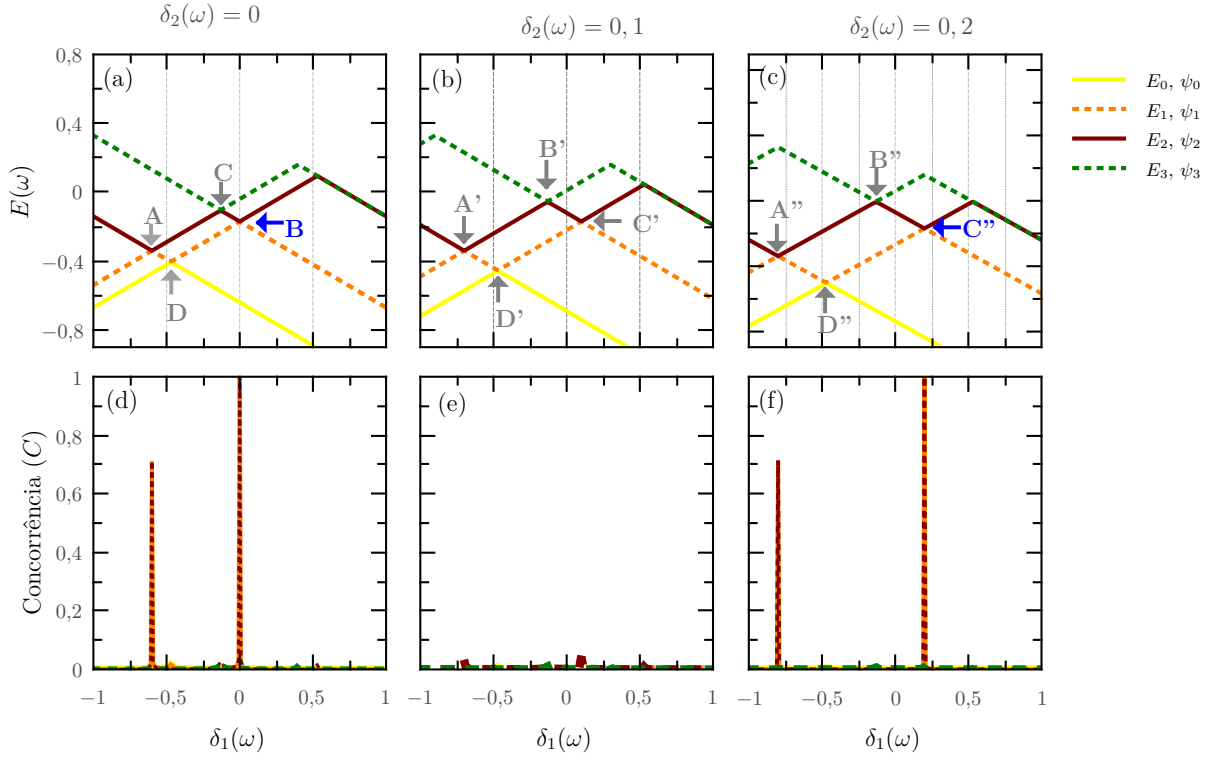


Figura 4.4: Espectro de energia e concorrência eletrônica como função de δ_1 , considerando $g_1 \neq g_2$, para os quatro primeiros autoestados do Hamiltoniano (3.1): (a) energias e (d) a concorrência dos estados, considerando $\delta_2 = 0$; (b) energias e (e) a concorrência, para $\delta_2 = 0,1\omega_1$; (c) energias e (f) a concorrência para $\delta_2 = 0,2\omega_1$. Os anticruzamentos de energia são indicados com setas e identificados por letras (veja o texto principal para mais detalhes). Os parâmetros físicos utilizados nas simulações foram $\omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$, $g_1 = 0,1\omega_1$, $g_2 = 0,4\omega_1$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega_1$. Em todas as figuras as linhas amarelas estão associados ao estado fundamental, as linhas laranjas ao primeiro estado excitado, a linha vinho ao segundo estado excitado e a linha verde oliva ao terceiro estado excitado.

consideramos as frequências nos modos vibracionais iguais.

Na figura 4.4, apresentamos os resultados, em função da dessintonia da molécula 1, para o espectro de energia e para a concorrência para o caso em que $g_1 \neq g_2$, sendo $g_2 = 0,4g_1$, os demais parâmetros foram definidos como: $\omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega_1$, para a dessintonia na molécula 2 consideramos além de $\delta_2 = 0$ e $\delta_2 = 0,1\omega_1$ um caso adicional com $\delta_2 = 0,2\omega_1$ que nos ajudara a compreender uma característica peculiar em relação aos anticruzamentos e sua relação com o emaranhamento. Analisando os resultados do espectro de energia, apresentados nas figuras 4.4 (a)-(c), verificamos que, assim como no caso em que $\omega_1 \neq \omega_2$, os anticruzamentos de energia sofrem um deslocamento para a esquerda quando consideramos $g_1 \neq g_2$, mas com a diferença de que nenhum dos anticruzamento associados a (C,C',C'') manterá sua posição em $\delta_1 = 0$, para C, ou $\delta_1 = \delta_2$, para C',C''. Assim, os autoestados associados a esses pontos, que anteriormente em $g_1 = g_2$ apresentam um alto grau de emaranhamento, passam a ser estados cujo valor máximo da concorrência está na ordem de 10^{-2} sendo assim estados separáveis. Embora que nos pontos citados o grau de emaranhamento dos autoestados diminua de forma drástica, podemos observar que os autoestados do sistema apresentam ainda picos máximos de concorrência em alguns pontos particulares: (i) na figura 4.4 (a) vemos que o anticruzamento C, anteriormente associado ao máximo emaranhamento, teve sua posição deslocada para esquerda e sua posição anterior, em $\delta_1 = 0$ para o caso em que $g_1 = g_2$, passa a ser tomada pelo anticruzamento B, que é agora associado a autoestados com grau máximo de concorrência sendo seus autoestados dados aproximadamente pelos vetores $|\Psi_{\mp}\rangle \otimes |00\rangle$; (ii) nas figuras 4.4 (b) e (c) observamos que considerar os acoplamentos elétron-fônons dos modos vibracionais 1 e 2 diferentes destrói completamente, pelo menos para o caso em que $\delta_2 = 0,1\omega$, a possibilidade de se obter estados emaranhados sendo o valor máximo da concorrência em alguns pontos da ordem de 10^{-2} .

Nos gráficos (c) e (f) da figura 4.4 observamos que ajustando os valores da dessintonia δ_2 temos condições para obter autoestados com alto grau de emaranhamento. A comparação dos três casos de δ_2 discutidos aqui nos permite afirmar que sempre que os anticruzamentos de energia entre o primeiro e o segundo estado excitado estiverem localizados nos pontos onde $\delta_1 = \pm n \times 0,25$ ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$), denotados pelas linhas verticais cinzas das figuras 4.4 (a)-(c), ou muito próximos a esses pontos, seus autoestados associados apresentarão um alto grau de emaranhamento e apresentarão as seguintes características:

- Quando $g_2 > g_1$, teremos um anticruzamento localizada na região em que $\delta_1 > 0$ sendo o autoestado associado a este anticruzamento o estado de Bell vestido por

modos vibracionais $|\psi_{-}\rangle \otimes |00\rangle$; o segundo anticruzamento estará localizado em $\delta_1 < 0$ tendo seu autoestado associado com um grau máximo de emaranhamento dado por $C \approx 0,7$.

- Quando $g_1 > g_2$ temos os dois anticruzamentos localizados nos pontos na região em que $\delta_1 > 0$, onde o primeiro estará associado ao estado de Bell $|\psi_{-}\rangle \otimes |00\rangle$, com o $C = 1$, e o segundo anticruzamento com o valor de emaranhamento dado por $C \approx 0,7$.

Concluimos que sempre que conseguirmos uma associação de parâmetros, δ_i , ω_i e g_1 , que nos forneça anticruzamentos de energia, localizados em $\delta_1 = \pm n \times 0,25$, entre o primeiro e o segundo estado excitado teremos condições para obtermos estados maximamente emaranhados.

Por último, na figura 4.5, consideramos os efeitos de se ter tunelamentos diferentes para as moléculas 1 e 2. Para esta simulação consideramos $\Delta_2 = \Delta_1/2$ com $\Delta_1 = 5 \times 10^{-3}\omega_1$, os demais parâmetros considerados foram: $\omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$ e $g_1 = g_2 = 0,1\omega_1$, consideramos dois casos para dessintonia na segunda molécula: $\delta_2 = 0$ e $\delta_2 = 0,1\omega_1$. Verificamos nas figuras 4.5 (a) e (c) que considerar tunelamentos diferentes, para $\delta_2 = 0$, não altera de modo significativo o espectro de energia e a concorrência principalmente nos anticruzamentos C e D os quais seus autoestados referentes continuam apresentando um alto grau de emaranhamento com $C \approx 1$. Nos anticruzamentos A e B, ainda nas figuras (a) e (c), verificamos uma pequena queda no grau de emaranhamento nestes pontos o que se explica pelo pequeno aumento no *gap* de energia nesses anticruzamentos. Já ao considerarmos o caso em que $\delta_2 = 0,1\omega_1$ verificamos que condiderar $\Delta_1 \neq \Delta_2$ reduz consideravelmente o grau de emaranhamento associados aos anticruzamentos C' e D', esses pontos que na ressonância completa (moléculas e modos vibracionais) apresentam um grau alto de concorrência com valores $C > 0,9$, apresentam agora um máximo de emaranhamento dado por $C \approx 0,25$. Esse fato pode ser explicado pelo fato de que nos pontos C' e D' as autoenergias não mais se anticruzarem e sim apresentar uma degenerescência o que não é favorável para obtenção de estados maximamente emaranhados, devemos também levar em conta o fato de que ter $\Delta_1 < \Delta_2$ faz com que o $|LR\rangle$ ($|RL\rangle$) se acople mais facilmente com o estado $|RR\rangle$ ($|LL\rangle$) o que faz com que seja mais difícil obter superposições que associem exclusivamente o estado $|LR\rangle$ ($|LL\rangle$) com o estado $|RL\rangle$ ($|RR\rangle$) que formariam os estados de Bell $|\Psi_{\pm}\rangle$ ($|\Phi_{\pm}\rangle$).

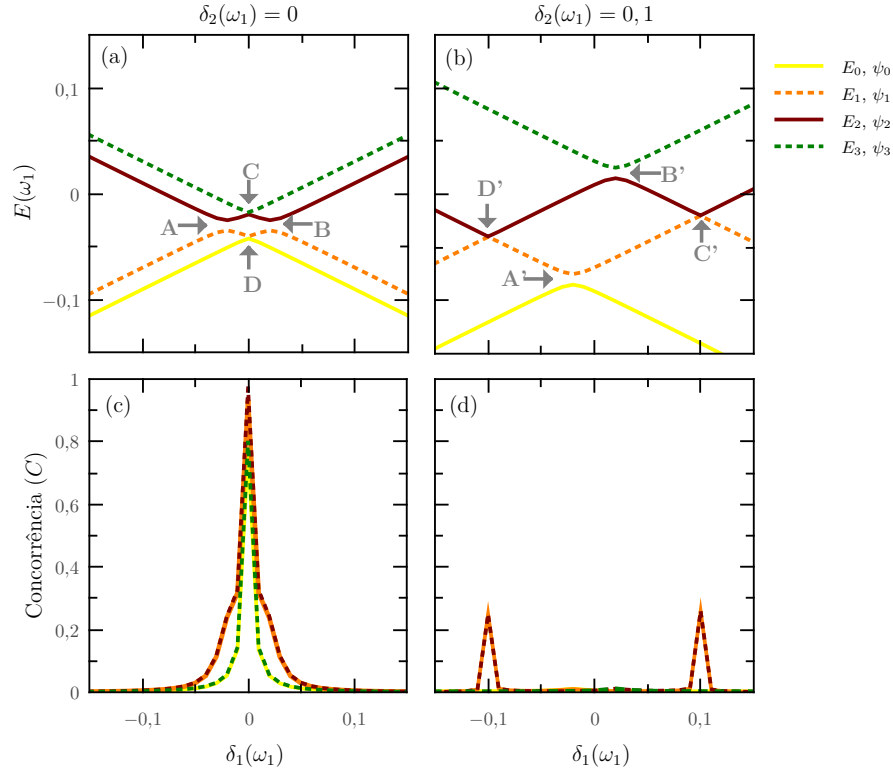


Figura 4.5: Espectro de energia e concorrência eletrônica como função de δ_1 , para os quatro primeiros autoestados do Hamiltoniano (3.1): (a) energias e (c) a concorrência dos estados, considerando $\delta_2 = 0$; (b) energias e (d) a concorrência, para $\delta_2 = 0,1\omega_1$. Os anticruzamentos de energia são indicados com setas e identificados por letras (veja o texto principal para mais detalhes). Os parâmetros físicos utilizados nas simulações foram $\omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$, $g_1 = g_2 = 0,1\omega_1$, $\Delta_1 = 5 \times 10^{-3}\omega_1$ e $\Delta_2 = \Delta_1/2$. Em todas as figuras as linhas amarelas estão associados ao estado fundamental, as linhas laranjas ao primeiro estado excitado, a linha vinho ao segundo estado excitado e a linha verde oliva ao terceiro estado excitado.

4.3 Geração dinâmica de estados maximamente emaranhados

Após estudarmos as propriedades dos autoestados do nosso sistema de qubits eletrônicos acoplados a modos vibracionais, estamos prontos para explorar a geração dinâmica de emaranhamento eletrônico afim de obtermos estados do tipo Bell

$$|\Psi(\varphi)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|LR\rangle + e^{i\varphi} |RL\rangle \right), \quad (4.16)$$

$$|\Phi(\vartheta)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|LL\rangle + e^{i\vartheta} |RR\rangle \right), \quad (4.17)$$

onde φ e ϑ são fases relativas². Com esse objetivo, obtivemos o operador densidade total do sistema em função do tempo $\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$, usando o Hamiltoniano (3.1). O sistema foi inicializado em $\rho_0 = |LR, 00\rangle \langle LR, 00|$, sabendo que a parte vibracional pode ser experimentalmente manipulada no limite de baixas temperaturas (subseção 1.4.2). A escolha do estado inicial ρ_0 foi motivada pelos resultados encontrados no anticruzamento de energia C' , que sabemos favorecer a geração de estados eletrônicos maximamente emaranhados da forma $|\Psi(\varphi)\rangle$. De modo análogo, a escolha de $|LL, 00\rangle$ ou $|RR, 00\rangle$ como estado inicial resultará na formação de estados emaranhados do tipo $|\Phi(\vartheta)\rangle$, para uma dinâmica considerando as condições específicas do anticruzamento D' . A escolha de inicialização do estado eletrônico, a princípio, não é um problema uma vez que a configuração experimental pode ser acoplada um conjunto auxiliar de fontes e drenos de elétrons que permitem a injeção de carga em qualquer um dos pontos quânticos do sistema.

Os pontos pretos na figura 4.6 mostram nossos resultados numéricos para a dinâmica do emaranhamento considerando os parâmetros específicos associados ao anticruzamento C' , onde $\Delta = \Delta_1 = \Delta_2$ e $\delta_1 = \delta_2 = 0,1\omega$, consideramos diferentes valores para o acoplamento elétron-fônon, g . Definimos uma nova variável para a dependência temporal, $\theta = \Omega_0 t$, com $\Omega_0 = 2|\Delta|^2/\omega$, que será muito útil em toda a discussão da dinâmica de nosso sistema, como veremos a seguir. Comparando os seis gráficos apresentados na figura, notamos que a concorrência C apresenta um comportamento oscilatório, atingindo sempre em algum período o seu máximo $C = 1$, o que nos indica a formação de estados eletrônicos maximamente emaranhados. Além disso, observamos que o período das oscilações depende claramente do fator g e apresenta um comportamento não monotônico. Esse fator nos fez identificar três

²Se considerarmos os valores $\varphi, \vartheta = \{0, \pi\}$ obtemos a base ortonormal para o espaço ortonormal 4D composto pelos estados Bell $|\Psi_{\pm}\rangle$ e $|\Phi_{\pm}\rangle$, definidos na equação (4.6)

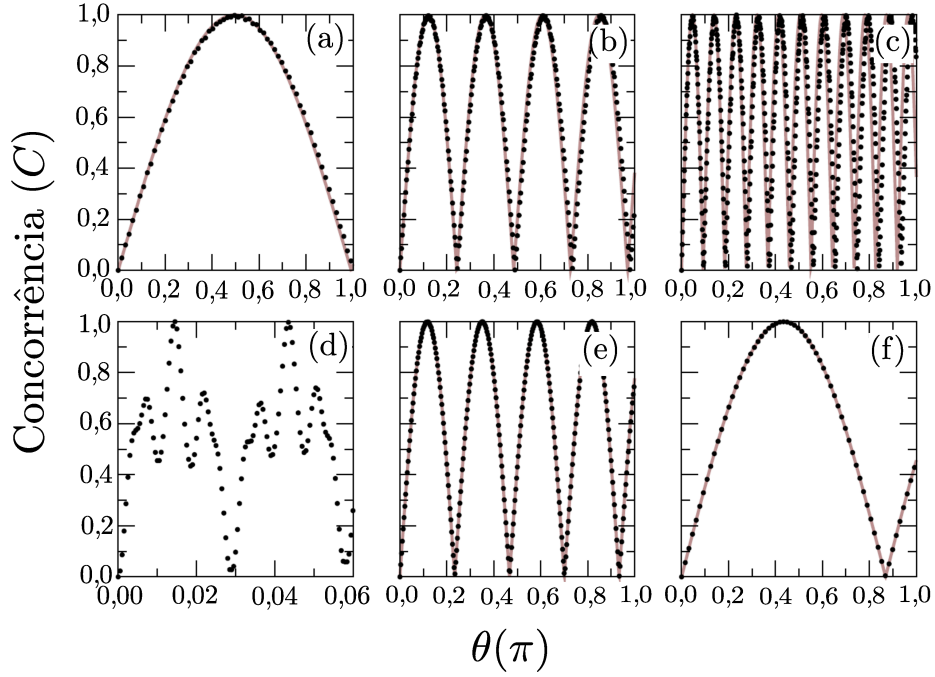


Figura 4.6: Dinâmica do emaranhamento eletrônico como função de θ para diferentes valores de g , considerando os parâmetros físicos do anticruzamento de energia C' : $\Delta = \Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega$ and $\delta = \delta_1 = \delta_2 = 0,1\omega$. Aqui, os resultados numéricos de C (pontos em preto) e a expressão analítica $C_{2ls}(t)$ conforme definido na equação (4.23) (linha cinza) foram obtidas considerando (a) $g = 0,05\omega$, (b) $g = 0,10\omega$, (c) $g = 0,15\omega$, (d) $g = 0,22\omega$, (e) $g = 0,40\omega$, e (f) $g = 0,50\omega$.

situações diferentes: (i) para o primeiro conjunto de valores de g ($g < 0,2\omega$) o emaranhamento no sistema realiza oscilações sinusoidais com um período decrescente à medida que g aumenta, como pode ser visto nas figuras 4.6 (a)-(c); (ii) existe uma faixa intermediária de valores de g em que a dinâmica não corresponde a uma função senoidal, embora oscilem em uma escala de tempo significativamente mais curta (em duas ordens de grandeza) do que nos outros casos, como é mostrado na figura 4.6 (d) onde consideramos $g = 0,22\omega$; (iii) após esse regime intermediário, o sistema volta a executar oscilações sinusoidais, que agora tem seu período aumentando conforme o termo de acoplamento g aumenta, o que pode ser verificado nos gráficos das figuras 4.6 (e)-(f).

Queremos agora entender esse comportamento peculiar presente na dinâmica do concorrência, para isso voltaremos nossa atenção para as características físicas presentes no ponto de anticruzamento C' discutido na seção 4.2. Na condição específica dos parâmetros associados a esse ponto, é esperado uma dinâmica associada a um subespaço de dois níveis, onde os elementos de base são $|I\rangle = |LR, 00\rangle$ e $|II\rangle = |RL, 00\rangle$. Devido ao acoplamento

efetivo entre $|I\rangle$ e $|II\rangle$ envolver processos de transição de segunda ordem, estimamos seu valor seguindo a teoria de perturbação, calculando o elemento de matriz $\Omega = \langle I | H_{\text{eff}} | II \rangle$ definido como

$$\Omega = \langle I | \bar{H}_0 | II \rangle + \sum_{\sigma=L}^R \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{\mathcal{V}_{I,II}(\sigma, ml)}{\varepsilon_{RL,00} - \varepsilon_{\sigma\sigma,ml}}, \quad (4.18)$$

onde

$$\mathcal{V}_{I,II}(\sigma, ml) = \langle I | \bar{V} | \sigma\sigma, ml \rangle \langle \sigma\sigma, ml | \bar{V} | II \rangle,$$

Esperamos que Ω nos forneça a frequência característica encontrada na figura 4.6, que seja valida para valores pequenos do termo de acoplamento g ($g \ll \omega$). O cálculo requer o uso de uma propriedade conhecida do operador de deslocamento (95) dado por

$$\begin{aligned} \langle ml | \mathbf{D}_{12} | 00 \rangle &= \langle m | D_1(\alpha) | 0 \rangle \langle l | D_2(-\alpha) | 0 \rangle \\ &= e^{-\alpha^2} \frac{\alpha^m}{\sqrt{m!}} \frac{(-\alpha)^l}{\sqrt{l!}}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Após um cálculo direto, chegamos à seguinte expressão para Ω

$$\Omega = \Omega_0 e^{-2\alpha^2} \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2m}}{m!} \frac{\alpha^{2l}}{l!} \frac{[2\alpha^2 - (m+l)]}{[2\alpha^2 - (m+l)]^2 - (\frac{\delta}{\omega})^2}, \quad (4.20)$$

onde $\Omega_0 = 2|\Delta|^2/\omega$. Este parâmetro de acoplamento efetivo descreve o processo de tunelamento de segunda ordem mediado pela interação elétron-fônon.

Para verificar o comportamento de Ω , plotamos na figura 4.7 a razão $r = \Omega/\Omega_0$ considerando os mesmos parâmetros físicos do anticruzamento de energia C' . A partir dos nossos resultados, identificamos três comportamentos distintos: (i) para valores pequenos de g , entre $g \approx 0$ e $g < 0,18\omega$, $|r|$ aumenta quando g aumenta; (ii) se $g \approx 0,22\omega$, o fator $2\alpha^2$ torna-se comparável com δ/ω de modo que o denominador da equação (4.18) tende a infinito se $m = l = 0$. Verificando a dinâmica exata desses valores de g , percebemos que o estado $\varepsilon_{LL,00}$ passa a ser ressonante com $\varepsilon_{LR,00}$ e $\varepsilon_{RL,00}$ assim, o sistema evolui para uma superposição desses três estados e o modelo efetivo de dois níveis deixa de ser válido; (iii) para $0,2\omega < g < 0,5\omega$, o valor de $|r|$ decai a medida que g aumenta.

Neste ponto, buscamos uma caracterização mais detalhada das oscilações sinusoidais. Assim, calculamos o estado evoluído, considerando os sistema de dois níveis efetivos (2ls) descrito por $H_{2ls} = \Omega |I\rangle \langle II| + \text{h.c.}$, considerando as mesmas condições iniciais usadas em

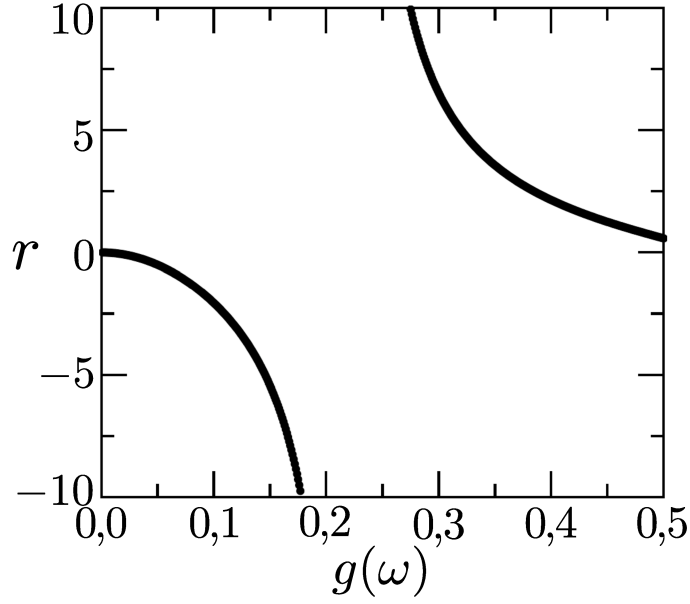


Figura 4.7: Razão $r = \Omega/\Omega_0$ como função do acoplamento elétron-fônon, g , fornecida pela equação (4.20), considerando os parâmetros físicos referentes ao anticruzamento C' da figura 4.2: $\Delta = \Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega$ e $\delta = \delta_1 = \delta_2 = 0,1\omega$.

nossa análise numérica, $|\psi_0\rangle = |LR, 00\rangle = |I\rangle$, obtivemos o seguinte estado

$$|\psi(t)\rangle_{2ls} = \cos \Omega t |I\rangle + e^{-i\pi/2} \sin \Omega t |II\rangle, \quad (4.21)$$

que, em termos de r e θ , é escrito como

$$|\psi(t)\rangle_{2ls} = [\cos(r\theta) |LR\rangle + e^{-i\pi/2} \sin(r\theta) |RL\rangle] \otimes |00\rangle. \quad (4.22)$$

A expressão analítica para a concorrência, considerando o modelo efetivo de dois níveis, assume a forma (128, 129)

$$C_{2ls}(r) = 2|\cos(r\theta) \sin(r\theta)|. \quad (4.23)$$

Na figura 4.6, o comportamento de C_{2ls} é mostrado usando uma linha sólida cinza. Observe que a equação (4.23) está em completo acordo com os cálculos numéricos da concorrência. Isso significa que o modelo efetivo de dois níveis é capaz de descrever o comportamento não monotônico das oscilações sinusoidais da concorrência. Na faixa intermediária de valores de g , este modelo simplificado não se aplica, uma vez que $|\Omega| \rightarrow \infty$. Porém, a expressão analítica acompanha as oscilações rápidas apresentadas na figura 4.6 (d).

É interessante também manipular o parâmetro de acoplamento g afim de definir uma escala temporal para a formação de estados eletrônicos emaranhados. A equação (4.23) nos mostra que C_{2ls} atinge um valor máximo em $r\theta_{\max} = \pi/4$ logo a escala temporal é dada por $t_{\theta_{\max}} = \pi/(4|\Omega|)$. Utilizando parâmetros experimentais realistas, com base no sistema de pontos quânticos acoplados a nanotubos de carbono, encontramos o valor $|\Omega| \approx 2\mu\text{eV}$ para $g = 0,1\omega$ ou $g = 0,4\omega$, assim $t_{\theta_{\max}} \approx 0,25$ ns (4 GHz). Este tempo é menor que o tempo característico para que o *dephasing* causado por flutuações de carga atue no sistema, sendo este tempo ocorre tipicamente em 1 ns (1 GHz) (130).

Para finalizar nossa discussão referente aos resultados da dinâmica dos qubits de carga, calculamos a fidelidade dos estados eletrônicos dada por

$$\mathcal{F}(t) = \text{Tr}_{\mathcal{D}}[\rho_{\mathcal{D}}(t)\rho_{\mathcal{D}}^{\text{tar}}], \quad (4.24)$$

onde $\rho_{\mathcal{D}}^{\text{tar}} = |\Psi(\varphi_{\text{tar}})\rangle\langle\Psi(\varphi_{\text{tar}})|$, com $|\Psi(\varphi_{\text{tar}})\rangle$ definido pela equação (4.16), sendo φ_{tar} a fase relativa específica de um estado alvo (do inglês *target state*). Em nossas simulações, escolhemos $g = 0,1\omega$ e $g = 0,4\omega$, com o intuito de explorarmos um exemplo para cada conjunto de g , mostrados na figura 4.6, que possui oscilações sinusenoidais.

Nos resultados mostrados na figura 4.8, consideramos dois valores de fase relativa para os estados alvo: $\varphi_{\text{tar}} = -\pi/2$ (pontos marrons) e $\varphi_{\text{tar}} = \pi/2$ (triângulos em preto). Observe que a fidelidade para ambos os casos de φ_{tar} oscilam fora de fase entre 0 e 1, e a comparação entre elas permite descrever com precisão a dinâmica eletrônica. Especificamente, na figura 4.8 (a) considerando $g = 0,1\omega$, o estado inicial $|LR\rangle$ evolui para o estado de emaranhamento máximo dado por $|\Psi(\varphi)\rangle$, e alterna para o $|\Psi(\pi/2)\rangle$, em $r\theta = \pi/4$, e $|\Psi(-\pi/2)\rangle$, quando $r\theta = 3\pi/4$. De maneira análoga, os resultados para $g = 0,4\omega$, figura 4.8 (b), exibe as mesmas oscilações, embora estejam fora de fase se comparados com o resultado da figura 4.8 (a).

As diferenças entre as figuras 4.8 (a) e (b) são explicadas ao observarmos o comportamento da razão r , que varia dos valores negativos a positivos, dependendo do valor de g . Considerando o estado evoluído associado ao modelo efetivo de dois níveis, equação (4.22), a mudança de sinal em r implica em uma mudança na fase relativa do estado evoluído. Calculando a fidelidade da solução analítica dada pela equação (4.22), considerando o mesmo estado alvo $|\Psi(\varphi_{\text{tar}})\rangle$, obtemos

$$\mathcal{F}_{2ls}(r\theta) = \frac{1}{2} - \cos(r\theta) \sin(r\theta) \sin(\varphi_{\text{tar}}). \quad (4.25)$$

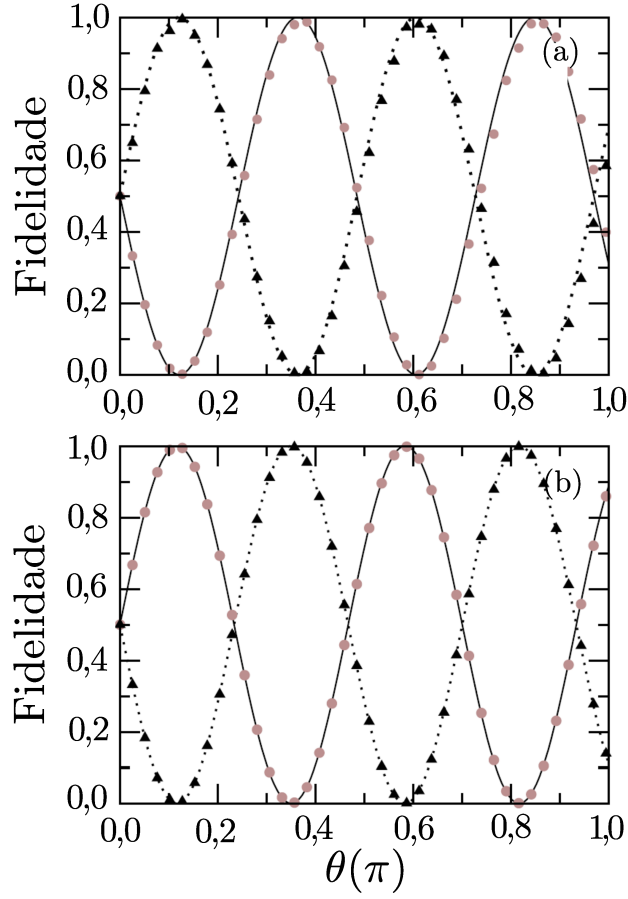


Figura 4.8: Evolução temporal da fidelidade, \mathcal{F} , considerando o estado alvo $|\Psi(\varphi_{\text{tar}})\rangle$ para duas escolhas de fase relativa, $\varphi_{\text{tar}} = -\pi/2$ (pontos em marrom), e $\varphi_{\text{tar}} = \pi/2$ (triângulos em preto). Os parâmetros físicos considerados são os mesmos escolhidos na figura 4.6 com (a) $g = 0,1\omega$ e (b) $g = 0,4\omega$. As linhas representam a evolução da $\mathcal{F}_{2\text{ls}}(\theta)$ considerando as mesmas condições físicas $\varphi_{\text{tar}} = -\pi/2$ (linha sólida preta) e $\varphi_{\text{tar}} = \pi/2$ (linha preta pontilhada).

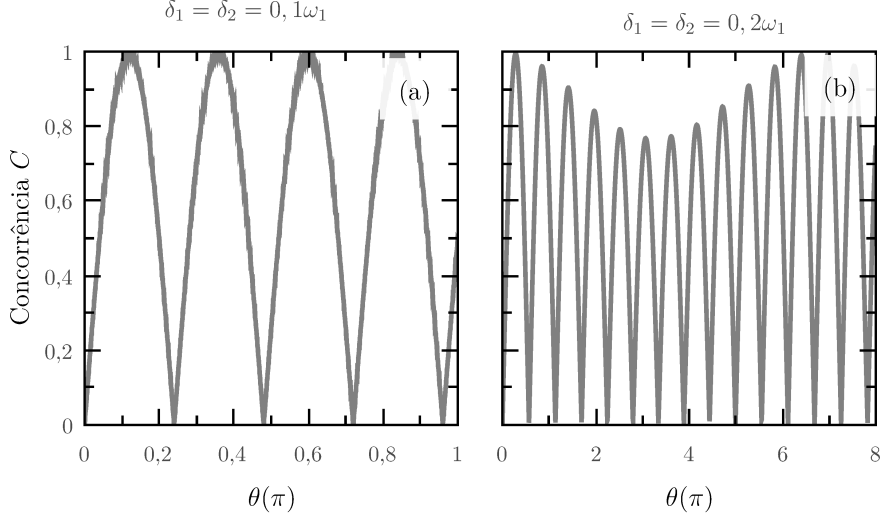


Figura 4.9: Dinâmica do emaranhamento eletrônico como função de θ considerando os efeitos de se ter diferenças entre parâmetros de frequência e de acoplamento elétron-fônon relacionados aos modos vibracionais 1 e 2. (a) Considerando o caso em que as frequências dos modos vibracionais são diferentes, sendo $\omega_1 = 1\text{meV}$ e $\omega_2 = 0,6\omega_1$, os demais parâmetros utilizados foram: $g_1 = g_2 = 0,1\omega_1$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega_1$, os mesmos do anticruzamento C' da figura 4.3. (b) Considerando os acoplamentos elétron-fônon dos modos vibracionais diferentes, sendo $g_2 = 0,4g_1$, foram utilizados os mesmos parâmetros do anticruzamento C'' apresenta na figura 4.4, onde $\omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$, $\delta_1 = \delta_2 = 0,2\omega_1$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega_1$.

A evolução temporal desta função é ilustrada com linhas na figura 4.8, para cada caso de g e φ_{tar} , mostrando boa concordância com os resultados numéricos.

4.3.1 Sensibilidade da dinâmica do emaranhamento à mudanças nos parâmetros físicos do sistema

Nesta subseção, aproveitaremos a análise espectral feita na subseção 4.2.1 para verificarmos se existe a possibilidade de obter estados emaranhados que sejam robustos a mudanças dos parâmetros como o de tunelamento intra-molecular, Δ_1 e Δ_2 , das frequências dos modos vibracionais, ω_1 e ω_2 , e dos acoplamentos elétron-fônons, g_1 e g_2 .

Vamos inicialmente considerar os efeitos de se ter diferença entre parâmetros relacionados aos modos vibracionais 1 e 2, o que está representado na figura 4.9. Os parâmetros escolhidos para as simulações nas figuras estão associados a pontos de anticruzamentos de energia C' e C'' dos gráficos apresentados das figuras 4.3 e 4.4, respectivamente.

Para a figura 4.9 (a) consideramos os seguintes parâmetros: $\omega_1 = 1\text{meV}$, $\omega_2 = 0,6\omega_1$, $g_1 = g_2 = 0,1\omega_1$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega_1$. Verificamos nesse caso que a dinâmica do emaranhamento do sistema quase não é afetada quando comparada a dinâmica do emaranhamento da figura 4.6 (b), onde a escolha dos demais parâmetros ($\delta_{1(2)}$, $g_{1(2)}$ e $\Delta_{1(2)}$) é a mesma. Isso nos mostra que quando consideramos o caso em que as frequências dos modos vibracionais não estão em ressonância a dinâmica da concorrência do sistema, para esta escolha específica dos demais parâmetros, é robusta, mantendo o padrão de oscilações entre estados separáveis e estados maximamente emaranhados. Consideramos ainda casos em que $\omega_2 = 0,4\omega_1$ e $\omega_2 = 0,8\omega_1$ e verificamos que para estes casos as oscilações na concorrência também não se altera. A figura 4.9 (b) foi plotada considerando a condição em que $g_1 \neq g_2$, sendo $g_2 = 0,4g_1$, foram utilizados os mesmos parâmetros do anticruzamento C'' presente na figura 4.4 (c), onde $\omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$, $\delta_1 = \delta_2 = 0,2\omega_1$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega_1$. Os resultados da concorrência para este caso nos mostra que as oscilações do emaranhamento apresentam ainda um padrão de oscilação sinusoidal que em seu primeiro máximo de concorrência $C \approx 1$ sendo que os picos seguintes sofrem uma queda em seus máximos decaindo para $C \approx 0,8$ em $\theta(\pi) \approx 3,3$ até que volta a ter um comportamento crescente nos picos de emaranhamento até repetir o ciclo. Essa região na qual os máximos de emaranhamento decrescem ocorre devido ao fato de que o anticruzamento de energia C'' da figura 4.4 (c) não estar localizado exatamente sobre um dos pontos em que $\delta_1 = \pm n \times 0,25$, no entanto está localizado próximo o suficiente para nos fornecer alguns pontos em que o estado eletrônico dinâmico é maximamente emaranhado e dado, de forma alternada, pelos estados de Bell $|\Psi_{\pm}\rangle$.

Na figura 4.10, apresentamos os resultados para a dinâmica da concorrência ao considerarmos diferentes valores para os tunelamentos nas moléculas 1 e 2. Para a figura (a), foram considerados os parâmetros associados ao anticruzamento C' da figura 4.5 (b) onde: $\omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$; $\delta_1 = \delta_2 = 0,1\omega$, $g_1 = g_2 = 0,1\omega$, $\Delta_1 = 5 \times 10^{-3}\omega$ e $\Delta_2 = \Delta_1/2$. Verificamos neste caso que o comportamento da concorrência segue o mesmo padrão apresentado na figura 4.6 (b) que, com exceção do tunelamento, tem os mesmos parâmetros utilizados na figura 4.10 (a). Porém, neste caso ao considerarmos taxas de tunelamento diferentes acarreta um decréscimo no máximo da concorrência que é proporcional ao quanto diminuímos o tunelamento em uma das moléculas. Essa queda no grau do emaranhamento pode ser compensada ao considerarmos diferentes frequências para os modos vibracionais 1 e 2, o que pode ser observado nas figuras 4.10 (b)-(d) onde mantivemos a frequência do modo vibracional 1 fixa em $\omega_1 = 1\text{meV}$, e reduzimos a frequência do segundo modo vibracional

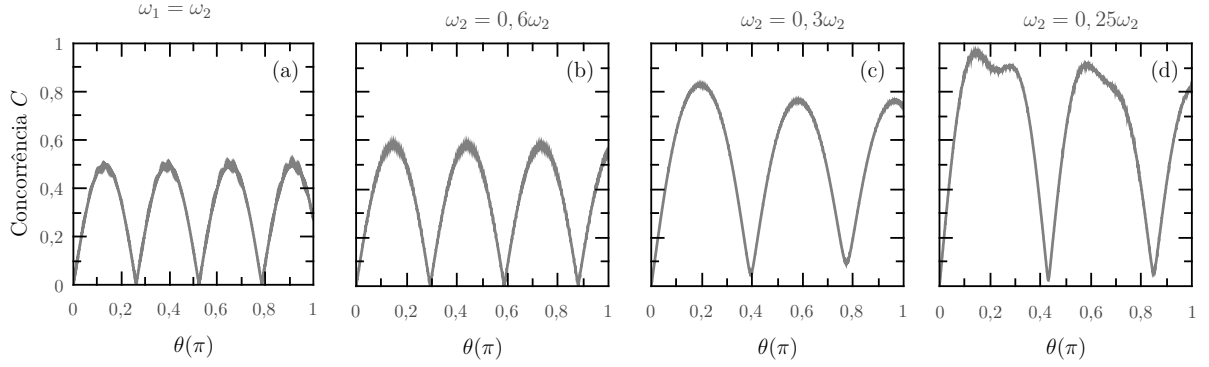


Figura 4.10: Dinâmica do emaranhamento eletrônico como função de θ para diferentes valores de ω_2 , considerando taxas de tunelamentos para as moléculas 1 e 2 diferentes, sendo $\Delta_1 = 5 \times 10^{-3}\omega$ e $\Delta_2 = \Delta_1/2$. Os demais parâmetros do anticruzamento C' da figura 4.5 (b) onde: $\omega_1 = 1\text{meV}$; $\delta_1 = \delta_2 = 0,1\omega$ e $g_1 = g_2 = 0,1\omega$. Aqui, os resultados numéricos de C foram obtidas considerando (a) $\omega_2 = \omega_1$, (b) $\omega_2 = 0,6\omega_1$, (c) $\omega_2 = 0,3\omega_1$, e (d) $\omega_2 = 0,25\omega_1$.

gradativamente. A cada redução, notamos que os valores máximos para a concorrência aumentam a medida que ω_2 se distancia de ω_1 , quase alcançando o valor máximo de $C = 1$ para $\omega_2 = 0,25\omega_1$, sendo essa condição uma das mais favorável uma vez que continuar reduzindo a frequência do segundo modo vibracional reduz também os valores máximos que a concorrência alcança.

Capítulo 5

Modos vibracionais: dinâmica e emaranhamento

Neste capítulo vamos considerar a dinâmica do sistema descrito na seção 1.4 do capítulo 1, analisando agora a dinâmica do emaranhamento quântico do subsistema composto pelos dois modos vibracionais. O objetivo principal é verificar os efeitos das oscilações eletrônicas dos qubits contidos nas moléculas sobre correlações quânticas dos modos vibracionais, utilizaremos para isso a negatividade logarítmica como quantificador do emaranhamento.

5.1 Emaranhamento dos modos vibracionais

No capítulo anterior, quando verificamos o espectro de energia do sistema, nos deparamos com o fato de que manipular e manter uma separação considerável entre os subespaços relacionados ao número total de excitações nos modos vibracionais ($N_{VT} = m + l$), pode favorecer, em condições específicas para os parâmetros dos modos vibracionais, a aparição de autoestados do sistema eletrônico com alto grau de emaranhamento. Essa possibilidade de separar ou juntar os subespaços $\mathcal{S}_{B,(ml)}$, ao manipularmos os parâmetros g_i e ω_i dos modos vibracionais 1 e 2, é explicada ao analisarmos o deslocamento energético dos níveis eletrônicos que ocorre quando o sistema molecular se acopla aos fônons contidos nos modos vibracionais. Esse deslocamento de energia eletrônico foi obtido explicitamente no capítulo 1, quando calculamos o Hamiltoniano efetivo (1.15), para cada um dos quatro pontos das

moléculas, dado seguinte forma

$$\begin{aligned}\tilde{\varepsilon}_{1(3)} &= \varepsilon_{1(3)} - \alpha_1^2 \omega_1^2, \\ \tilde{\varepsilon}_{2(4)} &= \varepsilon_{2(4)} - \alpha_2^2 \omega_2^2.\end{aligned}\tag{5.1}$$

Ao introduzirmos uma base de qubits na seção 4.2, as energias livres para os dois qubits passam a ser escritas como

$$\begin{aligned}\varepsilon_{LL,ml} &= \frac{\delta_1 + \delta_2}{2} - 2\alpha^2\omega + (m+l)\omega \\ \varepsilon_{RR,ml} &= -\left(\frac{\delta_1 + \delta_2}{2}\right) - 2\alpha^2\omega + (m+l)\omega \\ \varepsilon_{LR,ml} &= \frac{\delta_1 - \delta_2}{2} + (m+l)\omega \\ \varepsilon_{RL,ml} &= -\left(\frac{\delta_1 - \delta_2}{2}\right) + (m+l)\omega.\end{aligned}\tag{5.2}$$

Isso nos mostra que os estados em que a parte eletrônica tem uma população predominantemente nos estados da base computacional $|LL\rangle$ e $|RR\rangle$ são os que mais podem sofrer deslocamentos de energia devido ao termo quadrático $\alpha_i^2 \omega_i^2$, quando comparados com os estados globais associados as populações eletrônicas $|LR\rangle$ e $|RL\rangle$. Nos resultados apresentados na figura 4.1, consideramos $g_1 = g_2 = 0,1\omega$ onde $\omega = \omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$, essas escolhas resultam em $\alpha^2\omega^2 = \frac{g^2}{\omega} = 1 \times 10^{-2}$, o que leva a uma perturbação muito pequena nos níveis de energia eletrônicos das moléculas e isso nos possibilitou a exploração ampla do emaranhamento eletrônico para casos onde o regime de acoplamento elétron-fônon é muito pequeno com $g < \omega$.

Vamos agora analisar o que acontece com o espectro de energia do sistema, e consequentemente com os subespaços $\mathcal{S}_{B,(ml)}$ associados a N_{VT} , quando entramos em outro regime no qual $g > \omega$, considerando o caso onde os modos vibracionais são ressonantes, ou seja, $g = g_1 = g_2$ e $\omega = \omega_1 = \omega_2$. Assim como no capítulo anterior, utilizaremos a base truncada para os modos vibracionais em $m_{\max} = l_{\max} = 13$.

Na figura 5.1 apresentamos os resultados numéricos dos vinte e quatro primeiros autovalores de energia do Hamiltoniano (3.1) como função da dessintonia da molécula 1. Os resultados são apresentados para duas escolhas de parâmetros, onde para a figura 5.1 (a) consideramos $\omega = \omega_1 = \omega_2 = 10\text{meV}$, $\delta_2 = 0$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-2}\omega$, e $g_1 = g_2 = 2\omega$; para a figura 5.1 (b) $\omega = \omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$, $\delta_2 = 0$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-1}\omega$, e $g_1 = g_2 = 2\omega$. O

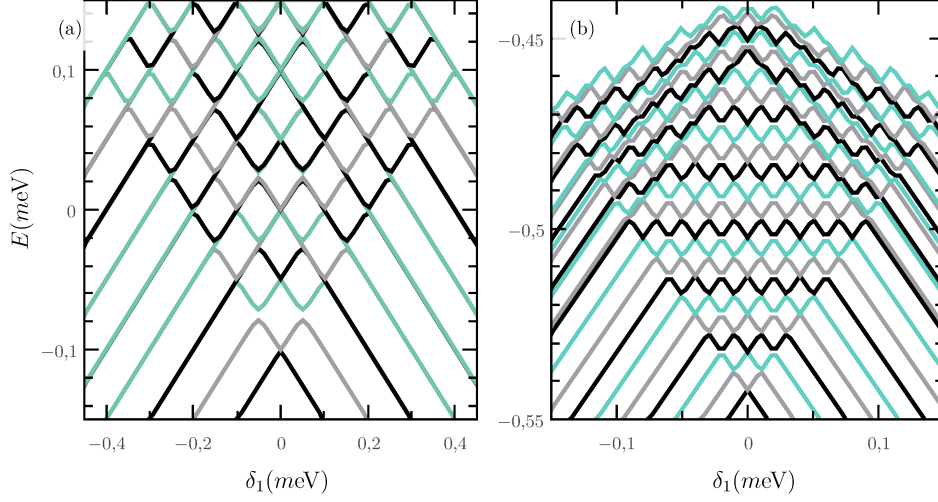


Figura 5.1: Primeiros 24 autovalores de energia do Hamiltoniano (3.1) como função da dessintonia na molécula 1, $\delta_1 = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$, em ambos os casos foi considerado $\delta_2 = 0$. Em (a) consideramos: $\omega = \omega_1 = \omega_2 = 10\text{meV}$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-2}\omega$, e $g_1 = g_2 = 2\omega$; em (b) $\omega = \omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$, $\delta_2 = 0$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-1}\omega$, e $g_1 = g_2 = 2\omega$. É possível notar, comparando com o gráfico 4.1, que uma vez que reduzimos a frequência dos modos vibracionais a separação entre os ramos de energia não é apreciável.

resultado de entrarmos em um regime de acoplamento elétron-fônon forte, sendo $g = 2 \times \omega$, é claramente observado em ambas as figuras, fazendo com que as separações entre os ramos associados aos subespaços $\mathcal{S}_{B,(ml)}$, como observados na figura 4.1, deixem de existir. Diferente do caso eletrônico, não é possível utilizar os autoestados do sistema para estudarmos as características do emaranhamento referente aos fônons gerados no sistema. No entanto, o empilhamento das bandas de energia proporcionado nesses casos podem indicar a possibilidade de se obter estados vibracionais com certo grau de emaranhamento, uma vez que esse empilhamento aproxima energeticamente estados nos quais os modos vibracionais são populados. A informação mais importante que o espectro de energia nos fornece é que para os modos vibracionais e que quanto mais empilhados os autoestados do Hamiltoniano estiverem maior será o grau de emaranhamento entre os estados pertencentes ao subespaço dos modos vibracionais, diferente dos qubits de carga onde estados com auto grau de emaranhamento só podem ser obtidos quando os subespaços quadridimensionais apresentados no Hamiltoniano (4.7) estão devidamente separados.

Com base nos resultados do espectro de energia, selecionamos os parâmetros correspondentes a figura 5.1 (b), considerando que a quantidade de estados empilhados em uma

pequena região de energia é maior. Para calcularmos a dinâmica do operador densidade total do sistema em função do tempo $\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$, usando o Hamiltoniano (3.1). Escolhemos como o vácuo, $|0\rangle \otimes |0\rangle$, como estado inicial dos modos vibracionais MV1 e MV2, uma vez que essa inicialização é mais fácil para se implementar experimentalmente. Na escolha do subespaço eletrônicos do sistema das duas moléculas damos prioridade aos estados do tipo $|LL\rangle$ ou $|RR\rangle$, escolha essa motivada pelo fato de que esses dois estados eletrônicos apresentam uma separação energética maior do que os estados $|RL\rangle$ e $|RL\rangle$ no regime de $g > \omega$. O segundo motivo, decorrente do primeiro, foi o fato de verificarmos que esses estados perturbam menos a dinâmica oscilatória do emaranhamento entre os modos vibracionais, quando comparados à escolha inicial de estados $|LR\rangle$ e $|RL\rangle$.

De posse destes argumentos, inicializamos o sistema em $\rho_0 = |LL, 00\rangle\langle LL, 00|$ e, para efetuarmos os cálculos do emaranhamento dos modos vibracionais, traçamos os estados dos qubits de carga

$$\rho_V(t) = \text{Tr}_D[\rho(t)], \quad (5.3)$$

obtendo a matriz reduzida do subsistema dos modos vibracionais. Como quantificador de emaranhamento utilizamos a negatividade logarítmica, $\mathcal{N}_{Log}(\rho)$, definida na equação (2.52). Sabendo que a negatividade logarítmica tem com o grau máximo de emaranhamento limitado por $\log_2 d$, que para o nosso caso onde $d = 13$, teremos estados vibracionais maximamente emaranhados quando $\mathcal{N}_{Log}(\rho) = 3,7004$. Para facilitar o entendimento e a representação gráfica de nossos resultados apresentaremos nas figuras a evolução temporal de $\mathcal{N}_{Log}(\rho)/3,7004$, de modo que o valor do máximo grau de emaranhamento fonônico esteja normalizado.

Antes de passarmos a discussão dos nossos resultados numéricos, voltaremos a analisar o Hamiltoniano escrito na base Bell-MV definido na equação (4.7). Verificando o Hamiltoniano é possível observar que os acoplamentos entre os modos vibracionais ocorrem por meio dos elementos não diagonais das matrizes quadridimensionais B_{ml} , definida na equação (4.8),

$$B_{ml} = \begin{pmatrix} E_{ml} & \Delta_- & \delta_-/2 & 0 \\ \Delta_- & E_{ml} & 0 & \delta_+/2 \\ \delta_-/2 & 0 & E_{ml} & \Delta_+ \\ 0 & \delta_+/2 & \Delta_+ & E_{ml} \end{pmatrix}.$$

Mostraremos que a relação entre os parâmetros intra-moleculares de tunelamento, $\Delta_{\pm} =$

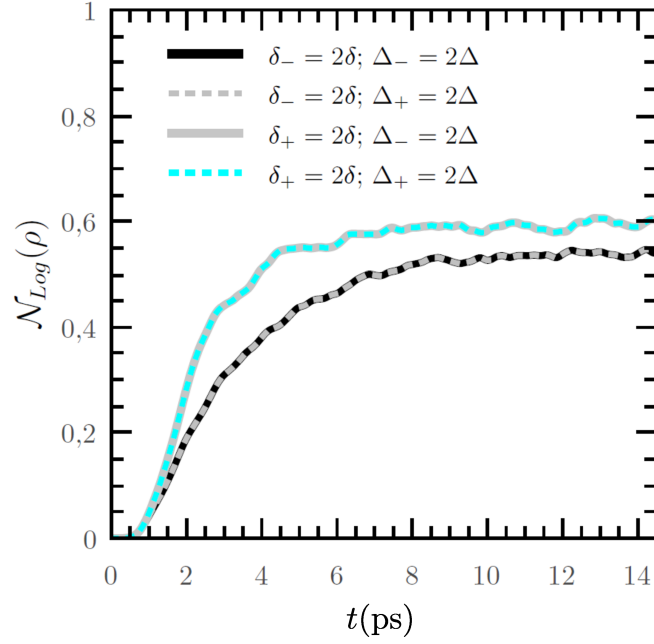


Figura 5.2: Cálculo numérico para a negatividade logarítmica dos modos vibracionais MV1 e MV2, demonstrando os efeitos da combinação de δ_{\pm} e Δ_{\pm} na dinâmica do emaranhamento fonônico. Para a linha sólida preta foram considerados $\delta_1 = -\delta_2 = \delta$ e $\Delta_1 = -\Delta_2 = \Delta$ o que nos leva a combinação $\delta_- = 2\delta$; $\Delta_- = 2\Delta$. A linha pontilhada cinza teve como parâmetros $\delta_1 = -\delta_2 = \delta$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$ o que nos leva a combinação $\delta_- = 2\delta$; $\Delta_+ = 2\Delta$. A combinação $\delta_1 = \delta_2 = \delta$ e $\Delta_1 = -\Delta_2 = \Delta$ resultando em $\delta_+ = 2\delta$; $\Delta_- = 2\Delta$ foi utilizada para calcular o resultado representado pela linha sólida em cinza. E a linha pontilhada em verde foi obtida com $\delta_1 = \delta_2 = \delta$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$ de modo que $\delta_+ = 2\delta$; $\Delta_+ = 2\Delta$. Em todos os casos foram considerados os seguintes parâmetros: $\omega = \omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$, $\delta = 1,0\omega$, $\Delta = 0,5\omega$, e $g_1 = g_2 = 2\omega$.

$\Delta_1 \pm \Delta_2$, e dessintonia, $\delta_{\pm} = \delta_1 - \delta_2$, exercem uma importante influencia na construção de emaranhamento entre os modos vibracionais MV1 e MV2. Considerando que, em valor absoluto, os parâmetros intra-moleculares de tunelamento e dessintonia iguais para as duas moléculas temos quatro combinações possíveis: a primeira considerar $\delta_1 = -\delta_2 = \delta$ e $\Delta_1 = -\Delta_2 = \Delta$ o que nos resulta na combinação $(\delta_-; \Delta_-)$, representada no gráfico 5.2 pela linha sólida preta, seus complementares, δ_+ e Δ_+ , se anulam. A linha pontilhada cinza foi obtida considerando $\delta_1 = -\delta_2 = \delta$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$, resultando no par $(\delta_-; \Delta_+)$. A combinação $\delta_1 = \delta_2 = \delta$ e $\Delta_1 = -\Delta_2 = \Delta$ com $(\delta_+; \Delta_-)$ e representada no gráfico pela linha sólida em cinza. E a linha pontilhada em verde foi obtida com $\delta_1 = \delta_2 = \delta$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$ de modo que $(\delta_+; \Delta_+)$. Em todos os resultados $\delta_{\pm} = 2\delta$ e $\Delta_{\pm} = 2\Delta$ e foram considerados os seguintes parâmetros: $\omega = \omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$, $\delta = 1,0\omega$, $\Delta = 0,5\omega$, e $g_1 = g_2 = 2\omega$.

A respeito da figura 5.2 podemos fazer algumas observações: o fator de acoplamento Δ_{\pm} não alterou a dinâmica do emaranhamento em nenhuma de suas associações com δ_{\pm} . Isso acontece devido ao fato de que a dinâmica das oscilações dos qubits de carga, que influenciam diretamente na negatividade logarítmica, é simétrica para valores negativos e positivos do tunelamento, o que já foi constatado durante o desenvolvimento da dissertação de mestrado (OLIVEIRA, 2015). O mesmo não ocorre quando analisamos as dessintonias eletrônicas entre os pontos das moléculas, δ_{\pm} : esse parâmetro não é simétrico e sua dinâmica esta diretamente relacionada com a escolha do estado eletrônico inicial $|LL\rangle$ ($|RR\rangle$) ou $|LR\rangle$ ($|RL\rangle$). Os estados antiparalelos estão associados, e são beneficiados, à condição em que a dessintonia em uma molécula seja o inverso da dessintonia na segunda molécula; já os estados paralelos $\{|LL\rangle; |RR\rangle\}$ desempenham melhor suas dinâmicas na condição em que as dessintonias nas moléculas são iguais e essa relação entre $\delta_{1(2)}$ e o estado inicial escolhido faz com que, na condição em que $\delta_+ \neq 0$, o emaranhamento vibracional seja maior, conforme pode ser observado na figura 5.2 pela linha contínua cinza e pela linha pontilhada em verde. O efeito inverso ocorreria se o estado inicial escolhido fosse $|LR\rangle$ ($|RL\rangle$), pois nesse caso o maior valor de maior emaranhamento estaria associado à $\delta_- \neq 0$, no entanto o período da negatividade logarítmica sofreria mais efeitos das flutuações de cargas nas moléculas. Por fim, aferimos diferentes valores para as dessintonias eletrônicas, $\delta_{1(2)}$, e verificamos que a partir do momento em que elas deixam de ser nulas o valor utilizado, desde que apresente a mesma ordem de grandeza de ω , não influencia na dinâmica do emaranhamento vibracional; nos casos onde a ordem de grandeza passa a ser diferente (tanto pra uma ordem maior quanto para menor) os valores máximos da negatividade

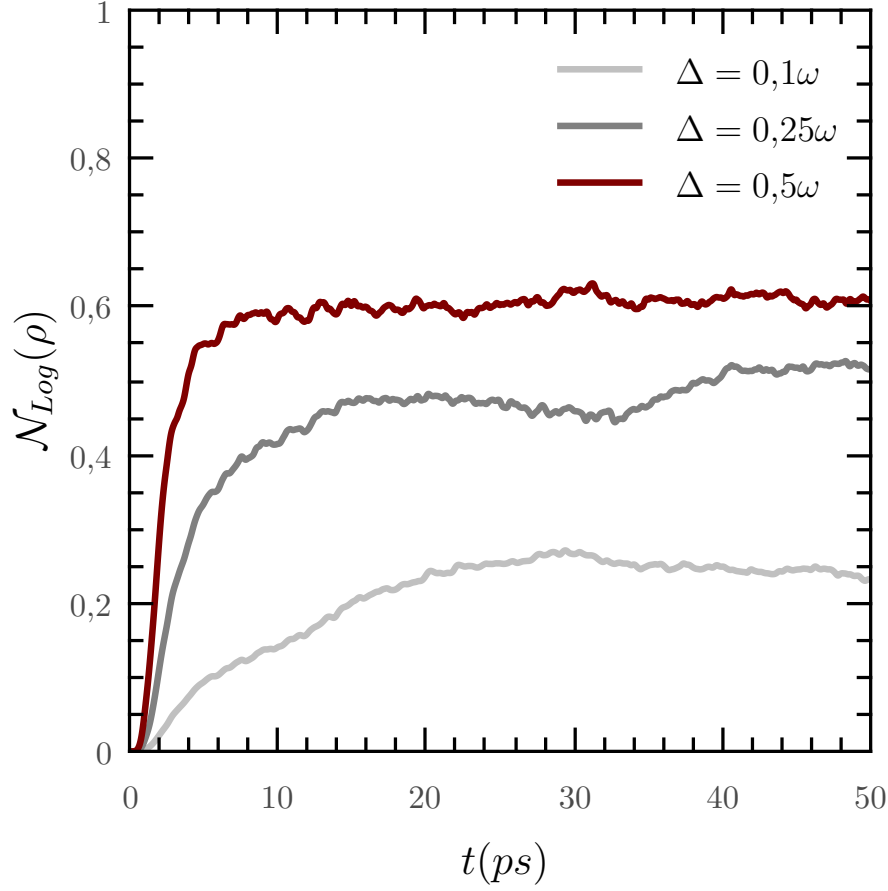


Figura 5.3: Efeitos do tunelamento sob a dinâmica da negatividade logarítmica dos modos vibracionais considerando $\Delta = 0,1\omega$ (linha sólida cinza claro), $\Delta = 0,25\omega$ (linha sólida cinza escuro) e $\Delta = 0,5\omega$ (linha sólida vinho). Os restantes dos parâmetros físicos são $\omega = 1\text{meV}$, $\delta = \omega$ e $g = 2\omega$

logarítmica decaem cerca de 10% a cada ordem de diferença.

Para uma análise mais completa do emaranhamento vibracional dos nossos modos fonônicos devemos também verificar o efeito da matriz de acoplamento elétron-fônon descrita pela equação (1.18),

$$\Delta_{\mathcal{DP}} = \left[(\Delta_{12} S_1^\dagger S_2) + (\Delta_{34} S_3^\dagger S_4) \right] \otimes \mathbb{X}_{12} + \left[(\Delta_{12} S_1 S_2^\dagger) + (\Delta_{43} S_3 S_4^\dagger) \right] \otimes \mathbb{X}_{12}^\dagger,$$

relembrando que $\mathbb{X}_{12} = e^{-\alpha(B_1 - B_1^\dagger)} \otimes e^{-\alpha(B_2^\dagger - B_2)} = D_1(\alpha) \otimes D_2(-\alpha)$, onde $\alpha = g/\omega$. Aqui vemos que o valor do tunelamento entre os pontos tem uma grande influência na intensidade do acoplamento entre os modos vibracionais e as moléculas, e também o parâmetro α presente na exponencial no operadores de deslocamento $D(\pm\alpha)$.

Na figura 5.3 verificamos o efeito de diferentes valores de tunelamento intra-molecular, $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$, na dinâmica da negatividade utilizando os seguintes parâmetros: $\omega = 1\text{meV}$; $g = 2\omega$; $\delta = 1,0\omega$. Podemos observar que o tempo de evolução necessário para se atingir o primeiro máximo de emaranhamento apresenta uma diminuição exponencial a medida que o valor do tunelamento aumenta, e atinge seu limite em $\Delta \approx 0,5\omega$ (linha sólida vinho) não apresentando mudanças significativas no que diz respeito ao tempo necessário para o primeiro valor máximo de $\mathcal{N}_{Log}(\rho)$. No entanto, a medida que o tunelamento passa a ser um múltiplo inteiro de ω , o grau do emaranhamento vibracional vai diminuindo cerca de 10% a cada ordem de grandeza em que Δ se distâcia de ω .

Os efeitos da mudança do parâmetro α no emaranhamento vibracional é ilustrado na figura 5.4, onde consideramos três valores distintos para α sendo os demais parâmetros dados por $\delta = 1\omega$ e $\Delta = 0,5\omega$. Esses três valores foram escolhidos analisando o comportamento do fator exponencial $e^{-\alpha}$, inset na figura 5.4, que aparece nos operadores de deslocamento $D(\alpha)$ definidos na equação (1.18). O primeiro caso escolhido foi aquele onde α é muito pequeno fazendo que o fator exponencial da equação (1.18) tenda ao infinito, escolhendo para a figura o valor $\alpha = 0,25$ especificamente. Concluimos que, nesse limite o grau de emaranhamento diminui e tende a se anular completamente a medida que α decrescer. Indo a outra extremidade, na qual o α assume valores maiores que fazem com que sua exponencial negativa tenda a zero, $\alpha = 5$ (linha sólida cinza e ponto cinza). Em contraste com o limite oposto, nesse caso os modos vibracionais preservam algum grau de emaranhamento, que diminui a medida que α aumenta mas que não se anulará completamente.

Após analisar os dois extremos do termo exponencial $e^{-\alpha}$, avaliamos uma situação em que o sistema esta afastado desses dois limites, para isso utilizamos $\alpha = 2,0$, ponto vermelho no inset da figura 5.4. Esse resultado esta representado pela linha sólida vermelha na mesma figura, e observamos que neste caso a negatividade logarítmica entre os fônons atinge um valor mais elevado, que se fixa em torno de $\mathcal{N}_{Log}(\rho) = 0,6$, apresentando pequenas oscilações devido as oscilações nos estados eletrônicos.

Com o objetivo de verificar a possibilidade de obtermos valores superiores a $\mathcal{N}_{Log}(\rho) \approx 0,6$ para o emaranhamento dos modos vibracionais calculamos numericamente a dinâmica da negatividade logarítmica como função das taxas de tunelamento e do parâmetro α que aparece no termo de acoplamento $\Delta_{\mathcal{DP}}$, os resultados para estas simulações estão demonstrados respectivamente nos gráficos (a) e (b) da figura 5.5. Para os resultados da figura (a), consideramos os seguintes parâmetros $\omega = \omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$; $\delta_1 = \delta_2 = 1\omega$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = 0,5\omega$. Nossos resultados mostram que fixar o parâmetro α fora nas regiões

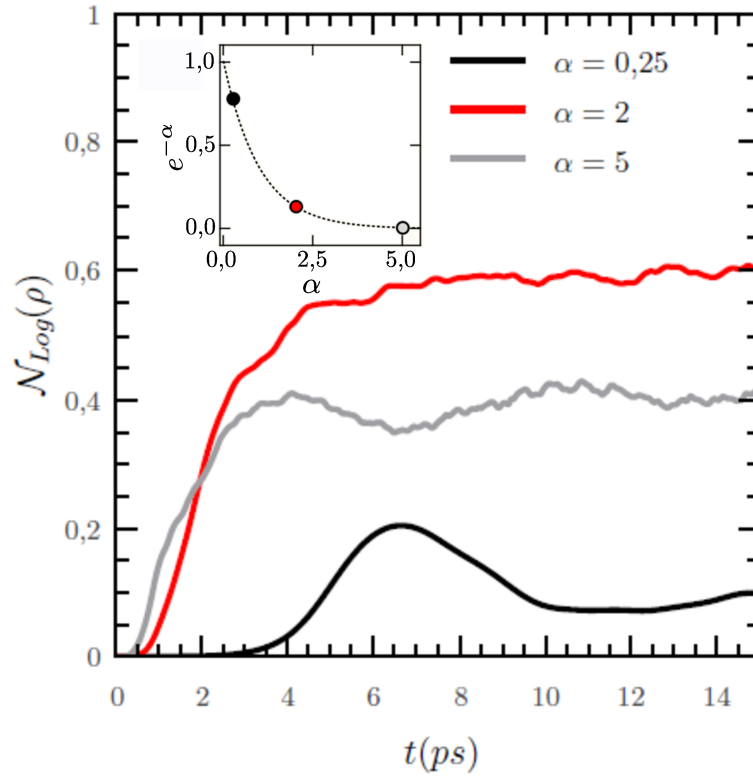


Figura 5.4: Cálculo numérico para a negatividade logarítmica dos modos vibracionais $\mathcal{VM}1$ e $\mathcal{VM}2$ considerando $\omega = 1\text{meV}$, $\delta = \omega$ e o parâmetro de tunelamento $\Delta = 0,5\omega$. Consideramos $g = 0,25\omega$ sendo $\alpha = 0,25$ (linha sólida preta), $g = 2\omega$ sendo $\alpha = 2$ (linha sólida cinza) e $g = 5\omega$ sendo $\alpha = 5$ (linha sólida vermelha). O inset na figura representa a função $e^{-\alpha}$ como função de valores de $\alpha = g/\omega$, com os pontos ilustrando as escolhas para o cálculo da negatividade logarítmica.

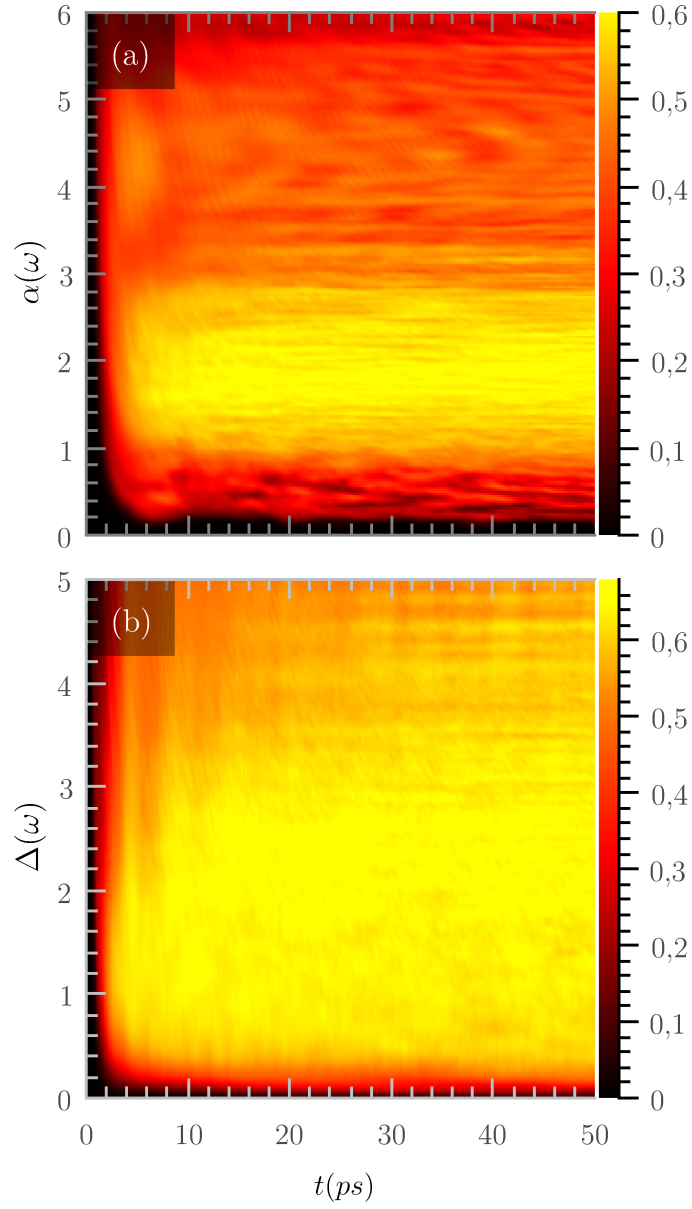


Figura 5.5: Dinâmica da negatividade logarítmica como função: (a) do parâmetro α , considerando $\omega = \omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$; $\delta_1 = \delta_2 = 1\omega$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = 0,5\omega$; (b) da taxa de tunelamento Δ com os demais parâmetros fixos em $\omega = \omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$; $\delta_1 = \delta_2 = 1\omega$; $g_1 = g_2 = 2\omega$ e $\alpha = 2$.

em que e^α esta afastada de seus dois extremos $(0, \infty)$ favorece o emaranhamento dos modos vibracionais, o que nos permite estabelecer uma faixa intermediária de valores para α , $1,0 \leq \alpha \leq 2,5$, otimiza a dinâmica do grau de emaranhamento, sendo que neste caso o máximo para a negatividade logarítmica é ainda de 0,6.

Na figura 5.5 (b), plotamos a dinâmica da negatividade logarítmica como função das taxas de tunelamento entre os pontos da moléculas, consideramos os seguintes parâmetros: $\omega = \omega_1 = \omega_2 = 1\text{meV}$; $\delta_1 = \delta_2 = 1\omega$; $g_1 = g_2 = 2\omega$ e $\alpha = 2$. Verificamos que o tunelamento exercem forte influência no grau de emaranhamento vibracional entre os modos. Nossos resultados mostram que para valores de $\Delta \geq 0,2$ o grau de emaranhamento da evolução temporal já chega a 0,4, chegando até a $\mathcal{N}_{Log}(\rho) \approx 0,65$ em $\Delta \approx 2,5\omega$, sendo este o valor máximo do emaranhamento entre os modos vibracionais.

Capítulo 6

Conclusões

Neste trabalho, estudamos as propriedades do emaranhamento de sistemas compostos por moléculas quânticas, que consistem em arranjos de pontos quânticos acoplados por tunelamento. Nos concentramos em dois problemas centrais, o primeiro sendo a escalabilidade do emaranhamento do problema estudado no mestrado, onde elétrons de duas moléculas diferentes são acoplados através da interação Coulombiana. O segundo problema abordado é um modelo de interação entre os elétrons de duas moléculas quântica e dois modos vibracionais. Referente ao primeiro problema, fizemos uma caracterização das propriedades do espectro de energias e autoestados do Hamiltoniano das moléculas na medida que se torna escalável, agregando 3, 4,5 ou mais moléculas. Ao analisarmos as características dos autoestados do Hamiltonino de muitas moléculas, verificamos que o aumento do número de moléculas traz como consequência a aparição de bandas de energia. Particularmente, as bandas de mais baixa e mais alta energia estão relacionados a estados maximamente emaranhados da família $|\text{GHZ}_{\pm}\rangle_N$, da qual os estados $|\text{FLIP}_{\pm}\rangle_N$, alojados no menor nível de energia, faz parte. Verificamos assim que, neste tipo de sistema específico onde as moléculas quânticas que interagem entre si à primeiros vizinhos por meio de interação coulombiana, o emaranhamento eletrônico nos estados alojados nas bordas do espectro energia é uma como característica fundamental do sistema sendo um recurso escalável para sistemas compostos por N moléculas.

No segundo problema abordado, verificamos o emaranhamento tanto entre os estados eletrônicos quanto entre os modos vibracionais. Para isso, utilizamos dois quantificadores de emaranhamento sendo a concorrência para os estados dos qubits e a negatividade logarítmica para os modos vibracionais. Inicialmente, considerando o modelo de interação elétron-modos vibracionais, utilizamos os estados de Bell $\{|\Psi_{\pm}\rangle_{\mathcal{D}}; |\Phi_{\pm}\rangle_{\mathcal{D}}\}$, relacionados aos

qubits de carga das moléculas, combinados com os estados $|ml\rangle$ dos modos vibracionais para reescrevermos o Hamiltoniano (3.1) na nova base Bell-MV $\{|\Psi_{\pm}, ml\rangle; |\Phi_{\pm}, ml\rangle\}$. Essa nova representação, nos permitiu dividir a matriz total do sistema em subespaços quadrimensionais $\mathcal{S}_{B,(ml)}$ associadas ao número total de excitações nos modos vibracionais $N_{VT} = m + l$, o que nos permitiu uma análise substancial de como se comporta o emaranhamento nos dois subsistemas isolados tanto o eletrônico quanto o de modos vibracionais.

Do ponto de vista eletrônico, ao reescrever o sistema na nova base Bell-MV nos permitiu verificar que termos associados ao estado de Bell $|\Psi_{-}\rangle_{\mathcal{D}}$ são completamente desacoplados dos demais estados eletrônicos quando as moléculas estão em completa ressonância, ou seja $\Delta_1 = \Delta_2$ e $\delta_- = 0$. Assim o estado $|\Psi_{-}\rangle_{\mathcal{D}}$ atua como um estado de Bell vestido por modos vibracionais, podendo surgir mais facilmente em uma dinâmica que apresente as condições de parâmetros citadas. Ao estudarmos o problema de autovalores e autovetores do Hamiltoniano (3.1), obtivemos o espectro de energia do sistema como função da dessintonia da primeira molécula, procurando explorar as possibilidades para se obter um espaçamento entre os conjuntos de subespaços $\mathcal{S}_{B,(ml)}$, associados a N_{VT} , e constatamos que para o subsistema das moléculas é interessante manter esses ramos afastados, principalmente o ramo com os quatro autoestados de menor energia, uma vez que a proximidade entre eles destruiria a possibilidade de obtermos estados eletrônicos emaranhados. Analisando separadamente o espectro de energia desses quatro autoestados, exploramos a relação entre seus anti-cruzamentos de energia com o emaranhamento nos autoestados do sistema utilizando a concorrência como quantificador e tendo como parâmetros: $g = 0, 1\omega$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = 5 \times 10^{-3}\omega$. Verificamos que em alguns pontos do espectro, (C, D) para $\delta_1 = \delta_2 = 0$ e (C', D') em $\delta_1 = \pm\delta_2$, onde as energias se anti-cruzam os estados associados a esses pontos tem um valor alto de concorrência, $C \approx 1$. Considerando especificamente os pontos C e C', temos, em boa aproximação, de Bell $|\Psi_{\pm}\rangle$ associado ao estado de vácuo dos modos vibracionais, $|\Psi_{\pm}, 00\rangle$.

Ao estudarmos a dinâmica do subsistema eletrônico, inicializamos o sistema geral no estado $|LR, 00\rangle$ escolhendo como parâmetros os mesmos do anti-cruzamento C' que tem como autoestado $|\Psi_{-}\rangle$, sendo este um estado vestido do sistema. Realizando a evolução temporal do sistema para diferentes valores de g , verificamos que, em todos os casos, a concorrência C apresenta um comportamento oscilatório, alcançando sempre em algum período o seu máximo $C = 1$, formando um estado eletrônico maximamente emaranhado. O padrão de oscilações da concorrência mostrou ser claramente dependente do acoplamento entre os elétrons e os modos vibracionais, o que nos permitiu distinguir três situações di-

ferentes: (i) para o primeiro conjunto de valores de g ($g < 0,2\omega$) o emaranhamento no sistema realiza oscilações sinusoidais com um período decrescente à medida que g aumenta; (ii) uma faixa intermediária de valores de g em que a dinâmica não corresponde a uma função senoidal, embora oscilem em uma escala de tempo significativamente mais curta; (iii) após esse regime intermediário, o sistema volta a executar oscilações sinusoidais, que agora tem seu período aumentando conforme o termo de acoplamento g aumenta. Afim de entender essa diferença de padrão oscilatório influenciado pelo acoplamento g , e devido ao fato de que o processo de transição de segunda ordem que acopla os estados $|LR\rangle$ e $|RL\rangle$ levar ao sistema próximo a um sistema de dois níveis, utilizamos teoria de perturbação, calculando o elemento de matriz Ω , que é o parâmetro de acoplamento efetivo que descreve o processo de tunelamento de segunda ordem mediado pela interação elétron-fônon. Definindo $\Omega_0 = 2|\Delta|^2/\omega$, calculamos a razão Ω/Ω_0 , ainda considerando os parâmetros do anti-cruzamento C' , a partir dos nossos resultados, identificamos três comportamentos distintos: (i) para valores pequenos de g , entre $g \approx 0$ e $g < 0,18\omega$, $|r|$ aumenta quando g aumenta; (ii) se $g \approx 0,22\omega$, o fator $2\alpha^2$ torna-se comparável com δ/ω de modo que o denominador da equação (4.18) tende a infinito se $m = l = 0$. Verificando a dinâmica exata desses valores de g , percebemos que o estado $|LL, 00\rangle$ passa a ser ressonante com $|LR, 00\rangle$ e $|RL, 00\rangle$ assim, o sistema evolui para uma superposição desses três estados e o modelo efetivo de dois níveis deixa de ser válido; (iii) para $0,2\omega < g < 0,5\omega$, o valor de $|r|$ decai à medida que g aumenta. Através do cálculo de fidelidade verificamos que o estado do subsistema eletrônico, nos picos de emaranhamento, é sempre correspondente ao estado $|\Psi_-\rangle$.

Após caracterizarmos do emaranhamento eletrônico, passamos averiguar os efeitos das oscilações eletrônicas das moléculas nos estados de fônons contidos nos modos vibracionais. O primeiro passo para este estudo foi verificar a influência das separações entre os ramos de energia correspondentes ao número total de excitações no sistema N_{VT} , e verificamos que no regime de baixas frequências onde ω é suficientemente pequeno para que se estreite a separação entre os subespaços $\mathcal{S}_{B,(ml)}$, conseguimos obter o espectro de energia no qual os níveis de energia do sistema deixam de estar separados e passam a apresentar um “empilhamento” de autoestados, que influencia diretamente na dinâmica do emaranhamento dos modos vibracionais, sendo que quanto mais empilhados os níveis energéticos se apresentam maior a possibilidade de obtermos estados vibracionais com algum grau de emaranhamento. Com base nesta análise, consideramos um regime de acoplamento fraco, em que $\omega = 1\mu\text{ev}$ (três ordens de grandeza menor que o caso eletrônico), e verificamos qual

o efeito dos demais parâmetros do sistema para que a negatividade logarítmica (quantificador utilizado) atingisse o maior valor possível. No que diz respeito aos parâmetros físicos do sistema, foi analisado a influência de cada um deles utilizando para isso as matrizes quadridimensionais, B_{ml} , e a matriz de acoplamento $\Delta_{\mathcal{DP}}$, ambas responsáveis por acoplar os estados excitados dos modos vibracionais. Por meio da análise dos elementos não diagonais das duas matrizes foi possível verificar os efeitos dos parâmetros eletrônicos e vibracionais sobre a dinâmica do emaranhamento vibracional, constatando que: (i) ao averiguarmos os efeitos das dessintonias verificamos que para obtermos um maior grau de emaranhamento vibracional, quando o estado inicial for $|LL, 00\rangle$, devemos ter a seguinte condição em que as dessintonias são iguais e não nulas, $\delta_1 = \delta_2 \neq 0$, sendo que o valor da dessintonia deve ter a mesma ordem de grandeza que a frequência dos modos vibracionais, ω ; (ii) quando analisamos a dinâmica da negatividade para diferentes valores de tunelamento, verificamos que o primeiro pico de emaranhamento vibracional do sistema apresenta uma diminuição exponencial a medida que o valor de Δ aumenta, e atinge o seu limite em $\Delta \approx 0,5\omega$. Concluimos também que aumentar ou diminuir o valor do tunelamento em uma ordem de grandeza reduz o grau de emaranhamento vibracional cerca de 10%, e que desde que não sejam nulos considerar $\Delta_1 = \pm\Delta_2$ não muda a dinâmica da negatividade logarítmica. (iii) O efeito do acoplamento elétron-fônon foi verificado indiretamente através do parâmetro $\alpha = g/\omega$, e notamos que valores muito altos ou valores muito baixos de α resultam em uma diminuição do grau de emaranhamento no subsistema vibracional tendendo a anular completamente quando $\alpha \rightarrow 0$ e apresentando um pequeno valor de emaranhamento a medida que α assume valores maiores. Verificamos o maior grau de emaranhamento, $\mathcal{N}_{Log}(\rho) \approx 0,6$, ocorre no intervalo em que $1,5 \leq \alpha \leq 3,5$, sendo os demais parâmetros dados por: $\delta_1 = \delta_2 = 1\omega$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = 0,5\omega$. Verificamos também que definir estado inicial eletrônico como um estado paralelo ($|LL\rangle$ ou $|RR\rangle$) nos leva a estados vibracionais com maior grau de emaranhamento.

Perspectivas para trabalhos futuros contemplam o aprofundamento sobre as características do emaranhamento dos autoestados do Hamiltoniano de N moléculas, ao relaxar as condições de dessintonia considerados nesta tese. Também desejamos refletir sobre as diferentes classes de estados que aparecem ao aumentar a dimensão do sistema, além de procurar quantificadores adequados para estudar cada classe. Referente ao nosso modelo de interação entre as moléculas quânticas e os modos vibracionais, temos a intenção de caracterizar os estados vibracionais através de funções de quase-distribuição como as funções de Hussimi ou Wigner. Desejamos também explorar as propriedades estatísticas desses

estados, contrastando-as com a dinâmica eletrônica que foram explorados no contexto de acoplamento forte, onde $g > \omega$.

Referências Bibliográficas

- 1 FEYNMAN, R. P. Simulating physics with computers. *International Journal of Theoretical Physics*, v. 21, n. 6, p. 467–488, 1982. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF02650179>>.
- 2 Deutsch, D. Quantum theory, the Church-Turing principle and the universal quantum computer. *Proceedings of the Royal Society of London Series A*, v. 400, n. 1818, p. 97–117, Jul 1985. Disponível em: <<https://doi.org/10.1098/rspa.1985.0070>>.
- 3 Shor, P. W. Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring. In: *Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*. [s.n.], 1994. p. 124–134. ISSN null. Disponível em: <<https://doi.org/10.1109/SFCS.1994.365700>>.
- 4 GROVER, L. K. Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack. In: . [s.n.], 1997. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.79.325>>.
- 5 JOZSA, R. Quantum algorithms and the fourier transform. *Proceedings: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, The Royal Society, v. 454, n. 1969, p. 323–337, 1998. ISSN 13645021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1098/rspa.1998.0163>>.
- 6 CAVES, C. M.; DEUTSCH, I. H.; BLUME-KOHOOUT, R. Physical-resource requirements and the power of quantum computation. *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics*, IOP Publishing, v. 6, n. 8, p. S801–S806, jul 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088%2F1464-4266%2F6%2F8%2F027>>.
- 7 BENNETT, C. H.; WIESNER, S. J. Communication via one- and two-particle operators on einstein-podolsky-rosen states. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 69, p. 2881–2884, Nov 1992. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.69.2881>>.
- 8 BENNETT, C. H. et al. Teleporting an unknown quantum state via dual classical and einstein-podolsky-rosen channels. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 70, p. 1895–1899, Mar 1993. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.70.1895>>.
- 9 ROOS, C. F. et al. Control and measurement of three-qubit entangled states. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 304, n. 5676, p. 1478–1480, 2004. ISSN 0036-8075. Disponível em: <<https://science.sciencemag.org/content/304/5676/1478>>.

- 10 BOEHI, P. et al. Coherent manipulation of bose–einstein condensates with state-dependent microwave potentials on an atom chip. *Nature Physics*, v. 5, 04 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nphys1329>>.
- 11 Kane, B. E. A silicon-based nuclear spin quantum computer. , v. 393, n. 6681, p. 133–137, May 1998. Disponível em: <<https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1998Natur.393..133K>>.
- 12 LOSS, D.; DIVINCENZO, D. P. Quantum computation with quantum dots. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 57, p. 120–126, Jan 1998. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.57.120>>.
- 13 BURKARD, G.; LOSS, D.; DIVINCENZO, D. P. Coupled quantum dots as quantum gates. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 59, p. 2070–2078, Jan 1999. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.59.2070>>.
- 14 IMAMOGLU, A. et al. Quantum information processing using quantum dot spins and cavity qed. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 83, p. 4204–4207, Nov 1999. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.83.4204>>.
- 15 BORGES, H. S. et al. Tunneling induced transparency and slow light in quantum dot molecules. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 85, p. 115425, Mar 2012. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.85.115425>>.
- 16 BORGES, H.; SANZ, L.; ALCALDE, A. Excitonic entanglement of protected states in quantum dot molecules. *Physics Letters A*, v. 380, n. 38, p. 3111 – 3116, 2016. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.physleta.2016.07.020>>.
- 17 VASCO, J. P. et al. Steady-state entanglement between distant quantum dots in photonic crystal dimers. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 94, n. 16, Oct 2016. ISSN 2469-9969. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.94.165302>>.
- 18 HAYASHI, T. et al. Coherent manipulation of electronic states in a double quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, v. 91, p. 226804, 2003. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.91.226804>>.
- 19 SHINKAI, G. et al. Controlled resonant tunneling in a coupled double-quantum dot system. *Appl. Phys. Lett.*, v. 90, p. 103116, 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.2709905>>.
- 20 SHINKAI, G. et al. Correlated coherent oscillations in coupled semiconductor charge qubits. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 103, p. 056802, Jul 2009. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.103.056802>>.

- 21 OLIVEIRA, P.; SANZ, L. Bell states and entanglement dynamics on two coupled quantum molecules. *Annals of Physics*, v. 356, p. 244 – 254, 2015. ISSN 0003-4916. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.aop.2015.02.036>>.
- 22 XUE, Y.; RATNER, M. Theoretical principles of single-molecule electronics: A chemical and mesoscopic view. *International Journal of Quantum Chemistry*, v. 102, 04 2005. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002/qua.20484>>.
- 23 XIANG, D. et al. Molecular-scale electronics: From concept to function. *Chemical Reviews*, v. 116, n. 7, p. 4318–4440, 2016. PMID: 26979510. Disponível em: <<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.chemrev.5b00680>>.
- 24 PARK, J. et al. Coulomb blockade and the kondo effect in single-atom transistors. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 417, p. 722, 2002. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nature00791>>.
- 25 PARK, H. et al. Nanomechanical oscillations in a single-c 60 transistor. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 407, p. 57, 2000. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/35024031>>.
- 26 STEELE, G. A.; GOTZ, G.; KOUWENHOVEN, L. P. Tunable few-electron double quantum dots and klein tunnelling in ultraclean carbon nanotubes. *Nature Nanotechnology*, Springer Science and Business Media LLC, v. 4, n. 6, p. 363–367, Apr 2009. ISSN 1748-3395. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/nnano.2009.71>>.
- 27 LASSAGNE, B. et al. Coupling mechanics to charge transport in carbon nanotube mechanical resonators. *Science*, v. 325, p. 1107, 2009. Disponível em: <<https://science.sciencemag.org/content/325/5944/1107>>.
- 28 GORELIK, L. Y. et al. Shuttle mechanism for charge transfer in coulomb blockade nanostructures. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 80, n. 20, p. 4526–4529, May 1998. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.4526>>.
- 29 ARMOUR, A. D.; MACKINNON, A. Transport via a quantum shuttle. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 66, p. 035333, Jul 2002. Disponível em: <[10.1103/PhysRevB.66.035333](http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.66.035333)>.
- 30 DONARINI, A.; NOVOTNÝ, T.; JAUHO, A.-P. Simple models suffice for the single-dot quantum shuttle. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 7, p. 237–237, Nov 2005. ISSN 1367-2630. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/7/1/237>>.
- 31 KEPESIDIS, K. V. et al. Cooling phonons with phonons: Acoustic reservoir engineering with silicon-vacancy centers in diamond. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 94, p. 214115, Dec 2016. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.94.214115>>.

- 32 WALTER, S.; TRAUZETTEL, B.; SCHMIDT, T. L. Transport properties of double quantum dots with electron-phonon coupling. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 88, p. 195425, Nov 2013. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.195425>>.
- 33 SOWA, J. K. et al. Vibrational effects in charge transport through a molecular double quantum dot. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 95, p. 085423, Feb 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.085423>>.
- 34 LETURCQ, R. et al. Franck condon blockade in suspended carbon nanotube quantum dots. *Nat. Phys.*, v. 5, p. 327, 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nphys1234>>.
- 35 RABI, I. I. On the process of space quantization. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 49, p. 324–328, Feb 1936. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.49.324>>.
- 36 RABI, I. I. Space quantization in a gyrating magnetic field. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 51, p. 652–654, Apr 1937. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.51.652>>.
- 37 CASANOVA, J. et al. Deep strong coupling regime of the jaynes-cummings model. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 105, n. 26, Dec 2010. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.263603>>.
- 38 DUAN, L. et al. Solution of the two-mode quantum rabi model using extended squeezed states. *EPL (Europhysics Letters)*, IOP Publishing, v. 112, n. 3, p. 34003, Nov 2015. ISSN 1286-4854. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/112/34003>>.
- 39 BRAAK, D. et al. Semi-classical and quantum rabi models: in celebration of 80 years. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, IOP Publishing, v. 49, n. 30, p. 300301, Jun 2016. ISSN 1751-8121. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/1751-8113/49/30/300301>>.
- 40 RAIMOND, J. M.; BRUNE, M.; HAROCHE, S. Manipulating quantum entanglement with atoms and photons in a cavity. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 73, p. 565–582, Aug 2001. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.73.565>>.
- 41 WINELAND, D. J. Nobel lecture: Superposition, entanglement, and raising schrödinger's cat. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 85, p. 1103–1114, Jul 2013. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.85.1103>>.
- 42 AZUMA, H. Quantum computation with the jaynes-cummings model. *Progress of Theoretical Physics*, Oxford University Press (OUP), v. 126, n. 3, p. 369–385, Sep 2011. ISSN 1347-4081. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1143/PTP.126.369>>.

- 43 LANDAU, L.; PEKAR, S. Effective mass of a polaron. *J. Exp. Theor. Phys*, v. 18, p. 419–423, 1948. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/B978-0-08-010586-4.50072-9>>.
- 44 EMIN, D. *Polarons*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2012.
- 45 GOLOVACH, V. N.; KHAETSKII, A.; LOSS, D. Phonon-induced decay of the electron spin in quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 93, p. 016601, Jun 2004. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.016601>>.
- 46 STAVROU, V. N.; HU, X. Charge decoherence in laterally coupled quantum dots due to electron-phonon interactions. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 72, n. 7, Aug 2005. ISSN 1550-235X. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.72.075362>>.
- 47 VOROJTISOV, S.; MUCCIOLO, E. R.; BARANGER, H. U. Phonon decoherence of a double quantum dot charge qubit. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 71, n. 20, May 2005. ISSN 1550-235X. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.71.205322>>.
- 48 ROYER, B. et al. Fast and high-fidelity entangling gate through parametrically modulated longitudinal coupling. *Quantum*, Verein zur Forderung des Open Access Publizierens in den Quantenwissenschaften, v. 1, p. 11, May 2017. ISSN 2521-327X. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.22331/q-2017-05-11-11>>.
- 49 CHILINGARYAN, S. A.; RODRÍGUEZ-LARA, B. M. The quantum rabi model for two qubits. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, IOP Publishing, v. 46, n. 33, p. 335301, Jul 2013. ISSN 1751-8121. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/1751-8113/46/33/335301>>.
- 50 BINA, M.; FELIS, S. M.; OLIVARES, S. Entanglement generation in the ultra-strongly coupled rabi model. *International Journal of Quantum Information*, World Scientific Pub Co Pte Lt, v. 12, n. 07n08, p. 1560016, Nov 2014. ISSN 1793-6918. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1142/S0219749915600163>>.
- 51 KRZYWDA, J.; ROSZAK, K. Phonon-mediated generation of quantum correlations between quantum dot qubits. *Scientific reports*, v. 6, 11 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/srep23753>>.
- 52 DELBECQ, M. et al. Photon-mediated interaction between distant quantum dot circuits. *Nature Communications*, Springer Science and Business Media LLC, v. 4, n. 1, Jan 2013. ISSN 2041-1723. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/ncomms2407>>.
- 53 DRESSELHAUS, M. S.; DRESSELHAUS, G.; AVOURIS, P. *Carbon Nanotubes*. Berlin Heidelberg: Springer, 2001.
- 54 SAZONOVA, V. et al. A tunable carbon nanotube electromechanical oscillator. *Nature*, v. 431, p. 284, 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nature02905>>.

- 55 DENG, G.-W. et al. Strongly coupled nanotube electromechanical resonators. *Nano Letters*, American Chemical Society (ACS), v. 16, n. 9, p. 5456–5462, Aug 2016. ISSN 1530-6992. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b01875>>.
- 56 JENSEN, K.; WELDON, J.; ZETTTL, A. Nanotube radio. *Nano Lett.*, v. 7, p. 3508, 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/nl0721113>>.
- 57 CHIU, H.-Y. et al. Atomic-scale mass sensing using carbon nanotube resonators. *Nano Lett.*, v. 8, p. 4342, 2008. Disponível em: <<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/nl802181c>>.
- 58 JENSEN, K.; KIM, K.; ZETTTL, A. An atomic-resolution nanomechanical mass sensor. *Nature Nanotechnology*, v. 3, p. 533, 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nnano.2008.200>>.
- 59 LAIRD, E. A. et al. A high quality factor carbon nanotube mechanical resonator at 39 ghz. *Nano Letters*, v. 12, n. 1, p. 193–197, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/nl203279v>>.
- 60 MOSER, J. et al. Nanotube mechanical resonators with quality factors of up to 5 million. *Nature Nanotechnology*, v. 9, p. 1007, 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nnano.2014.234>>.
- 61 LEROY, B. J. et al. Electrical generation and absorption of phonons in carbon nanotubes. *Nature*, v. 432, p. 371, 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nature03046>>.
- 62 BENYAMINI, A. et al. Real-space tailoring of the electron–phonon coupling in ultraclean nanotube mechanical resonators. *Nature Physics*, Springer Science and Business Media LLC, v. 10, n. 2, p. 151–156, Jan 2014. ISSN 1745-2481. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/nphys2842>>.
- 63 LAIRD, E. A. et al. Quantum transport in carbon nanotubes. *Reviews of Modern Physics*, American Physical Society (APS), v. 87, n. 3, p. 703–764, Jul 2015. ISSN 1539-0756. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.87.703>>.
- 64 WANG, H.; BURKARD, G. Mechanically induced two-qubit gates and maximally entangled states for single electron spins in a carbon nanotube. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 92, n. 19, Nov 2015. ISSN 1550-235X. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.92.195432>>.
- 65 SCHUETZ, M. J. A. et al. Universal quantum transducers based on surface acoustic waves. *Phys. Rev. X*, American Physical Society, v. 5, p. 031031, Sep 2015. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.5.031031>>.
- 66 CHEN, J. et al. Enhanced electron-phonon coupling for a semiconductor charge qubit in a surface phonon cavity. *Scientific Reports*, v. 5, 10 2015. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/srep15176>>.

- 67 Esaki, L.; Tsu, R. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors. *IBM Journal of Research and Development*, v. 14, n. 1, p. 61–65, Jan 1970. ISSN 0018-8646. Disponível em: <<https://dl.acm.org/doi/10.1147/rd.141.0061>>.
- 68 CHANG, L. E. L. L.; TSU, R. Resonant tunneling in semiconductor double barriers. *Appl. Phys. Lett.*, v. 24, p. 593, 1974. Disponível em: <<https://link.springer.com/book/10.1007/978-1-4615-3846-2>>.
- 69 ESAKI, L.; CHANG, L. L. New transport phenomenon in a semiconductor "superlattice". *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 33, p. 495–498, Aug 1974. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.33.495>>.
- 70 DINGLE, R.; WIEGMANN, W.; HENRY, C. H. Quantum states of confined carriers in very thin $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ - GaAs - $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ heterostructures. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 33, p. 827–830, Sep 1974. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.33.827>>.
- 71 HERMAN, M. A.; SITTER, H. *Molecular Beam Epitaxy*. [S.l.]: Spring Series in Materials Science, 1996.
- 72 KITTEL, C. *Introdução à Física do Estado Sólido*. [S.l.]: Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1978.
- 73 WARBURTON, R. Self-assembled semiconductor quantum dots. *Contemporary Physics*, v. 43, p. 351–364, 09 2002. Disponível em: <<https://doi.org/10.1093/nsr/nwx042>>.
- 74 KASTNER, M. Artificial atoms. *Phys. Today*, v. 2, p. 24, 1993. Disponível em: <<https://physicstoday.scitation.org/doi/10.1063/1.881393>>.
- 75 LESCHKIES, K. et al. Photosensitization of ZnO nanowires with CdSe quantum dots for photovoltaic devices. *Nano letters*, v. 7, p. 1793–8, 07 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/nl070430o>>.
- 76 XIE, C. et al. Core-shell heterojunction of silicon nanowire arrays and carbon quantum dots for photovoltaic devices and self-driven photodetectors. *ACS Nano*, v. 8, n. 4, p. 4015–4022, 2014. PMID: 24665986. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/nn501001j>>.
- 77 HOVE, L. V. The occurrence of singularities in the elastic frequency distribution of a crystal. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 89, p. 1189–1193, Mar 1953. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.89.1189>>.
- 78 KASTNER, M. Single quantum dots: Fundamentals, applications and new concepts. *Topics in Applied Physics, Editora Springer*, v. 90, p. 24, 2003.

- 79 REIMANN, S. M.; MANNINEN, M. Electronic structure of quantum dots. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 74, p. 1283–1342, Nov 2002. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.74.1283>>.
- 80 CRONENWETT, S. M.; OOSTERKAMP, T. H.; KOUWENHOVEN, L. P. A tunable kondo effect in quantum dots. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 281, n. 5376, p. 540–544, 1998. ISSN 0036-8075. Disponível em: <<https://science.sciencemag.org/content/281/5376/540>>.
- 81 Goldhaber-Gordon, D. et al. Kondo effect in a single-electron transistor. , v. 391, n. 6663, p. 156–159, Jan 1998. Disponível em: <<https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1998Natur.391..156G>>.
- 82 BARENCO, A. et al. Conditional quantum dynamics and logic gates. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 74, p. 4083–4086, May 1995. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.74.4083>>.
- 83 BRUM, J. A.; HAWRYLAK, P. Coupled quantum dots as quantum exclusive-or gate. *Superlattices and Microstructures*, v. 22, n. 3, p. 431 – 436, 1997. ISSN 0749-6036. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0749603696902633>>.
- 84 BALESTRA, F. et al. Production of φ and ω mesons in near-threshold pp reactions. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 81, p. 4572–4575, Nov 1998. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.81.4572>>.
- 85 FUJISAWA, T.; HAYASHI, T.; HIRAYAMA, Y. Controlled decoherence of a charge qubit in a double quantum dot. *Journal of Vacuum Science Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures*, v. 22, 07 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1116/1.1771679>>.
- 86 LIVERMORE, C. et al. The coulomb blockade in coupled quantum dots. *Science (New York, N.Y.)*, v. 274, p. 1332–5, 12 1996. Disponível em: <<https://science.sciencemag.org/content/274/5291/1332>>.
- 87 GOSS, K. et al. Parallel carbon nanotube quantum dots and their interactions. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 87, p. 035424, Jan 2013. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.035424>>.
- 88 LAHAYE, M. et al. Nanomechanical measurements of a superconducting qubit. *Nature*, v. 459, p. 960–4, 07 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nature08093>>.
- 89 PALOMAKI, T. et al. Coherent state transfer between itinerant microwave fields and a mechanical oscillator. *Nature*, v. 495, p. 210–4, 03 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nature11915>>.

- 90 YEO, I. et al. Strain-mediated coupling in a quantum dot-mechanical oscillator hybrid system. *Nature Nanotechnology*, v. 9, 06 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nnano.2013.274>>.
- 91 MOHAMED, A.-B.; OBADA, A. Non-classical correlations in two quantum dots coupled in a coherent resonator field under decoherence. *Quantum Information Processing*, v. 17, 10 2018. Disponível em: <<https://link.springer.com/article/10.1007/s11128-018-2052-1>>.
- 92 KENNES, D. M. et al. Transient superconductivity from electronic squeezing of optically pumped phonons. *Nature Physics*, Springer Science and Business Media LLC, v. 13, n. 5, p. 479–483, Jan 2017. ISSN 1745-2481. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/nphys4024>>.
- 93 ALEXANDROV, A. S.; KORNILOVITCH, P. E. Mobile small polaron. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 82, n. 4, p. 807–810, Jan 1999. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.82.807>>.
- 94 MAHAN, G. D. *Many-Particle Physics*. 3. ed. New York: Plenum, 2000. Disponível em: <<https://www.springer.com/gp/book/9780306463389>>.
- 95 SCULLY, M. O.; ZUBAIRY, M. S. *Quantum Optics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1997.
- 96 COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. Quantum mechanics, volume 1. *Quantum Mechanics, Volume 1, by Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Frank Laloe, pp. 898. ISBN 0-471-16433-X. Wiley-VCH, June 1986., -1, 05 1986.*
- 97 VIDAL, G.; WERNER, R. F. Computable measure of entanglement. *Physical Review A*, American Physical Society (APS), v. 65, n. 3, Feb 2002. ISSN 1094-1622. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.65.032314>>.
- 98 EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B.; ROSEN, N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 47, p. 777–780, May 1935. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.47.777>>.
- 99 BOHR, N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 48, p. 696–702, Oct 1935. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.48.696>>.
- 100 SCHRÖDINGER, E. Discussion o probalility relations between separated systems. *Proc. Camb. Phil. Sox.*, v. 31, p. 555, 1935. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/S0305004100013554>>.
- 101 BELL, J. S. On the einstein podolsky rosen paradox. *Physics Physique Fizika*, American Physical Society, v. 1, p. 195–200, Nov 1964. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysicsPhysiqueFizika.1.195>>.

- 102 ASPECT, A.; DALIBARD, J.; ROGER, G. Experimental test of bell's inequalities using time-varying analyzers. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 49, p. 1804–1807, Dec 1982. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.49.1804>>.
- 103 BRUN, T. A.; WANG, H. Coupling nanocrystals to a high-q-silica microsphere: Entanglement in quantum dots via photon exchange. *Physical Review A*, American Physical Society (APS), v. 61, n. 3, Feb 2000. ISSN 1094-1622. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.61.032307>>.
- 104 EKERT, A.; JOZSA, R. Quantum algorithms: entanglement-enhanced information processing. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, The Royal Society, v. 356, n. 1743, p. 1769–1782, Aug 1998. ISSN 1471-2962. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1098/rsta.1998.0248>>.
- 105 LINDEN, N.; POPESCU, S. Good dynamics versus bad kinematics: Is entanglement needed for quantum computation? *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 87, n. 4, Jul 2001. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.047901>>.
- 106 MEYER, D. A. Sophisticated quantum search without entanglement. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 85, n. 9, p. 2014–2017, Aug 2000. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.85.2014>>.
- 107 WERNER, R. F. Quantum states with einstein-podolsky-rosen correlations admitting a hidden-variable model. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 40, p. 4277–4281, Oct 1989. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.40.4277>>.
- 108 GREENBERGER D. M.; HORNE, M. A.; ZEILINGER, A. Going beyond bell's theorem. *Springer Netherlands*, p. 69–72, 1989.
- 109 GREENBERGER D. M.; HORNE, M. A.; ZEILINGER, A. Bell's theorem without inequalities. *American Journal of Physics*, v. 58, p. 1131–1143, 1990. Disponível em: <<https://doi.org/10.1119/1.16243>>.
- 110 DÜR, W.; VIDAL, G.; CIRAC, J. I. Three qubits can be entangled in two inequivalent ways. *Physical Review A*, American Physical Society (APS), v. 62, n. 6, Nov 2000. ISSN 1094-1622. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.62.062314>>.
- 111 RAUSSENDORF, R.; BROWNE, D. E.; BRIEGEL, H. J. Measurement-based quantum computation on cluster states. *Physical Review A*, American Physical Society (APS), v. 68, n. 2, Aug 2003. ISSN 1094-1622. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.68.022312>>.

- 112 BARZ, S. et al. Demonstration of blind quantum computing. *Science*, American Association for the Advancement of Science (AAAS), v. 335, n. 6066, p. 303–308, Jan 2012. ISSN 1095-9203. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1126/science.1214707>>.
- 113 TAME, M. et al. Experimental realization of a one-way quantum computer algorithm solving simon’s problem. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 113, n. 20, Nov 2014. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.200501>>.
- 114 EKERT, A. K. Quantum cryptography based on bell’s theorem. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 67, p. 661–663, Aug 1991. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.67.661>>.
- 115 CUNHA, M. O. T. *Emaranhamento: caracterização manipulação e consequências*. Uberlândia: Tese de Doutorado UFMG, 2005.
- 116 MA, X.-S. et al. Quantum teleportation over 143 kilometres using active feed-forward. *Nature*, v. 489, p. 269–73, 09 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nature11472>>.
- 117 VEDRAL, V. *Introduction to Quantum Information Science*. [S.l.: s.n.], 2007. ISBN 978-0-19-921570-6.
- 118 HORODECKI, R. et al. Quantum entanglement. *Reviews of Modern Physics*, American Physical Society (APS), v. 81, n. 2, p. 865–942, Jun 2009. ISSN 1539-0756. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.81.865>>.
- 119 BRUß, D. Characterizing entanglement. *Journal of Mathematical Physics*, AIP Publishing, v. 43, n. 9, p. 4237–4251, Sep 2002. ISSN 1089-7658. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.1494474>>.
- 120 RUNGTA, P. et al. Universal state inversion and concurrence in arbitrary dimensions. *Physical Review A*, American Physical Society (APS), v. 64, n. 4, Sep 2001. ISSN 1094-1622. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.64.042315>>.
- 121 COFFMAN, V.; KUNDU, J.; WOOTTERS, W. K. Distributed entanglement. *Physical Review A*, American Physical Society (APS), v. 61, n. 5, Apr 2000. ISSN 1094-1622. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.61.052306>>.
- 122 OSBORNE, T. J.; VERSTRAETE, F. General monogamy inequality for bipartite qubit entanglement. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 96, n. 22, Jun 2006. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.220503>>.
- 123 WONG, A.; CHRISTENSEN, N. Potential multiparticle entanglement measure. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 63, p. 044301, Mar 2001. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.63.044301>>.

- 124 YU, C.-s.; SONG, H.-s. Multipartite entanglement measure. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 71, p. 042331, Apr 2005. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.71.042331>>.
- 125 LEE, S. et al. Convex-roof extended negativity as an entanglement measure for bipartite quantum systems. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 68, p. 062304, Dec 2003. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.68.062304>>.
- 126 SOUZA, F. M.; SANZ, L. Lindblad formalism based on fermion-to-qubit mapping for nonequilibrium open quantum systems. *Physical Review A*, American Physical Society (APS), v. 96, n. 5, Nov 2017. ISSN 2469-9934. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.96.052110>>.
- 127 OLIVEIRA, P. A. *Emaranhamento eletrônico em moléculas de pontos quânticos semicondutores*. Uberlândia: Dissertação (Mestrado em Física) - Instituto de Física, Universidade Federal de Uberlândia., 2015a.
- 128 BENNETT, C. H. et al. Concentrating partial entanglement by local operations. *Physical Review A*, American Physical Society (APS), v. 53, n. 4, p. 2046–2052, Apr 1996. ISSN 1094-1622. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.53.2046>>.
- 129 HILL, S.; WOOTTERS, W. K. Entanglement of a pair of quantum bits. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 78, n. 26, p. 5022–5025, Jun 1997. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.78.5022>>.
- 130 FUJISAWA, T. et al. Multiple two-qubit operations for a coupled semiconductor charge qubit. *Phys. E*, v. 43, p. 730734, 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.physe.2010.07.040>>.