

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

Henri Gonçalves Mendonça

**Formação de Estados Emaranhados:
Qubits Eletrônicos e Cadeia de Spin**

Uberlândia, Brasil

26 de agosto de 2022

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

Henri Gonçalves Mendonça

**Formação de Estados Emaranhados:
Qubits Eletrônicos e Cadeia de Spin**

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Instituto de Física da Universidade Federal de Uberlândia, Minas Gerais, como requisito exigido parcial à obtenção do grau de Bacharel em Física de Materiais.

Orientador: Professor Doutor Fabrício Macedo de Souza

Universidade Federal de Uberlândia – UFU

Instituto de Física - INFIS

Bacharelado em Física de Materiais

Uberlândia, Brasil

26 de agosto de 2022

Henri Gonçalves Mendonça

Formação de Estados Emaranhados: Qubits Eletrônicos e Cadeia de Spin

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Instituto de Física da Universidade Federal de Uberlândia, Minas Gerais, como requisito exigido parcial à obtenção do grau de Bacharel em Física de Materiais.

Trabalho aprovado. Uberlândia, Brasil, em 10 de agosto de 2022:

**Professor Doutor Fabrício Macedo de
Souza**
Orientador

**Professora Doutora Liliana Sanz De
La Torre**

Professor Doutor José Roberto Tozoni

Uberlândia, Brasil
26 de agosto de 2022

Primeiramente dedico essa monografia ao meu pai Adenicio Gonçalves Mendonça Junior e minha mãe Vanêssa Santos Mendonça, meus eternos amigos e companheiros para a vida toda. Em segundo, dedico ao meu querido irmão Eduardo Gonçalves Mendonça e a minha namorada Gabriela Aparecida Santos. Também dedico essa monografia aos meus queridos amigos que fiz durante o curso Melissa Naomi, Bianca Almeida, Alessandra Köth, Gustavo Vidal, Lais Calandrine e Fernanda Ribeiro, além de Rafael Cambraia. Por fim, dedico essa monografia a minha querida companheirinha Amora.

Agradecimentos

Agradeço ao grande amigo e meu orientador prof. Fabricio Macedo de Souza que me auxiliou e guiou durante toda minha graduação. Também agradeço aos professores George Martins, Gerson Ferreira, Liliana Sanz e Marco Boselli pela paciência e cada momento que se dedicaram a me ensinar de forma tão apaixonada física.

Agradeço a minha família e minha namorada que estão me apoiando em cada momento da minha graduação, contribuindo para minha motivação e permanência no projeto de conclusão da minha graduação. Aos meus amigos também agradeço pelas risadas, pelas horas a fio de dedicações aos estudos e finalmente agradeço por ter cada um ao meu lado em cada momento triste e feliz.

Por fim agradeço a Universidade Federal de Uberlândia (UFU) e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo aporte financeiro para produção das minhas iniciações científicas, meus artigos e essa monografia.

"It is important to do everything with passion, it embellishes life enormously."

— Lev Landau

Resumo

Neste trabalho, estudaremos a formação de estados emaranhados em dois sistemas distintos: I) três qubits de carga acoplados à reservatórios vibracionais e II) cadeia de spin sob ação de um campo magnético não-homogêneo. Usando teoria de perturbação independente do tempo, foi possível calcular o acoplamento que possibilita a formação de estados emaranhados, onde para os qubits de carga a interação é do tipo elétron-fônon, e para cadeia de spin, a interação se dá via spin-spin entre primeiros vizinhos. Partindo do acoplamento, construímos modelos efetivos capazes de descrever os sistemas físicos, de forma que foi possível verificar as condições energéticas para que o sistema alcance o emaranhamento. Considerando os modelos reais e efetivos, realizamos a evolução temporal numérica e analítica de cada sistema físico, medido quantificadores de emaranhados, e por fim verificamos a formação de estados do tipo $|W\rangle$, para os qubits de carga, e estados de Bell bipartite para a cadeia de spin.

Palavras-chave: Qubits de Carga, Cadeia de Spin, Formação de Estados Emaranhados, Estados $|W\rangle$.

Lista de ilustrações

- Figura 1 – Ilustração do sistema considerado. Três qubits de carga acoplados à dois reservatórios bosônicos. Considerando que não há acoplamento direto entre os qubits, então a interação entre cada um dos qubits é feito através dos modos vibracionais dos reservatórios. Como resultado, os elétrons experimentam uma interação atrativa, que pode levar a formação de um estado altamente emaranhado $|W\rangle$ 21
- Figura 2 – Gráficos das autoenergias do sistema físico contra os parâmetros δ e g , respectivamente nas figuras (a) e (b), onde é negligenciado o termo de interação dado por (3.8). Na figura (a), foi verificado a variação das autoenergias em função de δ , no intervalo $[0, 0.3]$ na escala de ω , cada curva colorida corresponde a uma autoenergia de um dos estados quânticos possíveis no sistema tripartite, enquanto a linha preta indica para qual valor de $\delta = 0.1\omega$ foram feitas as análises numéricas. Já na figura (b), estão representadas as curvas das autoenergias contra g , no intervalo $[0, 0.3]$ em escala de ω , analogamente a figura (a), as curvas coloridas indicam as autoenergias de cada um dos estados do sistema, ao passo que a linha preta identifica o valor $g = 0.1\omega$ usado para análise numéricas posteriores. 25
- Figura 3 – A função espectral do sistema físico em função da energia E e a sua detuning δ . Para pequenos valores de energia temos um conjunto de quatro ramos, correspondendo as expressões 3.9-3.16 com $m = l = 0$. Os dois ramos de baixa intensidade são dados por $E_{000,00} = (3/2)\delta$ e $E_{111,00} = -(3/2)\delta$, enquanto os outros dois ramos de alta intensidade são devidos às energias degeneradas $E_{001,00} = E_{010,00} = E_{100,00} = (1/2)\delta$ e $E_{011,00} = E_{101,00} = E_{110,00} = -(1/2)\delta$. O ponto verde indica a configuração energética utilizada nas simulações para obter um estado $|W\rangle$. 26
- Figura 4 – Esquema de uma cadeia de spin composta por N sítios, com interação de próximos vizinhos via interação de troca J . A cadeia de spin está sob influência de campos magnéticos, em que as pontas da cadeia está sob ação de um campo B , representado pelas setas azuis, e os sítios internos ficam sob um campo genérico B' , representado pelas setas vermelhas. 27

- Figura 5 – Nos painéis (a) e (c) estão as curvas de amplitudes de probabilidades dos estados quânticos $|\bar{0}\rangle$ (linha preta), $|\bar{1}\rangle$ (linha vermelha) e $|\bar{2}\rangle$ (linha cinza), respectivamente o resultado numérico e analítico. Entretanto, nos painéis (b) e (c) são os resultados do cálculo da fidelidade, sendo $\exp[i2\pi/3]$ a curva em preto e $\exp[-i2\pi/3]$ a curva em vermelho, e novamente sendo (b) os cálculos numéricos e (c) os cálculos analíticos. Em todos os painéis estão em função de β , para melhor identificação do momento em que pode surgir estado emaranhado. 31
- Figura 6 – Dinâmica das quantidades E_τ , C_{\min}^2 , fidelidade e concorrência em função de β . Nos painéis (a) e (b) é mostrado E_τ e C_{\min}^2 , respectivamente, nota-se que os picos de cada uma das curvas ocorrem perto de $\beta = 1, 2, 4, 5, 7, 8, \dots$, onde aproximam-se de $4/3$, no painel (a) e $4/9$ no painel (b) (linha vermelha). No painel (c), é mostrado o cálculo da fidelidade para o estado alvo $|\psi(\alpha_{\max})\rangle$ com ambos os sinais da fase, sendo $\exp[i2\pi/3]$ a curva em vermelho e $\exp[-i2\pi/3]$ a curva em preto. No painel (d) é mostrado curvas das concorrências entre os qubits BC (C_{BC} - linha preta) e entre os qubits AC (C_{AC} - linha vermelha). Parâmetros: $g = 0.1\omega$, $\delta = 0.1\omega$ e $t = 0.005\omega$ 32
- Figura 7 – Dinâmica temporal de E_τ , C_{\min}^2 , fidelidade e concorrência contra β , porém com aplicação de defasamento no qubit A . Analogamente a Figura 6 nos painéis (a), (b), (c) e (d) são as curvas para E_τ , C_{\min}^2 , \mathcal{F} e C , respectivamente. Os quantificadores E_τ e C_{\min}^2 são suprimidos por efeitos de decoerência realizado pelo defasamento, o que indica que estados emaranhados tripartites são bastante suscetíveis a processos de defasamento. As curvas de fidelidade apresentam oscilações amortecidas e com apenas um pico próximo ao máximo valor de \mathcal{F} , indica que no início da evolução temporal ocorre uma tendência de formação de estado $|W\rangle$, mas logo não é alcançada. Já as curvas da concorrência sugerem que a aplicação de defasagem gera formação de estado parcialmente emaranhado para um conjunto bipartite de subsistemas. Parâmetros: $g = 0.1\omega$, $\delta = 0.1\omega$, $t = 0.005\omega$ e $\Gamma = 1 \cdot 10^{-4}\omega$ 34
- Figura 8 – Dinâmica da fidelidade com estado alvo bipartite emaranhando nos qubits B e C contra β na presença de defasamento no qubit A , revelando uma certa proteção do sistema contra processos de defasamento em um único qubit. Parâmetros: $g = 0.1\omega$, $\delta = 0.1\omega$, $t = 0.005\omega$ e $\Gamma = 1 \cdot 10^{-4}\omega$. 35
- Figura 9 – Esquema das transições virtuais que podem ocorrer entre os estados $|001\rangle$ e $|100\rangle$. As transições devem ocorrer seguindo a ordem $I \rightarrow II$ ou no sentido inverso $II \rightarrow I$, passam pelo estado $|010\rangle$ 37

Figura 10 – Esquema das transições virtuais que podem ocorrer entre os estados $ 0001\rangle$ e $ 1000\rangle$. As transições devem ocorrer seguindo a ordem $I \rightarrow II \rightarrow III$ ou no sentido inverso $III \rightarrow II \rightarrow I$, passam pelos estados $ 0010\rangle$ e $ 0100\rangle$	38
Figura 11 – Esquema das transições virtuais que podem ocorrer entre os estados $ 00001\rangle$ e $ 10000\rangle$. As transições devem ocorrer seguindo a ordem $I \rightarrow II \rightarrow III \rightarrow IV$ ou no sentido inverso $IV \rightarrow III \rightarrow II \rightarrow I$, passam pelos estados $ 00010\rangle$, $ 00100\rangle$ e $ 01000\rangle$	40
Figura 12 – Gráfico da concorrência máxima contra campo magnético atuante nos sítios internos da cadeia de spin. Para B_{loc} próximo ao valor de B os estados possíveis nos sítios da borda terão energia próxima aos estados possíveis no sítios internos, dessa forma, não serão viáveis a formação de estados emaranhados. Ao passo que para $B_{loc} > B$, será viável a formação de estados de Bell, nos sítios da borda da cadeia de spin. Parâmetros: $J = 1$, $B = 1$ e $\Delta = 1/10$	44
Figura 13 – Gráfico da concorrência contra Ωt , onde os picos ($C \approx 1$) indicam a formação de estados emaranhados. A parametrização da escala de tempo é feita dependendo do tamanho da cadeia, ou seja, dependendo do cálculo de Ω . Parâmetros: $J = 1$, $B = 1$, $\Delta = 1/10$ e $B_{loc} = 8B$	45

Sumário

1	INTRODUÇÃO	12
2	FORMALISMO E TEORIA	14
2.1	Formalismo da Mecânica Quântica	14
2.1.1	Sistema de Dois Níveis	16
2.2	Evolução Temporal	17
2.3	Quantificadores de Emaranhamento	18
3	MODELOS	21
3.1	Qubits Eletrônicos Acoplados à Modos Vibracionais	21
3.2	Cadeia de Spin Imersa em Campos Magnéticos	27
4	FORMAÇÃO DE ESTADOS EMARANHADOS	28
4.1	Qubits Eletrônicos	28
4.1.1	Cálculo do Elemento de Matriz Ω	28
4.1.2	Evolução Temporal Analítica e Numérica	30
4.1.3	Aplicando Dephasing	33
4.1.3.1	Dephasing em um Único Qubit	33
4.2	Cadeia de Spin	35
4.2.1	Cadeia de Spin com 2 sítios	35
4.2.2	Cadeia de Spin com 3 sítios	36
4.2.2.1	Cálculo do Elemento de Matriz Ω	37
4.2.3	Cadeia de Spin com 4 sítios	38
4.2.3.1	Cálculo do Elemento de Matriz Ω	38
4.2.4	Cadeia de Spin com 5 sítios	39
4.2.4.1	Cálculo do Elemento de Matriz Ω	40
4.2.5	Evolução Temporal Analítica e Numérica	41
5	CONCLUSÃO	46
	REFERÊNCIAS	47
	APÊNDICES	51
	APÊNDICE A – REESCREVENDO O OPERADOR UNITÁRIO	52

	APÊNDICE B – TRANSFORMAÇÃO DE LANG-FIRSOV	53
	APÊNDICE C – CÁLCULO DO ACOPLAMENTO EFETIVO	57
C.1	Para três qubits eletrônicos	57
C.2	Para cadeia de spin - Energias E	58
	 ANEXOS	 61
	ANEXO A – CÓDIGOS: RESULTADOS NUMÉRICOS	62
A.1	Qubits Eletrônicos	62
A.2	Cadeia de Spin	63

1 Introdução

Desde da criação do transistor ([BARDEEN; BRATTAIN, 1947](#)) em 1947 houve uma evolução na capacidade e velocidade de processamento de dados. Gordon E. Moore percebeu que a cada 18 meses a quantidade de transistor em um chip dobrava ([Moore, 2006](#)), ou seja, os transistors estavam sendo miniaturizados. Com a chegada do limite da miniaturização, em escalas nanométricas, a física de materiais busca utilizar efeitos quânticos para maximizar e aumentar capacidade de processamento de dados ([ARUTE et al., 2019](#)) desses dispositivos.

Ao longo do últimos anos, a indústria de tecnologia tem ganhado cada vez mais espaço na participação e integração do mercado mundial ([CHENG et al., 2021](#)), gerando grandes investimentos e desenvolvimentos de diversas novas tecnologias. Um dos maiores avanços tecnológicos recentes foi o desenvolvimento de computadores quânticos pelas empresas IBM ([PIVOLUSKA; PLESCH, 2022](#)), Google ([ARUTE et al., 2019](#)) e D-wave ([Johnson et al., 2010](#)). Tais computadores quânticos são baseados em supercondutividade, o que por sua vez, utilizam circuitos supercondutores e junções de Josephson ([GOLDENFELD, 2004](#)), para realizar operações lógicas. Alternativamente à tecnologia supercondutora, temos outras propostas baseadas em sistemas ópticos e semicondutores. A vantagem do uso de semicondutores é o baixo custo, tais como eletrônica molecular ([SOUZA; OLIVEIRA; SANZ, 2019; MENDONÇA; SOUZA, 2021](#)), optoeletrônica ([WETZIG; SCHNEIDER, 2006](#)), cavidades óptica ([XIAO; ZOU; GUO, 2007](#)), spintrônica ([GAO et al., 2021](#)).

Uma área de particular interesse é a nanoeletrônica, que visa o desenvolvimento de transistores que operam com um único elétron, cujo funcionamento dos dispositivos incluem interação com os graus de liberdade nanomecânicos e eletrônicos ([STEELE et al., 2009; LASSAGNE et al., 2009](#)) dos sistema. Devido as baixas correntes elétricas, espera-se um menor consumo de energia e maior velocidade de processamento. Com isso, as interações entre elétrons e modos vibracionais geram uma riqueza de fenômenos significativos, como formação de modos vibracionais coerentes. Também em transistors quânticos baseado em carga é a possível formar de estados emaranhados ([KOCHER; COMMINS, 1967; Hensen et al., 2015; Arndt et al., 1999](#)).

Outro campo de amplo desenvolvimento e investimento trata-se da implementação de qubits usando spin eletrônico ([LOSS; DIVINCENZO, 1998](#)) em diversos materiais, tais como arceneto de gálio ([Petta et al., 2005](#)), grafeno ([TRAUZETTEL et al., 2007](#)) e silício ([PLA et al., 2012](#)). Uma das vantagens da utilização de qubits de spin é de possuírem uma certa proteção contra flutuações térmicas ([ONO; MORI; MORIYAMA, 2019](#)), bem

como a possibilidade do controle do qubit via campos magnéticos (UDDIN et al., 2022; FRICKE et al., 2021). Adicionalmente às implementações supracitadas, os qubits baseados em spin ainda possibilitam formação de estados emaranhados, tornando-os candidatos para uso em computação quântica (YONEDA et al., 2021). A final, o emaranhamento é fundamental para atingir a supremacia quântica (ARUTE et al., 2019), ou seja, um computador quântico pode executar uma tarefa complexa, ao passo, que uma máquina clássica não poderia executar essa mesma tarefa em tempo hábil.

Ao longo do presente trabalho o aspecto central é a formação de estados emaranhados em dois sistemas particulares, qubits de carga e cadeias de spin. Para cada um dos sistemas quânticos, analisamos as condições energéticas necessárias para que os estados emaranhados sejam formados. Também utilizamos teoria de perturbação independente do tempo para verificar transições virtuais de estados, responsáveis por acoplar os estados de maior interesse. Com isso, foi possível construir modelos efetivos dos sistemas físicos e realizar suas evoluções temporais analiticamente. Com auxílio de métodos computacionais, como o pacote "QuTip", realizamos também a evolução temporal dos Hamiltonianos totais, para cada sistema. Finalmente, mensuramos os quantificadores de emaranhamento ao longo do tempo, que indicam a formação de estados maximamente emaranhados.

Para tanto, a monografia foi dividida em capítulos, sendo Introdução 1, Formalismo e Teoria 2, Modelos 3, Formação de Estados Emaranhados 4 e Conclusão 5. O capítulo de Formalismo e Teoria está separado por formalismo da mecânica quântica, evolução temporal e quantificadores de emaranhamento 2.3. Finalmente, no capítulo de Formação de Estados Emaranhados 4, será discutido a evolução temporal e quantificadores de emaranhamento específicos de cada sistema físico, sendo qubits de carga 4.1 e para a cadeia de spin 4.2. Por último, temos a Conclusão 5.

2 Formalismo e Teoria

2.1 Formalismo da Mecânica Quântica

Em mecânica quântica estamos interessados em descrever fenômenos físicos que ocorrem em escalas da ordem de nanômetros [nm], também em descrever partículas e suas interações. Em geral a descrição da mecânica quântica (SAKURAI; NAPOLITANO, 2017) é feita pelo estado $|\psi_n\rangle$ ¹, que descreve o sistema físico, definido no espaço de *kets*. Um estado pode ser decomposta em outros estados ortonormais,

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle, \quad (2.1)$$

onde c_n são coeficientes e $|\psi_n\rangle$ é um estado.

Da álgebra linear sabemos que um espaço dual também é um espaço de Hilbert, isso significa que podemos escrever o estado $\langle\psi_n|$ no espaço de *bras*, ainda sendo válido o princípio de superposição, mas agora no espaço de *bras*, dado pela expressão (2.2),

$$\langle\Psi| = \sum_n c_n^* \langle\psi_n|. \quad (2.2)$$

Com isso é possível definir os produtos interno e externo entre duas funções de onda. Supondo dois estados quaisquer $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$, defimos o produto interno e o produto externo sendo respectivamente as expressões (2.3) e (2.4). Devemos mencionar que o produto externo deve ser tratado como um operador, enquanto o produto interno é apenas um número,

$$\langle\alpha|\beta\rangle = (\langle\alpha|) \cdot (|\beta\rangle), \quad (2.3)$$

$$|\alpha\rangle\langle\beta| = (|\alpha\rangle) \cdot (\langle\beta|). \quad (2.4)$$

O espaço de Hilbert nos permite escrever operadores que atuam sobre os *kets*. Alguns operadores especiais são chamados de operadores observáveis, isto é, são aqueles que possuem um significado físico, por exemplo posição e momento. De forma genérica vamos denotar um operador como sendo X . Uma propriedade fundamental é que para certos operadores X , eles são iguais aos seus operadores adjuntos conjugados X^\dagger , esses operadores são chamados de *hermitianos*.

Podemos atuar operadores observáveis A em funções de onda particulares, chamadas de autoestados $|a\rangle$, e como resultado é obtido um valor real a , chamado de autovalor, multiplicado pelo mesmo autoestado. Essa é a dita equação de autovalor de um operador

¹ Estamos utilizando a notação de Dirac, também chamada de notação *braket*.

(2.5). Os autoestados de um operador hermitiano são as soluções linearmente independentes ², podendo ser interpretadas como sendo a função de estado do sistema físico,

$$A|a\rangle = a|a\rangle. \quad (2.5)$$

Em mecânica quântica, os Operadores Unitários são aqueles que sua inversa coincide com seu adjunto conjugado no espaço de Hilbert, ou seja,

$$U^{-1} = U^\dagger \rightarrow UU^\dagger = \mathbb{1},$$

onde U é um operador unitário qualquer e $\mathbb{1}$ é a matriz identidade. O uso de operadores unitários é geralmente utilizado para realizar evoluções temporais em sistema quânticos, discutido na Seção 2.2.

Usando o princípio de superposição (2.1), podemos descrever um estado em função dos seus autoestados

$$|\psi\rangle = \sum_a c_a |a\rangle,$$

onde $c_a \equiv \langle a|\psi\rangle$ são coeficientes, $|c_a|^2$ podem ser interpretados como sendo amplitudes de probabilidades.

Definido os principais conceitos e formalismo da mecânica quântica, é conveniente definir um operador densidade, a fim de futuramente verificar probabilidades de diferentes subespaços. Então definimos a matriz densidade como sendo (2.6), cuja condição de normalização é $\sum_n w_n = 1$.

$$\rho = \sum_n w_n |\psi^{(n)}\rangle\langle\psi^{(n)}| \quad (2.6)$$

Para falarmos do operador projetor, vamos usar uma analogia em algebra linear, seja $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$ e queremos saber qual é a projeção de \mathbf{r} sobre o eixo \hat{x} , da forma $r_x = \mathbf{r} \cdot \hat{x}$. Em mecânica quântica, a ideia do operador projetor P é analoga a projeção de um vetor sobre um eixo, no entanto, o operador P projeta um estado quântico genérico $|\psi\rangle$ sobre um determinado estado $|\varphi\rangle$, de forma que os estados quânticos são escritos agora em função de $|\varphi\rangle$. Então, seja o operador projetor $P = |\varphi\rangle\langle\varphi|$, a atuamos sobre $|\psi\rangle$ e obtemos

$$P|\psi\rangle = |\varphi\rangle\langle\varphi| \cdot |\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle |\varphi\rangle.$$

Em mecânica quântica, podemos definir os operadores e as funções onda em espaços de Hilbert, no entanto, não existe necessidade desses subespaços serem iguais por definição. Em um sistema físico real teremos que todos os subsistemas interagem, e matematicamente, os subespaços de Hilbert também interagem. Daí podemos usar produtos

² Quando realizamos o produto interno de dois autoestados linearmente independentes obtemos uma delta de Dirac, o que implica que são ortogonais, $\langle a'|a''\rangle = \delta_{a'a''}$.

de Kronecker a fim de descrever a interação entre cada subespaço (HENDERSON; PUKELSHEIM; SEARLE, 1983). A operação matemática é válida para qualquer sistema algébrico, assim considerando as matrizes P e Q , definidas por

$$P = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & \cdots & p_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{m1} & p_{m2} & \cdots & p_{mn} \end{pmatrix} \text{ e } Q = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & \cdots & q_{1n'} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{m'1} & q_{m'2} & \cdots & q_{m'n'} \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

onde as dimensões de P e Q podem ser diferentes, ou seja, $\dim(P) \neq \dim(Q)$. O produto de Kronecker é definido por

$$P \otimes Q = \begin{pmatrix} p_{11} \cdot Q & p_{12} \cdot Q & \cdots & p_{1n} \cdot Q \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{m1} \cdot Q & p_{m2} \cdot Q & \cdots & p_{mn} \cdot Q \end{pmatrix}, \quad (2.8)$$

no qual, cada elemento de P multiplica a matriz Q , resultando em uma matriz de dimensão maior que as de P e Q , cujo valor é dado por $\dim(P \otimes Q) = \dim(P) \cdot \dim(Q)$.

Em geral, problemas de mecânica quântica são complexos e não podem ser tratados analiticamente, daí vem a necessidade de construir modelos aproximativos capazes de descrever sistemas reais, como o uso de teoria de perturbação. A teoria de perturbação originalmente foi utilizada para verificar e demonstrar quebras de degenerescência em um átomo de hidrogênio, quando considerado correções, relativísticas da velocidade do elétron, interação spin-órbita, efeito Stark e efeito Zeeman (SAKURAI; NAPOLITANO, 2017; GRIFFITHS, 2004).

Atualmente, o uso da teoria de perturbação tem sido utilizado para verificar transições virtuais de estado, como mostrado por Sanz, Oliveira e Souza (SOUZA; OLIVEIRA; SANZ, 2019), e também por Mendonça e Souza (MENDONÇA; SOUZA, 2021). Tais transições são fundamentais para entender acoplamentos indiretos entre determinados estados de um sistema quântico como em qubits de carga e cadeias de spin.

2.1.1 Sistema de Dois Níveis

Em Mecânica Quântica, os *Sistemas de Dois Níveis* são bem descritos na literatura, por serem didáticos para uma introdução a disciplina e ainda possui diversas aplicabilidades. Um exemplo clássico dessa configuração física é o experimento de Stern-Gerlach (SAKURAI; NAPOLITANO, 2017). O experimento consiste em um forno, onde são aquecidos átomos geralmente de prata. O forno ainda possui um orifício por onde os átomos aquecidos podem sair do forno, formando um feixe de átomos. Esse feixe é colimado e atravessa uma região com campo magnético inhomogêneo, e ao final dessa região é colocado um anteparo, a fim de obter a distribuição das trajetórias dos átomos que sofreram a influência do campo magnético.

O átomo de prata é constituído por quarenta e sete prótons, e quarenta e sete elétrons, desprezando o spin-nuclear de cada átomo, o momento magnético resultante é devido ao quadragésimo sétimo (47°) elétron, ou seja, o momento magnético resultante é igual ao momento magnético de spin do 47° elétron, devido ao seu desemparelhamento com outro elétron. No entanto, os átomos ao saírem do forno não tem orientação preferencial para o spin do átomo, haja vista que estão aquecidos. Então, classicamente a distribuição dos átomos no anteparo deveria seguir uma distribuição relativamente uniforme entre um limite máximo e mínimo, porém, não foi observado esse resultado.

O resultado obtido foi que a distribuição dos átomos se dá em duas regiões apenas, uma próxima do valor máximo (cima) e outra próxima do valor mínimo (abaixo)³. O que implica que o experimento de Stern-Gerlach divide o feixe de átomos em duas componentes, ou seja, os momentos magnéticos se alinham com o campo inhomogêneo, e a interação com o campo produz duas trajetórias distintas. A consequência desse experimento é que esses átomos com momentos magnéticos bem definidos podem ter duas orientações para cima (*up*) ou para baixo (*down*), Nota de Rodapé 3. Por se tratarem de duas orientações é um sistema de dois níveis.

A relevância dos sistemas de dois níveis são grandes e amplamente discutidos na literatura (LUCATTO et al., 2019; SOUZA; OLIVEIRA; SANZ, 2019; MENDONÇA; SOUZA, 2021; VANDERSYPEN; ERIKSSON, 2019; BLUHM et al., 2011), além de que no Capítulo 3, nos dois modelos físicos propostos são compostos por sistemas de dois níveis, sendo na Seção 3.1 cada qubit é composto por dois pontos quânticos e a localização do elétron em um ou em outro ponto quântico indica se o estado é $|0\rangle$ ou $|1\rangle$ (*up* ou *down*); enquanto na Seção 3.2 cada sítio pode ser considerado, por analogia, um átomo de prata, como no experimento Stern-Gerlach, em que o momento magnético é devido um elétron, cujo estado pode ser $|0\rangle$ ou $|1\rangle$ (*up* ou *down*).

2.2 Evolução Temporal

Os sistemas quânticos podem ser descritos usando a equação de Schrödinger dependente do tempo (GRIFFITHS, 2004),

$$H|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle, \quad (2.9)$$

onde H é o Hamiltoniano, $|\psi(t)\rangle$ é o estado quântico no tempo t , i é o número complexo, \hbar é a constante de Planck ($\hbar = 1$). Dado um estado inicial $|\psi(t_0)\rangle$, a evolução temporal

³ O termo para cima e para baixo é relativo, a orientação dos campos magnéticos podem ser feitas em qualquer direção, que ainda sim os resultados serão análogos. Por exemplo se considerarmos os campos magnéticos rotacionados de $\pi/2$, a distribuição dos átomos serão duas manchas à direita e à esquerda.

pode ser descrita por meio de operadores unitários de forma,

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (2.10)$$

Considerando o Hamiltoniano independente do tempo H , podemos obter o operador unitário de evolução temporal $U(t)$ em função do Hamiltoniano H , partindo da equação de Schrödinger (2.9),

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t) = H U(t),$$

obtemos assim que o operador unitário seja da forma

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar}. \quad (2.11)$$

Usando a definição do operador de evolução temporal unitário (2.11), podemos reescrever a expressão (2.10) na base de autovalores λ_i e autoestados $|\lambda_i\rangle$ ⁴, obtendo

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-iHt/\hbar} \left[\sum_i |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i| \right] |\psi(t_0)\rangle \\ |\psi(t)\rangle &= \sum_i c_i e^{-i\lambda_i t/\hbar} |\lambda_i\rangle, \end{aligned} \quad (2.12)$$

onde $c_i = \langle \lambda_i | \psi(t_0) \rangle$. Nota-se que agora a exponencial não fica em função de um operador H , mas sim em função de autovalores reais λ_i . Vale mencionar que o resultado obtido está melhor descrito no Apêndice A.

2.3 Quantificadores de Emaranhamento

Se considerarmos um sistema de dois níveis bipartites, e fazendo uso da representação na base computacional o conjunto de estados possíveis são $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$. Seja os estados $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$, representados pelas expressões (2.13) e (2.14), respectivamente,

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|01\rangle + |10\rangle], \quad (2.13)$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|00\rangle + |01\rangle]. \quad (2.14)$$

Então, nota-se que o estado $|\psi_1\rangle$ não pode ser escrito, separando os estados em seus subespaços, ao passo que o estado $|\psi_2\rangle$ pode ser escrito dessa forma, dado por

$$|\psi_2\rangle = |\phi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |0^{(1)}\rangle \otimes (|0^{(2)}\rangle + |1^{(2)}\rangle),$$

⁴ Vamos usar a propriedade dos autoestados $\sum_i |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i| = \mathbb{1}$.

ou seja, o estado $|\psi_1\rangle$ pode ser um estado emaranhado, enquanto o estado $|\psi_2\rangle$ não pode ser. Podemos encontrar os principais estados emaranhados para sistemas bipartidos e tripartidos, chamados de estados de Bell.

$$|\Psi\rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}[|00\rangle + e^{-i\phi}|11\rangle] \\ \frac{1}{\sqrt{2}}[|01\rangle + e^{-i\phi}|10\rangle] \end{cases}$$

$$|\Psi\rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}[|000\rangle + e^{-i\phi}|111\rangle] & ; \text{Estado } |GHZ\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{3}}[|001\rangle + e^{-i\phi_1}|010\rangle + e^{-i\phi_2}|100\rangle] & ; \text{Estado } |W\rangle \end{cases}$$

No entanto, é fundamental ter ferramentas capazes de medir e quantificar o emaranhamento quântico.

Nessa perspectiva, no artigo de W. Dür, G. Vidal, and J. I. Cirac ([DÜR; VIDAL; CIRAC, 2000](#)), existe uma vasta discussão sobre os quantificadores desse fenômeno. Também pode ser utilizado medidas de distâncias entre os estados quânticos do sistema físico e estados alvo, chamado de medida de Fidelidade. A fidelidade é calculada a partir de matrizes densidades. Seja um estado quântico alvo $|\phi_{tar}\rangle$ e um estado quântico qualquer para o sistema físico $|\psi(t)\rangle$, então podemos construir as matrizes densidades referentes a cada um desses estados, conforme as equações (2.15),

$$\sigma_{tar} = |\phi_{tar}\rangle\langle\phi_{tar}| \quad \text{e} \quad \rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|. \quad (2.15)$$

De posse das matrizes densidades do estado alvo e do estado quântico do sistema físico, a fidelidade é calculada como

$$\mathcal{F} = \text{Tr}\{\sigma_{tar}\rho(t)\}, \quad (2.16)$$

onde $\text{Tr}\{X\}$ é o traço sob o operador X . Para estados normalizados a fidelidade é definida como sendo um número real no intervalo fechado $[0, 1]$, em que se $\mathcal{F} = 1$ o estado quântico de $|\psi(t)\rangle$ coincide exatamente com o estado quântico de $|\phi_{tar}\rangle$, enquanto se $\mathcal{F} = 0$ o estado $|\psi(t)\rangle$ é ortogonal do estado $|\phi_{tar}\rangle$.

Contudo, apesar da fidelidade ser um bom indicador da formação de estados emaranhados, essa função não é um quantificador de emaranhamento, ao passo que a medida da concorrência entre os qubits é um quantificador de emaranhamento. A concorrência $C(\rho)$ é uma medida de correlação entre os qubits, onde se $C(\rho) = 0$ é dito que a descrição de estados quânticos dos qubits são separáveis, enquanto se $C(\rho) = 1$ é dito que os estados quânticos estão maximamente emaranhados. A definição da concorrência foi feita por William Wootters ([WOOTTERS, 1998](#)) dado pela expressão (2.17), posteriormente foi definido uma concorrência generalizada para sistemas multipartidos (2.18),

$$C(\rho) = \max\{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\} \quad (2.17)$$

$$C_{\mathcal{M}}(\rho) = \sqrt{2(1 - \text{Tr}\rho_{\mathcal{M}}^2)}, \quad (2.18)$$

onde na equação (2.17) λ_i as raízes quadradas dos autovalores, em ordem decrescente, da matriz hermitiana $R = \sqrt{\sqrt{\rho}\tilde{\rho}\sqrt{\rho}}$ e $\tilde{\rho} = (\sigma_y \otimes \sigma_y)\rho^*(\sigma_y \otimes \sigma_y)$. Já na equação (2.18), $\rho_{\mathcal{M}}$ é a matriz de densidade reduzida na bipartição \mathcal{M} .

O uso da concorrência é suficiente para determinar o emaranhamento em sistema bipartidos ou para sistemas multipartido em que foi feito o traço parcial sobre os subsistemas. Já para sistemas maiores do que bipartidos é necessário utilizar outros quantificadores de emaranhamento. A fim de demonstrar alguns quantificadores, vamos supor uma configuração tripartite, formado por três subsistemas A , B e C . É possível realizar o traço parcial em um dos subsistemas e calcular a concorrência entre os dois qubits restantes, ou seja, C_{AB} é a concorrência entre os qubits A e B para o operador densidade reduzido $\rho_{AB} = \text{Tr}_C\{\rho\}$. As permutações do cálculo da concorrência entre os subsistemas são todas permitidas, obtendo assim C_{AB} , C_{AC} e C_{BC} . A partir desses resultados podemos calcular o próximo quantificador

$$C_{\min}^2 \equiv \min(C_{AB}^2, C_{AC}^2, C_{BC}^2), \quad (2.19)$$

o quantificador C_{\min}^2 possui um limite máximo que pode ser atingido, no valor de $4/9$, e ocorre apenas para um estado quântico emaranhado particular, o estado $|W\rangle$. Qualquer outro estado quântico o valor de $C_{\min}^2 < 4/9$.

Na mesma respectiva do cálculo de C_{\min}^2 , podemos definir outro quantificador de emaranhamento para sistemas tripartites usando a concorrência de dois qubits partindo do traço do terceiro qubit

$$E_{\tau} = C_{AB}^2 + C_{AC}^2 + C_{BC}^2, \quad (2.20)$$

os valores de E_{τ} também possuem um limite máximo, sendo $E_{\tau} = 4/3$, e similarmente ao quantificador C_{\min}^2 , esse valor é atingido apenas quando ocorre a formação de estado $|W\rangle$, isto é, dado um sistema físico os quantificadores das expressões (2.19) e (2.20), e for encontrado seus valores máximo, significa que o sistema se encontra em um estado emaranhado do tipo $|W\rangle$.

3 Modelos

Foi proposto o estudo de dois modelos físicos distintos, amplamente discutidos na literatura, o primeiro são elétrons confinados em pontos quânticos interagentes formando qubits (FEDICHKIN; YANCHENKO; VALIEV, 2000; VOLK et al., 2019), estes elétrons por sua vez interagem com modos vibracionais do ambiente que os cerca. Já o segundo, é uma cadeia de spin com interações entre primeiros vizinhos (PARKINSON; FARNELL, 2010) imersa em um campo magnético que podem variar sítio a sítio.

3.1 Qubits Eletrônicos Acoplados à Modos Vibracionais

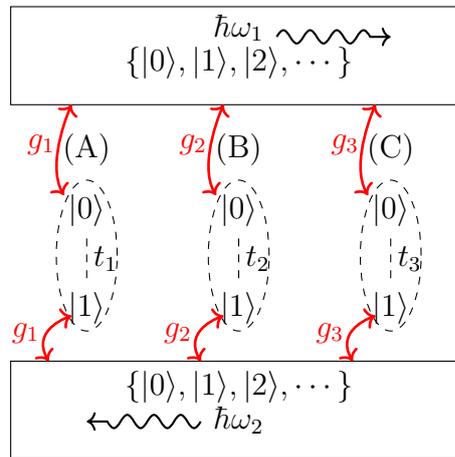


Figura 1 – Ilustração do sistema considerado. Três qubits de carga acoplados à dois reservatórios bosônicos. Considerando que não há acoplamento direto entre os qubits, então a interação entre cada um dos qubits é feita através dos modos vibracionais dos reservatórios. Como resultado, os elétrons experimentam uma interação atrativa, que pode levar a formação de um estado altamente emaranhado $|W\rangle$.

Vamos considerar um sistema multipartido composto por cinco subsistemas $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{qb1} + \mathcal{H}_{qb2} + \mathcal{H}_{qb3} + \mathcal{H}_v + \mathcal{H}_v$, em que os subsistemas \mathcal{H}_{qbj} correspondem aos qubits, intitulados como qubits A, B e C , enquanto \mathcal{H}_v são referentes aos subespaços dos modos vibracionais, conforme Figura 1.

Qubits de carga são geralmente formados por dois pontos quânticos intercomunicados capazes de aprisionar elétrons, a partir disso, podemos definir o Hamiltoniano que descreve cada um dos qubits,

$$H_{qubits} = \bigoplus_{n=1}^3 \left[\frac{\delta_n}{2} \sigma_z^{(n)} + t_n \sigma_x^{(n)} \right], \quad (3.1)$$

onde δ_n é dessintonia eletrônica entre os níveis eletrônicos, t_n é tunelamento de carga intra-qubit, σ_z e σ_x são matrizes de Pauli. A definição de H_{qubits} é feita por meio de soma de Kronecker, em que dita $\bigoplus_{n=1}^3 z_n Z^{(n)} = z_1 Z \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes z_2 Z \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes z_3 Z$.

Por outro lado, para descrever o Hamiltoniano dos reservatórios, podemos utilizar os graus de liberdade dos modos vibracionais do sistema,

$$H_v = \omega_1 B^\dagger B \otimes \mathbb{1}_v + \omega_2 \mathbb{1}_v \otimes B^\dagger B, \quad (3.2)$$

onde ω_i é a energia do i -ésimo modo vibracional, B^\dagger e B são respectivamente operadores de criação e aniquilação de excitações vibracionais nos reservatórios, e ainda $\mathbb{1}_v$ corresponde a matriz identidade no subespaço vibracional. Feita a descrição dos Hamiltonianos separados, é necessário escrever a interação dos três qubits com os reservatórios, para tanto podemos utilizar projetores a fim de descrever a interação eletromecânica, como sendo

$$\begin{aligned} V = & \bigoplus_{n=1}^3 [g_n P_0^{(n)}] \otimes [(B^\dagger + B) \otimes \mathbb{1}_v] \\ & + \bigoplus_{n=1}^3 [g_n P_1^{(n)}] \otimes [\mathbb{1}_v \otimes (B^\dagger + B)], \end{aligned} \quad (3.3)$$

onde os projetores são da forma $P_i = |i\rangle\langle i|$ e g_n é o parâmetro de acoplamento entre os graus de liberdade eletrônicos dos qubits com os graus de liberdade vibracionais dos reservatórios. A descrição feita dessa forma nos permite interpretar a ocupação do elétron em um dos pontos quânticos no qubit e determinar quais modos vibracionais irão interagir com esse elétron, ou seja, a partir da Figura 1. Quando o elétron ocupar o ponto quântico da parte de cima, o qubit se encontra com estado $|0\rangle$ e interage com modos vibracionais de energia ω_1 , ao passo que se o elétron ocupar o ponto quântico da parte de baixo do qubit, o estado do qubit será $|1\rangle$ e interage com os modos vibracionais de energia ω_2 . Dessa forma, a comunicação entre cada um dos qubits é realizada mediante apenas via interações com os modos vibracionais dos reservatórios.

No estudo de acoplamentos eletromecânicos (SOUZA; OLIVEIRA; SANZ, 2019) é conveniente realizar a transformação canônica de Lang-Firsov (MAHAN, 2000), e para a realização dessa transformação é fundamental definirmos o operador S que fará a transformação canônica, conforme expressão (3.4)

$$\begin{aligned} S = & \bigoplus_{n=1}^3 [\lambda_n P_0^{(n)}] \otimes [(B^\dagger - B) \otimes \mathbb{1}_v] \\ & + \bigoplus_{n=1}^3 [\lambda_n P_1^{(n)}] \otimes [\mathbb{1}_v \otimes (B^\dagger - B)], \end{aligned} \quad (3.4)$$

em que $\lambda_n = g_n/\omega_n$. A transformação canônica é feita por meio da expressão (3.5),

$$\bar{H} = e^S H e^{-S}, \quad (3.5)$$

onde \bar{H} é o Hamiltoniano transformado. O detalhamento das contas encontra-se no Apêndice B.

A partir da discussão feita no apêndice já referido, podemos escrever o novo Hamiltoniano dos qubits, dado pela expressão (3.6), onde $\mathbb{1}^{\otimes 3} = \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}$.

$$\begin{aligned}
\bar{H}_{\text{qubits}} &= \bigoplus_{n=1}^3 \frac{\delta_n}{2} \sigma_z^{(n)} - \frac{1}{\omega} (g_1^2 + g_2^2 + g_3^2) \\
&- \frac{g_1 g_2}{\omega} (\sigma_z \otimes \sigma_z \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1}^{\otimes 3}) \\
&- \frac{g_1 g_3}{\omega} (\sigma_z \otimes \mathbb{1} \otimes \sigma_z + \mathbb{1}^{\otimes 3}) \\
&- \frac{g_2 g_3}{\omega} (\mathbb{1} \otimes \sigma_z \otimes \sigma_z + \mathbb{1}^{\otimes 3}).
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Ao passo que o Hamiltoniano transformado que descreve os qubits é modificado, o Hamiltoniano que descreve os reservatórios de modos vibracionais é inalterada, com a ressalva de que as contribuições que afetam apenas os qubits foram realocadas para 3.6.

$$\bar{H}_v = \omega_1 B^\dagger B \otimes \mathbb{1}_v + \omega_2 \mathbb{1}_v \otimes B^\dagger B \tag{3.7}$$

A transformação de Lang-Firsov é utilizada também para identificar as interações efetivas que ocorrem entre os qubits e os modos vibracionais do reservatório, nesse caso, a interação efetiva da configuração física ocorre via tunelamento t_n , então podemos reescrever a equação (3.3), como

$$\begin{aligned}
\bar{V} &= t_1 (\sigma_+ \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes D(\lambda_1) \otimes D(-\lambda_1) + h.c.) + \\
&t_2 (\mathbb{1} \otimes \sigma_+ \otimes \mathbb{1} \otimes D(\lambda_2) \otimes D(-\lambda_2) + h.c.) + \\
&t_3 (\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \sigma_+ \otimes D(\lambda_3) \otimes D(-\lambda_3) + h.c.),
\end{aligned} \tag{3.8}$$

onde $\sigma_+ = |0\rangle\langle 1|$, $\sigma_- = |1\rangle\langle 0|$ e $D(\pm\lambda_i) = \exp\{\pm\lambda_i(B^\dagger - B)\}$ é o operador deslocamento.

Outra vantagem em realizar a transformação de Lang-Firsov trata-se de que podemos escrever facilmente as autoenergias dos estados quânticos do sistema, negligenciando o tunelamento do sistema, ou seja, $\bar{V} = 0$. A constante de energia $-6g^2/\omega$ foi omitida em todas as energias. Os índices de cada energia correspondem aos estados dos qubits $|ijk\rangle$, enquanto os índices m e l são referentes aos modos vibracionais dos reservatórios $|ml\rangle$. Para $\omega_1 = \omega_2$, temos

$$E_{000,ml} = \frac{1}{2}(\delta_1 + \delta_2 + \delta_3) - \frac{3g^2}{\omega} + (m+l)\omega, \tag{3.9}$$

e

$$E_{111,ml} = -\frac{1}{2}(\delta_1 + \delta_2 + \delta_3) - \frac{3g^2}{\omega} + (m+l)\omega. \tag{3.10}$$

As energias intermediárias superiores são

$$E_{001,ml} = \frac{1}{2}(+\delta_1 + \delta_2 - \delta_3) + \frac{g^2}{\omega} + (m+l)\omega, \quad (3.11)$$

$$E_{010,ml} = \frac{1}{2}(+\delta_1 - \delta_2 + \delta_3) + \frac{g^2}{\omega} + (m+l)\omega, \quad (3.12)$$

$$E_{100,ml} = \frac{1}{2}(-\delta_1 + \delta_2 + \delta_3) + \frac{g^2}{\omega} + (m+l)\omega, \quad (3.13)$$

enquanto as energias inferiores são

$$E_{011,ml} = \frac{1}{2}(+\delta_1 - \delta_2 - \delta_3) + \frac{g^2}{\omega} + (m+l)\omega, \quad (3.14)$$

$$E_{101,ml} = \frac{1}{2}(-\delta_1 + \delta_2 - \delta_3) + \frac{g^2}{\omega} + (m+l)\omega, \quad (3.15)$$

$$E_{110,ml} = \frac{1}{2}(-\delta_1 - \delta_2 + \delta_3) + \frac{g^2}{\omega} + (m+l)\omega. \quad (3.16)$$

Avaliando as energias do sistema físico podemos verificar as condições de degenerescência dos estados e assim definir as condições necessárias para a formação de estados emaranhados. O caso que salta aos olhos é para $\delta_1 = \delta_2 = \delta_3 = \delta$, onde temos dois conjuntos de estados degenerados. O primeiro para os estados $|001\rangle$, $|010\rangle$ e $|100\rangle$ com energia $E = \frac{\delta}{2} + \frac{g^2}{\omega} + (m+l)\omega$. E o segundo conjunto com energia $E = -\frac{\delta}{2} + \frac{g^2}{\omega} + (m+l)\omega$, correpondente aos estados $|011\rangle$, $|101\rangle$ e $|110\rangle$. Dessa forma, esses estados tem condição necessária para formação de estados emaranhados do tipo $|W\rangle$, fundamental em computação quântica.

A função espectral fornece informações sobre a natureza dos estados eletrônicos permitidos, assim, vamos partir da função de Green retardada, dada por

$$G_{nn'}^r(t-t') = -i\theta(t-t') \langle \phi_n | e^{-iH(t-t')} | \phi_{n'} \rangle, \quad (3.17)$$

onde $|\phi_n\rangle$ são autoestados de H , ou seja $H|\phi_n\rangle = \varepsilon_n|\phi_n\rangle$. Podemos então, reescrever a expressão 3.17 com termo dependente de uma delta de Kronecker, sendo

$$G_{nn'}^r(t-t') = -i\theta(t-t')\delta_{nn'}e^{-i\varepsilon_n(t-t')}. \quad (3.18)$$

Aplicando uma transformada de Fourier na nova expressão da função de Green, termos

$$\mathcal{G}_{nn'}^r(\epsilon) = \frac{\delta_{nn'}}{\epsilon - \varepsilon_n + i\eta}, \quad (3.19)$$

onde $\eta \rightarrow 0^+$. A partir da equação da função de Green já transformada, podemos usar a definição da função espectral $A_n(\epsilon) = -2\text{Im}\{\mathcal{G}_{nn'}^r(\epsilon)\}$, sendo da forma

$$\begin{aligned} A_n(\epsilon) &= -2\text{Im}\left\{\frac{\delta_{nn'}}{(\epsilon - \varepsilon_n) + i\eta}\right\} \\ &= -2\text{Im}\left\{\frac{\delta_{nn'}}{(\epsilon - \varepsilon_n) + i\eta} \cdot \frac{(\epsilon - \varepsilon_n) - i\eta}{(\epsilon - \varepsilon_n) - i\eta}\right\} \\ &= -2\text{Im}\left\{\frac{\delta_{nn'}((\epsilon - \varepsilon_n) - i\eta)}{(\epsilon - \varepsilon_n)^2 + \eta^2}\right\} \\ A_n(\epsilon) &= \frac{2\eta}{(\epsilon - \varepsilon_n)^2 + \eta^2}, \end{aligned} \quad (3.20)$$

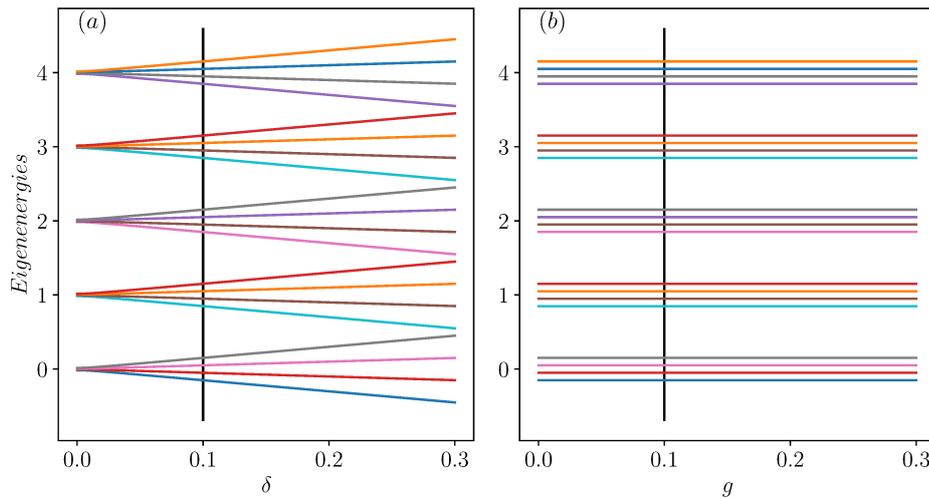


Figura 2 – Gráficos das autoenergias do sistema físico contra os parâmetros δ e g , respectivamente nas figuras (a) e (b), onde é negligenciado o termo de interação dado por (3.8). Na figura (a), foi verificada a variação das autoenergias em função de δ , no intervalo $[0, 0.3]$ na escala de ω , cada curva colorida corresponde a uma autoenergia de um dos estados quânticos possíveis no sistema tripartite, enquanto a linha preta indica para qual valor de $\delta = 0.1\omega$ foram feitas as análises numéricas. Já na figura (b), estão representadas as curvas das autoenergias contra g , no intervalo $[0, 0.3]$ em escala de ω , analogamente a figura (a), as curvas coloridas indicam as autoenergias de cada um dos estados do sistema, ao passo que a linha preta identifica o valor $g = 0.1\omega$ usado para análise numéricas posteriores.

onde $A(\epsilon) = \sum_n A_n(\epsilon)$. Calculando a função espectral podemos construir a Figura 3, onde variamos o parâmetro δ e analisamos a natureza dos estados para cada energia.

Do ponto de vista experimental o sistema físico proposto pode descrever qubits eletrônicos em nanotubos de carbono (CNT), como na proposta teórica (SOUZA; OLIVEIRA; SANZ, 2019) onde os resultados indicam que dois qubits em CNT podem formar estados emaranhados, como discutido na Seção 2.3. Nessa perspectiva, os modos vibracionais podem assumir valores de aproximadamente $\omega = 20\text{meV}$, em concordância com a literatura (LEROY et al., 2004), onde são discutidos resultados experimentais dos modos vibracionais dos CNTs. Por outro lado, o termo de hopping intra-qubit dos elétrons são da ordem de $t = 0.1\text{meV}$, encontrados no experimento de pontos quânticos paralelos em CNT (GOSS et al., 2013). Analogamente podemos ajustar o parâmetro de acoplamento elétron-fônon da ordem $g = 0.1\omega$, conforme Khivrich, Clerk e Ilani (KHIVRICH; CLERK; ILANI, 2019). A discussão do restante dos parâmetros físicos utilizados advém da Figura 3.

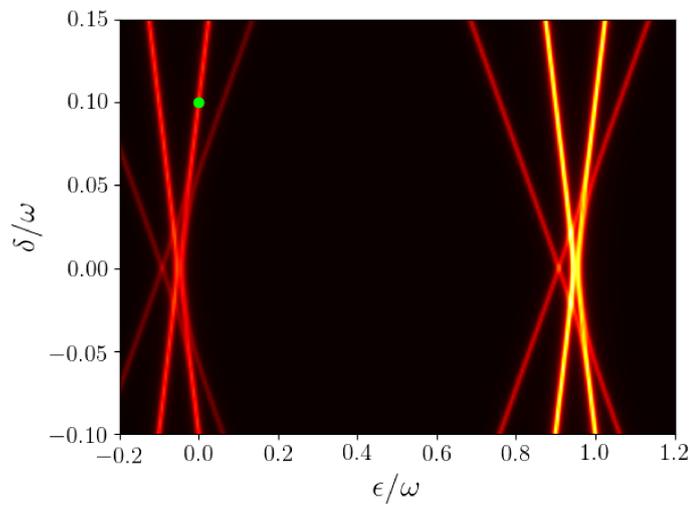


Figura 3 – A função espectral do sistema físico em função da energia E e a sua detuning δ . Para pequenos valores de energia temos um conjunto de quatro ramos, correspondendo as expressões 3.9-3.16 com $m = l = 0$. Os dois ramos de baixa intensidade são dados por $E_{000,00} = (3/2)\delta$ e $E_{111,00} = -(3/2)\delta$, enquanto os outros dois ramos de alta intensidade são devidos às energias degeneradas $E_{001,00} = E_{010,00} = E_{100,00} = (1/2)\delta$ e $E_{011,00} = E_{101,00} = E_{110,00} = -(1/2)\delta$. O ponto verde indica a configuração energética utilizada nas simulações para obter um estado $|W\rangle$.

3.2 Cadeia de Spin Imersa em Campos Magnéticos

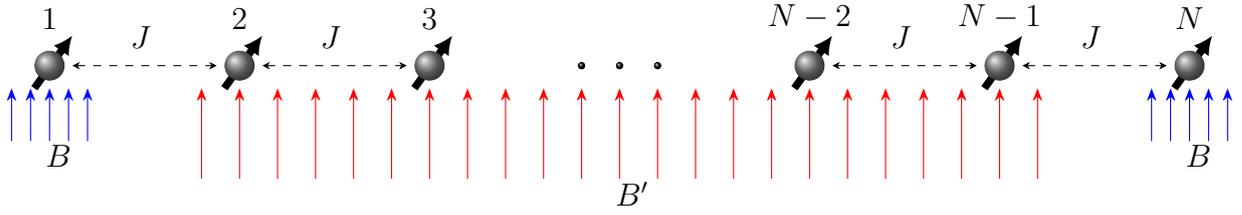


Figura 4 – Esquema de uma cadeia de spin composta por N sítios, com interação de próximos vizinhos via interação de troca J . A cadeia de spin está sob influência de campos magnéticos, em que as pontas da cadeia está sob ação de um campo B , representado pelas setas azuis, e os sítios internos ficam sob um campo genérico B' , representado pelas setas vermelhas.

Em geral, podemos descrever uma cadeia de spin usando uma generalização do modelo de Heisenberg (REZENDE, 2020) que descreve a orientação dos spins em função de operadores de spin S^k . Conforme a equação (3.21), cada sítio possui apesar um spin,

$$\begin{aligned}
 H = & -J \sum_{j=0}^{N-1} (S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + \Delta S_j^z S_{j+1}^z) \\
 & + J \sum_{j=1}^{N-1} B'_j S_j^z + JB[S_0^z + S_N^z].
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

Cada um dos sítios enxergam apenas os sítios vizinhos mais próximos, ou seja, está sendo considerada apenas interações de próximos vizinhos, negligenciando interações de mais altas ordens. A interação spin-spin é mediada via interação de troca J , B é proporcional a um campo magnético estacionário atuante nos sítios da borada da cadeia, enquanto $B'_{(j)}$ é proporcional ao campo magnético que atua sobre o j -ésimo sítio para $j = 1, 2, \dots, N - 1$.

A Figura 4 mostra o esquema do sistema físico, uma cadeia de spin com sítios N , todos influenciados por campos magnéticos. Em particular sítios 1 e N interagem com o campo magnético B , enquanto sites 2 a $N - 1$ interagem com $B' = B_{\text{loc}}$. Para realização das simulações dos sistemas quânticos, utilizamos $B = 1$, $\Delta = 1/10$ e $B_{\text{loc}} = 8B$.

Na Seção 4.2, serão abordados as condições necessárias para a formação de estados emaranhados, evolução temporal do sistema quântico, considerando cadeias de spin com 2, 3, 4 e 5 sítios, e ainda comparar o modelo com propostas experimentais sobre o tempo de vida do sistema quântico e sua viabilidade na construção de qubits.

4 Formação de Estados Emaranhados

Partindo dos modelos físicos discutidos nas Seções 3.1 e 3.2, é possível realizar evoluções temporais sob determinadas condições e assim estabelecer se a formação de estados maximamente emaranhados é possível. Nas Seções 4.1 e 4.2 são discutidos os resultados das evoluções temporais analíticas e numéricas para o sistema de qubits eletrônicos e para o sistema de cadeia de spin, respectivamente. Em cada Seção desse Capítulo haverá três Subseções, dispostas por 1) *Cálculo do Elemento de Matriz Ω* - Subseções 4.1.1, 4.2.2.1, 4.2.3.1 e 4.2.4.1; 2) *Evolução Temporal Analítica e Numérica* - Subseções 4.1.2 e 4.2.5; e 3) *Aplicando Dephasing* - Subseções 4.1.3.

4.1 Qubits Eletrônicos

4.1.1 Cálculo do Elemento de Matriz Ω

Como discutido inicialmente na Seção 2.1, a teoria de perturbação é adequada para descrever sistemas físicos com alta dimensionalidade, como no modelo proposto na Seção 3.1, em que os operadores de criação (aniquilação) B^\dagger (B) dos modos vibracionais têm dimensão infinita, tornando impossível tratamento computacionais exato. Dessa forma, o uso da teoria de perturbação é conveniente.

Para verificações de ocorrência de formação de estados maximamente emaranhados é fundamental delimitarmos os estados de interesse que podem formar um tipo de estado $|W\rangle$, na Seção 3.1 foi discutido a condição energética de degenerescência para os grupos estados $|001\rangle$, $|010\rangle$ e $|100\rangle$ ou $|011\rangle$, $|110\rangle$ e $|101\rangle$ a fim de formar de estados $|W\rangle$. A fim de simplificação, vamos demonstrar todas as contas para um único grupo de estados, sendo análogos para o outro grupo. Assim é conveniente definir um operador projetor $P = (|001\rangle\langle 001| + |010\rangle\langle 010| + |100\rangle\langle 100|) \otimes |00\rangle\langle 00|$, onde selecionamos um grupo de estados com possibilidades de formarem um estado emaranhado e ainda, realizamos um truncamento de base dos modos vibracionais ¹.

A fim de encontrar o acoplamento efetivo entre os estados do subespaço P , nós aplicamos a teoria de perturbação de segunda ordem. Nesse caso, o uso de ordens maiores que dois é desnecessária, pois as suas contribuições são baixas para o cálculo do acoplamento efetivo. Tomando os estados $|100\rangle$ e $|010\rangle$, podemos calcular o elemento de matriz $\Omega_{100,010}$, ocultando os estados dos reservatórios na representação de cada estado quântico,

¹ O truncamento de base foi feito para o primeiro modo vibracional de cada reservatório $\{|00\rangle\}$, isso se deve que a partir do segundo $\{|01\rangle$ ou $|10\rangle\}$ a energia necessária para serem acoplados com os elétrons dos qubits é relativamente grande, se comparado aos primeiros modos vibracionais.

$$\Omega_{100,010} = - \sum_{i,j,k} \frac{\langle 100 | \bar{V} | ijk \rangle \langle ijk | \bar{V} | 010 \rangle}{E_{ijk,00} - E_{100,00}}. \quad (4.1)$$

Da equação 4.1 os índices i , j e k correspondem aos outros estados quânticos permitidos para o sistema físico composto por três qubits, \bar{V} é a interação entre os modos vibracionais e os elétrons contidos no qubits - equação 3.8, $E_{ijk,00}$ corresponde as energias dos estados $|ijk\rangle$, enquanto $E_{100,00}$ é a energia de $|100\rangle$, mas vale resaltar que para formação de estados do tipo $|W\rangle$, o subespaço P deve ter somente estados degenerados, ou seja, $E_{100,00} = E_{010,00} = E_{001,00}$. Ao analisar todos os estados possíveis e os elementos de matriz com os estados $|100\rangle$ e $|010\rangle$, os únicos cujo resultado não seja zero em pelo menos um dos produtos, ocorrem para os estados $|000\rangle$ e $|110\rangle$, dessa forma, a expressão 4.1 pode ser reduzida como sendo

$$\Omega_{100,010} = - \frac{\langle 100 | \bar{V} | 000 \rangle \langle 000 | \bar{V} | 010 \rangle}{E_{000,00} - E_{100,00}} - \frac{\langle 100 | \bar{V} | 110 \rangle \langle 110 | \bar{V} | 010 \rangle}{E_{110,00} - E_{100,00}}. \quad (4.2)$$

Na Seção C.1 no Apêndice C foi realizado o cálculo dos dois elementos de matriz dispostos na expressão 4.2. De posse dos resultados obtidos nas expressões C.2, C.3, C.4 e C.5 feita no Apêndice C, e ainda as energias calculadas na Seção 3.1, em particular as expressões 3.9, 3.12, 3.13 e 3.16, podemos finalmente obter Ω , conforme a equação 4.3, onde foi considerado $\delta_1 = \delta_2 = \delta_3 = \delta$, $g_1 = g_2 = g_3 = g$, $\omega_1 = \omega_2 = \omega$, $t_1 = t_2 = t_3 = t$ e portanto $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$.

$$\begin{aligned} \Omega_{100,010} &= -t^2 e^{-2\lambda^2} \left[\frac{1}{\delta - \frac{4g^2}{\omega}} + \frac{1}{\delta} \right] \\ \Omega_{100,010} &= - \frac{4g^2 t^2 e^{-2\lambda^2}}{\omega \delta (\delta - \frac{4g^2}{\omega})} \end{aligned} \quad (4.3)$$

O resultado obtido para $\Omega_{100,010}$ é idêntico para os elementos de matriz $\Omega_{100,001}$ e $\Omega_{010,001}$. Assim, podemos escrever o modelo efetivo para o subsistema P , sendo $H_{\text{eff}} = \Omega h$, onde

$$h = |100\rangle \langle 010| + |100\rangle \langle 001| + |010\rangle \langle 001| + \text{h.c.} \quad (4.4)$$

Os autovalores de h são $a' = 2$, $b' = c' = -1$, e seus autoestados² são da forma

$$\begin{aligned} |\bar{0}'\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}(|\bar{0}\rangle + |\bar{1}\rangle + |\bar{2}\rangle), \\ |\bar{1}'\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}}(|\bar{0}\rangle + |\bar{1}\rangle - 2|\bar{2}\rangle), \\ |\bar{2}'\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\bar{0}\rangle - |\bar{1}\rangle), \end{aligned}$$

onde $|\bar{0}\rangle = |100\rangle$, $|\bar{1}\rangle = |010\rangle$ e $|\bar{2}\rangle = |001\rangle$. Assim, temos um modelo simples de ser tratado analiticamente na Subseção 4.1.2.

² Podemos usar a equação de autovalores e autoestados (2.5), e ainda normalizados.

4.1.2 Evolução Temporal Analítica e Numérica

Calculado o acoplamento efetivo do sistema físico e ainda o Hamiltoniano efetivo que o descreve, podemos aplicar o que foi discutido na Seção 2.2, com auxílio de algumas contas feitas no Apêndice A, a fim de obter a evolução temporal e formação de estados quânticos particulares. Então vamos escolher um estado quântico, como por exemplo o estado $|\bar{0}\rangle$, onde $|\bar{0}\rangle$, $|\bar{1}\rangle$ e $|\bar{2}\rangle$, são escritos como funções dos autoestados de h , da forma

$$\begin{aligned} |\bar{0}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |\bar{0}'\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} |\bar{1}'\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\bar{2}'\rangle, \\ |\bar{1}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |\bar{0}'\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} |\bar{1}'\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |\bar{2}'\rangle, \\ |\bar{2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |\bar{0}'\rangle - \frac{2}{\sqrt{6}} |\bar{1}'\rangle. \end{aligned}$$

Aplicando a evolução temporal, usando o Hamiltoniano efetivo (4.4) com a frequência característica apropriada (4.3), e conforme a equação (2.11), temos que o estado analítica é da forma

$$|\psi(t)\rangle = e^{-ih\Omega t} |\bar{0}\rangle.$$

Aplicando o operador de evolução temporal no estado inicial, obtemos

$$|\psi(t)\rangle = \frac{e^{-2i\Omega t}}{\sqrt{3}} |\bar{0}'\rangle + \frac{e^{-i\Omega t}}{\sqrt{6}} |\bar{1}'\rangle + \frac{e^{-i\Omega t}}{\sqrt{2}} |\bar{2}'\rangle, \quad (4.5)$$

reescrevendo os argumentos da exponencial como $\alpha = (3/2)\Omega t$ e transformando novamente para a base computacional, temos

$$|\psi(\alpha)\rangle = \left[\cos(\alpha) + \frac{i}{3} \sin(\alpha) \right] |\bar{0}\rangle - \frac{2i}{3} \sin(\alpha) (|\bar{1}\rangle + |\bar{2}\rangle). \quad (4.6)$$

Como estamos tentando identificar a formação de estados W , podemos analisar o tempo que melhor indica quando pode ocorrer essa formação, assim o estado W irá ocorrer quando

$$\sin(\alpha_{\max}) = \pm \frac{\sqrt{3}}{2} \implies \alpha_{\max} = \pm \frac{\pi}{3} + \pi n,$$

podendo escrever um sequência de números inteiros cujo valores identificam quando existe maior probabilidade de ocorrência do máximo estado emaranhado.

$$\beta_{\max} = \frac{6\alpha_{\max}}{2\pi} = 1, 2, 4, 5, 7, 8, 10, 11, 13, \dots \quad (4.7)$$

Como esse resultado, podemos reescrever o estado analítica, omitindo uma fase global, como sendo

$$|\psi(\alpha_{\max})\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[|\bar{0}\rangle + e^{\mp i2\pi/3} (|\bar{1}\rangle + |\bar{2}\rangle) \right]. \quad (4.8)$$

De posse, do resultado analítico do estado (4.8) e do Hamiltoniano efetivo (4.4), podemos realizar duas evoluções temporais, sendo uma numérica mais com o Hamiltoniano efetivo e outra analítica com o estado, dispostos na Figura 5. Também como discutido

na Seção 2.3, podemos calcular a fidelidade para ambos os casos, e verificar a partir dessa medida se o resultado analítico sugere formação de estado maximamente emaranhado, haja vista que o cálculo dos quantificadores de emaranhamento com a contração do Hamiltoniano efetivo não pode ser feito, pois houve uma transformação de subespaço e com isso o cálculo desses quantificadores não pode ser feito concretamente.

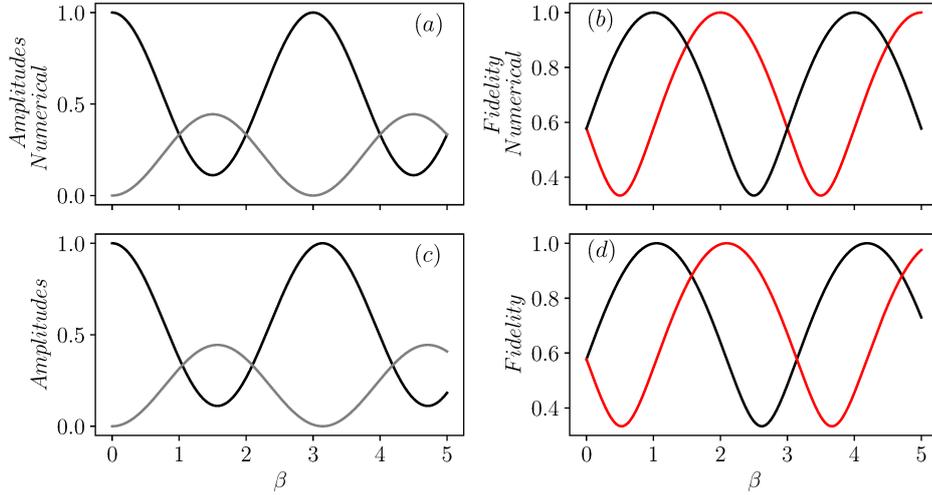


Figura 5 – Nos painéis (a) e (c) estão as curvas de amplitudes de probabilidades dos estados quânticos $|0\rangle$ (linha preta), $|1\rangle$ (linha vermelha) e $|2\rangle$ (linha cinza), respectivamente o resultado numérico e analítico. Entretanto, nos painéis (b) e (c) são os resultados do cálculo da fidelidade, sendo $\exp[i2\pi/3]$ a curva em preto e $\exp[-i2\pi/3]$ a curva em vermelho, e novamente sendo (b) os cálculos numéricos e (c) os cálculos analíticos. Em todos os painéis estão em função de β , para melhor identificação do momento em que pode surgir estado emaranhado.

Para o cálculo da fidelidade foi usado a expressão (2.16), enquanto o estado alvo³ é da forma

$$|\psi_{\text{tar}}\rangle = |\psi(\alpha_{\text{max}})\rangle \implies \sigma_{\text{tar}} = |\psi(\alpha_{\text{max}})\rangle\langle\psi(\alpha_{\text{max}})|.$$

De fato, quando analisamos o tempo mais provável para ocorrência da formação do estado W , foi verificado que seria para os valores de $\beta = 1, 2, 4, 5, \dots$, e na Figura 5 é o que ocorre em ambas evoluções temporais. Para esses valores de β as amplitudes de probabilidade são iguais para os estados quânticos $|0\rangle$, $|1\rangle$ e $|2\rangle$, adicionalmente as curvas da fidelidade encontram-se nos seus valores máximo ($\mathcal{F} \approx 1$), por consequência, esses resultados sugerem que o sistema está atingindo estados de Bell maximamente emaranhados do tipo W . Vale ressaltar que as evoluções temporais e numéricas podem desencontrar-se, isso se dá pela omissão de fases globais.

A evolução temporal analítica é fundamental para compreensão da física do problema, bem como para realizações experimentais a partir da construção de modelos efe-

³ Nos resultados numéricos com o Hamiltoniano total, discutido na Seção 3.1, basta realizar um produto tensorial com o subsistema dos reservatórios, sendo $|\psi_{\text{tar}}\rangle = |\psi(\alpha_{\text{max}})\rangle \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle$.

tivos. No entanto, na Seção 2.3, foi discutido formas para identificação de estados maximamente emaranhados bipartite e para estado $|W\rangle$, e que no modelo efetivo, disposto na Subseção 4.1.1, não é possível ser feita a identificação a partir de quantificadores de emaranhamento. Assim o cálculo numérico pode ser bem aproveitado para o cálculo dos quantificadores de emaranhamento e identificação dos estados de Bell. Usando a linguagem de programação *PYTHON*, e ainda usando o pacote aberto *QuTip*⁴, foram realizadas as simulações numéricas para o sistema proposto. A fim de compartilhar e divulgar o uso dessa linguagem de programação útil em diversas áreas (não apenas em pesquisa científica), vamos transcrever o Hamiltoniano utilizado para o cálculo numérico, disposto no Anexo A na Seção A.1.

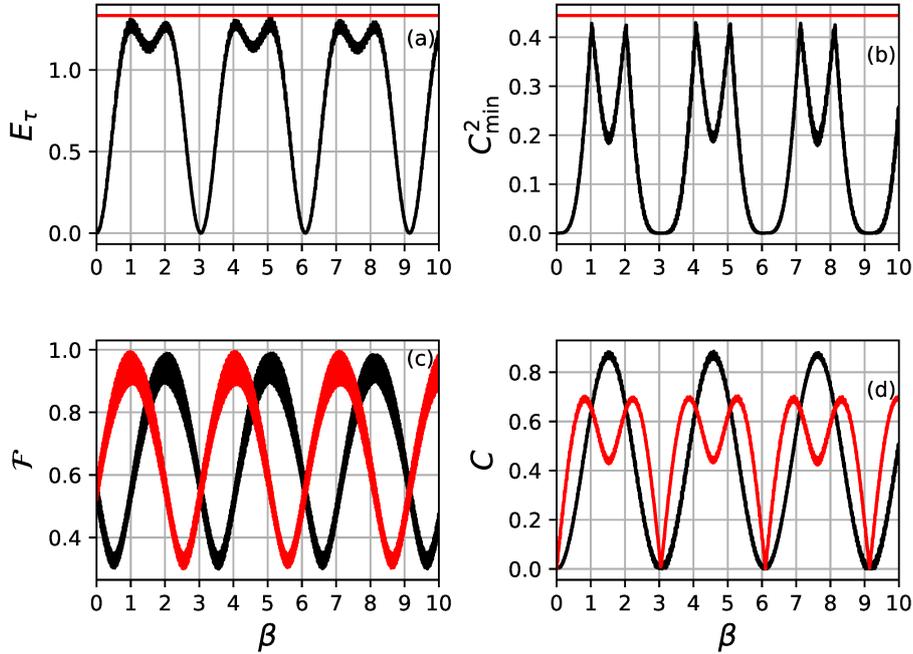


Figura 6 – Dinâmica das quantidades E_τ , C_{\min}^2 , fidelidade e concorrência em função de β . Nos painéis (a) e (b) é mostrado E_τ e C_{\min}^2 , respectivamente, nota-se que os picos de cada uma das curvas ocorrem perto de $\beta = 1, 2, 4, 5, 7, 8, \dots$, onde aproximam-se de $4/3$, no painel (a) e $4/9$ no painel (b) (linha vermelha). No painel (c), é mostrado o cálculo da fidelidade para o estado alvo $|\psi(\alpha_{\max})\rangle$ com ambos o sinais da fase, sendo $\exp[i2\pi/3]$ a curva em vermelho e $\exp[-i2\pi/3]$ a curva em preto. No painel (d) é mostrado curvas das concorrências entre os qubits BC (C_{BC} - linha preta) e entre os qubits AC (C_{AC} - linha vermelha). Parâmetros: $g = 0.1\omega$, $\delta = 0.1\omega$ e $t = 0.005\omega$.

Na Seção 2.3 foi mostrado que para $E_\tau = 4/3$ e $C_{\min}^2 = 4/9$, temos formação de estados $|W\rangle$, e como nos painéis (a) e (b), na Figura 6, os quantificadores de emaranhamento

⁴ O pacote aberto (JOHANSSON; NATION; NORI, 2012) usa a linguagem *PYTHON* de base, e é uma ferramenta bastante útil para tratar numericamente sistemas quânticos abertos, com implementações já feitas para cálculo de quantificadores de emaranhamento e uso na área de Informação Quântica.

se aproximam do seu valor máximo para determinados valores de β , isso demonstra que nesses valores de β forma-se $|W\rangle$. Na mesma Seção, foi mostrado a medida de distância fidelidade, em que compara-se um estado alvo com o estado do sistema, sendo que seu valor máximo significa que $|\psi_{\text{tar}}\rangle = |\psi\rangle$, e no painel (c) os picos da curva da fidelidade para ambos sinais de fase ocorrem nos mesmos valores de β que os picos E_τ e C_{\min}^2 ocorrem.

No painel (d), os picos observados para C_{AC} - concorrência entre AC - e C_{BC} - concorrência entre BC - indicam a formação de emaranhamento parcialmente bipartido, porém essas evidências não ocorrem para os mesmo valores de β que sugerem formação de $|W\rangle$. No entanto, o cálculo da concorrência⁵ indica que os qubits AC e BC ficam parcialmente emaranhados.

4.1.3 Aplicando Dephasing

Nessa subseção vamos introduzir efeitos de decoerência quântica no nosso sistema, de forma que os resultados sejam o mais próximo possível de uma situação de realização experimental, então temos o processo de defasamento que ocorre em apenas um dos qubits - disposto na Subseção 4.1.3.1. Escolhemos processos de defasamento, ou seja, nós assumimos que as fases podem conter erros⁶, e a forma para introduzir esses tipos de erros pode ser feita via equação de Lindblad (LINDBLAD, 1976), dado na sua forma padrão pela expressão 4.9.

$$\dot{\rho} = -i[H, \rho] + \sum_i \left(L_i \rho L_i^\dagger - \frac{1}{2} L_i^\dagger L_i \rho + \frac{1}{2} \rho L_i^\dagger L_i \right) \quad (4.9)$$

Onde ρ é a matriz densidade do sistema físico, H é o Hamiltoniano que descreve o sistema, e L_i são operadores de Lindblad, dado por $L_i = \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \sqrt{\Gamma} \sigma_z^{(i)} \otimes \dots \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v$, em que o índice i identifica qual qubit $\{A, B, C\}$ o operador de Lindblad está atuando e Γ sendo a taxa de erro da fase, e com $\Gamma = 1 \cdot 10^{-4} \omega$, que corresponde à 0.5GHz para $\omega = 20\text{meV}$.

4.1.3.1 Dephasing em um Único Qubit

Vamos aplicar um processo de decoerência quântica no sistema proposto, selecionando o qubit A para que sofra processo de defasamento, ou seja, o operador de Lindblad é da forma $L_A = \sqrt{\Gamma} \sigma_z^{(i)} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v$, e foi adicionado na evolução temporal numérica do sistema físico e calculado quantificadores de emaranhamento e fidelidade sobre estados alvo (discutido na Nota de Rodapé 3), dispostos na Figura 7.

⁵ A definição de concorrência também foi discutida na Seção 2.3.

⁶ É favorável comentar que aplicar o defasamento em todos os qubits, gera uma evolução temporal idêntica a não aplicação de defasamento, como na Subseção 4.1.2, isso se dá pelo de todos os qubits terem um fator de defasamento igual, faz com que entrem em fase e a evolução temporal permaneça inalterada.

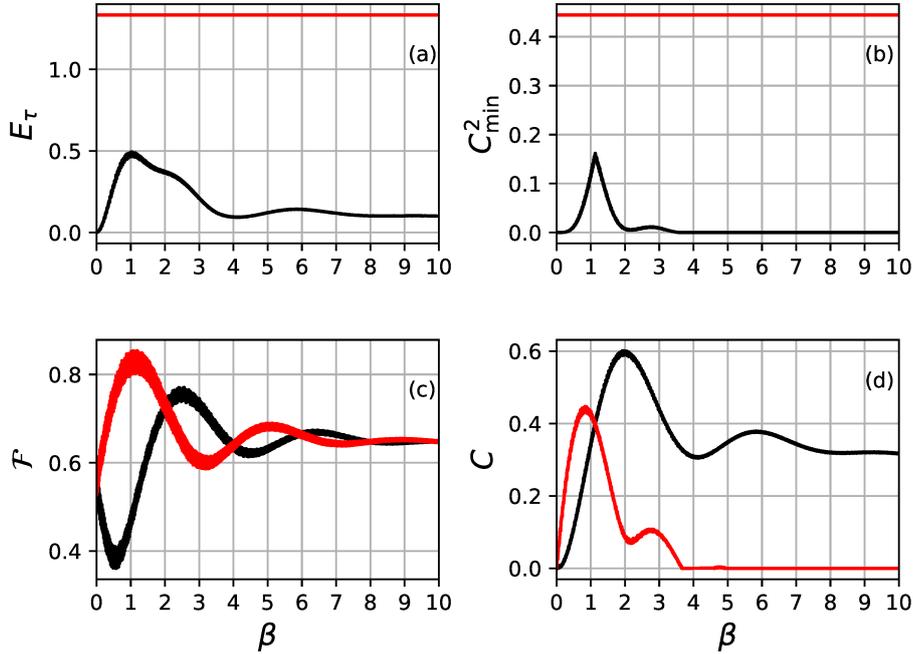


Figura 7 – Dinâmica temporal de E_τ , C_{\min}^2 , fidelidade e concorrência contra β , porém com aplicação de defasamento no qubit A . Analogamente a Figura 6 nos painéis (a), (b), (c) e (d) são as curvas para E_τ , C_{\min}^2 , \mathcal{F} e C , respectivamente. Os quantificadores E_τ e C_{\min}^2 são suprimidos por efeitos de decoerência realizado pelo defasamento, o que indica que estados emaranhados tripartites são bastante suscetíveis a processos de defasamento. As curvas de fidelidade apresentam oscilações amortecidas e com apenas um pico próximo ao máximo valor de \mathcal{F} , indica que no início da evolução temporal ocorre uma tendência de formação de estado $|W\rangle$, mas logo não é alcançada. Já as curvas da concorrência sugerem que a aplicação de defasagem gera formação de estado parcialmente emaranhado para um conjunto bipartite de subsistemas. Parâmetros: $g = 0.1\omega$, $\delta = 0.1\omega$, $t = 0.005\omega$ e $\Gamma = 1 \cdot 10^{-4}\omega$.

Apesar da curva da fidelidade indicar que no início da evolução temporal o sistema físico pode atingir um estado parcialmente emaranhado tripartite, quase atingindo um dos estados alvo, o que por sua vez indica uma ligeira robustez do sistema físico, também indicado pelas curvas de E_τ e C_{\min}^2 , que não atingem o valor limite para os quantificadores mas revela uma tendência de formação de $|W\rangle$.

No entanto, o resultado mais interessante trata-se da curva das concorrências. A curva em preto que mostra a concorrência entre os qubits AB possui o pico para um valor inferior à $C_{AB} < 0.5$, o que sugerem que esses qubits não estão emaranhados (NICHOL et al., 2017). Já a curva da concorrência dos qubits BC , tem o valor do pico próximo à $C_{BC} \approx 0.6$, ou seja, indica que os qubits B e C estão parcialmente emaranhados (NICHOL et al., 2017). Na Figura 8, temos a curva da fidelidade sobre os estados alvo (4.10) entre os qubits B e C , na curva verifica-se a sugestão da formação de um estado parcialmente

emaranhados bipartite.

$$|\psi_{\text{tar}}\rangle = |0\rangle \otimes \left[\frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}} \right] \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle \quad (4.10)$$

Esses resultados sugerem que o sistema é ligeiramente protegido contra processos de decoerência, onde é priorizado a formação de estados emaranhados entre os qubits em fase, "isolando" o qubit que sofre ação de defasamento.



Figura 8 – Dinâmica da fidelidade com estado alvo bipartite emaranhando nos qubits B e C contra β na presença de defasamento no qubit A , revelando uma certa proteção do sistema contra processos de defasamento em um único qubit. Parâmetros: $g = 0.1\omega$, $\delta = 0.1\omega$, $t = 0.005\omega$ e $\Gamma = 1 \cdot 10^{-4}\omega$.

4.2 Cadeia de Spin

Analogamente aos cálculos da Seção anterior, realizamos os cálculos para cadeia de spin 3.2, considerando quatro casos particulares, 2, 3, 4 e 5 sítios, divididas em subseções. A subseção para 2 sítios tem apenas a análise da evolução temporal analítica e numérica, pois não é necessária a utilização de teoria de perturbação. Já nas subseções com 3, 4 e 5 sítios, contam além da evolução temporal, cálculo do elemento de matriz Ω e suas respectivas ordens apropriadas.

4.2.1 Cadeia de Spin com 2 sítios

No modelo da cadeia de spin, disposta na expressão 3.21 podemos particularizar para 2 sítios, a inclusão dessa particularidade implica que não existe sítios internos aos dois da borda, e com isso, podemos considerar que ambos os sítios existentes estão sob

ação do mesmo campo magnético B , de forma que o Hamiltoniano pode ser escrito como sendo

$$H = -J\{S^x \otimes S^x + S^y \otimes S^y + \Delta S^z \otimes S^z - B[S^z \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes S^z]\}, \quad (4.11)$$

onde J é a interação de troca, B é proporcional ao campo magnético e S^k são matrizes de Pauli, com $k = \{x, y, z\}$.

Realizando os produtos de Kronecker da equação 4.11, verificamos que trata-se de uma matriz 4×4 , conforme expressão 4.12, desconsiderando em um primeiro momento o parâmetro B , pois sua contribuição aparecerá apenas nos elementos da diagonal. O ordenamento na base computacional, pode ser verificado, como sendo $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$, e dele identificamos que o único acoplamento em primeira ordem que é possível nesse sistema físico dar-se-á por meio dos estados $|01\rangle$ e $|10\rangle$.

$$H_{s/B} = -J \begin{pmatrix} & |00\rangle & |01\rangle & |10\rangle & |11\rangle \\ \begin{pmatrix} \Delta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -\Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta \end{pmatrix} & & & & \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

A inclusão do parâmetro B representará mudança apenas dos estados $|00\rangle$ e $|11\rangle$, cujo os novos elementos de matriz serão $-J(\Delta - 2B)$ e $-J(\Delta + 2B)$, respectivamente. Essa modificação implicará que os estados $|00\rangle$ e $|11\rangle$ não estarão degenerados. Já para os estados $|01\rangle$ e $|10\rangle$ serem degenerados e isolados energeticamente pela contribuição dos spins na direção z (dado pelo parâmetro Δ) e pela contribuição do campo B , também na direção z .

4.2.2 Cadeia de Spin com 3 sítios

Considerando uma cadeia de spin com 3 sítios, temos que reescrever a expressão 3.21 usando produtos de Kronecker como na subseção anterior, mas para $N = 3$. Assim, temos que o novo Hamiltoniano é da forma

$$H = -J \left\{ \sum_{k=x,y,z} (\Delta_k S^k \otimes S^k \otimes I + \Delta_k I \otimes S^k \otimes S^k) + \right. \\ \left. -B(S^z \otimes I^{\otimes 2} + I^{\otimes 2} \otimes S^z) - B_{\text{loc}} I \otimes S^z \otimes I \right\}, \quad (4.13)$$

onde $\Delta_x = \Delta_y = 1$, $\Delta_z = \Delta$, S^k são as matrizes de Pauli e a ainda $I^{\otimes 2} = I \otimes I$, os outros parâmetros são análogos aos discutidos na subseção 4.2.1.

Apesar do sistema considerado ser composto por 3 sítios, ou seja, três termos multiplicados via produto de Kronecker, a estrutura matricial da equação 4.12 também

é encontrada. Desse fato, verificamos que os acoplamentos entre cada estado só serão diferentes de zero se for da forma

$$\langle 01i|H|10j\rangle \neq 0 \text{ ou } \langle i01|H|j10\rangle \neq 0. \quad (4.14)$$

4.2.2.1 Cálculo do Elemento de Matriz Ω

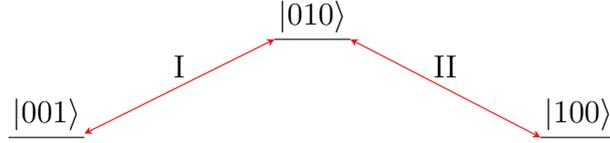


Figura 9 – Esquema das transições virtuais que podem ocorrer entre os estados $|001\rangle$ e $|100\rangle$. As transições devem ocorrer seguindo a ordem $I \rightarrow II$ ou no sentido inverso $II \rightarrow I$, passam pelo estado $|010\rangle$.

Na cadeia com $N = 3$, existem dois conjuntos de estados que tem possibilidade de atingirem estados emaranhados, pois as bordas não apresentam estados separáveis e ainda estão degenerados, são os conjuntos de estados: $\{|001\rangle, |100\rangle\}$ e $\{|011\rangle, |110\rangle\}$. As análises a seguir são válidas para ambos os casos, mas vamos tomar o primeiro conjunto a fim de exemplificar todas as contas.

Partindo da repetição da estrutura matricial 4.12, podemos verificar que os estados $|001\rangle$ e $|100\rangle$ não se acoplam diretamente, ou seja, $\langle 001|H|100\rangle = 0$, porém ambos estados se acoplam com $|010\rangle$. A exemplo dos trabalhos publicados (SOUZA; OLIVEIRA; SANZ, 2019; MENDONÇA; SOUZA, 2021), os estados de interesse podem acoplar-se via transições virtuais de estado passando por $|010\rangle$, Figura 9, e assim para avaliar a ocorrência desse fenômeno utilizamos Teoria de Perturbação, dado pela expressão 4.1, sendo reescrita como

$$\Omega^{(2)} = \sum_i \frac{\langle 001|H|i\rangle \langle i|H|100\rangle}{E_{001} - E_i}. \quad (4.15)$$

Ainda usando 4.12, podemos mapear todos os estados que acoplam $|001\rangle$ e $|100\rangle$, e o único estado que realiza o acoplamento ao mesmo tempo é o estado $|010\rangle$, devido a relação 4.14. Assim a expressão 4.15 pode ser reduzida à forma

$$\begin{aligned} \Omega^{(2)} &= \frac{\langle 001|H|010\rangle \langle 010|H|100\rangle}{E_{001} - E_{010}} \\ &= \frac{(-2J)(-2J)}{J(B_{\text{loc}} - (2\Delta + 2B - B_{\text{loc}}))} \\ \Omega^{(2)} &= -\frac{2J}{\Delta + B - B_{\text{loc}}}, \end{aligned} \quad (4.16)$$

onde os valores das energias E_{001} e E_i são discutidos no Apêndice C.2 e os acoplamentos são dados pelo elemento de matriz da relação 4.12.

4.2.3 Cadeia de Spin com 4 sítios

Analogamente ao caso $N = 3$, quando consideramos uma cadeia de spin com 4 sítios, podemos reescrever a equação 3.21 usando produtos de Kronecker, como sendo

$$H = -J \left\{ \sum_{k=x,y,z} \Delta_k (S^k \otimes S^k \otimes I \otimes I + I \otimes S^k \otimes S^k \otimes I + I \otimes I \otimes S^k \otimes S^k) + \right. \\ \left. -B(S^z \otimes I^{\otimes 3} + I^{\otimes 3} \otimes S^z) - B_{\text{loc}}(I \otimes S^z \otimes I \otimes I + I \otimes I \otimes S^z \otimes I) \right\}, \quad (4.17)$$

onde $I^{\otimes 3} = I \otimes I \otimes I$, $\Delta_x = \Delta_y = 1$ e $\Delta_z = \Delta$. Em decorrência dos produtos $S^k \otimes S^k$, no Hamiltoniano 4.17 as estruturas de matriz 4×4 , dado pela expressão 4.12, ocorrem. Nessa perspectiva, estados que se acoplam terão que apresentar a estrutura de estado semelhante a da expressão 4.14.

4.2.3.1 Cálculo do Elemento de Matriz Ω

De maneira semelhante à discutida na subseção 4.2.2.1, para $N = 4$ teremos dois conjuntos de estados distintos com possibilidade de atingirem estados emaranhados, sendo eles: $\{|0001\rangle, |1000\rangle\}$ e $\{|0111\rangle, |1110\rangle\}$. Porém, a fim de exemplificar as contas e não torná-las confusas, vamos focar apenas no primeiro conjunto de estados.

Mapeando os estados que participarão das transições virtuais, podemos mostrar esquematicamente através da Figura 10 que participam apenas dois estados nesse processo de transição, são eles $|0010\rangle$ e $|0100\rangle$.

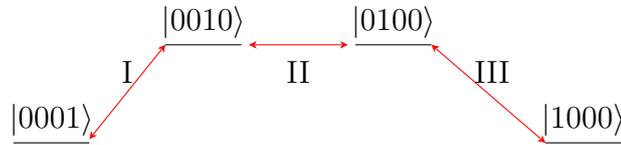


Figura 10 – Esquema das transições virtuais que podem ocorrer entre os estados $|0001\rangle$ e $|1000\rangle$. As transições devem ocorrer seguindo a ordem $I \rightarrow II \rightarrow III$ ou no sentido inverso $III \rightarrow II \rightarrow I$, passam pelos estados $|0010\rangle$ e $|0100\rangle$.

Mapeados o caminho das transições necessárias para o acoplamento entre os estados de interesse, verificamos que o uso de teoria de perturbação em segunda ordem não é suficiente para descrever os efeito do acoplamento. Assim, vamos considerar a Teoria de Perturbação em terceira ordem $\Omega^{(3)}$, sendo que pode ser escrita na forma mais geral como sendo

$$\begin{aligned}\Omega^{(3)} &= -\sum_i \sum_{i'} \frac{\langle 0001|H|i\rangle \langle i|H|i'\rangle \langle i'|H|1000\rangle}{(E_{0001} - E_i)(E_{0001} - E_{i'})} + \\ &\quad - \langle 0001|H|1000\rangle \sum_i \frac{\langle 0001|H|i\rangle \langle i|H|1000\rangle}{E_{0001} - E_i},\end{aligned}\quad (4.18)$$

onde i e i' correm todos os estados da cadeia de spin. Porém como já discutidos anteriormente, foram mapeados todos os estados que são capazes de acoplar os estados de interesse, e que os estados de interesse não se acoplam de forma direta, ou seja, $\langle 0001|H|1000\rangle = 0$, também sabemos que em segunda ordem $\langle 0001|H|i\rangle \langle i|H|1000\rangle = 0$, $\forall |i\rangle$. Então podemos reduzir a expressão 4.18 à equação

$$\Omega^{(3)} = -\sum_i \sum_{i'} \frac{\langle 0001|H|i\rangle \langle i|H|i'\rangle \langle i'|H|1000\rangle}{(E_{0001} - E_i)(E_{0001} - E_{i'})}. \quad (4.19)$$

Resolvendo o somatório da equação 4.19 com auxílio da Figura 10 e ainda utilizando a estrutura matricial da expressão 4.12, podemos encontrar o valor de $\Omega^{(3)}$ a depender dos parâmetros físicos dispostos no Hamiltoniano 4.17. Vale mencionar que o cálculo das energias estão no Apêndice C.2.

$$\begin{aligned}\Omega^{(3)} &= -\frac{\langle 0001|H|0010\rangle \langle 0010|H|0100\rangle \langle 0100|H|1000\rangle}{(E_{0001} - E_{0010})(E_{0001} - E_{0100})} \\ &= -\frac{(-2J)(-2J)(-2J)}{(-J)^2(\Delta - 2B_{\text{loc}} + \Delta + 2B)(\Delta - 2B_{\text{loc}} + \Delta + 2B)} \\ &= -\frac{-8J}{(2\Delta + 2B - 2B_{\text{loc}})^2} \\ \Omega^{(3)} &= \frac{2J}{(\Delta + B - B_{\text{loc}})^2}\end{aligned}\quad (4.20)$$

O conjunto de estados $\{|0101\rangle, |1100\rangle\}$, $\{|0011\rangle, |1010\rangle\}$ à primeira vista também podem emaranhar, pois nas bordas não são separáveis e eles são degenerados, mas não existem estados capazes de realizar transições virtuais. Por exemplo, o único estado que acopla com $|0101\rangle$ é o estado $|0110\rangle$ (a fim de realizar transições virtuais de estado), no entanto, o segmento de estado $|i11j\rangle$ não pode ser acoplado com outro tipo de segmento de estado, vide eq. 4.12. Dessa forma, partindo dos estados $\{|0101\rangle, |1100\rangle\}$ ou $\{|0011\rangle, |1010\rangle\}$ não há formação de estados emaranhados.

4.2.4 Cadeia de Spin com 5 sítios

A construção o Hamiltoniano considerando uma cadeia de spin com 5 sítios se dá de forma semelhante aos casos anteriores com acréscimo de mais um subespaço, sendo que o novo Hamiltoniano usando produtos de kronecker será

$$H = -J \left\{ \begin{aligned} & \sum_{k=x,y,z} \Delta_k (S^k \otimes S^k \otimes I^{\otimes 3} + I \otimes S^k \otimes S^k \otimes I^{\otimes 2} \\ & + I^{\otimes 2} \otimes S^k \otimes S^k \otimes I + I^{\otimes 3} S^k \otimes S^k) + \\ & -B(S^z \otimes I^{\otimes 4} + I^{\otimes 4} \otimes S^z) - B_{\text{loc}} I \otimes S^z \otimes I^{\otimes 3} \\ & -B_{\text{loc}}(I^{\otimes 2} \otimes S^z \otimes I^{\otimes 2} + I^{\otimes 3} \otimes S^k \otimes I) \end{aligned} \right\}, \quad (4.21)$$

onde $I^{\otimes 4} = I \otimes I \otimes I \otimes I$, $\Delta_x = \Delta_y = 1$ e $\Delta_z = \Delta$. Analogamente aos casos anteriores o surgimento dos produtos $S^k \otimes S^k$, teremos a repetição da estrutura matricial da equação 4.12.

4.2.4.1 Cálculo do Elemento de Matriz Ω

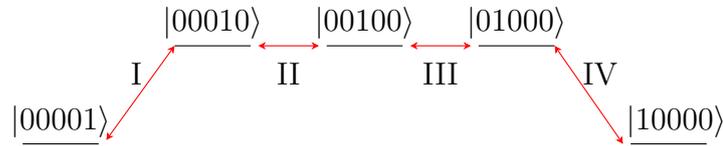


Figura 11 – Esquema das transições virtuais que podem ocorrer entre os estados $|00001\rangle$ e $|10000\rangle$. As transições devem ocorrer seguindo a ordem $\text{I} \rightarrow \text{II} \rightarrow \text{III} \rightarrow \text{IV}$ ou no sentido inverso $\text{IV} \rightarrow \text{III} \rightarrow \text{II} \rightarrow \text{I}$, passam pelos estados $|00010\rangle$, $|00100\rangle$ e $|01000\rangle$.

Analogamente, ao caso de 4 sítios na cadeia de spin, podemos mapear os estados que podem atingir estados emaranhados, e também, os estados que forneceram as transições virtuais de estados a fim de que os estados de interesse sejam acoplados indiretamente. O conjunto de estados que podem emaranhar são $\{|00001\rangle, |10000\rangle\}$ e $\{|01111\rangle, |11110\rangle\}$, quaisquer outro conjunto de estados, não terão estados capazes de participar ativamente das transições virtuais. Para exemplificar as contas, consideramos o primeiro conjunto de estados de interesse.

Novamente, pelo surgimento da estrutura matricial 4.12 no Hamiltoniano 4.21, foi possível construir um diagrama esquemático das transições virtuais de estados, disposto na Figura 11. Com esse diagrama podemos identificar qual a ordem da teoria de perturbação devemos usar a fim de descrever o efeito completo. Assim, temos que para a cadeia com 5 sítios a ordem apropriada é de quarto grau, descrita por

$$\begin{aligned}
\Omega^{(4)} &= \sum_i \sum_{i'} \sum_{i''} \frac{\langle \phi_1 | H | i \rangle \langle i | H | i' \rangle \langle i' | H | i'' \rangle \langle i'' | H | \phi_2 \rangle}{(E_{\phi_1} - E_i)(E_{\phi_1} - E_{i'})(E_{\phi_1} - E_{i''})} \\
&\quad - \sum_i \sum_{i'} \frac{\langle \phi_1 | H | i \rangle \langle i | H | \phi_2 \rangle \langle \phi_1 | H | i' \rangle \langle i' | H | \phi_2 \rangle}{(E_{\phi_1} - E_i)^2 (E_{\phi_1} - E_{i'})} \\
&\quad - 2 \langle \phi_1 | H | \phi_2 \rangle \sum_i \sum_{i'} \frac{\langle \phi_1 | H | i \rangle \langle i | H | i' \rangle \langle i' | H | \phi_2 \rangle}{(E_{\phi_1} - E_i)^2 (E_{\phi_1} - E_{i'})} \\
&\quad - |\langle \phi_1 | H | \phi_2 \rangle|^2 \sum_i \frac{\langle \phi_1 | H | i \rangle \langle i | H | \phi_2 \rangle}{(E_{\phi_1} - E_i)^3}, \tag{4.22}
\end{aligned}$$

onde $|\phi_1\rangle = |00001\rangle$ e $|\phi_2\rangle = |10000\rangle$. Os dois últimos termos da expressão 4.22 são zero, pois os estados $|\phi_1\rangle$ e $|\phi_2\rangle$ não se acoplam, ou seja, $\langle \phi_1 | H | \phi_2 \rangle = 0$. O segundo termo de $\Omega^{(4)}$ também será zero, e isso se dá pelo fato de que não existe um estado quântico $|i\rangle$ ou $|i'\rangle$ que se acoplam ao mesmo tempo aos estados $|\phi_1\rangle$ e $|\phi_2\rangle$. Dessa forma, a expressão 4.22 pode ser reduzida para

$$\Omega^{(4)} = \sum_i \sum_{i'} \sum_{i''} \frac{\langle \phi_1 | H | i \rangle \langle i | H | i' \rangle \langle i' | H | i'' \rangle \langle i'' | H | \phi_2 \rangle}{(E_{\phi_1} - E_i)(E_{\phi_1} - E_{i'})(E_{\phi_1} - E_{i''})}. \tag{4.23}$$

Como mostrado na Figura 11, temos os estados que participam das transições virtuais entre $|00001\rangle$ e $|10000\rangle$, sendo $|i\rangle = |00010\rangle$, $|i'\rangle = |00100\rangle$ e $|i''\rangle = |01000\rangle$, então podemos calcular $\Omega^{(4)}$ em função dos parâmetros do Hamiltoniano 4.21, de forma a obter

$$\begin{aligned}
\Omega^{(4)} &= \frac{\langle 00001 | H | 00010 \rangle \langle 00010 | H | 00100 \rangle \langle 00100 | H | 01000 \rangle \langle 01000 | H | 10000 \rangle}{(E_{00001} - E_{00010})(E_{00001} - E_{00100})(E_{00001} - E_{01000})} \\
&= \frac{(-2J)(-2J)(-2J)(-2J)}{J^3(-2\Delta + 3B_{\text{loc}} - 2B - B_{\text{loc}})^3} \\
&= \frac{16J}{(-2\Delta + B_{\text{loc}} - 2B)^3} \\
\Omega^{(4)} &= -\frac{2J}{(\Delta + B - B_{\text{loc}})^3} \tag{4.24}
\end{aligned}$$

4.2.5 Evolução Temporal Analítica e Numérica

Para cada tamanho de cadeia de spin, calculamos o elemento de matriz Ω , dados pelas equações 4.16, 4.20 e 4.24. Esse elemento de matriz é responsável pelo acoplamento entre os sítios da borda, quando escrevemos o Hamiltoniano efetivo do sistema físico, sendo da forma

$$H_{\text{eff}} = \Omega \sigma_x, \tag{4.25}$$

onde σ_x é a matriz de Pauli na direção x , considerando a representação em relação ao eixo z . Construído o Hamiltoniano efetivo H_{eff} , podemos diagonalizá-lo, e assim, obter

seus autoestados e autovalores. Seja a equação de autovalor 2.5, reescrita para o nosso sistema físico, onde $A \rightarrow H_{\text{eff}}$, $a \rightarrow \lambda$ e $|a\rangle \rightarrow |\lambda\rangle$, temos

$$H_{\text{eff}} |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle \implies [H_{\text{eff}} - \lambda] |\lambda\rangle = 0. \quad (4.26)$$

Não estamos procurando o caso trivial de $|\lambda\rangle = 0$, assim o termo em colchetes deve ser igual à zero, ou seja o determinante da diferença entre H_{eff} e λ deve ser zero. Então, na representação matricial temos

$$\mathbf{det} \begin{vmatrix} -\lambda & \Omega \\ \Omega & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \implies \lambda^2 - \Omega^2 = 0 \implies \lambda^\pm = \pm\Omega. \quad (4.27)$$

De posse dos autovalores λ^\pm , podemos encontrar os autoestados de H_{eff} , substituindo λ^\pm na equação 4.26 e atuarmos nos estados $|\lambda^\pm\rangle$. A fim de exemplificar a conta vamos considerar λ^- , e a matriz atuante em $|\lambda^-\rangle$ é da forma

$$\begin{pmatrix} \Omega & \Omega \\ \Omega & \Omega \end{pmatrix} |\lambda^-\rangle = \begin{pmatrix} \Omega & \Omega \\ \Omega & \Omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1^- \\ \lambda_2^- \end{pmatrix} = 0 \implies |\lambda^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (4.28)$$

De forma análoga, podemos determinar $|\lambda^+\rangle$, como sendo

$$|\lambda^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Note que a determinação de λ^\pm é dependente da condição de normalização dos autoestados $\langle \lambda^\pm | \lambda^\pm \rangle = 1$, como demonstrado na seção 2.1. A fim de deixar a notação mais consistente, podemos considerar que $|\lambda^+\rangle = |\bar{0}\rangle$ e $|\lambda^-\rangle = |\bar{1}\rangle$, e ainda podemos reescrever os autoestados na base computacional $|0\rangle$ e $|1\rangle$, obtendo

$$|\bar{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0\rangle + |1\rangle], \quad (4.29)$$

$$|\bar{1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0\rangle - |1\rangle]. \quad (4.30)$$

Não obstante, podemos escrever os estados da base computacional em função dos autoestados de H_{eff} , sendo

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\bar{0}\rangle + |\bar{1}\rangle], \quad (4.31)$$

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\bar{0}\rangle - |\bar{1}\rangle]. \quad (4.32)$$

Como discutido na seção 2.2, é possível construir um operador de evolução temporal dependente do Hamiltoniano do sistema físico, que por sua vez, quando atuado sobre

um estado inicial resulta no estado $|\psi(t)\rangle$ correspondente em qualquer tempo t . Assim o novo operador de evolução temporal é descrito por

$$U = e^{-iH_{\text{eff}}t}. \quad (4.33)$$

Considere o estado inicial $|\psi_0\rangle = |0\rangle$, e como discutido no Apêndice A, quando um operador de evolução temporal atua sobre os autoestados de H , então o operador de evolução temporal poderá ser reescrito em função dos autovalores de H . Pelas expressões 4.31 e 4.32, o estado inicial $|\psi_0\rangle$, pode ser escrito como autoestados de H_{eff} . Nessa perspectiva, segue os cálculo de $\psi(t)$:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-iH_{\text{eff}}t} |0\rangle \\ &= e^{-iH_{\text{eff}}t} \frac{\sqrt{2}}{2} [|\bar{0}\rangle + |\bar{1}\rangle] \\ &= \frac{\sqrt{2}}{2} [e^{-i\Omega t} |\bar{0}\rangle + e^{i\Omega t} |\bar{1}\rangle] \\ &= \frac{\sqrt{2}}{2} e^{-i\Omega t} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) + \frac{e^{2i\Omega t}}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle) \right] \\ &= \frac{e^{-i\Omega t}}{2} [(1 + e^{2i\Omega t}) |0\rangle + (1 - e^{2i\Omega t}) |1\rangle] \\ |\psi(t)\rangle &= \cos \Omega t |0\rangle - i \sin \Omega t |1\rangle \end{aligned} \quad (4.34)$$

A expressão 4.34, representa o estado em qualquer instante de tempo t , considerando o Hamiltoniano efetivo H_{eff} , onde a informação sobre o sistema físico, ou seja, o tamanho da cadeia de spin, os campos magnéticos atuante, as contribuições dos spins na direção z , estão contidos em Ω , e como vimos nas subseções 4.2.2.1, 4.2.3.1 e 4.2.4.1, podemos calcular esse elemento de matriz na teoria de perturbação, com suas respectivas ordens.

Podemos ainda, considerar os Hamiltonianos totais, dados pelas expressões 4.13, 4.17 e 4.21, mas sem realizarmos a conversão para o Hamiltoniano efetivo, as soluções analíticas tornam-se inviáveis. Porém, podemos lançar mão de métodos computacionais para verificar surgimento de estados emaranhados, como mostrado no Anexo A.2.

Nós conseguimos avaliar a formação de estados emaranhados partindo do cálculo da concorrência, discutido na seção 2.3, em função do parâmetro B_{loc} . Assim podemos verificar a influência de B_{loc} na formação de estados de Bell, conforme mostrado na Figura 12.

Na Figura 12, verificamos que a partir de $B_{\text{loc}} > 4B$, o sistema físico está apto a formação de estados emaranhados, separando os sítios da borda dos sítios interno na cadeia de spin. Assim podemos avaliar a concorrência em função do tempo. Para deixar os gráficos consistentes podemos parametrizar a escala de tempo em função de Ω , assim os gráficos da concorrência terão a forma da Figura 13.

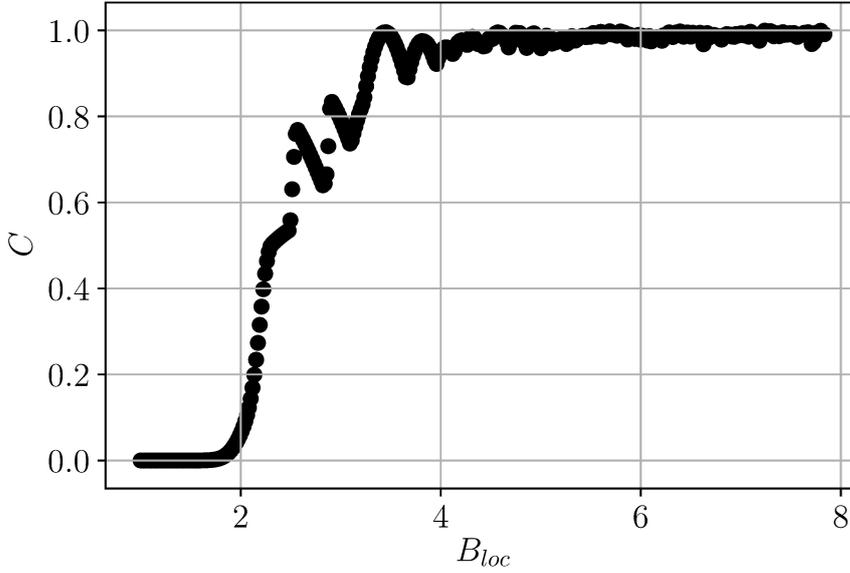


Figura 12 – Gráfico da concorrência máxima contra campo magnético atuante nos sítios internos da cadeia de spin. Para B_{loc} próximo ao valor de B os estados possíveis nos sítios da borda terão energia próxima aos estados possíveis no sítios internos, dessa forma, não serão viáveis a formação de estados emaranhados. Ao passo que para $B_{loc} > B$, será viável a formação de estados de Bell, nos sítios da borda da cadeia de spin. Parâmetros: $J = 1$, $B = 1$ e $\Delta = 1/10$.

O cálculo do elemento de matriz Ω para cada tamanho de cadeia, fornece uma frequência característica da formação de estados emaranhados, ou seja, nos fornece o tempo necessário da evolução temporal cuja probabilidade de encontrarmos estados emaranhados nas bordas seja a maior possível. No entanto, como os acoplamentos acontecem via transições de estado, quando aumentamos o número de sítios, o tempo para atingir esses estados de interesse aumentam proporcionalmente. Assim, podemos comparar a frequência característica de cada cadeia $N = 3, 4, 5$, e comparar com o tempo de vida médio de um sistema quântico de spin, isto é, comparar as frequências Ω com as frequências do tempo de vida de um sistema real τ_{lt} de um único qubit (UDDIN et al., 2022; FRICKE et al., 2021), disposto na Tabela a seguir.

$J = 1.3234 \times 10^{-7}$ [eV]		
Ω [eV]	tempo [ns]	Silício τ_{lt}^{Si} [ns]
$\Omega^{(2)} = 3.84 \times 10^{-8}$	$\tau = 107,75$	300
$\Omega^{(3)} = 5.56 \times 10^{-9}$	$\tau = 746,26$	300
$\Omega^{(4)} = 8.08 \times 10^{-10}$	$\tau = 5263,16$	300

Usando as referências (UDDIN et al., 2022; FRICKE et al., 2021), obtemos uma medida do tempo de vida que qubits de spin baseados em Silício, sendo medido na Ref.

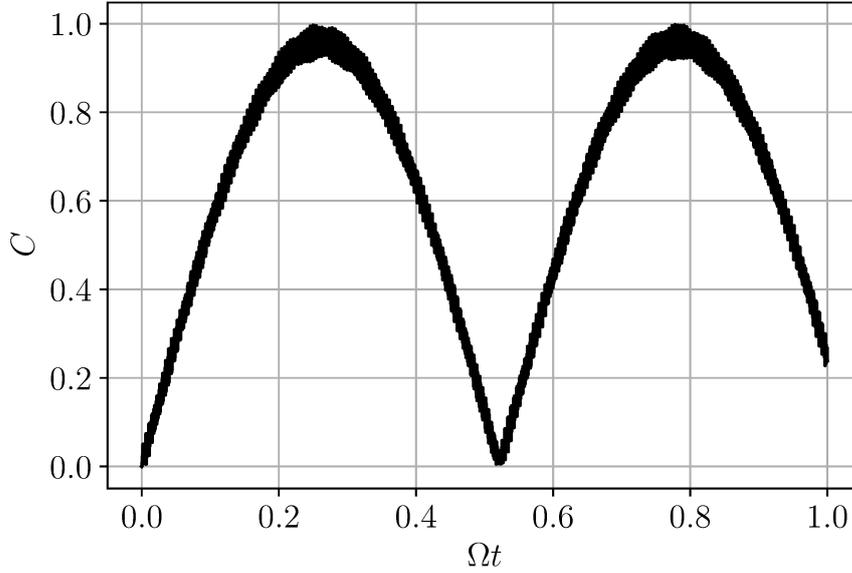


Figura 13 – Gráfico da concorrência contra Ωt , onde os picos ($C \approx 1$) indicam a formação de estados emaranhados. A parametrização da escala de tempo é feita dependendo do tamanho da cadeia, ou seja, dependendo do cálculo de Ω . Parâmetros: $J = 1$, $B = 1$, $\Delta = 1/10$ e $B_{\text{loc}} = 8B$.

(FRICKE et al., 2021) com 300 ns de duração. Usando o valor médio da interação de troca, presente na Ref. (UDDIN et al., 2022), e calculando os valores de Ω , podemos comparar com o tempo de vida. E verificamos que a princípio, considerando apenas interação de troca entre primeiros vizinhos, campo magnéticos não-homogêneos e transições virtuais de estados, a única cadeia que atingiria estados emaranhados em tempo inferior ao tempo de vida do spin do qubit, seria para o tamanho da cadeia igual à $N = 3$. Para cadeia maiores processos de decoerência tornam-se mais relevantes e impedem formação dos estados emaranhados. Assim é necessário realizar mais pesquisa em torno de técnicas para diminuir influência de processos decoerente, bem com sintetizar materiais cujo tempo de vida dos spins sejam sejam maiores.

5 Conclusão

No capítulo 4 verificamos a formação do estado $|W\rangle$ em função do tempo em qubits de carga, cujo seus pontos quânticos estão acoplados aos modos vibracionais de dois reservatórios. As análises partiram das condições apropriadas para atingir tais estados, passando pela construção de um modelo efetivo e identificação do acoplamento efetivo. Por fim, estabelecemos os tempos mais prováveis da ocorrência do estado quântico $|W\rangle$ e a robustez com efeitos de decoerência.

Ainda no capítulo 4, propusemos uma cadeia de spin, a partir do modelo de Heisenberg para interações entre primeiros vizinhos, na qual aplicamos campos magnéticos diferentes nas bordas e no interior da cadeia. Considerando tamanhos finitos do modelo unidimensional, verificamos a relação da formação de estados emaranhados ao longo do tempo, dependentes do campo magnético e do tamanho da cadeia. Além disso, ainda verificamos que as bordas são acopladas via transições virtuais de estados, os quais conseguimos mapear o caminho de acoplamento.

Realizando o estudo sobre formação de estados emaranhados em dois sistemas físicos distintos, a implementação experimental deve ser viável em ambos os casos tratados neste texto. Também existe a possibilidade para o uso dos sistemas usados na computação quântica, uma vez que os qubits de carga possuem certa robustez contra efeitos de defasamento, como visto na Figura 7, e na cadeia de spin a formação de estados emaranhados depende dos campos magnéticos aplicados, ou seja, depende de uma grandeza macroscópica, dispostas nas seções 4.2.2.1, 4.2.3.1 e 4.2.4.1.

Dada as realizações teóricas e computacionais, foi publicado o artigo em revista de circulação internacional intitulado "Vibrational effects on the formation of quantum W states", referência (MENDONÇA; SOUZA, 2021), com as discussões apresentadas na Seção 4.1. Já com relação aos resultados sobre a cadeia de spin está sendo desenvolvido um artigo relatando o que obtivemos.

As propostas futuras para investigação de estados emaranhados seguem duas linhas distintas de pesquisa: A primeira proposta trata-se de aumentar a quantidade de qubits ou sítios em cada sistema físico, a fim de verificar limites da formação dos estados de Bell com relação ao tempo, e sua viabilidade em relação ao tempo de vida quântico de cada configuração de sistema. A segunda linha de pesquisa, seria a realização de novas evoluções temporais nos respectivos dispositivos, porém considerando uma evolução não-Markoviana (BREUER; PETRUCCIONE, 2007), ou seja, considerando e avaliando efeitos de memória, nos reservatórios bosônicos - no caso de qubits de carga - e nos sítios internos da cadeia unidimensional.

Referências

- Arndt, M. et al. Wave-particle duality of C_{60} molecules. *Nature*, v. 401, n. 6754, p. 680–682, out. 1999. Citado na página 12.
- ARUTE, F. et al. Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. *Nature*, v. 574, n. 7779, p. 505–510, Oct 2019. ISSN 1476-4687. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41586-019-1666-5>>. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 13.
- BARDEEN, J.; BRATTAIN, W. H. The transistor, a semi-conductor triode. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 74, p. 230–231, Jul 1947. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.74.230>>. Citado na página 12.
- BLUHM, H. et al. Dephasing time of gaas electron-spin qubits coupled to a nuclear bath exceeding 200 μ s. *Nature Physics*, v. 7, n. 2, p. 109–113, Feb 2011. ISSN 1745-2481. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nphys1856>>. Citado na página 17.
- BOCHKIN, G. A. et al. Many-spin entanglement in zigzag spin chain in multiple quantum nmr. *Applied Magnetic Resonance*, v. 51, n. 7, p. 667–678, Jul 2020. ISSN 1613-7507. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s00723-020-01206-0>>. Nenhuma citação no texto.
- BREUER, H.-P.; PETRUCCIONE, F. *The Theory of Open Quantum Systems*. Oxford: Oxford University Press, 2007. 656 p. ISBN 9780199213900. Disponível em: <<https://oxford.universitypressscholarship.com/10.1093/acprof:oso/9780199213900.001.0001/acprof-9780199213900>>. Citado na página 46.
- CHENG, Y. et al. How do technological innovation and fiscal decentralization affect the environment? a story of the fourth industrial revolution and sustainable growth. *Technological Forecasting and Social Change*, Elsevier, v. 162, p. 120398, 2021. Citado na página 12.
- DÜR, W.; VIDAL, G.; CIRAC, J. I. Three qubits can be entangled in two inequivalent ways. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 62, p. 062314, Nov 2000. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.62.062314>>. Citado na página 19.
- FEDICHKIN, L.; YANCHENKO, M.; VALIEV, K. A. Coherent charge qubits based on GaAs quantum dots with a built-in barrier. IOP Publishing, v. 11, n. 4, p. 387–391, nov 2000. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0957-4484/11/4/339>>. Citado na página 21.
- FRICKE, L. et al. Coherent control of a donor-molecule electron spin qubit in silicon. *Nature Communications*, v. 12, n. 1, p. 3323, Jun 2021. ISSN 2041-1723. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41467-021-23662-3>>. Citado 3 vezes nas páginas 13, 44 e 45.
- GAO, R. et al. Identification of the spintronic nitrogen center in c-gan and its qubit applications. *Journal of Physics D: Applied Physics*, IOP Publishing, v. 54, n. 50, p. 505109, 2021. Citado na página 12.

- GOLDENFELD, N. Sync: The emerging science of spontaneous order. *Physics Today*, v. 57, n. 6, p. 59–60, 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.1784276>>. Citado na página 12.
- 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>>. Citado na página 25.
- GRIFFITHS, D. J. *Introduction to Quantum Mechanics (2nd Edition)*. 2nd. ed. Pearson Prentice Hall, 2004. Hardcover. ISBN 0131118927. Disponível em: <<http://www.amazon.com/exec/obidos/redirect?tag=citeulike07-20&path=ASIN/0131118927>>. Citado 2 vezes nas páginas 16 e 17.
- HENDERSON, H. V.; PUKELSHEIM, F.; SEARLE, S. R. On the history of the kronecker product. *Linear and Multilinear Algebra*, Taylor and Francis, v. 14, n. 2, p. 113–120, 1983. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/03081088308817548>>. Citado na página 16.
- Hensen, B. et al. Loophole-free Bell inequality violation using electron spins separated by 1.3 kilometres. *Nature*, v. 526, n. 7575, p. 682–686, out. 2015. Citado na página 12.
- ITS, A. R.; JIN, B.-Q.; KOREPIN, V. E. Entanglement in the XY spin chain. IOP Publishing, v. 38, n. 13, p. 2975–2990, mar 2005. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0305-4470/38/13/011>>. Nenhuma citação no texto.
- JOHANSSON, J.; NATION, P.; NORI, F. Qutip: An open-source python framework for the dynamics of open quantum systems. *Computer Physics Communications*, v. 183, n. 8, p. 1760–1772, 2012. ISSN 0010-4655. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465512000835>>. Citado na página 32.
- Johnson, M. W. et al. A scalable control system for a superconducting adiabatic quantum optimization processor. *Superconductor Science Technology*, v. 23, n. 6, p. 065004, jun. 2010. Citado na página 12.
- KHIVRICH, I.; CLERK, A. A.; ILANI, S. Nanomechanical pump–probe measurements of insulating electronic states in a carbon nanotube. *Nature Nanotechnology*, v. 14, n. 2, p. 161–167, Feb 2019. ISSN 1748-3395. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41565-018-0341-6>>. Citado na página 25.
- KOCHER, C. A.; COMMINS, E. D. Polarization correlation of photons emitted in an atomic cascade. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 18, p. 575–577, Apr 1967. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.18.575>>. Citado na página 12.
- LASSAGNE, B. et al. Coupling mechanics to charge transport in carbon nanotube mechanical resonators. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 325, n. 5944, p. 1107–1110, 2009. ISSN 0036-8075. Disponível em: <<https://science.sciencemag.org/content/325/5944/1107>>. Citado na página 12.
- LEROY, B. J. et al. Electrical generation and absorption of phonons in carbon nanotubes. *Nature*, v. 432, n. 7015, p. 371–374, Nov 2004. ISSN 1476-4687. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nature03046>>. Citado na página 25.

- LINDBLAD, G. On the generators of quantum dynamical semigroups. *Communications in Mathematical Physics*, v. 48, n. 2, p. 119–130, Jun 1976. ISSN 1432-0916. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF01608499>>. Citado na página 33.
- 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: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.57.120>>. Citado na página 12.
- LUCATTO, B. et al. Charge qubit in van der waals heterostructures. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 100, p. 121406, Sep 2019. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.100.121406>>. Citado na página 17.
- MAHAN, G. D. *Many Particle Physics, Third Edition*. New York: Plenum, 2000. Citado na página 22.
- MENDONÇA, H. G.; SOUZA, F. M. Vibrational effects on the formation of quantum w states. IOP Publishing, v. 134, n. 4, p. 40001, may 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1209/0295-5075/134/40001>>. Citado 5 vezes nas páginas 12, 16, 17, 37 e 46.
- Moore, G. E. Cramming more components onto integrated circuits, reprinted from electronics, volume 38, number 8, april 19, 1965, pp.114 ff. *IEEE Solid-State Circuits Society Newsletter*, v. 11, n. 3, p. 33–35, Sep. 2006. ISSN 1098-4232. Citado na página 12.
- NICHOL, J. M. et al. High-fidelity entangling gate for double-quantum-dot spin qubits. *npj Quantum Information*, v. 3, n. 1, p. 3, Jan 2017. ISSN 2056-6387. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41534-016-0003-1>>. Citado na página 34.
- ONO, K.; MORI, T.; MORIYAMA, S. High-temperature operation of a silicon qubit. *Scientific Reports*, v. 9, n. 1, p. 469, Jan 2019. ISSN 2045-2322. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41598-018-36476-z>>. Citado na página 12.
- PARKINSON, J. B.; FARNELL, D. J. J. *An Introduction to Quantum Spin Systems*. New York, NY, USA: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010. Citado na página 21.
- Petta, J. R. et al. Coherent Manipulation of Coupled Electron Spins in Semiconductor Quantum Dots. *Science*, v. 309, n. 5744, p. 2180–2184, set. 2005. Citado na página 12.
- PIVOLUSKA, M.; PLESCH, M. Implementation of quantum compression on ibm quantum computers. *Scientific Reports*, v. 12, n. 1, p. 5841, Apr 2022. ISSN 2045-2322. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41598-022-09881-8>>. Citado na página 12.
- PLA, J. J. et al. A single-atom electron spin qubit in silicon. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 489, n. 7417, p. 541–545, 2012. Citado na página 12.
- REZENDE, S. M. *Fundamentals of Magnonics*. New York, NY, USA: Springer, 2020. Citado na página 27.
- SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. *Modern Quantum Mechanics*. 2. ed. [S.l.]: Cambridge University Press, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 16.
- SCULLY, M. O.; ZUBAIRY, M. S. *Quantum Optics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1997. Citado na página 57.

SOUZA, F. M.; OLIVEIRA, P. A.; SANZ, L. Quantum entanglement driven by electron-vibrational mode coupling. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 100, p. 042309, Oct 2019. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.100.042309>>. Citado 6 vezes nas páginas 12, 16, 17, 22, 25 e 37.

STEELE, G. A. et al. Strong coupling between single-electron tunneling and nanomechanical motion. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 325, n. 5944, p. 1103–1107, 2009. ISSN 0036-8075. Disponível em: <<https://science.sciencemag.org/content/325/5944/1103>>. Citado na página 12.

TRAUZETTEL, B. et al. Spin qubits in graphene quantum dots. *Nature Physics*, v. 3, n. 3, p. 192–196, Mar 2007. ISSN 1745-2481. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nphys544>>. Citado na página 12.

UDDIN, W. et al. Silicon-based qubit technology: progress and future prospects. *Bulletin of Materials Science*, v. 45, n. 1, p. 46, Mar 2022. ISSN 0973-7669. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s12034-021-02621-0>>. Citado 3 vezes nas páginas 13, 44 e 45.

VANDERSYPEN, L. M. K.; ERIKSSON, M. A. Quantum computing with semiconductor spins. *Physics Today*, v. 72, n. 8, p. 38–45, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/PT.3.4270>>. Citado na página 17.

VOLK, C. et al. Fast charge sensing of si/sige quantum dots via a high-frequency accumulation gate. *Nano Letters*, v. 19, n. 8, p. 5628–5633, 2019. PMID: 31339321. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.9b02149>>. Citado na página 21.

WETZIG, K.; SCHNEIDER, C. M. *Metal based thin films for electronics*. Hoboken, NJ: Wiley, 2006. Disponível em: <<http://cds.cern.ch/record/1609927>>. Citado na página 12.

WOOTTERS, W. K. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 80, p. 2245–2248, Mar 1998. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.80.2245>>. Citado na página 19.

XIAO, Y.-F.; ZOU, X.-B.; GUO, G.-C. One-step implementation of an n-qubit controlled-phase gate with neutral atoms trapped in an optical cavity. *Physical Review A*, APS, v. 75, n. 5, p. 054303, 2007. Citado na página 12.

YONEDA, J. et al. Coherent spin qubit transport in silicon. *Nature Communications*, v. 12, n. 1, p. 4114, Jul 2021. ISSN 2041-1723. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41467-021-24371-7>>. Citado na página 13.

Apêndices

APÊNDICE A – Reescrevendo o Operador Unitário

Para obter a equação (2.12), devemos lembrar da equação de autovalor e autoestado (2.5), nesse sentido o operador agora é da forma $\exp\{-iHt/\hbar\}$, mas podemos expandir funções exponenciais em séries de Taylor, como

$$e^{-iHt/\hbar} = \mathbb{1} + \left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) + \frac{1}{2!} \left(\frac{-iHt}{\hbar}\right)^2 + \dots, \quad (\text{A.1})$$

então se atuarmos o operador exponencial nos autoestados e usando a equação de autovalor e autoestado, obtemos que

$$\begin{aligned} & \left[\mathbb{1} + \left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) + \frac{1}{2!} \left(\frac{-iHt}{\hbar}\right)^2 + \dots \right] |\lambda_i\rangle = \\ & = \left[1 + \left(\frac{-it}{\hbar}\right) \lambda_i + \frac{1}{2!} \left(\frac{-it}{\hbar}\right)^2 (\lambda_i)^2 + \dots \right] |\lambda_i\rangle = e^{-i\lambda_i t/\hbar} |\lambda_i\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

E esse resultado da expressão (A.2) nos permite escrever o estado quântico $|\psi(t)\rangle$ em relação aos autovalores e autoestados do sistema físico, resultando na expressão (2.12).

APÊNDICE B – Transformação de Lang-Firsov

Em diversos trabalhos, é verificado que para interações do tipo eletromecânicos torna-se conveniente realizar a transformação canônica de Lang-Firsov para tratar melhor o problema físico, identificando melhor as interações e também a caracterização energética. Para tanto, é necessário que ao realizar a transformação de Lang-Firsov sejam utilizadas as expansões de Barker-Hausdorff. Nessa seção, vamos mostrar cálculos completos de três termos dos Hamiltonianos do modelo com qubits de carga, um para cada Hamiltoniano 3.1, 3.2 e 3.3. A expansão de Barker-Hausdorff é dada por

$$\bar{B} = e^A B e^{-A} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} [A, B]_m = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \frac{1}{3!} [A, [A, [A, B]]] + \dots \quad (\text{B.1})$$

Da expressão 3.4, podemos verificar que cada termo do operador S comuta com os demais, e dessa forma, podemos reescrever o operador e^S como sendo

$$\begin{aligned} e^S = & e^{\lambda_1 P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes (B^\dagger - B) \otimes \mathbb{1}_v} e^{\lambda_1 P_1 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes (B^\dagger - B)} \\ & e^{\lambda_2 \mathbb{1} \otimes P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes (B^\dagger - B) \otimes \mathbb{1}_v} e^{\lambda_2 \mathbb{1} \otimes P_1 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes (B^\dagger - B)} \\ & e^{\lambda_3 \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes P_0 \otimes (B^\dagger - B) \otimes \mathbb{1}_v} e^{\lambda_3 \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes P_1 \otimes \mathbb{1}_v \otimes (B^\dagger - B)}, \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

e assim, poderemos aplicar os operadores mais facilmente à cada termo dos Hamiltonianos (3.1, 3.2 e 3.3). Usando a base computacional podemos reescrever as matrizes de Pauli σ_k como produtos externos dos estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$, obtendo assim

$$\sigma_x = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|,$$

e por consequência o Hamiltoniano 3.1, será reescrito como

$$H_{qubits} = \bigoplus_{n=1}^3 \left[\frac{\delta_n}{2} \sigma_z^{(n)} + t_n |0\rangle\langle 1|_n + t_n^* |1\rangle\langle 0|_n \right]. \quad (\text{B.3})$$

O uso da nova forma do Hamiltoniano é conveniente uma vez que usarem a expansão de Barker-Hausdorff, e alguns termos da comutação serão zero. Vamos considerar então o termo $|0\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v$, para exemplificar os cálculos desses termos do Hamiltoniano. A primeira verificação que faremos é analisar as posições de P_j do operador B.2, onde P_j pode ser P_0 ou P_1 , e nota-se que para determinados termos de B.2, o comutador é zero, de forma

$$\left[|0\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}, \mathbb{1} \otimes P_j \otimes \mathbb{1} \right] = \left[|0\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}, \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes P_j \right] = 0,$$

ou seja, os termo que comutam com $|0\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v$ não interferem na transformação de Lang-Firsov. Nessa perspectiva, a transformação para esse caso tem contribuição de

$$\begin{aligned} e^S |0\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v e^{-S} &= e^{\lambda_1 P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes (B^\dagger - B) \otimes \mathbb{1}_v} e^{\lambda_1 P_1 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes (B^\dagger - B)} \times \\ &\times (|0\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v) \times \\ &\times e^{-\lambda_1 P_1 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes (B^\dagger - B) \otimes \mathbb{1}_v} e^{-\lambda_1 P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes (B^\dagger - B)} \end{aligned}$$

A fim de simplificar a notação usaremos $\mathcal{P}_0^{(1)} = P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes (B^\dagger - B) \otimes \mathbb{1}_v$. Aplicando a expansão de Barker-Hausdorff no exemplo supracitado e considerando primeiramente a contribuição de $\mathcal{P}_1^{(1)}$, teremos

$$\begin{aligned} e^{\lambda_1 \mathcal{P}_1^{(1)}} (|0\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v) e^{-\lambda_1 \mathcal{P}_1^{(1)}} &= |0\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v + \\ &+ \lambda_1 [\mathcal{P}_1^{(1)}, |0\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v] + \\ &+ \frac{\lambda_1^2}{2!} [\mathcal{P}_1^{(1)}, [\mathcal{P}_1^{(1)}, |0\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v]] + \dots \\ &= |0\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v + \\ &- \lambda_1 |0\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes (B^\dagger - B) + \\ &+ \frac{\lambda_1^2}{2!} |0\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes (B^\dagger - B)^2 + \dots \\ &= |0\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes e^{-\lambda_1 (B^\dagger - B)}. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

De maneira análoga, podemos realizar os cálculos com o termo $\mathcal{P}_0^{(1)}$, mas agora devemos considerar como termo do Hamiltoniano $|0\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes e^{-\lambda_1 (B^\dagger - B)}$, pois já começamos a transformação. Com isso, obtemos que

$$e^{\lambda_1 \mathcal{P}_1^{(0)}} e^{\lambda_1 \mathcal{P}_1^{(1)}} (|0\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v) e^{-\lambda_1 \mathcal{P}_1^{(1)}} e^{-\lambda_1 \mathcal{P}_1^{(0)}} = |0\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes e^{\lambda_1 (B^\dagger - B)} \otimes e^{-\lambda_1 (B^\dagger - B)}. \quad (\text{B.5})$$

Esse procedimento pode ser repetido para todos os outros termos do Hamiltoniano 3.1, com a diferença dos termos que comutaram ou não com o operador S . Ao passo que os termos que possuem apenas P_0 ou P_1 de diferentes de identidades nos subespaços, quando realizamos a transformação de Lang-Firsov, todos comutam os termos do operador S , por exemplo,

$$e^S P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v e^{-S} = P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v. \quad (\text{B.6})$$

Quando vamos tratar o termo de interação (3.3), verificamos que os termos com $P_{j'}$ do operador S não contribuem na transformação de Lang-Firsov, para P_j do operador

de interação V e $j \neq j'$. Traduzindo por meio de um exemplo, se queremos descobrir qual a transformação de Lang-Firsov do termo $P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes (B^\dagger + B) \otimes \mathbb{1}_v$, os termos do operador S com $\{P_1 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}, \mathbb{1} \otimes P_1 \otimes \mathbb{1}, \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes P_1\} \otimes \mathbb{1} \otimes (B^\dagger - B)$ não irão contribuir. No entanto, todos os termos com P_0 do operador S contribuirão na transformação.

Então vamos verificar como fica a transformação para o termo de interação ainda considerando exemplo de $P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes (B^\dagger + B) \otimes \mathbb{1}_v$. Por partes, seja o termo de S a ser considerado $\lambda_3 \Lambda_3 = \lambda_3 \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes P_0 \otimes (B^\dagger - B) \otimes \mathbb{1}$ e expandindo em Barker-Hausdorff.

$$\begin{aligned}
 e^{\lambda_3 \Lambda_3} (P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes (B^\dagger + B) \otimes \mathbb{1}_v) e^{-\lambda_3 \Lambda_3} &= P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes (B^\dagger + B) \otimes \mathbb{1}_v + \\
 &+ \lambda_3 [\Lambda_3, P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes (B^\dagger + B) \otimes \mathbb{1}_v] + \\
 &+ \frac{\lambda_3^2}{2!} [\Lambda_3, [\Lambda_3, P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes (B^\dagger + B) \otimes \mathbb{1}_v]] + \dots
 \end{aligned} \tag{B.7}$$

Teremos que o comutado de primeira ordem será dado por

$$\begin{aligned}
 [\Lambda_3, P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes (B^\dagger + B) \otimes \mathbb{1}_v] &= P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes P_0 \otimes \\
 &\otimes (B^\dagger - B)(B^\dagger + B) - (B^\dagger + B)(B^\dagger - B) \otimes \mathbb{1}_v \\
 &= P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes P_0 \otimes -2[B^\dagger, B] \otimes \mathbb{1}_v \\
 &= -2P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes P_0 \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v.
 \end{aligned} \tag{B.8}$$

Mas em segunda ordem teremos que o comutador será dado por

$$[\Lambda_3, -2P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes P_0 \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v] = 0, \tag{B.9}$$

onde devemos lembrar que $P_0 P_0 = P_0^2 = P_0$. Temos que realizar novamente o cálculo para Λ_1 e Λ_2 , porém os cálculos são análogos ao termo Λ_3 , obteremos que a transformação será da forma

$$\begin{aligned}
 e^S P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes (B^\dagger + B) \otimes \mathbb{1}_v e^{-S} &= P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes (B^\dagger + B) \otimes \mathbb{1}_v + \\
 &-2\lambda_1 P_0 P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v + \\
 &-2\lambda_2 P_0 \otimes P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v + \\
 &-2\lambda_3 P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes P_0 \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v
 \end{aligned} \tag{B.10}$$

Analogamente, os cálculos também podem ser repetidos para P_1 , e na expressão final todos os P_0 serão substituídos por P_1 . Finalmente, podemos discutir sobre o termo

vibracional da rede proporcional a ω_i , novamente, para fins de exemplificar, iremos utilizar o termo $\varpi = \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes B^\dagger B \otimes \mathbb{1}_v$. Em primeira ordem do comutador e considerando em um inicialmente o termo Λ_3 de S , teremos

$$\begin{aligned} [\Lambda_3, \varpi] &= \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes P_0 \otimes \{-B^\dagger[B, B^\dagger] - [B, B^\dagger]B\} \otimes \mathbb{1}_v \\ &= -\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes P_0 \otimes (B^\dagger + B) \otimes \mathbb{1}. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Em termo de comutação de segunda ordem teremos

$$[\Lambda_3, [\Lambda_3, \varpi]] = 2\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes P_0 \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v, \quad (\text{B.12})$$

em terceira, como já visto o comutador será zero. Temos que aplicar agora $e^{\lambda_1 \Lambda_1} e^{\lambda_2 \Lambda_2}$ nos termos resultantes da operação feita via Λ_3 .

$$\begin{aligned} e^S \varpi e^{-S} &= \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes B^\dagger B \otimes \mathbb{1}_v - \lambda_3 \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes P_0 \otimes (B^\dagger + B) \otimes \mathbb{1}_v \\ &\quad + \frac{\lambda_3^2}{2!} 2\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes P_0 \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v - \lambda_2 \mathbb{1} \otimes P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes (B^\dagger + B) \otimes \mathbb{1}_v \\ &\quad + \frac{\lambda_2^2}{2!} 2\mathbb{1} \otimes P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v + \lambda_3 \lambda_2 2\mathbb{1} \otimes P_0 \otimes P_0 \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v \\ &\quad - \lambda_1 P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes (B^\dagger + B) \otimes \mathbb{1} + \frac{\lambda_1^2}{2!} 2P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v \\ &\quad \lambda_3 \lambda_1 2P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes P_0 \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v + \lambda_2 \lambda_1 2P_0 \otimes P_0 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}_v \otimes \mathbb{1}_v \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Analogamente, podemos escrever o termo transformado usando P_1 no lugar de P_0 , e ao final dos cálculos somando termo a termo, obteremos as equações 3.6, 3.7 e 3.8. A primeira vista o termo vibracional possui bastante termos, mas quando somarmos aos outros termos supracitados vários são suprimidos.

APÊNDICE C – Cálculo do Acoplamento Efetivo

C.1 Para três qubits eletrônicos

Na Seção 2.1 foram discutidas algumas propriedades de Tensores, e para realizar o cálculo do elemento de matriz Ω o uso de uma de suas propriedades será fundamental. Vamos considerar agora que os estados são da forma $|ijk, 00\rangle$, onde os índices ijk referem-se ao estado quântico dos qubits, podendo ser $|0\rangle$ ou $|1\rangle$, e $|00\rangle$ referem-se aos estados dos reservatórios, como explicado na Nota de Rodapé 1. Vamos considerar o primeiro sanduíche da expressão 4.2 e usando a propriedade já citada, podemos tratar o cálculo separadamente para cada um dos subsistemas, e ao final realizar uma multiplicação simples de cada sanduíche dos subsistemas.

Seja o sanduíche $\langle 100, 00 | \bar{V} | 000, 00 \rangle$, onde \bar{V} é dado pela equação 3.8, vamos ter um único termo de que seja diferente de zero, considerando ainda a formula para calcular os elementos do operador deslocamento $D(\lambda)$ (SCULLY; ZUBAIRY, 1997), pela expressão C.1.

$$\langle n | D(\lambda) | 0 \rangle = e^{-\lambda^2/2} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} \quad (\text{C.1})$$

$$\begin{aligned} \langle 100, 00 | \bar{V} | 000, 00 \rangle &= t_1 \left\{ [\langle 1 | \sigma_- | 0 \rangle] \cdot [\langle 0 | 0 \rangle] \cdot [\langle 0 | 0 \rangle] \cdot [\langle 0 | D(-\lambda_1) | 0 \rangle] \cdot [\langle 0 | D(\lambda_1) | 0 \rangle] \right\} \\ &= t_1 e^{-\lambda_1^2} \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

Analogamente, para o outro sanduíche $\langle 000, 00 | \bar{V} | 010, 00 \rangle$, no entanto agora são outros termos que realizam o acoplamento entre os estados, mas ainda assim, existe apenas um termo onde o produto não dê zero.

$$\begin{aligned} \langle 000, 00 | \bar{V} | 010, 00 \rangle &= t_2 \left\{ [\langle 0 | 0 \rangle] \cdot [\langle 1 | \sigma_+ | 0 \rangle] \cdot [\langle 0 | 0 \rangle] \cdot [\langle 0 | D(\lambda_2) | 0 \rangle] \cdot [\langle 0 | D(-\lambda_2) | 0 \rangle] \right\} \\ &= t_2 e^{-\lambda_2^2} \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

O outro termo do elemento de matriz Ω , da equação 4.2, são referentes aos sanduíches $\langle 100, 00 | \bar{V} | 110, 00 \rangle$ e $\langle 110, 00 | \bar{V} | 010, 00 \rangle$, conforme

$$\begin{aligned} \langle 100, 00 | \bar{V} | 110, 00 \rangle &= t_2 \left\{ [\langle 0 | 0 \rangle] \cdot [\langle 1 | \sigma_+ | 0 \rangle] \cdot [\langle 0 | 0 \rangle] \cdot [\langle 0 | D(\lambda_2) | 0 \rangle] \cdot [\langle 0 | D(-\lambda_2) | 0 \rangle] \right\} \\ &= t_2 e^{-\lambda_2^2} \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

$$\begin{aligned} \langle 110, 00 | \bar{V} | 010, 00 \rangle &= t_1 \left\{ [\langle 1 | \sigma_- | 0 \rangle] \cdot [\langle 0 | 0 \rangle] \cdot [\langle 0 | 0 \rangle] \cdot [\langle 0 | D(-\lambda_1) | 0 \rangle] \cdot [\langle 0 | D(\lambda_1) | 0 \rangle] \right\} \\ &= t_1 e^{-\lambda_1^2} \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

C.2 Para cadeia de spin - Energias E

A fim de exemplificar as contas realizadas no cálculo da energia E_i , dispostos nas seções 4.2.2.1, 4.2.3.1 e 4.2.4.1, onde i são os estados na cadeia de spin $N = 3$ ou $N = 4$ ou $N = 5$, vamos considerar o caso maior cujo possui mais estados a ser analisado. Assim seja a cadeia de spin $N = 5$, o cálculo de E será dado pela expressão

$$E_i = \langle i|H|i\rangle. \quad (\text{C.6})$$

Da expressão 4.21, podemos ainda reescreve-la na sua forma total, expondo todas as somas e produtos de Kronecker, para que seja de mais fácil visualização a ocorrência ou não da contribuição das energias em cada estado,

$$\begin{aligned} H_{N=5}^{\text{full}} = & -J \left\{ S^x \otimes S^x \otimes I \otimes I \otimes I + I \otimes S^x \otimes S^x \otimes I \otimes I + I \otimes I \otimes S^x \otimes S^x \otimes I + \right. \\ & I \otimes I \otimes I \otimes S^x \otimes S^x + S^y \otimes S^y \otimes I \otimes I \otimes I + I \otimes S^y \otimes S^y \otimes I \otimes I + \\ & I \otimes I \otimes S^y \otimes S^y \otimes I + I \otimes I \otimes I \otimes S^y \otimes S^y + \Delta S^z \otimes S^z \otimes I \otimes I \otimes I + \\ & \Delta I \otimes S^z \otimes S^z \otimes I \otimes I + \Delta I \otimes I \otimes S^z \otimes S^z \otimes I + \Delta I \otimes I \otimes I \otimes S^z \otimes S^z + \\ & \left. -B \left[S^z \otimes I \otimes I \otimes I \otimes I + I \otimes I \otimes I \otimes I \otimes S^z \right] + \right. \\ & \left. -B_{\text{loc}} \left[I \otimes S^z \otimes I \otimes I \otimes I + I \otimes I \otimes S^z \otimes I \otimes I + I \otimes I \otimes I \otimes S^z \otimes I \right] \right\}, \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

onde I são identidades e S^k são matrizes de Pauli.

Nas seções 4.2.2.1, 4.2.3.1 e 4.2.4.1, conseguimos mapear os estados que são acessados via transições virtuais e ainda temos os estados de interesse para formação de estados emaranhados, então podemos analisar apenas as energias do conjunto $\{|00001\rangle, |00010\rangle, |00100\rangle, |01000\rangle, |10000\rangle\}$. Usando a equação C.6 e com auxílio da matriz 4.12, vamos considerar primeiro o estado $|00001\rangle$, no qual teremos o conjunto de equações

$$\begin{aligned}
 \langle 00001 | -JS^x \otimes S^x \otimes I \otimes I \otimes I | 00001 \rangle &= -J \langle 00 | S^x \otimes S^x | 00 \rangle = 0 \\
 \langle 00001 | -JI \otimes S^x \otimes S^x \otimes I \otimes I | 00001 \rangle &= -J \langle 00 | S^x \otimes S^x | 00 \rangle = 0 \\
 \langle 00001 | -JI \otimes I \otimes S^x \otimes S^x \otimes I | 00001 \rangle &= -J \langle 00 | S^x \otimes S^x | 00 \rangle = 0 \\
 \langle 00001 | -JI \otimes I \otimes I \otimes S^x \otimes S^x | 00001 \rangle &= -J \langle 01 | S^x \otimes S^x | 01 \rangle = 0 \\
 \langle 00001 | -JS^y \otimes S^y \otimes I \otimes I \otimes I | 00001 \rangle &= -J \langle 00 | S^y \otimes S^y | 00 \rangle = 0 \\
 \langle 00001 | -JI \otimes S^y \otimes S^y \otimes I \otimes I | 00001 \rangle &= -J \langle 00 | S^y \otimes S^y | 00 \rangle = 0 \\
 \langle 00001 | -JI \otimes I \otimes S^y \otimes S^y \otimes I | 00001 \rangle &= -J \langle 00 | S^y \otimes S^y | 00 \rangle = 0 \\
 \langle 00001 | -JI \otimes I \otimes I \otimes S^y \otimes S^y | 00001 \rangle &= -J \langle 01 | S^y \otimes S^y | 01 \rangle = 0 \\
 \langle 00001 | -J\Delta S^z \otimes S^z \otimes I \otimes I \otimes I | 00001 \rangle &= -J\Delta \langle 00 | S^z \otimes S^z | 00 \rangle = -J\Delta \\
 \langle 00001 | -J\Delta I \otimes S^z \otimes S^z \otimes I \otimes I | 00001 \rangle &= -J\Delta \langle 00 | S^z \otimes S^z | 00 \rangle = -J\Delta \\
 \langle 00001 | -J\Delta I \otimes I \otimes S^z \otimes S^z \otimes I | 00001 \rangle &= -J\Delta \langle 00 | S^z \otimes S^z | 00 \rangle = -J\Delta \\
 \langle 00001 | -J\Delta I \otimes I \otimes I \otimes S^z \otimes S^z | 00001 \rangle &= -J\Delta \langle 01 | S^z \otimes S^z | 01 \rangle = J\Delta \\
 \langle 00001 | JBS^z \otimes I \otimes I \otimes I \otimes I | 00001 \rangle &= JB \langle 0 | S^z | 0 \rangle = JB \\
 \langle 00001 | JB_{\text{loc}} I \otimes S^z \otimes I \otimes I \otimes I | 00001 \rangle &= JB_{\text{loc}} \langle 0 | S^z | 0 \rangle = JB_{\text{loc}} \\
 \langle 00001 | JB_{\text{loc}} I \otimes I \otimes S^z \otimes I \otimes I | 00001 \rangle &= JB_{\text{loc}} \langle 0 | S^z | 0 \rangle = JB_{\text{loc}} \\
 \langle 00001 | JB_{\text{loc}} I \otimes I \otimes I \otimes S^z \otimes I | 00001 \rangle &= JB_{\text{loc}} \langle 0 | S^z | 0 \rangle = JB_{\text{loc}} \\
 \langle 00001 | JBI \otimes I \otimes I \otimes I \otimes S^z | 00001 \rangle &= JB \langle 1 | S^z | 1 \rangle = -JB
 \end{aligned}$$

Note que calculamos o cada elemento de matriz, considerando termo a termo do Hamiltoniano C.7, então agora basta somar cada elemento para obter E_{00001} , obtendo

$$E_{00001} = J[-\Delta - \Delta - \Delta + \Delta + B + B_{\text{loc}} + B_{\text{loc}} + B_{\text{loc}} - B] = J[-2\Delta + 3B_{\text{loc}}]. \quad (\text{C.8})$$

Porém, sabemos que $E_{00001} = E_{10000}$, então não precisamos mostrar os cálculos para E_{10000} . Podemos também calcular as energias E_{00010} , E_{00100} e E_{01000} , no entanto, a fim de exemplificar podemos calcular apenas para um dos estados acessados via transições virtuais, pois $|00010\rangle$, $|00100\rangle$ e $|01000\rangle$ são degenerados.

$$\begin{aligned}
 \langle 00100 | -JS^x \otimes S^x \otimes I \otimes I \otimes I | 00100 \rangle &= -J \langle 00 | S^x \otimes S^x | 00 \rangle = 0 \\
 \langle 00100 | -JI \otimes S^x \otimes S^x \otimes I \otimes I | 00100 \rangle &= -J \langle 01 | S^x \otimes S^x | 01 \rangle = 0 \\
 \langle 00100 | -JI \otimes I \otimes S^x \otimes S^x \otimes I | 00100 \rangle &= -J \langle 10 | S^x \otimes S^x | 10 \rangle = 0 \\
 \langle 00100 | -JI \otimes I \otimes I \otimes S^x \otimes S^x | 00100 \rangle &= -J \langle 00 | S^x \otimes S^x | 00 \rangle = 0 \\
 \langle 00100 | -JS^y \otimes S^y \otimes I \otimes I \otimes I | 00100 \rangle &= -J \langle 00 | S^y \otimes S^y | 00 \rangle = 0 \\
 \langle 00100 | -JI \otimes S^y \otimes S^y \otimes I \otimes I | 00100 \rangle &= -J \langle 01 | S^y \otimes S^y | 01 \rangle = 0 \\
 \langle 00100 | -JI \otimes I \otimes S^y \otimes S^y \otimes I | 00100 \rangle &= -J \langle 10 | S^y \otimes S^y | 10 \rangle = 0 \\
 \langle 00100 | -JI \otimes I \otimes I \otimes S^y \otimes S^y | 00100 \rangle &= -J \langle 00 | S^y \otimes S^y | 00 \rangle = 0 \\
 \langle 00100 | -J\Delta S^z \otimes S^z \otimes I \otimes I \otimes I | 00100 \rangle &= -J\Delta \langle 00 | S^z \otimes S^z | 00 \rangle = -J\Delta \\
 \langle 00100 | -J\Delta I \otimes S^z \otimes S^z \otimes I \otimes I | 00100 \rangle &= -J\Delta \langle 01 | S^z \otimes S^z | 01 \rangle = J\Delta \\
 \langle 00100 | -J\Delta I \otimes I \otimes S^z \otimes S^z \otimes I | 00100 \rangle &= -J\Delta \langle 10 | S^z \otimes S^z | 10 \rangle = J\Delta \\
 \langle 00100 | -J\Delta I \otimes I \otimes I \otimes S^z \otimes S^z | 00100 \rangle &= -J\Delta \langle 00 | S^z \otimes S^z | 00 \rangle = -J\Delta \\
 \langle 00100 | JBS^z \otimes I \otimes I \otimes I \otimes I | 00100 \rangle &= JB \langle 0 | S^z | 0 \rangle = JB \\
 \langle 00100 | JB_{\text{loc}} I \otimes S^z \otimes I \otimes I \otimes I | 00100 \rangle &= JB_{\text{loc}} \langle 0 | S^z | 0 \rangle = JB_{\text{loc}} \\
 \langle 00100 | JB_{\text{loc}} I \otimes I \otimes S^z \otimes I \otimes I | 00100 \rangle &= JB_{\text{loc}} \langle 1 | S^z | 1 \rangle = -JB_{\text{loc}} \\
 \langle 00100 | JB_{\text{loc}} I \otimes I \otimes I \otimes S^z \otimes I | 00100 \rangle &= JB_{\text{loc}} \langle 0 | S^z | 0 \rangle = JB_{\text{loc}} \\
 \langle 00100 | JBI \otimes I \otimes I \otimes I \otimes S^z | 00100 \rangle &= JB \langle 0 | S^z | 0 \rangle = JB
 \end{aligned}$$

Novamente somando termo a termo os elementos da energia E_{00100} , obtemos

$$E_{00100} = J[-\Delta + \Delta + \Delta - \Delta + B + B_{\text{loc}} - B_{\text{loc}} + B_{\text{loc}} + B] = J[2B + B_{\text{loc}}]. \quad (\text{C.9})$$

Exemplificado como foram realizados os cálculos das energias E_i , podemos apenas mostrar a forma das energias dos estados de interesse, quando dos estados acessados via transições virtuais de todas as cadeias de spin analisadas na Seção 4.2.

$N = 3$	
Estados de Interesse	Estados de Transição
$E_{001} = E_{100} = -JB_{\text{loc}}$	$E_{010} = -J[2\Delta + 2B - B_{\text{loc}}]$
$N = 4$	
Estados de Interesse	Estados de Transição
$E_{0001} = E_{1000} = -J[\Delta - 2B_{\text{loc}}]$	$E_{0010} = E_{0100} = -J[-\Delta - 2B]$
$N = 5$	
Estados de Interesse	Estados de Transição
$E_{00001} = E_{10000} = -J[2\Delta - 3B_{\text{loc}}]$	$E_{00010} = E_{00100} = E_{01000} = -J[-2B + B_{\text{loc}}]$

Anexos

ANEXO A – Códigos: Resultados Numéricos

A.1 Qubits Eletrônicos

Como disposto nas Subseções 4.1.2 e 4.1.3, foi utilizado a linguagem de programação PYTHON com pacote aberto QuTip. A construção do Hamiltoniano foi feita de tal forma que podemos controlar os parâmetros físico $[\omega, \delta, t, g]$, além de selecionar se queremos utilizar H_{qubits} (equação (3.1)) ou V (equação (3.2)) ou ainda o Hamiltoniano total. Vale resaltar que para os cálculos numéricos não se faz necessário utilizar o Hamiltoniano transformado por Lang-Firsov, sendo necessária apenas para a análise e compreensão analítica do sistema proposto.

```
def H(w, delta, thop, g):
    ## The identities, projectors and dimensionality of the reservoirs were
    ## predefined. ##
    # physical parametes:
    e3, e4 = w, w
    delta0, delta1, delta2 = delta, delta, delta
    t0, t1, t2 = thop, thop, thop
    g0, g1, g2 = g, g, g
    # qubits Hamiltonian:
    H00 = (delta0/2)*sigmaz()
    Vhop0 = t0*sigmax()
    H01 = (delta1/2)*sigmaz()
    Vhop1 = t1*sigmax()
    H02 = (delta2/2)*sigmaz()
    Vhop2 = t2*sigmax()
    # phonon Hamiltonian:
    B3 = destroy(dim3)
    B4 = destroy(dim4)
    B3d = B3.dag()
    B4d = B4.dag()
    H3 = e3*B3d*B3
    H4 = e4*B4d*B4
    # building the noninteracting Hamiltonian:
    # electronic term:
    H0012 = tensor(H00, I1, I2)+tensor(I0, H01, I2)+tensor(I0, I1, H02)
```

```

Vhop012 = tensor(Vhop0, I1, I2)+tensor(I0, Vhop1, I2)+tensor(I0, I1, Vhop2)
H012 = H0012+Vhop012
# phononic term:
H34 = tensor(H3, I4)+tensor(I3, H4)
H0 = tensor(H0012, I34)+tensor(I012, H3, I4)+tensor(I012, I3, H4)
HT0 = tensor(H012, I34)+tensor(I012, H3, I4)+tensor(I012, I3, H4)
# building the interaction Hamiltonian:
# electron-phonon coupling:
V0 = g0*(tensor(P0, I1, I2, B3d+B3, I4)+tensor(P1, I1, I2, I3, B4d+B4))
V1 = g1*(tensor(I0, P0, I2, B3d+B3, I4)+tensor(I0, P1, I2, I3, B4d+B4))
V2 = g2*(tensor(I0, I1, P0, B3d+B3, I4)+tensor(I0, I1, P1, I3, B4d+B4))
V = V0+V1+V2
# total Hamiltonian:
H = HT0+V
return HT0, V, H

```

A.2 Cadeia de Spin

Nesta subseção, iremos mostrar como foi realizada a implementação numérica das cadeias de spin, disposto na Seção 4.2, na qual foi utilizado subrotinas dos pacotes Numpy, Matplotlib e QuTip, todos para uso em linguagem de programação PYTHON. Na Seção 4.2 foi analisados quatro diferentes casos, sendo para dois, três, quatro e cinco sítios na cadeia, mas nesta subseção será apresentado apenas o caso para cinco sítios, subseção 4.2.4, sem prejuízo da não apresentação dos outros casos, sendo que o Hamiltoniano considerado para cadeias com a quantidade de sítios menor que cinco, é na prática, a retidade um ou mais termos nos produtos de Kronecker. Então o código para a cadeia com cinco sítios é da forma a seguir.

Analogamente à expressão 3.21, os parâmetros físicos usados com a seguinte notação 'J' é a interação de troca, 'B' é campo magnético que atua sob os sítios das bordas, 'Bloc' é o campo magnético que atua sob os sítios internos na cadeia de spin, e 'Delta' é o termo que indica a orientação dos spins na direção-z.

```

#Pauli Matrices:
sx, sy, sz, I = sigmax(), sigmay(), sigmaz(), qeye(2)

#Physical Parameters:
J = 1
B = 1
Bloc = 10*B
Delta = 1/10

```

#Hamiltonian Terms:

```
hx1 = tensor(sx, sx, I, I, I)
hx2 = tensor(I, sx, sx, I, I)
hx3 = tensor(I, I, sx, sx, I)
hx4 = tensor(I, I, I, sx, sx)
hy1 = tensor(sy, sy, I, I, I)
hy2 = tensor(I, sy, sy, I, I)
hy3 = tensor(I, I, sy, sy, I)
hy4 = tensor(I, I, I, sy, sy)
hz1 = Delta* tensor(sz, sz, I, I, I)
hz2 = Delta* tensor(I, sz, sz, I, I)
hz3 = Delta* tensor(I, I, sz, sz, I)
hz4 = Delta* tensor(I, I, I, sz, sz)
```

```
b1 = -B*tensor(sz, I, I, I, I)
b2 = -Bloc*tensor(I, sz, I, I, I)
b3 = -Bloc*tensor(I, I, sz, I, I)
b4 = -Bloc*tensor(I, I, I, sz, I)
b5 = -B*tensor(I, I, I, I, sz)
```

#Total Hamiltonian:

```
H = -J * (hx1+hx2+hx3+hx4+hy1+hy2+hy3+hy4+hz1+hz2+hz3+hz4+b1+b2+b3+b4+b5)
```

#Matrices element in the effective Hamiltonian:

```
Omega = - 2*J/(Delta + B - Bloc)**3
```
