

Universidade Federal de Uberlândia - UFU

Instituto de Física - INFIS

José Nogueira de Castro Neto

**Conceitos Gerais sobre o Emaranhamento com Aplicação
em Moléculas Quânticas**

Uberlândia - MG

2018

José Nogueira de Castro Neto

Conceitos Gerais sobre o Emaranhamento com Aplicação em Moléculas Quânticas

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado como requisito para conclusão do curso de Bacharelado em Física de Materiais pela Universidade Federal de Uberlândia.

Orientadora: Profa. Dra. Liliana Sanz de la Torre

Uberlândia - MG

2018

Resumo

A partir da década de 90, protocolos de teletransporte quântico passaram a explorar o emaranhamento de sistemas bipartites, transformando a busca por estados maximamente emaranhados em um fato de interesse prático. Nesse sentido, propõe-se a obtenção de estados maximamente emaranhados em um sistema de três qubits formados pela oscilação coerente de pontos quânticos nanoestruturados. Para um conjunto de parâmetros físicos do hamiltoniano, estuda-se a dinâmica do sistema através da solução da equação de Von Neumann, obtendo a matriz densidade, da qual se extraem as propriedades do estado quântico. A caracterização desse ocorre por uma análise das populações, pela medida de fidelidade, com relação a um estado maximamente emaranhado definido previamente e por quantificadores de emaranhamento 2-tangle e 3-tangle. Com base na variação das dessintonias, taxa de tunelamento e interação de Coulomb presentes no hamiltoniano, descobriu-se um regime desses parâmetros capaz de criar três subespaços desconexos no hamiltoniano e os estados pertencentes à classe GHZ são obtidos trivialmente pela dinâmica em cada um desses subespaços.

Palavras-chave: emaranhamento, sistemas tripartite, pontos quânticos, informação quântica, classe GHZ.

Abstract

From the 90's, quantum teleportation protocols have been increasing the interest on entanglement of bipartite systems, once the implementation of the first demand the use of maximally entangled states. In this work, it is discussed a theoretical proposal of the dynamical generation of GHZ state, a kind of an entangled state defined in a three qubit system. The physical scenario for the proposal is a set of six charged quantum dots, divided by pairs. Each pair is coupled by tunneling so defining the quantum molecule. If only one electron in excess is allowed per pair of dots, a qubit can be encoded. Electrons from different qubits interact by Coulomb coupling, opening the possibility of definition of entangled states. The quantum dynamics is explored, by solving the Von Neumann equation for the density matrix. The characterization of the quantum dynamics is made by calculating the population of the electronic states and the fidelity considering a target quantum state. The quantification of the entanglement degree is made by calculating 2-tangle and 3-tangle. Varying the physical parameters of the system of interest, specific conditions for the generation of GHZ are obtained and the state are characterized.

Key-words: entanglement, tripartite systems, quantum dots, quantum information, GHZ class.

Lista de Figuras

3.1	Representação pictórica de um qubit no contexto de PQ semicondutores. As duas esferas representam os pontos quânticos em si, e o elétron em excesso é representado pelo preenchimento na cor preta.	50
3.2	Representação pictórica de todas as configurações eletrônicas possíveis no sistema de três qubits, em que se associa a cada configuração um vetor estado da base computacional reduzida.	51
3.3	Gráficos contendo os quantificadores de emaranhamento e as populações associadas aos elementos diagonais da matriz densidade, em cores: τ_3 (preto); τ_2 (vermelho); $\mathcal{F}(\rho(t), \sigma)$ (verde); $\rho_{11}(t)$ (azul); $\rho_{88}(t)$ (amarelo). Todos os demais elementos da diagonal de $\rho(t)$ estão inseridos no último gráfico. . .	53
3.4	Gráfico contendo os critérios de emaranhamento com a fidelidade em GHZ, fase positiva. Em cores: τ_3 (preto); τ_2 (vermelho); $\mathcal{F}(\rho(t), \sigma)$ (verde). . . .	54
3.5	Gráficos contendo os quantificadores de emaranhamento e os elementos diagonais da matriz densidade, em cores: τ_3 (preto); τ_2 (vermelho); $\mathcal{F}(\rho(t), \sigma)$ (verde); $\rho_{33}(t)$ (cinza); $\rho_{66}(t)$ (rosa). Todos os demais elementos da diagonal de $\rho(t)$ estão inseridos no último gráfico.	56
3.6	Dinâmica de emaranhamento, fidelidade e populações para a condição inicial $\rho(0) = \rho_{22} = 1$, em cores: τ_3 (preto); τ_2 (vermelho); $\mathcal{F}(\rho(t), \sigma)$ (verde); $\rho_{22}(t)$ (amarelo); $\rho_{44}(t)$ (azul escuro); $\rho_{55}(t)$ (rosa); $\rho_{77}(t)$ (azul claro). Todos os demais elementos da diagonal de $\rho(t)$ estão inseridos no último gráfico. . .	58
3.7	Gráfico ampliado da evolução temporal das populações, em cores: $\rho_{22}(t)$ (amarelo); $\rho_{44}(t)$ (azul escuro); $\rho_{55}(t)$ (rosa); $\rho_{77}(t)$ (azul claro).	60

3.8 Gráficos contendo os critérios de emaranhamento e os elementos diagonais da matriz densidade, em cores: τ_3 (preto); τ_2 (vermelho); $\mathcal{F}(\rho(t), \sigma)$ (verde); $\rho_{22}(t)$ (amarelo); $\rho_{44}(t)$ (azul escuro); ρ_{55} (rosa); ρ_{77} (azul claro). Todos os demais elementos da diagonal de $\rho(t)$ estão inseridos no último gráfico. . . 61

Sumário

Introdução	7
1 Fundamentação Teórica	11
1.1 Postulados fundamentais da Mecânica Quântica	11
1.1.1 O formalismo do Vetor Estado	11
1.1.2 O formalismo do Operador Densidade	15
1.1.3 Propriedades do Operador Densidade	17
1.2 A equação de Von Neumann	19
2 Emaranhamento	25
2.1 Fenomenologia não clássica	25
2.1.1 Paradoxo EPR	25
2.1.2 Teorema de Bell	27
2.2 Definição formal de Emaranhamento	31
2.2.1 Sistemas puros e mistos	31
2.3 Quantificadores de Emaranhamento	33
2.3.1 Concorrência	34
2.3.2 Traço Parcial	35
2.3.3 2-Tangle	35
2.3.4 3-Tangle	36
2.3.5 Fidelidade	37
2.4 Classes de Estados	37
2.4.1 Classe GHZ	40
2.4.2 Classe W	42

3	Resultados e Discussão	45
3.1	Considerações e construção do sistema de interesse	45
3.2	O método de pesquisa, o algoritmo computacional e terminologias	48
3.3	Obtenção de Estados pertencentes à Classe GHZ	52
4	Conclusão	63

Introdução

Verschränkung, traduzido como emaranhamento, é um termo devido a E. Schrödinger, cunhado para descrever partículas que, interagentes por um período de tempo, são separadas e adquirem um tipo de correlação sem análogo na mecânica clássica [1]. Albert Einstein classificou o fenômeno como *ação fantasmagórica à distância* em consequência da sua quebra de localidade: em sistemas bipartite emaranhados, a medida de algum observável sobre o estado da partícula A altera o estado da partícula B, independente de sua distância de separação espacial. Este conceito é generalizado para sistemas multipartites [2]. Com efeito, isso permite o teletransporte quântico, em que um estado quântico é transportado com a utilização de pares emaranhados e bits clássicos de informação, sem transferência de matéria [3]. Esse protocolo já foi produzido extensivamente em laboratórios usando diversas implementações físicas como a polarização de fótons, spin de elétrons e, mais recentemente, realizou-se o teletransporte da informação codificada em uma partícula para o espaço [4–6].

Com relação à computação quântica, os qubits devem compartilhar emaranhamento de modo a ser possível a realização de operações lógicas. G. Tosi desenvolveu um novo processador quântico explorando a propriedade de não localidade do emaranhamento dos qubits para aumentar a distância entre eles. Esse novo design proporciona a fabricação dos processadores em larga escala e de forma mais barata [7]. Por fim, apesar de o assunto estar envolto de filosofia da ciência relacionada à realidade física e localidade, mais proeminentemente na cultura popular, a partir dos anos 90 uma variedade de quantificadores de emaranhamento surgiu, permitindo estudar o fenômeno de maneira mais pragmática [8]. Nesse sentido, o emaranhamento pode ser considerado um recurso tão real quanto energia [9], promovendo a realização dos protocolos quânticos citados, de sorte que a busca por estados maximamente

(ou quase maximamente) emaranhados torna-se um fato de interesse prático e, portanto, estudos teóricos estão justificados, na medida em que podem permitir a descoberta de novos caminhos para obtê-los.

O problema geral de quantificação de emaranhamento, qual seja, dado um sistema multipartite com matriz densidade, ρ , determinar a quantidade de emaranhamento contido nesse estado não é trivial e ainda é tema aberto na física teórica [10]. Uma das soluções encontradas é a de definir quantificadores de emaranhamento, geralmente em sistemas bi e tripartites. Impõem-se certas restrições a esses quantificadores de forma a satisfazerem $\mathcal{E}(\rho) = 0$ para estados separáveis e $\mathcal{E}(\rho) = 1$ para estados maximamente emaranhados. Como consequência direta, existe a possibilidade de alguns estados possuírem maior grau de emaranhamento se comparado com outros [11]. Historicamente, as *desigualdades de Bell* surgem como primeira testemunha de emaranhamento em sistemas bipartites: quando violadas indicam que o estado possui um grau de emaranhamento. Sequencialmente, tem-se *decomposição de Schmidt* e *critério de Peres-Horodecki* [8]. Apesar de esses critérios indicarem a existência de estados emaranhados, não o quantificam, e essa é a função dada aos quantificadores. Em sistemas bipartites tem-se *Concorrência* e *Entropia de Formação*, para citar alguns [12]. No caso de sistemas tripartites, tem-se *2-Tangle* e *3-Tangle* [13] [14], os quais serão usados neste trabalho.

Em relação ao valor prático da teoria de emaranhamento, tem-se uma gama de sistemas físicos nos quais o emaranhamento foi efetivamente observado, em aplicações visando o processamento quântico de informação. Pontos quânticos carregados têm-se mostrado promissores, como é possível observar nos trabalhos a serem mencionados. Em 2003, Hayashi *et. al* demonstraram a oscilação coerente de um qubit formado por dois pontos quânticos carregados, sendo um deles ocupado por um elétron, conjunto chamado de molécula quântica [15]. Em 2009, Fujisawa *et. al* estudaram um sistema composto por duas moléculas quânticas acopladas, obtendo algumas portas lógicas para sistemas bipartite, incluindo CROT, SWAP e FLIP em um regime muito particular de parâmetros físicos [16].

Sobre os trabalhos realizados no Instituto de Física na Universidade Federal de Uberlândia, em 2015, P. A. Oliveira desenvolveu um estudo sistemático sobre as propriedades de

emaranhamento presentes em tal sistema, mostrando que a base de estados de Bell é interessante para o estudo das propriedades dos autoestados do sistema de duas moléculas acopladas. Em particular, mostrou que estados maximamente emaranhados podem ser obtidos pela manipulação dos parâmetros físicos relacionados à taxa de tunelamento, as dessintonias e interação coulombiana [17]. Por fim, em 2017, Souza e Sanz desenvolveram uma nova equação mestra para descrever sistemas abertos de moléculas quânticas carregadas, fora de equilíbrio [18].

Dessa maneira, deseja-se dar continuidade a estes trabalhos anteriores, aplicando-se o formalismo do operador densidade a um sistema de três moléculas quânticas acopladas, considerando-se interação coulombiana, e, pela aplicação dos quantificadores de emaranhamento escolhidos, sendo estes a Concorrência, o 2-tangle e o 3-tangle, obter estados maximamente emaranhados, ao menos para um regime de parâmetros físicos. Para tanto, deve-se revisar ferramentas básicas da Mecânica Quântica que permitem a descrição adequada de um sistema bipartite ou multipartite, também revisar conceitos fundamentais concernentes ao emaranhamento em sistemas bi e multipartite e, por fim, aprofundar o conhecimento em duas medidas de emaranhamento de aplicação comum no estudo de interação entre qubits: a concorrência e os tangles. O documento está organizado da maneira como segue: Capítulo 1 - Fundamentação Teórica; Capítulo 2 - Emaranhamento; Capítulo 3 - A aplicação em um sistema tripartite; Capítulo 4 - Conclusão; Referências Bibliográficas.

Capítulo 1

Fundamentação Teórica

Apresenta-se neste capítulo um resumo dos conceitos fundamentais a serem usados no estudo do emaranhamento. Na seção 1.1, revisa-se os postulados da mecânica quântica, além da definição e propriedades do operador densidade. Na seção 1.2, discute-se brevemente sobre como tratar o problema de dinâmica quântica do ponto de vista do operador densidade, por meio da solução da equação de Von Neumann.

1.1 Postulados fundamentais da Mecânica Quântica

1.1.1 O formalismo do Vetor Estado

Toda a fenomenologia associada à Mecânica Quântica (MQ) pode ser condensada em seis postulados fundamentais que são apresentados a seguir [19].

Postulado 1 *O estado de um sistema físico, num particular instante t_0 , é completamente determinado por um vetor estado $|\psi(t_0)\rangle$.*

No contexto da MQ associa-se a cada sistema físico um espaço vetorial denotado *espaço estado* e simbolizado por $\mathcal{H}$. Em razão dos demais postulados, e de algumas propriedades impostas aos kets com origem física, mais proeminentemente a conservação da probabilidade e a interpretação estatística devido a Born, impõe-se a $\mathcal{H}$ ser identificado como um espaço de Hilbert. Em síntese, os produtos internos entre kets e bras devem ser

finitos para que se possa atribuir alguma realidade física à fenomenologia da MQ. Uma consequência importante da identificação citada é a existência de *Superposição Quântica*, ou estados originados da superposição de outros kets pertencentes a $\mathcal{H}$. Em mecânica clássica, o conhecimento das coordenadas canônicas $\{q_i(t), p_i(t)\}$ de um sistema em um dado instante, aliadas às equações canônicas de Hamilton-Jacobi, permitem determinar todas as propriedades dinâmicas de interesse em qualquer outro instante, isto é, o estado desse sistema é completamente determinado. Nesse sentido, o postulado 1 apenas enuncia a existência de um analogo quântico às coordenadas generalizadas, o vetor estado, que também caracteriza completamente o sistema.

Postulado 2 *Todo elemento físico efetivamente mensurável pode ser descrito como um operador hermitiano $\mathcal{A}$ atuante em $\mathcal{H}$.*

Como os elementos representantes de estados quânticos são vetores complexos (com produtos internos finitos) e operadores são os objetos matemáticos capazes de atuar neles, esse postulado pode ser justificado, com a particularização adicional dos operadores serem sempre do tipo hermitiano. Devido ao Postulado 2, um operador hermitiano $\mathcal{A}$ é dito *Observável*. Observáveis são importantes devido a dois teoremas concernentes às suas propriedades, quais sejam, todos os seus autovalores são reais ($\{a_n\} \in \mathbb{R}, \forall n = 1, \dots, \dim \mathcal{H}$) e todos os seus autovetores, com autovalores distintos, são ortogonais ($\langle a_m | a_n \rangle = \delta_{mn}, \forall n = 1, \dots, \dim \mathcal{H}$), sendo a primeira de importância fundamental ao postulado 3.

Postulado 3 *O único resultado possível da medida de um observável $\mathcal{A}$ corresponde a um de seus autovalores.*

O sentido atrelado ao termo medida deve ser considerado como o de uma interação macroscópica (instrumento essencialmente clássico) sob o sistema quântico, permitindo ao experimentador conhecer propriedades do último: energia, momento angular ou posição para citar alguns exemplos (cada qual com um observável distinto) [20]. Associa-se um elemento da realidade física - o instrumento de medida - a um objeto matemático abstrato - o observável. A aplicação do operador que representa o dito observável sobre o vetor estado do sistema (o ato de medir) pode somente retornar como valor algum elemento pertencente ao

espectro desse observável. Para os propósitos desse trabalho é suficiente considerar apenas observáveis de espectro discreto e não degenerado, particularizando os dois próximos postulados.

Postulado 4 *Quando um observável $\mathcal{A}$ é medido em um sistema de estado $|\psi(t)\rangle$, necessariamente normalizado, a probabilidade de obter-se o autovalor a_n , conforme o postulado 3 é expressa por $\mathcal{P}(a_n) = |\langle a_n | \psi(t) \rangle|^2$.*

Nesse ponto, pode-se fazer um breve comentário relacionado ao postulado 4, a começar pela importante equação de autovalores de um observável. Com efeito, considere a equação abaixo.

$$\mathcal{A} |a_n\rangle = a_n |a_n\rangle, \quad \forall n = 1, \dots, \dim \mathcal{H}. \quad (1.1)$$

A solução da Eq. (1.1), via solução da equação característica de ordem $\dim \mathcal{H}$, permite determinar o espectro de $\mathcal{A}$, $\{a_n\}$ e também o conjunto de seus autoestados $\{|a_n\rangle\}$. Agora, o número de autoestados é o mesmo dado pela dimensão de $\mathcal{H}$, e como esse conjunto é ortonormal, a álgebra linear permite utilizá-lo como base de $\mathcal{H}$. Portanto, em consequência do comentário feito sobre o Postulado 1, todo estado $|\psi(t)\rangle$ pode ser expandido pelos autovetores de um observável, como segue [21].

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= I |\psi\rangle = \left(\sum_n |a_n\rangle \langle a_n| \right) |\psi\rangle \\ \sum_n \langle a_n | \psi \rangle |a_n\rangle &= \sum_n c_n |a_n\rangle. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Comparando-se a expressão (1.2) com o postulado 4, conclui-se que a probabilidade $\mathcal{P}(a_n)$ de obtenção do autovalor a_n equivale ao módulo quadrado do coeficiente da decomposição de $|\psi\rangle$ na base dos autoestados $\{|a_n\rangle\}$, isto é $|c_n|^2$. Talvez este seja o Postulado mais contraintuitivo dentre todos, e é devido a Born. Sua manutenção como postulado decorre da confirmação empírica (vista por exemplo no experimento de Stern-Gerlach).

Postulado 5 *Se a medida de um observável $\mathcal{A}$ sobre um sistema de vetor estado arbitrário, conforme (1.2), resultar no autovalor a_n , o vetor estado representante do sistema imediatamente após a medida deve ser o respectivo autoestado $|a_n\rangle$.*

No caso do quinto postulado, a confirmação empírica também indica o colapso do vetor estado num dos autoestados do observável aplicado (visto pela obtenção do mesmo autovalor em medidas subsequentes do observável), entretanto, esse colapso deve ser instantâneo, de acordo com a própria MQ. Essa faceta (localidade), aliada à hipótese de realismo, foi utilizada por Einstein para caracterizar a MQ como teoria incompleta.

Postulado 6 *A evolução temporal do vetor estado $|\psi(t)\rangle$ é governada pela equação de Schrödinger:*

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle, \quad (1.3)$$

onde $H(t)$ é o operador Hamiltoniano, associado à energia do sistema e obtido pela quantização do Hamiltoniano clássico.

Conforme o primeiro parágrafo dessa subseção, toda a MQ está contida nesses seis postulados. No entanto, existem algumas particularidades acerca dos mesmos. Do ponto de vista do formalismo, existem duas representações principais da MQ: representação de Schrödinger, em que os vetores estado dependem explicitamente do parâmetro tempo, representação de Heisenberg, em que os observáveis são explicitamente dependentes do tempo [21]. Enunciados de tal maneira, escolhe-se implicitamente pela representação de Schrödinger (note por exemplo o postulado 6). Para além da representação, pode-se escolher o formalismo a ser utilizado: vetor estado; operador densidade. Nesse trabalho, define-se como *modus operandi* a representação de Schrödinger no formalismo da matriz densidade. Essa escolha está distante da arbitrariedade, e sua motivação é fundamentada nos parágrafos subsequentes.

De modo geral, um sistema quântico pode ser considerado puro ou misto. No primeiro caso, é sempre possível associar ao sistema um vetor estado, digamos $|\psi(t)\rangle$. Aparentemente trivial (veja o Postulado 1), a colocação anterior não o é, devido à existência de sistemas mistos, que de certa maneira violam o primeiro Postulado enunciado. De fato, são esses sistemas um dos grandes impulsionadores para o desenvolvimento do formalismo da matriz densidade. Seja um conjunto de vetores estados $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_i\rangle, \dots, |\psi_s\rangle\}$. A cada $|\psi_i\rangle$, associa-se uma probabilidade clássica p_i , de sorte que se tem um conjunto de

probabilidades $\{p_1, p_2, \dots, p_i, \dots, p_s\}$ satisfazendo $\sum_{i=1}^s p_i = 1$. Então, diz-se que o sistema possui a probabilidade p_i de ocupar a configuração referente ao vetor estado $|\psi_i\rangle$. Nesse caso, não há um vetor estado genérico $|\psi(t)\rangle$ em que se pode representar completamente o sistema, conhece-se apenas um conjunto de configurações acessíveis, tão prováveis quanto o seu peso probabilístico permite. Geralmente esse tipo é mais frequente na natureza, sendo uma consequência de nossa ignorância sobre o estado ocupado pelo sistema (exemplos diversos são polarização de um fóton emitido por uma fonte de luz natural, e spin dos eletrons emitidos por uma fonte térmica à temperatura T no experimento de Stern-Gerlach) [19]. Assim, descartado o formalismo de vetor estado, deve-se recorrer ao formalismo do operador densidade. Por fim, note que em sistemas puros, ambos formalismos são equivalentes.

O formalismo da matriz densidade fornece a base para o cálculo e análise da dinâmica do emaranhamento que será apresentada no capítulo 3. Ao aplicar estes conceitos para os sistemas tripartites serão considerados apenas sistemas puros. No entanto, além de o formalismo do operador densidade permitir uma generalização rápida do estudo para considerar estados mistos, existe um segundo fator determinante na escolha, qual seja, os quantificadores de emaranhamento foram construídos de forma a serem aplicados proeminentemente em matrizes densidade (particularmente em sistemas bipartites, mas é possível contornar essa technicalidade ao calcular o traço parcial permitindo sua utilização em sistemas tripartites).

Na próxima subseção, é apresentado o formalismo da matriz densidade e são apresentadas as principais propriedades satisfeitas por um operador densidade, num sentido parecido ao dos postulados da MQ.

1.1.2 O formalismo do Operador Densidade

A MQ é intrinsecamente estatística e, por conseguinte, médias e variâncias das medidas obtidas empiricamente surgem de forma natural, para além de erros instrumentais. Nesse sentido, [22] oferece uma boa motivação para a introdução do operador densidade. Com efeito, considere um sistema puro representado pelo vetor estado $|\psi(t)\rangle$, um observável $\mathcal{Q}$ e um conjunto de autoestados $\{|u_n\rangle\}$ referentes a outro observável $\mathcal{U}$. Expande-se

então o vetor estado e o observável nessa base, obtendo-se:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle, \quad (1.4)$$

$$\mathcal{Q} = \sum_{n',n} \langle u_{n'} | \mathcal{Q} | u_n \rangle |u_{n'}\rangle \langle u_n|. \quad (1.5)$$

Define-se então o *valor esperado* de $\mathcal{Q}$, no caso de um estado puro, pela expressão $\langle \mathcal{Q} \rangle = \langle \psi | \mathcal{Q} | \psi \rangle$. Aplicando-se (1.4) e (1.5), tem-se:

$$\langle \mathcal{Q} \rangle = \sum_{n',n} \mathcal{Q}_{n',n} C_n C_{n'}^*. \quad (1.6)$$

Essa quantidade pode ser interpretada como segue: sejam $N \gg 1$ sistemas identicamente preparados de estado $|\psi\rangle$, mede-se em todos eles, simultaneamente, o mesmo observável $\mathcal{Q}$. A média de todos esses resultados será justamente $\langle \mathcal{Q} \rangle$.

No caso de um sistema misto, esse pode ocupar distintos estados, $|\psi^i\rangle$, cada qual com probabilidade p_i . Define-se então o valor esperado individual $\langle \mathcal{Q}^i \rangle = \langle \psi^i | \mathcal{Q} | \psi^i \rangle$, de expressão muito parecida à (1.6):

$$\langle \mathcal{Q} \rangle = \sum_{n',n} \mathcal{Q}_{n',n} C_n^i C_{n'}^{*i}, \quad (1.7)$$

sendo a diferença entre (1.6) e (1.7), os coeficientes de expansão. No caso misto, esses dependem de qual o estado ocupado pelo sistema (notado pela inclusão do índice i). Assim, o valor esperado geral será dado pela média ponderada dos valores esperados individuais, com os pesos probabilísticos p_i :

$$\langle \mathcal{Q} \rangle = \sum_i p_i \langle \mathcal{Q}^i \rangle = \sum_{n',n} \mathcal{Q}_{n',n} \sum_i p_i C_{n'}^{*i} C_n^i. \quad (1.8)$$

Por fim, baseando-se em (1.8), define-se o termo geral da matriz densidade ρ como:

$$\rho_{n,n'} = \sum_i p_i C_{n'}^{*i} C_n^i. \quad (1.9)$$

1.1.3 Propriedades do Operador Densidade

Algumas propriedades principais podem ser extraídas da forma tomada pelo termo geral da matriz densidade em (1.9), enunciadas a seguir, sendo válidas, em princípio, para sistemas puros ou mistos [22].

Propriedade 1 *O valor esperado de qualquer observável $\mathcal{Q}$ é dado pela expressão*

$$\langle \mathcal{Q} \rangle = \text{Tr}\{\mathcal{Q}\rho\}. \quad (1.10)$$

Como dito anteriormente, é possível mostrar a definição (1.10) como consequência direta da (1.9) substituída em (1.8). Tem-se:

$$\langle \mathcal{Q} \rangle = \sum_{n',n} \mathcal{Q}_{n',n} \rho_{n,n'} = \sum_{n',n} \langle u_{n'} | \mathcal{Q} | u_n \rangle \langle u_n | \rho_{n,n'} | u_{n'} \rangle. \quad (1.11)$$

Usando o princípio de completeza/completude onde $I = \sum_n |u_n\rangle\langle u_n|$ [21], obtem-se:

$$\langle \mathcal{Q} \rangle = \sum_{n'} \langle u_{n'} | \mathcal{Q} \rho | u_{n'} \rangle = \text{Tr}\{\mathcal{Q}\rho\}. \quad (1.12)$$

Certamente (1.10) é uma expressão muito útil, inclusive do ponto de vista prático. Conhecida ρ e a forma matricial do observável $\mathcal{Q}$, seu valor esperado é obtido do *traço* da matriz resultante de seu produto e, computacionalmente, produtos entre matrizes e traços são facilmente implementados.

Propriedade 2 *O operador densidade de um sistema misto pode ser escrito como média ponderada, com pesos p_i , das matrizes densidade ρ^i :*

$$\rho = \sum_i p_i \rho^i. \quad (1.13)$$

Note que $\rho_{n,n'} = \sum_i p_i \langle u_n | \psi^i \rangle \langle \psi^i | u_{n'} \rangle$. Identificando-se a equivalência $|\psi^i\rangle\langle\psi^i| = \rho^i$, obtem-se $\rho_{n,n'} = \sum_i p_i \rho_{n,n'}^i$, provando-se a propriedade 2. Tratando-se de um sistema puro, todos os p_i serão nulos, exceto por um, de índice k , tal que $p_k = 1$, de sorte que

$\rho = |\psi^k\rangle\langle\psi^k|$, em outras palavras, a matriz densidade é simplesmente o *produto externo* do vetor estado do sistema.

Propriedade 3 A condição $\langle\mathcal{Q}\rangle \in \mathbb{R}, \forall \mathcal{Q} = \mathcal{Q}^\dagger$ implica na hermiticidade do operador densidade:

$$\rho_{n',n} = \rho_{n,n'}^*. \quad (1.14)$$

Propriedade 4 A condição de que o valor esperado do operador identidade seja 1, implica no traço da matriz densidade também ser a unidade.

$$\text{Tr}\{\rho\} = \sum_n \rho_{nn} = 1. \quad (1.15)$$

Considere um vetor estado $|\psi\rangle$ normalizado, isto é, satisfaz $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Então, $\langle I \rangle = \langle\psi|I|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1$. Mas pela propriedade 1, $\langle I \rangle = \text{Tr}\{I\rho\} = \text{Tr}\{\rho\}$. Portanto, a equivalência desses dois resultados confirma a propriedade 4.

Propriedade 5 Todo operador com espectro não negativo requer um valor esperado não negativo, de sorte que ρ deve ser positiva-definida, isto é, todos os seus elementos diagonais, independente da base de representação, são não negativos:

$$\rho_{kk} \geq 0. \quad (1.16)$$

A propriedade 5 (escrita dessa forma é válida apenas quando os estados tratados são puros) é um requerimento necessário pela interpretação física dada aos elementos diagonais da matriz densidade, qual seja, dada uma base ortonormal $\{|u_n\rangle\}$ (autoestados de algum operador hermitiano $\mathcal{U}$) em que se expande ρ , tem-se ρ_{kk} como a probabilidade de o sistema ocupar o estado $|u_k\rangle$, por isso tais elementos diagonais são chamados *populações*. Nesse sentido, a propriedade 4 garante a conservação de probabilidade - o sistema (fechado) certamente ocupará alguma configuração, seja ela de superposição entre os estados (quando dois ou mais elementos diagonais são não nulos) ou apenas um deles (quando apenas um elemento diagonal é não nulo). Os elementos fora da diagonal também tem uma interpretação

física associada, qual seja, o elemento arbitrário ρ_{ij} dá uma medida da correlação (puramente quântica) entre os estados $|u_i\rangle$ e $|u_j\rangle$, por isso são denominados *coêrências* [19] [22].

Propriedade 6 *A matriz densidade ρ pode ser transformada numa matriz diagonal por uma transformação de similaridade.*

A prova dessa propriedade está além do escopo desse trabalho, no entanto, em decorrência da propriedade 4, da propriedade de que o traço de uma matriz é simplesmente a soma de seus autovalores e de que o traço independe da base de representação, pode-se inferir a existência de alguma transformação $\mathcal{T}$ capaz de diagonalizá-la, de forma a satisfazer simultaneamente todos os três requisitos citados.

A última propriedade a ser citada é de tal importância que se julgou melhor escrevê-la numa seção separada, encontrada a seguir.

1.2 A equação de Von Neumann

Propriedade 7 *A evolução temporal de um sistema fechado, na representação de Schrödinger, via formalismo do operador densidade é governada pela equação de Von Neumann:*

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho(t) = [H, \rho(t)]. \quad (1.17)$$

Faz-se importante determinar a solução geral de (1.17), pois todas as informações do sistema serão extraídas de ρ nas aplicações apresentadas no capítulo 3, seja no estudo das populações ou mesmo na determinação da separabilidade dos estados obtidos via dinâmica. Dessa maneira, será apresentada uma solução pelo postulado de expansão na base dos autoestados do Hamiltoniano e a confirmação dessa, pela solução via operador de evolução temporal.

Com efeito, seja um sistema quântico com operador Hamiltoniano H , de dimensão N . Supõe-se conhecido o conjunto $\{|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_N\rangle\}$ de autoestados normalizados de H , e o seu espectro $\{E_1, \dots, E_N\}$, naturalmente obedecendo a equação de autovalores $H|\psi_k\rangle = E_k|\psi_k\rangle \quad \forall k = 1, \dots, N$. Ambos os conjuntos são obtidos da solução da

equação característica de H , um polinômio de ordem N . Para os propósitos desse trabalho, essa suposição demonstra-se factível, uma vez que a dimensão máxima será $N = 8$ e o problema será resolvido numericamente, como apresentado no capítulo 3.

Constrói-se então o operador $S^\dagger$, da maneira como segue: $S^\dagger = (|\psi_1\rangle \langle\psi_2| \dots |\psi_N\rangle \langle\psi_N|)$. Portanto, $S^\dagger$ é uma matriz com as colunas constituídas dos autoestados de H . Por fim, tem-se o operador S , definido pela relação $S = (S^\dagger)^\dagger$, ambos satisfazendo $SS^\dagger = S^\dagger S = I_N$, em que I_N é a matriz identidade de ordem N . O fato de (1.17) ser uma equação matricial implica a dependência dos elementos de $\dot{\rho}$, ρ e H com a base escolhida para representação. A solução explora essa liberdade e é exatamente equivalente ao que se faz para resolver a equação de Schrödinger independente do tempo.

Inicia-se por observar a forma tomada pelo operador Hamiltoniano na base de seus autovetores, qual seja, diagonal. Fixada a sequência desses autoestados na base, a diagonal de H deve ser composta pelos autovalores correspondentes. A partir de H , construir o Hamiltoniano diagonal, H_d , significa realizar uma transformação de similaridade sobre o primeiro:

$$H_d = SHS^\dagger. \quad (1.18)$$

A equação (1.18) pode ser invertida pela propriedade do produto entre os operadores S e $S^\dagger$, tornando-se:

$$H = S^\dagger H_d S. \quad (1.19)$$

Substituindo-se (1.19) em (1.17) e aplicando-se a transformação de similaridade, tem-se:

$$i\hbar(S\dot{\rho}S^\dagger) = S[(S^\dagger H_d S)\rho - \rho(S^\dagger H_d S)]S^\dagger. \quad (1.20)$$

E após algumas manipulações em (1.20):

$$\dot{\rho}' = \frac{-i}{\hbar} [H_d, \rho'], \quad (1.21)$$

em que $\rho' = S\rho S^\dagger$ é a matriz densidade expandida na base dos autovetores de H .

A vantagem da (1.21) sobre a (1.17) é a forma tomada pelo comutador $[H_d, \rho']$.

Mostra-se facilmente que seu termo geral é dado por:

$$[H_d, \rho'] = \begin{cases} 0, & \text{se } i = j. \\ (E_i - E_j)\rho_{ij}', & \text{se } i \neq j. \end{cases} \quad (1.22)$$

Consequentemente, o elemento da matriz densidade $\dot{\rho}_{ij}'$ toma a forma:

$$\dot{\rho}_{ij}' = \begin{cases} 0, & \text{se } i = j. \\ \frac{-i}{\hbar}(E_i - E_j)\rho_{ij}', & \text{se } i \neq j. \end{cases} \quad (1.23)$$

Expandida nesse espaço, as populações são constantes do tempo, enquanto as coerências oscilam harmonicamente na frequência de transição $\omega_{ij} = \frac{(E_i - E_j)}{\hbar}$. Esse sistema de equações possui solução analítica dada por:

$$\rho_{ij}'(t) = \begin{cases} \rho_{ij}'(0), & \text{se } i = j. \\ \rho_{ij}'(0) \exp\left\{\frac{-i}{\hbar}(E_i - E_j)t\right\}, & \text{se } i \neq j. \end{cases} \quad (1.24)$$

Dessa maneira, todos os elementos da matriz densidade estão determinados no espaço de H . Usando a Eq. (1.24), constrói-se ρ' , então por uma transformação de similaridade inversa $\rho = S^\dagger \rho' S$, determina-se de fato a solução da equação de Von Neumann (1.17). Seu termo geral é dado por:

$$\rho_{ij}(t) = \sum_{n,k} S_{in}^\dagger \rho_{nk}' S_{kj}. \quad (1.25)$$

Há apenas uma última ressalva quanto as equações (1.24) e (1.25), decorrentes do fato de (1.17) ser uma equação diferencial de primeira ordem no tempo. A matriz densidade obtida está determinada a menos das constantes $\rho_{ij}'(0)$, porquanto é necessário o conhecimento da condição inicial do sistema de forma a resolver completamente a (1.17). Essa imposição adicional implica outra transformação de similaridade, dessa vez sobre a matriz

densidade inicial do sistema em sua base original, denotada $\rho(0)$. Assim:

$$\rho_{ij}'(0) = \sum_{n,k} S_{in} \rho_{nk}(0) S_{kj}^\dagger. \quad (1.26)$$

Há uma sequência preferencial de aplicação desse método para solução da Eq. (1.17): primeiro, usa-se a Eq. (1.26) na determinação da matriz densidade que descreve a condição inicial do problema de interesse no espaço de autoestados de H . Depois, faz-se uso da Eq. (1.24) na solução da Eq. (1.21), obtendo assim a matriz densidade dependente do tempo. Deve-se ressaltar a facilidade computacional de implementação do código para a aplicação desse método, uma vez que, essencialmente, tratam-se de produtos entre matrizes de dimensões baixas.

Um método mais eficiente de determinação da solução de (1.17), é através da utilização do operador de evolução temporal $\mathcal{U}(t, t_0)$ [21] [22]. Deve-se considerar a situação da dinâmica de um sistema puro, com hamiltoniano H independente do tempo. Assim, tem-se $\mathcal{U}(t, t_0) = \exp\left\{\frac{-i}{\hbar}H(t - t_0)\right\}$. Ainda, $|\psi(t)\rangle = \mathcal{U}(t - t_0) |\psi(t_0)\rangle$ e, por fim, $\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$. Portanto:

$$\rho(t) = \exp\left\{\frac{-i}{\hbar}H(t - t_0)\right\} |\psi(t_0)\rangle\langle\psi(t_0)| \exp\left\{\frac{i}{\hbar}H(t - t_0)\right\}. \quad (1.27)$$

O termo $|\psi(t_0)\rangle\langle\psi(t_0)|$ pode ser identificado como $\rho(t_0)$. Aplicando-se em (1.27) o produto interno pelos autoestados do Hamiltoniano, tem-se:

$$\langle\psi_i|\rho(t)|\psi_j\rangle = \langle\psi_i|\exp\left\{\frac{-i}{\hbar}H(t - t_0)\right\}\rho(t_0)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}H(t - t_0)\right\}|\psi_j\rangle. \quad (1.28)$$

A aplicação do operador $\mathcal{U}(t, t_0)$ em um dos autoestados $|\psi_i\rangle$ resulta apenas na obtenção de uma fase por parte desse autoestado, $\exp\left\{\frac{-i}{\hbar}H(t - t_0)\right\} |\psi_i\rangle = \exp\left\{\frac{-i}{\hbar}E_i(t - t_0)\right\} |\psi_i\rangle$, de maneira que (para $i \neq j$):

$$\rho_{ij}'(t) = \rho_{ij}'(0) \exp\left\{\frac{-i}{\hbar}(E_i - E_j)(t - t_0)\right\}, \quad (1.29)$$

a mesma expressão obtida pelo outro método. Caso $i = j$, a subtração dos autovalores resultaria simplesmente num termo constante $\rho_{ii}'(t) = \rho_{ii}'(t_0)$.

A veracidade das equações obtidas, principalmente (1.25), podem também ser confirmadas pelo teste do sistema de dois níveis, cujo Hamiltoniano tem a forma:

$$\begin{pmatrix} \epsilon & V \\ V & \epsilon \end{pmatrix}. \quad (1.30)$$

onde V é o termo de acoplamento entre os dois níveis. Pela aplicação do primeiro método explanado, obtem-se a solução analítica, isto é, a matriz densidade $\rho(t)$ desse sistema:

$$\begin{pmatrix} \cos\left(\frac{Vt}{\hbar}\right)^2 & i\sin\left(\frac{Vt}{\hbar}\right)\cos\left(\frac{Vt}{\hbar}\right) \\ -i\sin\left(\frac{Vt}{\hbar}\right)\cos\left(\frac{Vt}{\hbar}\right) & \sin\left(\frac{Vt}{\hbar}\right)^2 \end{pmatrix}. \quad (1.31)$$

Esse resultado está em acordo com a literatura, podendo ser confirmado pela construção da matriz densidade a partir do vetor estado do sistema de dois níveis [20].

Capítulo 2

Emaranhamento

Neste capítulo, apresenta-se uma revisão sobre o assunto principal da monografia, sendo este o emaranhamento de sistemas quânticos. Inicialmente, apresenta-se brevemente o paradoxo EPR, usando a formulação de Bohm para o problema e o teorema de Bell. Seguidamente, define-se formalmente o problema do emaranhamento, além da distinção entre sistemas puros e mistos. Apresenta-se ao final do capítulo o conjunto de quantificadores de grau de emaranhamento que serão usados no capítulo posterior de resultados.

2.1 Fenomenologia não clássica

2.1.1 Paradoxo EPR

Em primeira ordem, o Paradoxo EPR e o subsequente Teorema de Bell não foram propostos de forma a contemplar as propriedades de estados emaranhados, mas sim avaliar a completeza da MQ. Entretanto, a fundamentação argumentativa de Einstein *et. al* baseava-se no Princípio da localidade e, de forma aparente, esse é violado pelas correlações não clássicas presentes em estados emaranhados [2]. Nesse sentido, busquemos a formulação de Bohm para paradoxo EPR, de maneira a discorrermos sobre o mesmo num nível quantitativo [20]. Considere o decaimento da partícula π^0 (méson pi), inicialmente estacionária, em um e^- (eletron) e um e^+ (positron). Podem-se inferir algumas propriedades do estado resultante pelas leis de conservação. Com efeito, pela conservação do momento total, essas

devem se mover com módulo de velocidade $|v|$, mesma direção e sentidos opostos. Pela conservação do momento angular de spin, inicialmente nulo $s = 0$, as partículas devem ocupar a configuração de singleto, cujo vetor estado é da forma:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (2.1)$$

quando escrito na base dos autoestados do operador S_z . O primeiro índice refere-se à projeção do spin de e^- na direção $\hat{z}$ e, analogamente para o segundo índice relacionado ao e^+ .

Medindo-se o spin do e^- e obtendo-se, digamos, *spin up*, tem-se como consequência o spin de e^+ ser do tipo *spin down* e vice-versa, portanto o resultado de tais medidas está intimamente correlacionado. Nesse contexto, a MQ oferece-nos apenas a informação de que num ensemble de estados singleto, em metade das vezes o spin do elétron será medido como sendo do tipo *up* e em metade do tipo *down*, independente da distância espacial entre as partículas. A interpretação de Copenhague assume o colapso da função de onda no instante da medida, de sorte que o resultado do spin do elétron, qualquer que seja, produz a propriedade de spin do pósitron e permite-nos conhecê-lo sem a necessidade de se realizar qualquer medida (no sentido dado pelo postulado 3) sobre o próprio pósitron. Essa interpretação é bastante contraintuitiva para uma mente embebida na fenomenologia clássica (e até relativística), pois, assumindo a completeza da MQ, o colapso instantâneo da função de onda e, conseqüentemente a não localidade, tornam-se facetas da natureza. A interpretação realista, mais proeminentemente devido a Einstein, caminha em outra direção. Assume-se primeiro a localidade, isto é, nenhuma informação pode ser transmitida a uma velocidade superior à da luz no vácuo c , em segundo que as medidas são realizadas em instantes nos quais as partículas estão a uma distância suficiente para que atrasos devido a transmissão de informação sejam mensuráveis (distâncias da ordem de anos-luz, por exemplo) e, finalmente, a inexistência de interações realizadas pelo experimentador sobre o pósitron. Por um lado, a MQ nos diz sobre a relação anti-paralela dos spins, por outro nenhum tempo de atraso é previsto pela MQ (colapso instantâneo da função de onda). Assim, de forma a não violar a

localidade, o pósitron deve ter sua propriedade de spin anteriormente à medida do elétron (e, para todos os efeitos, até o elétron deve ter sua medida de spin bem definida previamente à medida), o que implica na incompleteza da MQ, pois, mesmo conhecendo-se o vetor estado do sistema (Postulado 1), existem informações sobre o mesmo inacessíveis. Assume-se então a existência de variáveis ocultas que, combinadas ao vetor estado, podem descrever completamente o sistema. A denotada *ação fantasmagórica à distância* por Einstein - é essa suposta influência da medida em uma parte do sistema sobre outra por meios desconhecidos, considerando-a absurda.

2.1.2 Teorema de Bell

A solução para o Paradoxo EPR é dada pelo Teorema de Bell [20]. Primeiramente, considere uma generalização do modelo EPR/Bohm, no qual as medidas de projeção de spin são tomadas em direções arbitrárias: $\hat{a}$ para o elétron e $\hat{b}$ para o pósitron. O estado do sistema continua sendo dada pela equação (2.1), porém o interesse agora é o cálculo do valor esperado $\langle \psi | (\vec{S}_1 \cdot \hat{a})(\vec{S}_2 \cdot \hat{b}) | \psi \rangle$, em que $\vec{S}_1$ é o vetor de spin do elétron e $\vec{S}_2$ é o vetor de spin do pósitron. Esse valor esperado pode ser interpretado como a média do produto da projeção dos spins das partículas nas direções arbitrárias dadas. De acordo com a MQ, tem-se (em unidades de $\frac{\hbar}{2}$):

$$P(\hat{a}, \hat{b}) = \langle \psi | (\vec{S}_1 \cdot \hat{a})(\vec{S}_2 \cdot \hat{b}) | \psi \rangle = -\hat{a} \cdot \hat{b}. \quad (2.2)$$

Agora, de fato a construção do teorema de Bell [20] [23]. Pressupõe-se a existência de uma variável oculta λ , como o fez Einstein, suficiente à caracterização completa do sistema elétron-positron. Então, deve existir alguma função $\mathcal{A}(\hat{a}, \lambda)$ capaz de determinar com probabilidade unitária o valor da medida de spin do elétron, e equivalentemente $\mathcal{B}(\hat{b}, \lambda)$, para o pósitron. Tais valores estão limitados:

$$\mathcal{A}(\hat{a}, \lambda) = \pm 1 \quad \mathcal{B}(\hat{b}, \lambda) = \pm 1. \quad (2.3)$$

Ainda, na condição de alinhamento dos vetores unitários $\hat{a} = \hat{b}$, os valores resultantes

devem ser perfeitamente anti-correlacionados:

$$\mathcal{A}(\hat{a}, \lambda) = -\mathcal{B}(\hat{a}, \lambda), \quad (2.4)$$

válido para todo valor possível da variável oculta λ . Agora, a quantidade (2.2) pode ser calculada como segue:

$$P(\hat{a}, \hat{b}) = \int \rho(\lambda) \mathcal{A}(\hat{a}, \lambda) \mathcal{B}(\hat{b}, \lambda) d\lambda, \quad (2.5)$$

em que $\rho(\lambda)$ é a densidade de probabilidade da variável oculta λ (satisfazendo todas as propriedades principais de uma densidade de probabilidade como não negatividade e normalização). Pode-se eliminar $\mathcal{B}(\hat{b}, \lambda)$ em (2.5) utilizando-se de (2.4):

$$P(\hat{a}, \hat{b}) = - \int \rho(\lambda) \mathcal{A}(\hat{a}, \lambda) \mathcal{A}(\hat{b}, \lambda) d\lambda. \quad (2.6)$$

Considerando uma nova direção arbitrária $\hat{c}$, pode-se subtrair de $P(\hat{a}, \hat{b})$ o termo $P(\hat{a}, \hat{c})$, resultando em:

$$P(\hat{a}, \hat{b}) - P(\hat{a}, \hat{c}) = - \int \rho(\lambda) [\mathcal{A}(\hat{a}, \lambda) \mathcal{A}(\hat{b}, \lambda) - \mathcal{A}(\hat{a}, \lambda) \mathcal{A}(\hat{c}, \lambda)] d\lambda. \quad (2.7)$$

Mas $[\mathcal{A}(\hat{b}, \lambda)]^2 = 1$, então substituindo em (2.7) e após algumas manipulações tem-se:

$$P(\hat{a}, \hat{b}) - P(\hat{a}, \hat{c}) = - \int \rho(\lambda) [1 - \mathcal{A}(\hat{b}, \lambda) \mathcal{A}(\hat{c}, \lambda)] \mathcal{A}(\hat{a}, \lambda) \mathcal{A}(\hat{b}, \lambda) d\lambda. \quad (2.8)$$

Ainda, como consequência de (2.3), tem-se a desigualdade $-1 \leq \mathcal{A}(\hat{a}, \lambda) \mathcal{A}(\hat{b}, \lambda) \leq +1$ e, por definição, $\rho(\lambda) [1 - \mathcal{A}(\hat{b}, \lambda) \mathcal{A}(\hat{c}, \lambda)] \geq 0$. Portanto, decorre a desigualdade:

$$|P(\hat{a}, \hat{b}) - P(\hat{a}, \hat{c})| \leq \int \rho(\lambda) [1 - \mathcal{A}(\hat{b}, \lambda) \mathcal{A}(\hat{c}, \lambda)] d\lambda, \quad (2.9)$$

ou de forma mais simples:

$$\left| P(\hat{a}, \hat{b}) - P(\hat{a}, \hat{c}) \right| \leq 1 + P(\hat{b}, \hat{c}). \quad (2.10)$$

A equação (2.10) é conhecida como a *Desigualdade de Bell*, possuindo um profundo significado, qual seja, toda a teoria de variáveis ocultas no contexto da MQ deve satisfazê-la, isto é, quando violada, nenhuma teoria de variáveis ocultas pode reproduzir os resultados observados experimentalmente. De fato, pode ser considerada como um teste ao Paradoxo EPR. Caso satisfeita de maneira geral, as variáveis ocultas são necessárias para descrever de forma completa a fenomenologia da MQ. Caso violada, a natureza deve ser fundamentalmente não local, pois o colapso da função de onda é de fato instantâneo confirmando a interpretação de Copenhague e violando, de forma aparente, o princípio da localidade.

Demonstra-se facilmente a violação da Desigualdade de Bell, utilizando-se o resultado previsto pela MQ em (2.2). Com efeito, considere para medida do estado spin as orientações $\hat{a} = \hat{x}$, $\hat{b} = \hat{y}$ e $\hat{c} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + \hat{y})$. Então, utilizando-se (2.2) em (2.10), obtem-se:

$$0.707 \leq 0.293, \quad (2.11)$$

o que é absurdo. Portanto, não existe teoria de variáveis ocultas capaz de reproduzir as correlações proporcionadas pelo estado singlete (2.1), diz-se então que esse estado possui correlações puramente quânticas. Caso o valor esperado $\langle \psi | (\vec{S}_1 \cdot \hat{a})(\vec{S}_2 \cdot \hat{b}) | \psi \rangle$ fosse calculado em relação a um estado, digamos, da forma $|\psi\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$ ou $|\psi\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$ a desigualdade não seria violada. Isto é, alguns estados não violam a desigualdade de Bell, podendo ser descritos de maneira clássica (com o auxílio de alguma variável oculta), mas outros a violam e, portanto, apresentam correlações puramente quânticas.

Essa é uma das principais características dos estados maximamente emaranhados, permitindo-se a identificação do estado singlete como um estado maximamente emaranhado de um sistema bipartite. De fato, ele pertence à classe dos chamados *estados de Bell*, pos-

suindo as formas genéricas:

$$|\phi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle \pm |11\rangle) \quad (2.12)$$

$$|\psi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle \pm |10\rangle). \quad (2.13)$$

De um ponto de vista histórico, os estados maximamente emaranhados tornam-se especiais pois são a primeira demonstração da não localidade instrínseca à natureza. Em termos absolutos, o princípio da localidade não é ferido pela existência das correlações puramente quânticas, pois nenhuma informação pode ser transmitida através da utilização de estados emaranhados. De fato, considere novamente o estado singleto compartilhado entre Alice e Bob, dois experimentadores em laboratórios espacialmente distantes. Alice tem como objetivo transmitir um sinal binário a Bob através do resultado de uma medida em seu subsistema (o elétron). Para tanto, assume a relação $|\uparrow\rangle_A \rightarrow YES$ e $|\downarrow\rangle_A \rightarrow NO$. Bob, por sua vez, possui acesso apenas a seu subsistema (o pósitron). Após alguma medida devido a Alice, ele terá a tarefa de codificar a mensagem por meio da orientação assumida pelo spin do pósitron e como a relação é antiparalela, para interpretar corretamente essa mensagem deve assumir a identificação $|\uparrow\rangle_B \rightarrow NO$ e $|\downarrow\rangle_B \rightarrow YES$. Agora, suponha que Alice tem planos de enviar a mensagem *YES* para Bob, então uma medida sobre o elétron deveria necessariamente produzir a orientação *spin up*. Ora, de acordo com a MQ, o resultado de um processo de medida é completamente randômico, de sorte que há igual probabilidade de o resultado ser *spin up* ou *spin down*. Portanto, somente na condição $|\uparrow\rangle_A$ a mensagem correta seria enviada, ao passo que Bob, possuindo acesso restrito à orientação de spin de seu pósitron, não poderia checar a sua veracidade. Em metade das vezes ele saberia a mensagem correta e em metade das vezes a incorreta, o que descaracteriza completamente tal canal superluminal de transmissão de informação [20]. No entanto, a junção de bits clássicos de informação com o recurso do emaranhamento permitem a criação de protocolos de informação quântica (IQ) bastante poderosos, como o próprio teletransporte quântico.

Uma última propriedade relacionada a estados emaranhados pode ser comentada, nesse caso devido a Schrödinger [1]. Considere novamente o estado singleto (2.1). Sendo

esse puro, tem-se a priori, com probabilidade unitária, a exatidão do vetor estado representante do sistema, portanto, concernente à teoria da informação, possui-se conhecimento completo sobre o sistema composto. Entretanto, considerando-se o elétron ou pósitron, a situação é dispar. Até o instante da medida, a propriedade de spin do elétron ou pósitron é desconhecida, randômica e igualmente provável entre spin *up* e *down*. Dessa maneira, a informação acessível sobre o sistema composto é superior à informação conhecida de suas partes, caracterizando certamente outra faceta curiosa do emaranhamento.

2.2 Definição formal de Emaranhamento

2.2.1 Sistemas puros e mistos

Na seção 1.1, definiram-se de forma sucinta os estados do tipo puro e misto. Naquele contexto possuíam uma similaridade, qual seja, baseavam-se na condição do sistema possuir apenas um elemento físico (podendo esse ser de qualquer natureza, i.e, um elétron, um oscilador harmônico, um qubit e assim por diante). No entanto, pelo teorema de Bell, concluiu-se que o estado singleto é maximamente emaranhado, e esse é caracterizado por duas partículas - elétron e pósitron. Nesse sentido, deve-se ressaltar uma condição necessária para o estudo do emaranhamento como a existência de dois ou mais subsistemas no sistema composto. Quer-se dizer que o emaranhamento necessariamente está associado às correlações puramente quânticas entre os vários subsistemas componentes do sistema global [9]. Tais informações podem ser colocadas de forma quantitativa como seguem: seja um sistema quântico composto de N subsistemas, cada qual representado pelo i -ésimo espaço de Hilbert $\mathcal{H}_i$, então o espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ do sistema global é dado pelo produto tensorial dos espaços de Hilbert individuais [9]:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N. \quad (2.14)$$

Baseando-se em (2.14), tem-se a definição de separabilidade em sistemas puros:

Definição 1 Um vetor estado $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, representante de um sistema puro, é dito separável quando pode ser decomposto em um produto tensor de vetores estados $|\psi_i\rangle \in \mathcal{H}_i$:

$$|\psi\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N\rangle. \quad (2.15)$$

Quando a definição 1 não é satisfeita para um dado estado $|\psi\rangle$, este é dito emaranhado. Pode-se tomar nota da binaridade dessa definição, isto é, possibilita apenas a distinção entre estados separáveis e emaranhados, mas é transparente aos vários níveis de emaranhamentos contidos nos estados. De fato tal nivelamento não é trivialmente constatado baseando-se somente na definição acima, e sim sob análise dos quantificadores de emaranhamento, a serem mencionados num instante subsequente. Por hora, pode-se utilizar de alguns estados mencionados para exemplificar a aplicação da definição de separabilidade.

Com efeito, considere o sistema bipartite de spin $s = \frac{1}{2}$ e, primeiramente, os estados $|\psi\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$ e $|\psi\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$. Note a existência das decomposições triviais $|\psi\rangle = |\uparrow_A\rangle |\uparrow_B\rangle$ e $|\psi\rangle = |\downarrow_A\rangle |\downarrow_B\rangle$. Como tais estados satisfazem a definição 1, eles são separáveis. Portanto, do ponto de vista dos protocolos de IQ, não tem grande função para a extração do recurso emaranhamento, enquanto do ponto de vista do teorema de Bell, por satisfazerem a Desigualdade, a correlação entre os subsistemas pode ser explicada pela utilização de alguma teoria de variáveis ocultas. Considere agora o estado singleto, dado em (2.1). Para demonstrar a impossibilidade de uma decomposição tal qual a definição 1 requer, é suficiente supor estados genéricos para o subsistema A, $|\psi_A\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle$, e para o subsistema B, $|\psi_B\rangle = \gamma |\uparrow\rangle + \nu |\downarrow\rangle$, realizar o produto tensorial entre eles, igualar ao estado singleto e, finalmente, demonstrar, por absurdo, a inexistência dos coeficientes α , β , γ e ν . Uma vez descaracterizada a decomposição, identifica-se o estado singleto como um estado emaranhado. O prefixo *maximamente*, utilizado anteriormente para descrevê-lo, decorre da aplicação de quantificadores, também podendo ser explicado devido à violação máxima da desigualdade de Bell. Existe, portanto, um algoritmo para distinguir estados separáveis e estados emaranhados utilizando-se da definição 1: deve-se encontrar uma decomposição do estado de interesse em um produto tensor de estados provenientes dos subsistemas, ou no

caso de sua inexistência, prová-la de maneira genérica. Pode-se também formular a definição de separabilidade para sistemas puros, utilizando-se do formalismo do operador densidade:

Definição 2 *O operador densidade $\rho \in \mathcal{O}$, representando um sistema puro, é dito separável quando pode ser decomposto em um produto tensor de operadores densidade $\rho_i \in \mathcal{O}_i$:*

$$\rho = \rho_A \otimes \rho_B \otimes \dots \otimes \rho_N, \quad (2.16)$$

em que $\mathcal{O}$ define o espaço de operadores lineares atuantes em $\mathcal{H}$ e naturalmente $\mathcal{O}_i$ define o espaço de operadores lineares atuantes em $\mathcal{H}_i$.

No caso de sistemas mistos, a definição de separabilidade concerne apenas ao formalismo do operador densidade:

Definição 3 *O operador densidade $\rho \in \mathcal{O}$, representante de um sistema misto, é dito separável quando permite a decomposição em um produto tensor de operadores densidade $\rho_j^i \in \mathcal{O}_j$:*

$$\rho = \sum_i p_i \rho_A^i \otimes \rho_B^i \otimes \dots \otimes \rho_N^i, \quad (2.17)$$

em que o índice i refere-se à particular configuração i tomada pelos subsistemas $A, B, \dots, N$. Quando o estado representado por ρ não satisfaz a definição 3, é dito emaranhado. Note que as definições 2 e 3 são bastante claras e pode-se supor a trivialidade da determinação da separabilidade dos estados. Do ponto de vista prático, decidir se um estado é separável ou emaranhado é um dos problemas mais complexos e, portanto, não resolvidos no contexto do estudo do emaranhamento, recebendo o nome de *problema da separabilidade*. A solução deste é apenas particular, obtida para alguns poucos sistemas através dos *quantificadores de emaranhamento*.

2.3 Quantificadores de Emaranhamento

Nesta seção serão apresentados alguns quantificadores de emaranhamento, em formato teorema, no sentido de não serem apresentadas as deduções formais para obtê-los,

focando-se então sobre seu valor prático e discutindo-se casos de interesse. Existem vários destes, porém aos propósitos desse trabalho faz-se suficiente citarmos apenas dois, para sistemas de $N = 2$ (bipartites) e $N = 3$ (tripartites).

2.3.1 Concorrência

A *Concorrência* é um quantificador do grau de emaranhamento com uso no problema de dois qubits. Considere a matriz densidade ρ que descreve um estado de um sistema de dois qubits. Pela natureza do problema, a matriz densidade terá uma representação matricial 4x4. A Concorrência é definida como [12]:

$$C(\rho) = \max(0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4), \quad (2.18)$$

onde os λ_i são os autovalores, em ordem decrescente, do operador hermitiano:

$$R = \sqrt{\sqrt{\rho} \tilde{\rho} \sqrt{\rho}}, \quad (2.19)$$

e, define-se a matriz densidade *spin-flip* $\tilde{\rho}$ como:

$$\tilde{\rho} = (\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho^* (\sigma_y \otimes \sigma_y), \quad (2.20)$$

em que σ_y é a matriz de Pauli escrita na base dos autoestados do operador S_z , e ρ^* é a matriz densidade conjugada. Um carater bastante geral dos quantificadores, partilhado pela concorrência, é seu intervalo de imagem percorrendo continuamente a reta real com mínimo em 0 e máximo em 1. Quando se tem $C(\rho) = 0$, diz-se que ρ representa um estado separável. Por outro lado, quando se tem $C(\rho) = 1$, diz-se que ρ representa um estado maximamente emaranhado. Quando se tem $0 < C(\rho) < 1$, o estado é dito emaranhado. Certamente, estados em que $C(\rho) \rightarrow 1$ são mais úteis aos protocolos de IQ quando comparados com estados em que $C(\rho) \rightarrow 0$, pois os primeiros contem mais emaranhamento e, por conseguinte, mais correlações não clássicas do que os últimos. Na medida em que o foco do trabalho é um sis-

tema tripartites, e a concorrência está definida apenas para sistemas bipartites, pode-se tornar útil apresentar alguma ferramenta matemática que permite diminuir a dimensionalidade de matrizes, dada na subseção seguinte.

2.3.2 Traço Parcial

O *Traço Parcial* é o mapeamento da matriz densidade ρ_{ABC} de um sistema tripartites, com espaço de Hilbert $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_C$, numa matriz densidade ρ_{AB} de espaço de Hilbert $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ (ou permutações desses índices). Seja $\{|a_i\rangle\}$ uma base ortonormal de $\mathcal{H}_A$, $\{|b_i\rangle\}$ uma base ortonormal de $\mathcal{H}_B$ e $\{|c_i\rangle\}$ com base ortonormal $\mathcal{H}_C$. De maneira genérica, pode-se escrever a matriz densidade ρ_{ABC} como segue:

$$\rho_{ABC} = \sum_{i,j,k,l,m,n} p_{ijklmn} |a_i\rangle\langle a_j| \otimes |b_k\rangle\langle b_l| \otimes |c_m\rangle\langle c_n|. \quad (2.21)$$

O traço parcial da matriz densidade em (2.21), com relação ao subespaço $\mathcal{H}_C$ é dado por:

$$\text{Tr}_C\{\rho_{ABC}\} = \rho_{AB} = \sum_{i,j,k,l,m,n} p_{ijklmn} |a_i\rangle\langle a_j| \otimes |b_k\rangle\langle b_l| \delta_{mn}. \quad (2.22)$$

2.3.3 2-Tangle

Neste ponto da discussão é impossível identificar a existência de classes distintas de emaranhamento, isto é, conjuntos de estados cujo emaranhamento possui características dispares se comparados a outros. Em um sistema bipartite com dois qubits, os estados são dispostos entre separáveis e maximamente emaranhados, sendo essas as duas únicas classes de estados. Aqueles apenas parcialmente emaranhados podem ser obtidos pela aplicação de transformações lineares sobre os maximamente emaranhados, de sorte que todo os estados de um sistema bipartite são reproduzidos de tal maneira.

Em um sistema tripartite a situação é fundamentalmente distinta pois além de estados separáveis, existem diferentes tipos de emaranhamento que separam os estados por classes, as quais serão apresentadas na seção 2.4. Seja um sistema tripartite de qubits A, B e C, o

critério quantificador de uma das classes de emaranhamento é dado pelo *2-tangle*, definido pela expressão [13]:

$$\tau_2 = \frac{(C_{AB}^2 + C_{AC}^2 + C_{BC}^2)}{3}, \quad (2.23)$$

em que C_{ij} é a concorrência entre os qubits i e j , calculados pela (2.18) aplicando-se a matriz densidade reduzida $\rho_{ij} = \text{Tr}_k\{\rho_{ijk}\}$ (ou permutações desses índices). Como exemplo, C_{BC} é calculada pela (2.18) com matriz densidade $\rho_{BC} = \text{Tr}_A\{\rho_{ABC}\}$. Analogamente à concorrência, tem-se como intervalo de imagem de τ_2 a reta real com limite inferior em 0 e superior em 1. Quando se tem $\tau_2 = 0$ o estado é dito separável, ao passo que quando se tem $\tau_2 = 1$, o estado é maximamente emaranhado pertencente a alguma das classes de emaranhamento do sistema tripartite.

2.3.4 3-Tangle

O critério quantificador de outra das classes de emaranhamento é dado pelo *3-tangle*, definido pela expressão [13] [14]:

$$\tau_3 = C_{i(jk)}^2 - (C_{ij}^2 + C_{ik}^2), \quad (2.24)$$

onde C_{ij} é a concorrência entre os qubit i e j e C_{ik} é a concorrência entre os qubits i e k , ambos calculados pela (2.18) quando devidamente utilizadas as matrizes reduzidas necessárias. No entanto, note como τ_3 requer um passo adicional se comparado a τ_2 , dado pelo termo $C_{i(jk)}$. Esta é denominada *concorrência bipartite*, podendo ser interpretada como a concorrência entre o qubit i e simultaneamente os qubits j e k , cuja expressão é da forma:

$$C_{i(jk)} = \sqrt{2 - \text{Tr}(\rho_i)^2}, \quad (2.25)$$

e onde ρ_i é a matriz densidade do sistema quando reduzida dos qubits j e k : $\rho_i = \text{Tr}_j[\text{Tr}_k(\rho_{ijk})]$.

2.3.5 Fidelidade

Em termos absolutos a *Fidelidade* não é um quantificador de emaranhamento. Entretanto, quando utilizada de maneira adequada pode ser de grande valor na identificação de estados maximamente emaranhados, note, pois, que a Fidelidade é uma medida da similaridade entre operadores [24]. Assim, seja σ o representante de um operador de interesse. Então $\rho(t)$ torna-se equivalente a σ , ao passo em que a fidelidade aproxima-se do valor unitário:

$$F(\rho(t), \sigma) = \text{Tr}\{\rho(t)\sigma\} \quad (2.26)$$

Ressalta-se que a equação (2.26) é somente válida na condição de $\rho(t)$ e σ representarem estados puros. Apesar de condição bastante restritiva, desenvolve-se o trabalho utilizando-se dinâmica de estados puros e, portanto, pode ser utilizada sem ressalvas. Ora, para se retirar algum valor prático de F , é suficiente construir σ de maneira tal que represente algum estado maximamente emaranhado. Por exemplo, no caso de um sistema bipartite pode-se fazer $\sigma = |\psi\rangle\langle\psi|$, com $|\psi\rangle$ dado por (2.1). Dessa maneira, encontrar um regime para o qual a matriz densidade do sistema $\rho(t)$ represente um estado maximamente emaranhado reduz-se a encontrar um regime para o qual $F(\rho(t), \sigma) = 1$. Ou, em outras palavras, pode-se confirmar o quanto $\rho(t)$ aproxima-se do estado singleto na medida em que $F(\rho(t), \sigma) \rightarrow 1$.

2.4 Classes de Estados

O primeiro passo a ser tomado no sentido da obtenção das classes de equivalência referentes ao conjunto completo dos estados emaranhados é definir o critério sobre o qual tais classes são discriminadas. Para tanto, definem-se *Operações Locais e Comunicação Clássica* (em inglês *Local Operations and Classical Communication (LOCC)*), como um subconjunto de todas as operações atuantes no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ de um sistema multipartite (incluem-se observáveis e portas lógicas, para citar alguns exemplos), caracterizadas pela utilização exclusiva de operações locais e a existência de um canal clássico de comunicação permitindo a cada um dos subsistemas conhecer, quando necessário, o resultado de

operações realizadas em outros subsistemas. Ressalta-se que o emaranhamento contido em um estado ρ nunca pode aumentar através unicamente das LOCC [25].

Seja por exemplo um sistema bipartite de matriz densidade ρ cujo valor de concorência é $C(\rho_{AB})$. Após a aplicação de operações locais arbitrárias, transforma-se a matriz densidade inicial em uma nova matriz densidade ρ'_{AB} . Entretanto, deve-se manter a igualdade $C(\rho_{AB}) = C(\rho'_{AB})$. Ora, se tais estados possuem exatamente a mesma quantidade de emaranhamento, então podem executar os mesmos protocolos de IQ, indistinguívelmente. Dessa maneira, *dois estados $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$ são ditos equivalentes se, e somente se, são obtidos um do outro mediante as LOCC, com probabilidade unitária de sucesso*. Um resultado matemático conhecido enuncia que estados são equivalentes se, e somente se, estão relacionados por *Operadores Locais Unitários*. O termo *Local* implica atuação individual em cada um dos subsistemas e *Unitário* no sentido comum de manutenção da norma quando aplicado em vetores estado. Quantitativamente, $|\phi\rangle = U_A \otimes U_B |\psi\rangle$. Esse é um fator limitante para a definição dada de equivalência, pois mesmo em casos onde o sistema considerado é bipartite, estados não são comumente relacionados por meio desses operadores [25].

A solução é relaxar a condição de probabilidade unitária de obtenção de um estado pelo outro. Diz-se então que *os estados $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$ de um sistema multipartite arbitrário pertencem à mesma classe de equivalência de emaranhamento quando podem ser obtidos um do outro mediante as LOCC, com probabilidade não nula*. Além de solucionar o problema anteriormente citado, em termos práticos, se $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$ são equivalentes partindo-se dessa definição, então podem ser utilizados na realização dos mesmos protocolos de IQ com a ressalva de que a performance depende do estado escolhido para a tarefa. Outro resultado matemático enuncia que dois estados são equivalentes perante SLOCC (o adicional S informa a relaxação da probabilidade e quer dizer estocástico, em inglês *Stochastic*) se um *Operador Local Inversível* relaciona ambos os estados. Quantitativamente, no caso de um sistema tripartite, $|\phi\rangle = A \otimes B \otimes C |\psi\rangle$ e, naturalmente, $|\psi\rangle = A^{-1} \otimes B^{-1} \otimes C^{-1} |\phi\rangle$. Os operadores A , B e C sintetizam todas as operações locais realizadas sobre os subsistemas homônimos, não interessando o ordenamento temporal das mesmas [25].

A última definição, aplicada ao conjunto de todos os estados de um sistema tripartite

puro, permite concluir a existência de seis classes de equivalência distintas, com isso, quer-se dizer para estados pertencentes a diferentes classes, não existe um operador $A \otimes B \otimes C$ relacionando-os [25]. A primeira delas é denominada *classe separável*. Nela, encontram-se os estados que, quando submetidos a τ_2 e τ_3 tem-se como resposta o valor nulo. O representante genérico para estados deste tipo é da forma:

$$|\psi_{ABC}\rangle = |0\rangle_A |0\rangle_B |0\rangle_C, \quad (2.27)$$

em que a notação de produto tensorial foi absorvida de sorte que há a equivalência $|0\rangle_A |0\rangle_B |0\rangle_C = |0\rangle_A \otimes |0\rangle_B \otimes |0\rangle_C$, onde $|0\rangle$ e $|1\rangle$ são os estados ortonormais da base de um qubit. Todos os estados separáveis de um sistema tripartite podem ser transformados no estado (2.27) por meio de transformações unitárias, nesse caso pode-se falar sobre operadores unitários porque por hipótese o estado pertence à classe separável.

Adicionalmente, existem três classes de formato similar contendo, no entanto, emaranhamento distinto. São as classes de emaranhamento bipartite no sistema tripartite. Sua nomenclatura é identificada como *classe A - BC*, *classe AB - C* e *classe C - AB*. Os detalhes serão apresentados para uma delas e podem ser facilmente generalizados às demais. No caso da primeira, a letra A encontra-se separada (pelo hífen) das letras B e C (estas agrupadas), o que significa separabilidade do subsistema A com relação aos subsistemas B e C, enquanto estes últimos estão maximamente emaranhados. Intuitivamente conhece-se quais os subsistemas maximamente emaranhados e aquele separável nas demais classes. Também, pode-se compreender a razão pela qual as três classes possuem emaranhamento fundamentalmente distinto. É bem verdade que os quantificadores de emaranhamento, quando aplicados em representantes de cada uma das classes apresentarão o mesmo valor numérico, isso decorre do máximo emaranhamento bipartite contido nesses representantes. No entanto, essa quantidade de emaranhamento, apesar de numericamente equivalente, está distribuída em diferentes setores do sistema global para cada um deles. Então, assumindo-se a aplicação exclusiva de operações do tipo LOCC, o emaranhamento não pode aumentar. Nesse caso ele teria de ser redistribuído, isto é, decrescer com relação a dois subsistemas (o que pode ser realizado

pela aplicação de operadores locais não invertíveis), e crescer novamente com relação a dois outros, o que é absurdo por hipótese. Portanto, de fato as classes são não equivalentes. O representante genérico para estados pertencentes à classe A - BC é da forma:

$$|\psi_{ABC}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_A (|0\rangle_B |0\rangle_C + |1\rangle_B |1\rangle_C)). \quad (2.28)$$

Portanto, qualquer estado em um sistema tripartite pertencente à classe A - BC pode ser transformado, por operações unitárias, em (2.28). A mesma arguição é válida para as demais classes e os representantes genéricos possuem forma similar, alterando-se apenas o índice do estado separável (o ket externo à soma em parênteses). A recíproca também é verdadeira, qualquer estado pertencente à classe A - BC pode ser obtido do representante em (2.28), com probabilidade unitária, através das LOCC.

2.4.1 Classe GHZ

Apresenta-se na sequência as duas últimas classes de equivalência, e a essas será dada uma maior importância por duas razões principais: podem ser consideradas classes tais que seus estados são os estados de Bell de um sistema tripartite, isto é, são estados maximamente emaranhados com genuíno emaranhamento triplo (nesse caso não existem subsistemas separáveis dos demais); são os estados buscados por meio da evolução temporal no sistema. O nome dado a essa classe é em homenagem a Greenberger, Horne e Zeilinger, quando o utilizaram na produção de uma prova complementar ao teorema de Bell. Sua representação é genérica e válida para qualquer sistema N-partite, no entanto, interessa-se pela particularização $N = 3$, o sistema tripartite, como segue [26]:

$$|GHZ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|111\rangle + e^{i\phi} |000\rangle), \quad (2.29)$$

em que se omitiu o índice do subsistema (pois não há risco de confusão e usualmente a sua ordem é inalterada), utilizou-se da notação equivalente $|0\rangle |0\rangle |0\rangle = |000\rangle$ e ϕ é uma fase relativa. Novamente, todo estado pertencente à Classe GHZ pode ser transformado à forma

em (2.29) por LOCC. Uma de suas características mais interessantes é a máxima violação de desigualdades do tipo Bell (naturalmente não as mesmas apresentadas neste trabalho, mas sim adequadas a sistemas tripartite). Por máxima violação, quer-se dizer que dado o conjunto completo de estados representantes de um sistema tripartite, todos podem ser colocados sob teste das desigualdades de Bell. Um subconjunto dos estados as violará, uma vez que se tem a existência de correlações puramente quânticas por entre os subsistemas de tais estados. Essa violação se dará em um espectro de valores, pois a quantidade de correlação não é equivalente para todos os estados. Nesse sentido, um dos estados pertencente a tal subconjunto deve possuir máximo valor de correlação e, por conseguinte, viola maximamente a desigualdade de Bell. Cabe anotar que τ_2 não possui valor prático para a quantificação desse tipo de estado. Como citado anteriormente, essa classe é caracterizada por conter emaranhamento genuíno triplo, ao passo que τ_2 é uma média aritmética do emaranhamento bipartite total presente nos estados, podendo ser útil à constatação de representantes da classe A - BC e permutações não triviais desta. Da definição de τ_3 na equação (2.24), nota-se que a concorrência bipartite $C_{i(jk)}$ pode ser interpretada como a medida total de correlação entre o qubit i e os qubits j e k . No entanto, para $C_{i(jk)} > 0$, nada pode ser afirmado sobre a origem da correlação, podendo ela ser bipartite entre os qubits i e k , i e j ou simultaneamente entre i , j e k . Ao se subtrair do quadrado dessa o quadrado das concorrências singulares, subtraem-se as correlações bipartites entre os qubits i e j e os qubits i e k , podendo-se então concluir que τ_3 é uma medida exclusiva da correlação simultânea entre i , j e k e quantifica o emaranhamento genuinamente triplo presente no sistema. Um estado pertence à classe de equivalência GHZ quando sua matriz densidade aplicada na equação (2.24) produz a unidade, isto é, um critério necessário e suficiente para a identificação de um estado como pertencente à classe GHZ é $\tau_3 = 1$. Um último comentário deve ser feito em relação a τ_2 . Com efeito, os dois tipos de emaranhamento - bipartite e genuíno triplo - são complementares, isto é, na medida em que o sistema se aproxima do máximo emaranhamento par a par, afasta-se do emaranhamento genuíno triplo e vice-versa. Não é possível que um estado possua simultaneamente e maximamente os dois tipos de emaranhamento, ao passo que pode simultaneamente possuir nenhum (sendo nesse caso separável). Dessa forma, particularmente para a formação

de estados GHZ, é necessário verificar $\tau_2 = 0$, pois somente assim τ_3 pode atingir o valor unitário.

2.4.2 Classe W

Um representante genérico pertencente à classe W é da forma [25]:

$$|W\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|100\rangle + |010\rangle + |001\rangle). \quad (2.30)$$

Comparando-se os representantes (2.29) e (2.30) das classes GHZ e W, respectivamente, observa-se uma diferença essencial. Aqueles pertencentes à última necessitam da combinação linear de três vetores estados, ao contrário dos primeiros, necessitando de apenas dois. Essa é, em termos simplórios, a razão de existirem essas duas classes de emaranhamento genuinamente triplo, pois explica na inexistência de um operador local invertível capaz de transformá-los um no outro e vice-versa.

Em relação a quantificadores de emaranhamento, também nesse caso τ_2 é irrelevante. Paradoxalmente, e distante de uma justificativa formal (podendo ser dada apenas em um nível mais avançado de domínio da construção do quantificadores tipo tangle), uma condição necessária à obtenção de um estado pertencente à classe W é $\tau_3 = 0$. Com isso, quer-se dizer que todo estado cujo valor de 3-tangle iguala-se a zero pode ser um estado do tipo W, mas não necessariamente é, pois ele pode ser separável, de sorte que outros critérios devem ser avaliados. Julgou-se suficiente aliar ao τ_3 a análise das populações componentes do estado W em conjunto à fidelidade (definida de maneira a representar um estado desse tipo).

Por fim, pode-se utilizar de um exemplo simples para ilustrar outra propriedade distinta do emaranhamento por entre as classes GHZ e W. Com efeito, sejam duas medidas realizadas cada qual sobre um dos estados representantes de cada classe. No caso do GHZ, mede-se o estado do terceiro qubit, em (2.29) e descobre-se que ele vale $|0\rangle_C$. Esse resultado provoca o colapso do estado GHZ em $|000\rangle$. Portanto, a medida faz com que o sistema perca todo o emaranhamento que antes possuía. Por outro lado, no caso de W em (2.30), mede-se sobre o primeiro qubit o valor $|0\rangle$. Então o estado colapsa em $|W\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle(|10\rangle + |01\rangle))$,

pertencente à classe de emaranhamento bipartite $A - BC$. Nesse caso, é dito que o emaranhamento contido no estado W é robusto em relação à perda de partículas.

Capítulo 3

Resultados e Discussão

Neste capítulo são apresentados os resultados da pesquisa realizada durante o período de iniciação científica, sob orientação do Prof. Dr. Fabrício M. de Souza. Na seção 3.1 são feitas as considerações sobre o sistema físico e o problema é apresentado. Seguidamente, expõe-se a metodologia de trabalho e o cálculo numérico. Na última seção são apresentados os resultados para a dinâmica do emaranhamento e obtenção de estados emaranhados puros no sistema de interesse.

3.1 Considerações e construção do sistema de interesse

O sistema quântico de interesse é composto por três pares de pontos quânticos (PQ) semicondutores carregados, cada par formando um único bit quântico (quantum bit ou qubit), denotado Molécula Quântica. Dada uma condição inicial de ocupação eletrônica, interessa-se pela evolução temporal do sistema, cujas informações serão extraídas do operador densidade $\rho(t)$. O Hamiltoniano do sistema é dado como segue:

$$H = \sum_{i=1}^6 E_i d_i^\dagger d_i + \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^6 V_{ij} d_i^\dagger d_j + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^6 U_{ij} N_i N_j, \quad (3.1)$$

onde $N_i = d_i^\dagger d_i$. O limite superior em (3.1) decorre do número de PQ compondo o sistema. Também, o primeiro termo é responsável pela energia intra PQ, pois é caracterizada

pelo produto entre a energia do i -ésimo PQ e o i -ésimo operador número N_i . O segundo se refere ao tunelamento entre os PQ, onde um vínculo é adicionado ao sistema de modo a permitir apenas tunelamento intra qubit. Desta forma, o tunelamento se define como o produto da ação dos operadores criação $d_i^\dagger$ e aniquilação d_j , em que um férmion é aniquilado no sítio j e criado no sítio i , na condição de V_{ij} não nulo. Por fim, o último termo é responsável pela interação de Coulomb (essa é válida por entre todos os PQ, a menos de algumas aproximações de origem física), em que se nota a ação dos operadores números N_i e N_j . Para um termo U_{ij} não nulo, se esses pontos estão ocupados, há interação coulombiana.

O espaço de Hilbert para o sistema total é obtido pelo produto tensorial dos espaços de Hilbert individuais de cada PQ (conforme a seção de emaranhamento). O i -ésimo PQ possui a base binária $\mathcal{H}_i = \{|1\rangle, |0\rangle\}$, com a identificação:

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Naturalmente segue que $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_6$, com $\dim(\mathcal{H}) = 64$. Em virtude da própria construção, há uma enorme similaridade da álgebra de espaços vetoriais a ser desenvolvida com a álgebra de spin $s = \frac{1}{2}$, inclusive as matrizes de Pauli serão utilizadas na construção dos operadores criação e aniquilação. Com efeito, considere as matrizes a seguir:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

sendo estas as matrizes de pauli x, y e z escritas, particularmente, na base dos autoestados do operador S_z . Utilizando-se das (3.4) e (3.5), pode-se definir os operadores σ_+ e σ_- como seguem:

$$\sigma_+ = \frac{\sigma_x + i\sigma_y}{2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

$$\sigma_- = \frac{\sigma_x - i\sigma_y}{2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Tais operadores são identificados como *operador de levantamento* e *operador de abaixamento*, respectivamente, na álgebra de spin $s = \frac{1}{2}$, responsáveis por aumentar ou diminuir de uma unidade o número quântico m_s . Ainda, é fácil ver que aplicando-se (3.7) no estado $|0\rangle$, obtem-se o estado $|1\rangle$ e aplicando-se (3.8) no estado $|1\rangle$, obtem-se o estado $|0\rangle$. Em ambos os casos uma segunda aplicação do mesmo operador resulta no vetor nulo. Agora é possível definir os operadores criação e aniquilação, como seguem:

$$d_k^\dagger = I^{\otimes k-1} \otimes \sigma_+ \otimes \sigma_z^{N-k} \quad (3.9)$$

$$d_k = I^{\otimes k-1} \otimes \sigma_- \otimes \sigma_z^{N-k}, \quad (3.10)$$

onde $k \in \mathbb{N}$, com valor mínimo em 1 e máximo em $N = 6$, o número de PQ no sistema. Dessa maneira, a (3.1) tem todos os termos identificados, sendo sua construção facilmente implementada numericamente. De fato, o operador H pode ser implementado de forma analítica sem a necessidade de atribuir valores numéricos. Entretanto, como os operadores S e $S^\dagger$ são essenciais, há também a necessidade de solução da equação característica para H . Dadas as suas dimensões, isso implica encontrar as raízes de um polinômio de ordem 64. Certamente algum computador pode o fazer de forma literal, entretanto a solução seria tão complexa de ser interpretada que se preferiu resolver o problema numericamente, atribuindo valores aos termos no hamiltoniano, como será explanado adiante.

3.2 O método de pesquisa, o algoritmo computacional e terminologias

A dinâmica quântica do sistema tripartite e cálculos de critério de quantificação do grau de emaranhamento foram implementados através de um algoritmo em linguagem Fortran, sendo o código desenvolvido durante o período de iniciação científica sob a orientação do Prof. Dr. Fabrício M. de Souza. O código em si segue os seguintes passos: declaração de todas as variáveis utilizadas no decorrer do algoritmo; construção de operadores matriciais envolvidos na construção do hamiltoniano (matrizes de Pauli e operadores de criação e aniquilação, como exemplo); atribuição de valores numéricos às quantidades físicas presentes no hamiltoniano e construção do hamiltoniano de dimensão 64×64 ; redução do hamiltoniano composto para representar apenas os estados fisicamente interessantes, tornando-o uma matriz de dimensão 8×8 ; diagonalização do hamiltoniano reduzido e obtenção de seus autoestados e autoenergias; atribuição de uma configuração inicial para o sistema, um estado alvo para o cálculo de fidelidade e realização da dinâmica quântica via solução da equação de Von Neumann (1.17); cálculo, usando a matriz densidade evoluída, de algumas quantidades físicas, sendo estas ocupações eletrônicas, traços totais para fins de confirmação da exatidão do código e, concomitantemente, traços parciais; calculo dos critérios de emaranhamento

fidelidade, 2-tangle e 3-tangle a partir da matriz densidade evoluída.

O primeiro passo é a construção do hamiltoniano com base em (3.1). Nesse ponto as aproximações numéricas tem início. No primeiro termo do somatório, os E_i referem-se à dessintonia entre os PQ de cada qubit, porquanto mais elevado tal termo menos há probabilidade de tunelamento para uma taxa de tunelamento fixa. Esses são relacionados aos termos ε_i pelas relações: $E_1 = \frac{+\varepsilon_1}{2}$, $E_2 = \frac{-\varepsilon_1}{2}$, $E_3 = \frac{+\varepsilon_2}{2}$, $E_4 = \frac{-\varepsilon_2}{2}$, $E_5 = \frac{+\varepsilon_3}{2}$, $E_6 = \frac{-\varepsilon_3}{2}$. Quanto ao segundo somatório, os V_{ij} são relacionados ao termo Δ , referente à taxa de tunelamento entre os PQ, pela expressão $V_{ij} = \frac{\Delta}{2}$. Por fim, no último termo do somatório, tem-se as relações para a interação coulombiana. Primeiro, faz-se $U_{ij} = U_0$. Em seguida, consideram-se diferentes pesos multiplicativos para a interação coulombiana dependendo da posição dos PQ. Para PQ pertencentes ao mesmo qubit, tem-se $U_o = \alpha U_0$; Para PQ vizinhos horizontalmente (não pertencentes ao mesmo qubit obviamente), tem-se $U_l = \beta U_0$; Para PQ vizinhos diagonalmente (também não pertencentes ao mesmo qubit), tem-se $U_u = \gamma U_0$. Naturalmente, os pesos possuem a característica $\alpha > \beta > \gamma$ e todas as constantes arbitrariamente fixadas, ε_i , Δ e U_0 possuem as dimensões respectivas às quantidades físicas que representam para que no fim o Hamiltoniano tenha unidade de energia. Dessa maneira se torna simples a inicialização do hamiltoniano, e na medida em que os casos de interesse forem apresentados, os valores dessas constantes também serão. Em síntese, tem-se o seguinte conjunto de parametrização dos termos envolvidos no hamiltoniano:

$$E_1 = \frac{+\varepsilon_1}{2}, E_2 = \frac{-\varepsilon_1}{2}, E_3 = \frac{+\varepsilon_2}{2}, E_4 = \frac{-\varepsilon_2}{2}, E_5 = \frac{+\varepsilon_3}{2}, E_6 = \frac{-\varepsilon_3}{2} \quad (3.11)$$

$$V_{12} = V_{21} = \frac{\Delta}{2}, V_{34} = V_{43} = \frac{\Delta}{2}, V_{56} = V_{65} = \frac{\Delta}{2} \quad (3.12)$$

$$U_{ij} = U_0, U_o = \alpha U_0, U_l = \beta U_0, U_u = \gamma U_0 \quad (3.13)$$

No contexto de PQ semicondutores, os qubits são produzidos quando dois pontos quânticos vizinhos compartilham um elétron em excesso, que é permitido tunelar entre os

dois sítios, como pode ser visto abaixo.

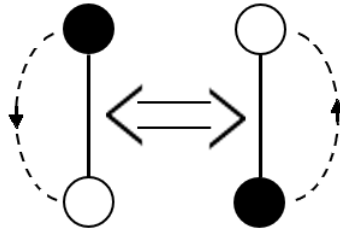


Figura 3.1: Representação pictórica de um qubit no contexto de PQ semicondutores. As duas esferas representam os pontos quânticos em si, e o elétron em excesso é representado pelo preenchimento na cor preta.

Fonte: Próprio autor

Como consequência da construção vista na figura 3.1, ainda que o espaço de Hilbert do sistema de 6 PQ possua 64 estados fisicamente possíveis compondo sua base, aqueles de interesse são apenas os que formam efetivamente qubits (para cada par de PQ vizinhos, um PQ ocupado e outro vazio), podendo-se descartar configurações em que ambos estão ocupados ou ambos vazios. Isso limita bastante o escopo do estudo, de sorte que apenas 8 estados restam, representando todos os arranjos possíveis de 3 qubits. Devido a ordem fixa dos vetores de base dos subespaços de cada PQ, é possível utilizar uma notação de ocupação que permite identificar prontamente qual o estado em questão. Por exemplo, o primeiro estado (da base completa do espaço de Hilbert do sistema composto) é dado por todos os PQ ocupados, portanto se escreve $|1\rangle = |111111\rangle$. O número do ket à esquerda refere-se à posição do estado de acordo com a ordem na base completa, enquanto o da direita é uma representação direta do estado, em que 1 significa PQ ocupado e 0 PQ vazio. Como existem seis números, cada um deles representa a ocupação de um PQ (segundo a ordem natural, o primeiro número representa o primeiro PQ e assim por diante). Pode-se dessa maneira apresentar todos os estados de interesse, como seguem: $|22\rangle = |101010\rangle$; $|23\rangle = |101001\rangle$; $|26\rangle = |100110\rangle$; $|27\rangle = |100101\rangle$; $|38\rangle = |011010\rangle$; $|39\rangle = |011001\rangle$; $|42\rangle = |010110\rangle$; $|43\rangle = |010101\rangle$.

Sendo também instrutivo apresentar uma representação visual dos anteriores, dada a seguir.

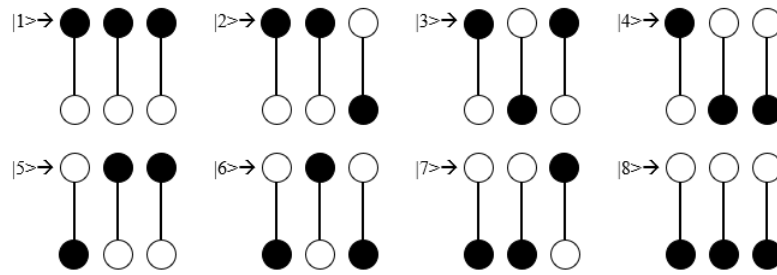


Figura 3.2: Representação pictórica de todas as configurações eletrônicas possíveis no sistema de três qubits, em que se associa a cada configuração um vetor estado da base computacional reduzida.

Fonte: Próprio autor

A nomenclatura dos estados apresentada anteriormente contém toda a informação necessária para identificar qual a configuração de qubits representa (a posição do estado na base completa do espaço de Hilbert e as posições dos elétrons em cada qubit). Pode-se então desenvolver todos os cálculos de dinâmica e critérios de emaranhamento utilizando-a. No entanto, no contexto da literatura em IQ, a dita nomenclatura não é padrão, de sorte que se optou por adequá-la à maneira observada na figura 3.2.

Note que para um dado qubit (ainda no contexto de PQ semicondutores), existem apenas duas configurações possíveis, quais sejam, $|10\rangle$ em que o primeiro PQ está ocupado e o segundo vazio, e $|01\rangle$ em que o primeiro PQ está vazio e o segundo ocupado. Dada essa dualidade, pode-se definir as relações $|10\rangle \rightarrow |1\rangle$ e $|01\rangle \rightarrow |0\rangle$, sendo essas válidas para todos os três qubits compondo o sistema. E apenas para manter o ordenamento da base antiga intacto utilizando-se de índices novos, faz-se: $|22\rangle \rightarrow |1\rangle$, $|23\rangle \rightarrow |2\rangle$ e assim por diante até $|43\rangle \rightarrow |8\rangle$. Portanto, de acordo com a nova convenção: $|1\rangle = |111\rangle$; $|2\rangle = |110\rangle$; $|3\rangle = |101\rangle$; $|4\rangle = |100\rangle$; $|5\rangle = |011\rangle$; $|6\rangle = |010\rangle$; $|7\rangle = |001\rangle$; $|8\rangle = |000\rangle$. De fato, essa nova base rotulada é a base em que se escreve o Hamiltoniano reduzido 8×8 já citado e a matriz densidade do sistema tripartite. E agora os $|0\rangle$ e $|1\rangle$ em (2.29) e (2.30) estão justificados, tornando-se claro o que se quer dizer por um estado GHZ e um estado W no contexto dos PQ semicondutores.

Com toda a nomenclatura bem estabelecida e em acordo com a literatura da IQ, além da breve síntese sobre o funcionamento do algoritmo, faz-se necessário um esclarecimento quanto ao método de cálculo numérico. Começa-se com simulações de casos limites com

o intuito de garantir a precisão do código implementado (como a confirmação da unitariedade do traço da matriz densidade do sistema completo, por exemplo). Após concluir esta etapa, e uma vez que o objetivo central é a obtenção do estado GHZ, foca-se na dinâmica do quantificador de emaranhamento τ_3 , como definido na equação (2.24). Desta forma, os parâmetros físicos, como definidos nas equações (3.11), (3.12) e (3.13) são sistematicamente variados (considera-se sempre $\hbar = 1$) até se encontrar combinações em que $\tau_3 \approx 1$, valor característico do estado GHZ, como discutido na subseção 2.4.1.

Atribui-se ao sistema uma configuração inicial dos qubits, que deve corresponder a um dos estados conforme vistos na figura 3.2, pois as situações tratadas incluem apenas sistemas puros. Para finalizar, define-se um estado alvo maximamente emaranhado para o cálculo de fidelidade e que pode ser da classe W ou GHZ. Então, todos esses valores são anotados em tabelas para a análise posterior. Repetiu-se esse processo centenas de vezes e os principais resultados obtidos serão apresentados na próxima seção.

3.3 Obtenção de Estados pertencentes à Classe GHZ

A figura 3.3 ilustra os resultados de uma simulação numérica da geração do estado GHZ. Em particular, os parâmetros considerados são $U_0 = 1.0$, $\alpha = 0.0$, $\beta = 3.0$, $\gamma = 1.0$, $\Delta = 0.3$ e $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = 0.0$. A condição inicial do sistema é $|1\rangle = |111\rangle$, então a matriz densidade $\rho(0)$ é descrita por uma matriz 8x8 com todos os elementos nulos, exceto por $\rho_{11}(0) = 1$. Para o cálculo de fidelidade, define-se $\sigma = |\psi\rangle\langle\psi|$ com $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|111\rangle - i|000\rangle)$, isto é, um estado GHZ com a fase $\phi = \frac{-\pi}{2}$.

É possível identificar a formação de um estado pertencente à classe GHZ ao notar os pontos de interseção das curvas amarela e azul da figura 3.3, painel (b). Essas curvas representam os elementos diagonais $\rho_{11}(t)$ e $\rho_{88}(t)$ da matriz densidade, que nesse contexto são a probabilidade do sistema ocupar a i -ésima configuração dos qubits no sistema tripartite. Portanto, nas interseções existe uma superposição da ocupação do sistema nos estados $|1\rangle = |111\rangle$ e $|8\rangle = |000\rangle$ (metade da probabilidade em ocupar a primeira configuração e a outra metade na oitava), exatamente o que caracteriza o representante genérico do GHZ, conforme

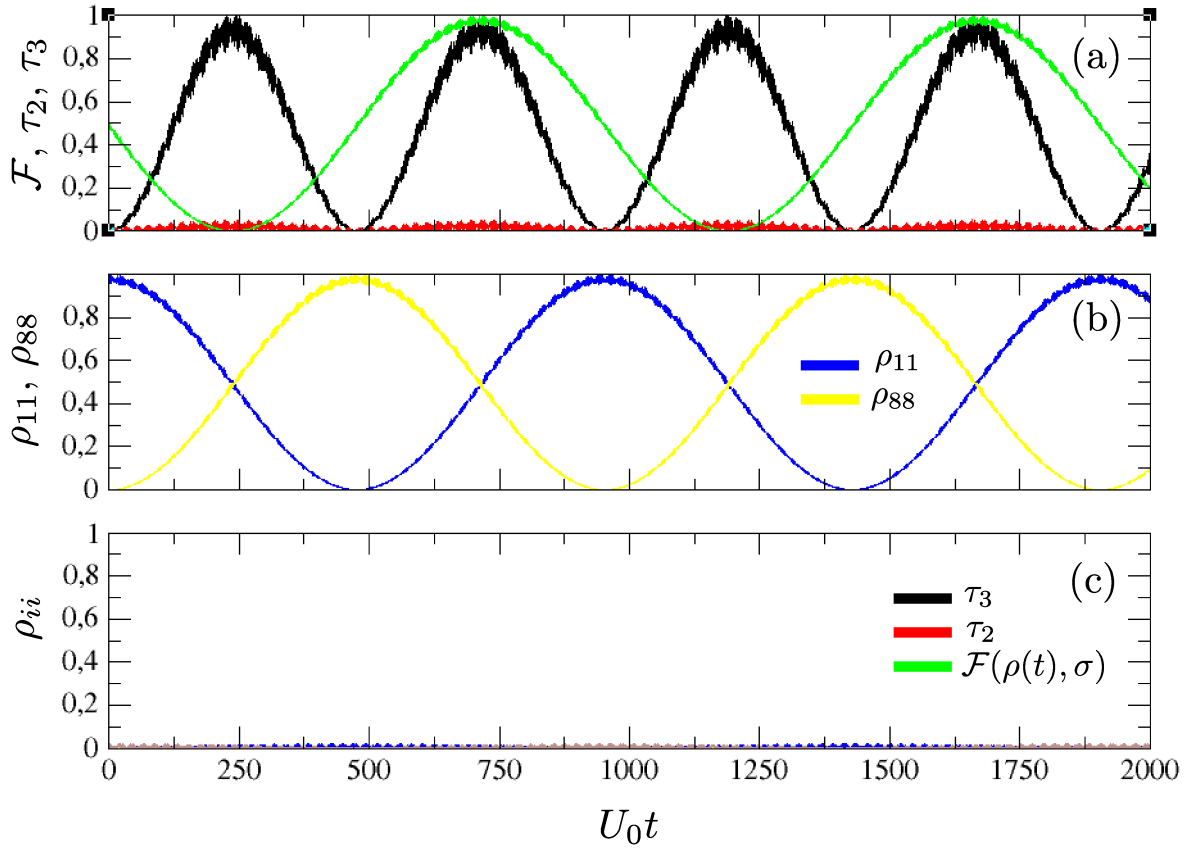


Figura 3.3: Gráficos contendo os quantificadores de emaranhamento e as populações associadas aos elementos diagonais da matriz densidade, em cores: τ_3 (preto); τ_2 (vermelho); $\mathcal{F}(\rho(t), \sigma)$ (verde); $\rho_{11}(t)$ (azul); $\rho_{88}(t)$ (amarelo). Todos os demais elementos da diagonal de $\rho(t)$ estão inseridos no último gráfico.

Fonte: Próprio autor

em (2.29). Simultaneamente, todos os critérios de detecção de emaranhamento aplicados tomaram os valores previstos nos instantes em que o sistema ocupava a configuração GHZ, isto é, 3-tangle e Fidelidade em valor unitário e 2-tangle em valor nulo. Uma análise mais precisa da 3.3(b) revela a existência de quatro pontos de interseção ao passo que na 3.3(a) em apenas dois deles a fidelidade atinge a unidade. Note o primeiro ponto de interseção. Nesse, $\tau_3 = 1$ e $\tau_2 = 0$, mas com fidelidade em valor nulo. De acordo com a definição de fidelidade, ela é uma medida de quanto a matriz densidade do sistema $\rho(t)$ se aproxima de uma matriz densidade σ pré- definida, que nesse caso é representante de um estado GHZ com $\phi = \frac{-\pi}{2}$. Essa matriz é estática enquanto a do sistema é dinâmica, então existem intervalos em que $\rho(t)$ se aproxima e até se iguala a σ (instantes em que a fidelidade é igual 1, pontos de interseção dois e quatro), e intervalos em que $\rho(t)$ se afasta e se torna completamente

díspar à σ (instantes em que a fidelidade é nula, pontos de interseção um e três). Então, por um lado deve existir um GHZ nesses pontos de interseção em que a fidelidade é nula, por outro ele não é dado por um GHZ com $\phi = \frac{-\pi}{2}$. A hipótese mais simples para explicar esse fenômeno é que nesses pontos a fase do GHZ é trocada, isto é, torna-se $\phi = \frac{+\pi}{2}$, sendo este um estado ortogonal em relação ao estado GHZ alvo. Este fato é confirmado ao calcular a fidelidade com um estado GHZ com a fase positiva, apresentada na figura 3.4.

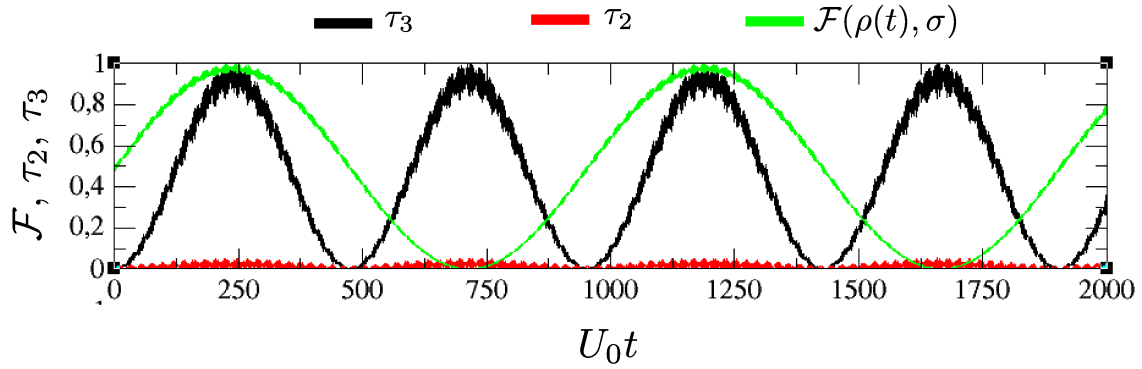


Figura 3.4: Gráfico contendo os critérios de emaranhamento com a fidelidade em GHZ, fase positiva. Em cores: τ_3 (preto); τ_2 (vermelho); $\mathcal{F}(\rho(t), \sigma)$ (verde).

Fonte: Próprio autor

Comparando-se a figura 3.3 com a figura 3.4, confirma-se a hipótese pois os pontos de máximo da fidelidade são trocados (agora no primeiro e terceiro a fidelidade atinge 1, enquanto nos segundo e quarto ela vai a zero). A partir dessa inversão de fase, pode-se concluir de forma completa como ocorre a evolução do sistema, qual seja, a oscilação entre estados separáveis e estados GHZ, ora de fase positiva, ora de fase negativa com valor absoluto $\phi = \frac{\pi}{2}$: $|111\rangle \rightarrow |GHZ_+\rangle \rightarrow |000\rangle \rightarrow |GHZ_-\rangle$, em que:

$$|GHZ_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|111\rangle \pm i|000\rangle). \quad (3.14)$$

O tipo de dinâmica obtido não é particular do regime de parâmetros citado no começo dessa seção. Com isso quer-se dizer que pequenas variações dos parâmetros não alteram drasticamente o comportamento do sistema. Com efeito, nota-se que a taxa de tunelamento Δ afeta apenas a frequência com que a dinâmica ocorre e o mesmo comportamento das figuras 3.3 e 3.4 podem ser observados se a taxa for inserida num intervalo aproximado

$0.1 \leq \Delta \leq 1.0$, naturalmente numa escala temporal diferente. Para o coeficiente β , o intervalo aproximado é $2.0 \leq \beta \leq 3.0$ e para o coeficiente γ é $0.0 \leq \gamma \leq 1.0$. Note que a interação coulombiana de PQ vizinhos diagonalmente pode ser desprezada e ainda assim se obtém a mesma dinâmica. A situação muda drasticamente quando são consideradas as dessintonias ε_i . Em todos os testes realizados, o sistema tripartite demonstrou ser sensível à presença de dessintonia no que diz respeito à evolução para algum estado da classe GHZ, de sorte que nenhum desse foi observado quando qualquer $\varepsilon_i \neq 0.0$ (valores na ordem de 0.01 são suficiente para interferir na dinâmica de modo negativo). Para regimes de parâmetros fora dos intervalos citados não existe a garantia de formação de estados maximamente emaranhados, podendo ocasionalmente ocorrer a formação de estados parcialmente emaranhados (comumente detectados). Duas últimas observações precisam ser feitas nesse sentido. Em primeiro lugar, o fato de ter sido encontrada apenas uma região de parâmetros satisfatória para a produção de estados GHZ não implica sua unicidade. No entanto, se outra existe - e muito provavelmente deve existir - ela não foi encontrada nessa pesquisa. Em segundo, a região satisfatória de parâmetros é especial pelas consequências causadas sobre o Hamiltoniano reduzido, como será explanado nos próximos parágrafos.

Considere a figura 3.3(c). Exceto pelos $\rho_{11}(t)$ e $\rho_{88}(t)$, nota-se que todos os elementos diagonais de $\rho(t)$ possuem valor nulo no decorrer da dinâmica. Como consequência, não há probabilidade do sistema ocupar configurações que não sejam as constituintes do estado GHZ. Analogamente, fazendo-se uma nova dinâmica com o mesmo valor dos parâmetros no Hamiltoniano usados nas figuras 3.3 e 3.4, mas com a condição inicial $\rho_{88}(0) = 1$, obtém-se $|000\rangle \rightarrow |GHZ_-\rangle \rightarrow |111\rangle \rightarrow |GHZ_+\rangle$. Verifica-se que, uma vez que o sistema é iniciado nas configurações $|111\rangle$ ou $|000\rangle$ a dinâmica nunca permite que outros estados sejam acessados (ao menos na ausência de reservatórios). Ou o sistema ocupa um estado puro (separável) ou uma superposição desses dois estados (GHZ). Portanto, esse regime de parâmetros cria um subespaço desconectado dos demais no Hamiltoniano reduzido do sistema.

Na verdade os resultados indicam a formação de três subespaços que efetivamente não interagem, com os outros dois apresentados na sequência. Na figura 3.5, apresentam-

se os resultados da dinâmica das mesmas quantidades das figuras anteriores, com a mesma escolha de parâmetros, considerando como condição inicial $\rho_{33}(0) = 1$ e $\sigma = |\psi\rangle\langle\psi|$, com $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|101\rangle - i|010\rangle)$ para o cálculo de fidelidade.

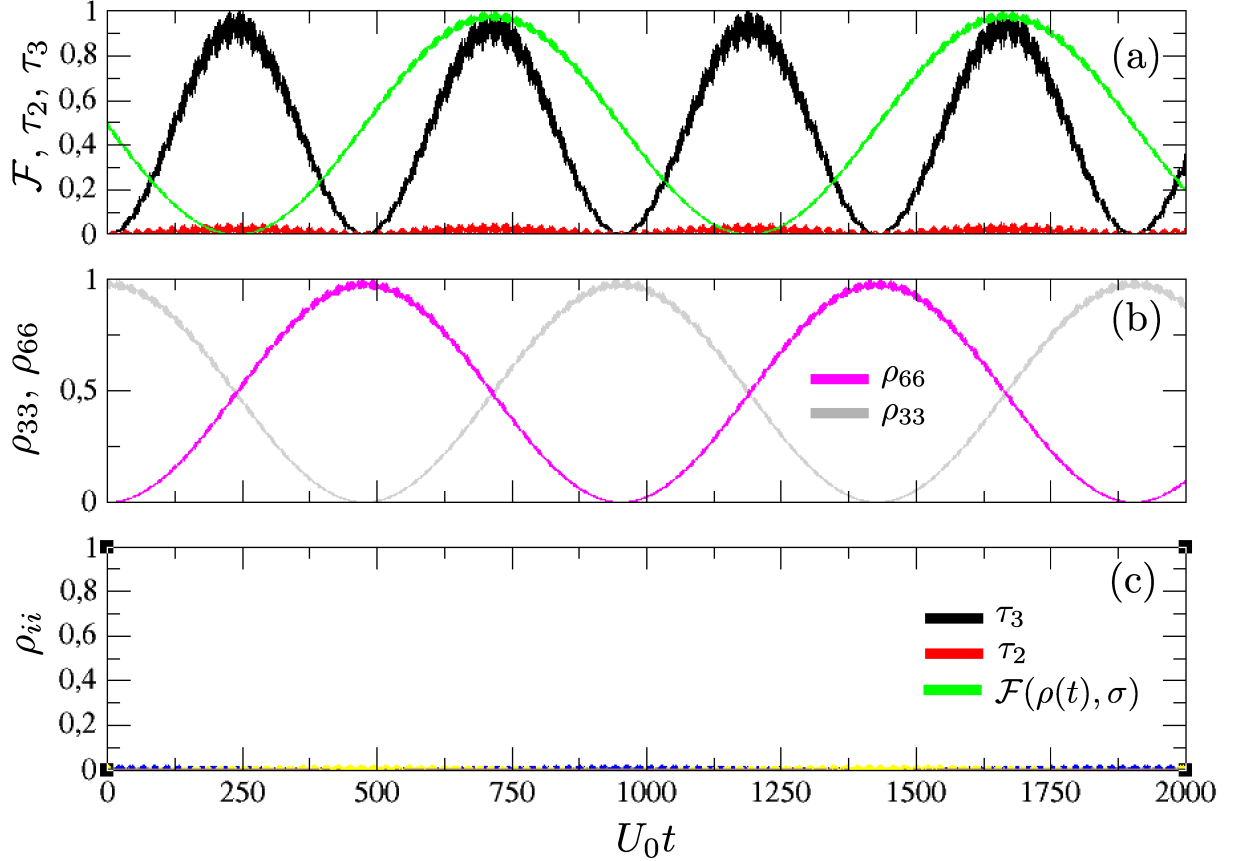


Figura 3.5: Gráficos contendo os quantificadores de emaranhamento e os elementos diagonais da matriz densidade, em cores: τ_3 (preto); τ_2 (vermelho); $\mathcal{F}(\rho(t), \sigma)$ (verde); $\rho_{33}(t)$ (cinza); $\rho_{66}(t)$ (rosa). Todos os demais elementos da diagonal de $\rho(t)$ estão inseridos no último gráfico.

Fonte: Próprio autor

A comparação das curvas presentes na figura 3.5 e figura 3.3 permite a utilização da mesma arguição para extrair resultados da primeira. Nesse sentido, a dinâmica completa é dada por $|101\rangle \rightarrow |E_{36+}\rangle \rightarrow |010\rangle \rightarrow |E_{36-}\rangle$, onde:

$$|E_{36\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|101\rangle \pm i|010\rangle). \quad (3.15)$$

Também continua válido o comentário sobre as regiões de parâmetros acessíveis, isto é, os intervalos dos parâmetros Δ , β , γ e ε_i em que esses mesmos resultados são obtidos.

No entanto, nesse caso a dinâmica está num subespaço distinto do anterior, pois os únicos estados acessíveis são os $|101\rangle$ e $|010\rangle$. Ou o sistema ocupa a configuração de estado puro separável ou ocupa a superposição desses dois estados. Isso pode ser confirmado pela figura 3.5. Os únicos elementos não nulos de $\rho(t)$ no decorrer da dinâmica estão em seu painel (b) e são $\rho_{33}(t)$, $\rho_{66}(t)$, sendo os demais plotados no painel (c). Portanto está demonstrada a existência do segundo subespaço desconectado do Hamiltoniano.

Considere agora os estados da forma (3.15) obtidos durante a dinâmica nesse segundo subespaço do hamiltoniano. Naturalmente eles não são da forma GHZ particular, dada em (3.14). Entretanto, os critérios de emaranhamento 3-tangle e 2-tangle indicam que eles são estados maximamente emaranhados, pois no instante de sua formação $\tau_3 = 1$ e $\tau_2 = 0$, como pode ser visto na figura 3.5(a). Particularmente, devem ser estados maximamente emaranhados com a propriedade de emaranhamento genuíno triplo, característico dos estados pertencentes à classe de equivalência GHZ. Esse resultado é interessante pois por um lado, os estados E_{36} não possuem a forma particular associada aos estados GHZ (sendo distintos fisicamente devido a ocupação dos PQ) por outro, são indistinguíveis dos GHZ via critérios de emaranhamento 2-tangle e 3-tangle. Nesse sentido, é possível provar a equivalência entre os estados $\text{GHZ}\pm$ e os $E_{36}\pm$, baseando-se no critério apresentado na seção 2.4, qual seja, dois estados pertencem à mesma classe de equivalência se existe um operador local inversível transformando-os um no outro. Com efeito, considere o operador $I \otimes \sigma_x \otimes I$ aplicado sobre um estado genérico da forma (2.29). É fácil ver que:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|101\rangle + e^{i\phi}|010\rangle) = (I \otimes \sigma_x \otimes I) \frac{1}{\sqrt{2}}(|111\rangle + e^{i\phi}|000\rangle). \quad (3.16)$$

A equação 3.17 é válida para todo ϕ e, naturalmente, para $\phi = \pm\frac{\pi}{2}$. Portanto, os estados da forma (3.15) são obtidos por LOCC aplicadas nos estados da forma (3.14). A transformação $I \otimes \sigma_x \otimes I$ é a sua própria inversa, de sorte que:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|111\rangle + e^{i\phi}|000\rangle) = (I \otimes \sigma_x \otimes I) \frac{1}{\sqrt{2}}(|101\rangle + e^{i\phi}|010\rangle). \quad (3.17)$$

Dessa maneira, uma vez que se demonstra a existência do operador local inversível, decorre que os estados $|E_{36\pm}\rangle$ pertencem à classe GHZ. Por conseguinte, podem ser utilizados nos protocolos de IQ, indistinguívelmente dos estados da forma (3.14) e devem apresentar as mesmas propriedades de correlações quânticas dos últimos, como por exemplo a máxima violação das Desigualdades de Bell.

O último subespaço desconexo do hamiltoniano é obtido mantendo-se os mesmos valores dos parâmetros, com a condição inicial $\rho_{22}(0) = 1$ e, apenas para o cálculo de fidelidade, faz-se $\sigma = |\psi\rangle\langle\psi|$ com $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|110\rangle - i|001\rangle)$. Os resultados da dinâmica são apresentados na figura 3.6.

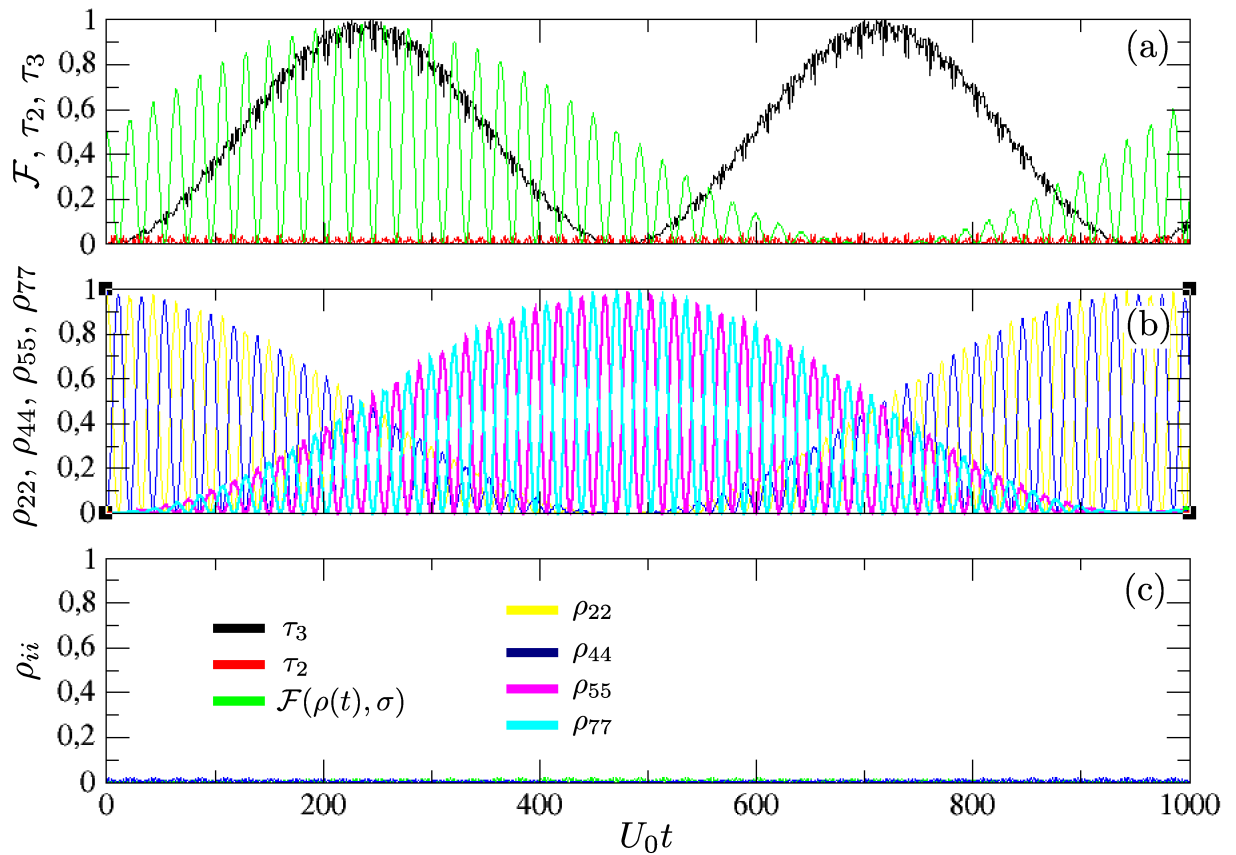


Figura 3.6: Dinâmica de emaranhamento, fidelidade e populações para a condição inicial $\rho(0) = \rho_{22} = 1$, em cores: τ_3 (preto); τ_2 (vermelho); $\mathcal{F}(\rho(t), \sigma)$ (verde); $\rho_{22}(t)$ (amarelo); $\rho_{44}(t)$ (azul escuro); ρ_{55} (rosa); ρ_{77} (azul claro). Todos os demais elementos da diagonal de $\rho(t)$ estão inseridos no último gráfico.

Fonte: Próprio autor

Conforme a figura 3.6, a dinâmica se limita aos quatro estados, $|110\rangle$, $|100\rangle$, $|011\rangle$ e $|001\rangle$. De fato, para qualquer condição inicial que seja referente a um desses estados, não há

evolução permitida para estados externos (conforme a figura 3.6(c)), caracterizando o último subespaço desconexo do hamiltoniano. Como nos casos anteriores, as únicas possibilidades para a evolução são estados separáveis ou estados de superposição, no entanto a fenomenologia é distinta, pois agora existem quatro estados acessíveis ao invés de apenas dois.

A evolução temporal como demonstrado na figura 3.6(b) permite inferir como as populações evoluem no tempo de maneira completa. No instante inicial a população é caracterizada por $|110\rangle$ (pela condição inicial imposta). Instantaneamente após o início da dinâmica, cresce a população do estado $|100\rangle$ enquanto a do $|110\rangle$ diminui e eles oscilam alternadamente e com alta frequência por um curto período com mínimo em 0 e máximo em 1. A superposição desses dois estados não produz um estado maximamente emaranhado conforme visto na figura 3.6(a), pela medida de 3-tangle. Após alguns instantes, a amplitude dessa oscilação passa a diminuir na medida em que a oscilação dos estados $|011\rangle$ e $|001\rangle$ se inicia e tem sua amplitude aumentada. O detalhe crucial a ser notado é que a oscilação dos estados $|110\rangle$ e $|001\rangle$ ocorre em fase, assim como a dos estados $|100\rangle$ e $|011\rangle$. Isso permite a criação de estados bastante similares aos dados em (3.15), pois devem ocorrer superposições do tipo:

$$|E_{27\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|110\rangle \pm i |001\rangle) \quad (3.18)$$

$$|E_{45\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|100\rangle \pm i |011\rangle). \quad (3.19)$$

Pode-se observar a superposição do tipo (3.18) com fase negativa na figura 3.6(a), no primeiro máximo das quantidades 3-tangle e fidelidade. Pelas rápidas oscilações do painel(b), é difícil constatar que as populações estão divididas em 0.5 nesse instante, mas uma ampliação facilita a essa visualização, conforme a figura 3.7.

Na figura 3.7, aproximadamente em 235 (em unidades de $U_0 t$), nota-se que $\rho_{22}(t) = \rho_{77} = 0.5$ e $\rho_{44}(t) = \rho_{55}(t) = 0.0$. Nesse exato instante pela figura 3.6(a), $\tau_3 = 1$, assim como a fidelidade. O estado $|E_{27+}\rangle$ é obtido no segundo máximo de 3-tangle da figura 3.6(a), conforme visto na figura 3.8, em que todos os valores dos parâmetros foram mantidos iguais, assim como a condição inicial, mas se definiu (para o cálculo de fidelidade)

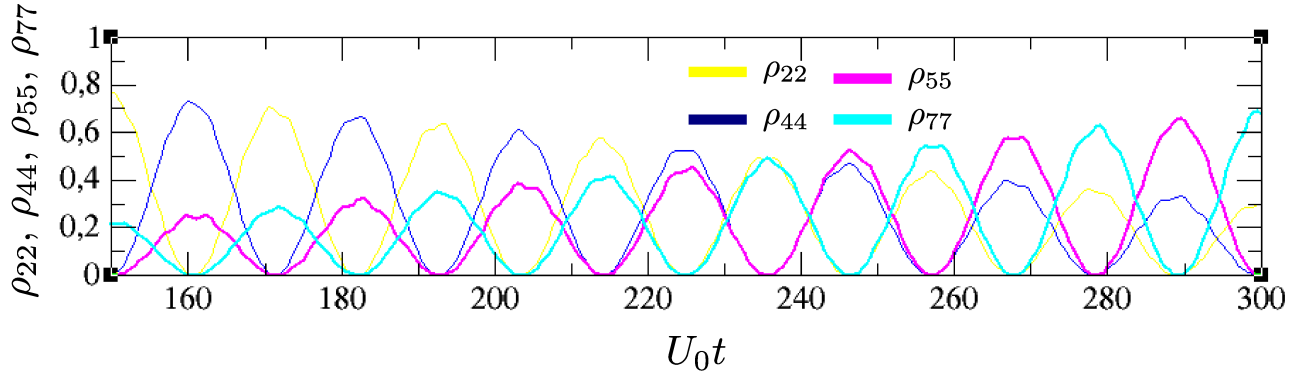


Figura 3.7: Gráfico ampliado da evolução temporal das populações, em cores: $\rho_{22}(t)$ (amarelo); $\rho_{44}(t)$ (azul escuro); $\rho_{55}(t)$ (rosa); $\rho_{77}(t)$ (azul claro).

Fonte: Próprio autor

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|110\rangle + i|001\rangle).$$

Os estados da forma (3.19) são igualmente obtidos nessa mesma dinâmica, mas em instantes de tempo posteriores. Pode-se provar que os estados desse último subespaço também pertencem à classe GHZ. Com efeito, considere a transformação $I \otimes I \otimes \sigma_x$ aplicado sobre um estado genérico da forma (2.29):

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|110\rangle + e^{i\phi}|001\rangle) = (I \otimes I \otimes \sigma_x) \frac{1}{\sqrt{2}}(|111\rangle + e^{i\phi}|000\rangle). \quad (3.20)$$

Portanto, para o particular valor $\phi = \pm\frac{\pi}{2}$, obtem-se $|E_{27\pm}\rangle$ por LOCC aplicadas em estados da forma (3.14). Uma vez que a transformação $I \otimes I \otimes \sigma_x$ é sua própria inversa, segue que:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|111\rangle + e^{i\phi}|000\rangle) = (I \otimes I \otimes \sigma_x) \frac{1}{\sqrt{2}}(|110\rangle + e^{i\phi}|001\rangle). \quad (3.21)$$

Dessa maneira, demonstra-se a existência do operador local inversível e decorre que os estados $|E_{27\pm}\rangle$ pertencem à classe GHZ. Por conseguinte, podem ser utilizados nos protocolos de IQ, indistinguívelmente dos estados da forma (3.14) e devem apresentar as mesmas propriedades de correlações quânticas dos últimos, como por exemplo a máxima violação das Desigualdades de Bell.

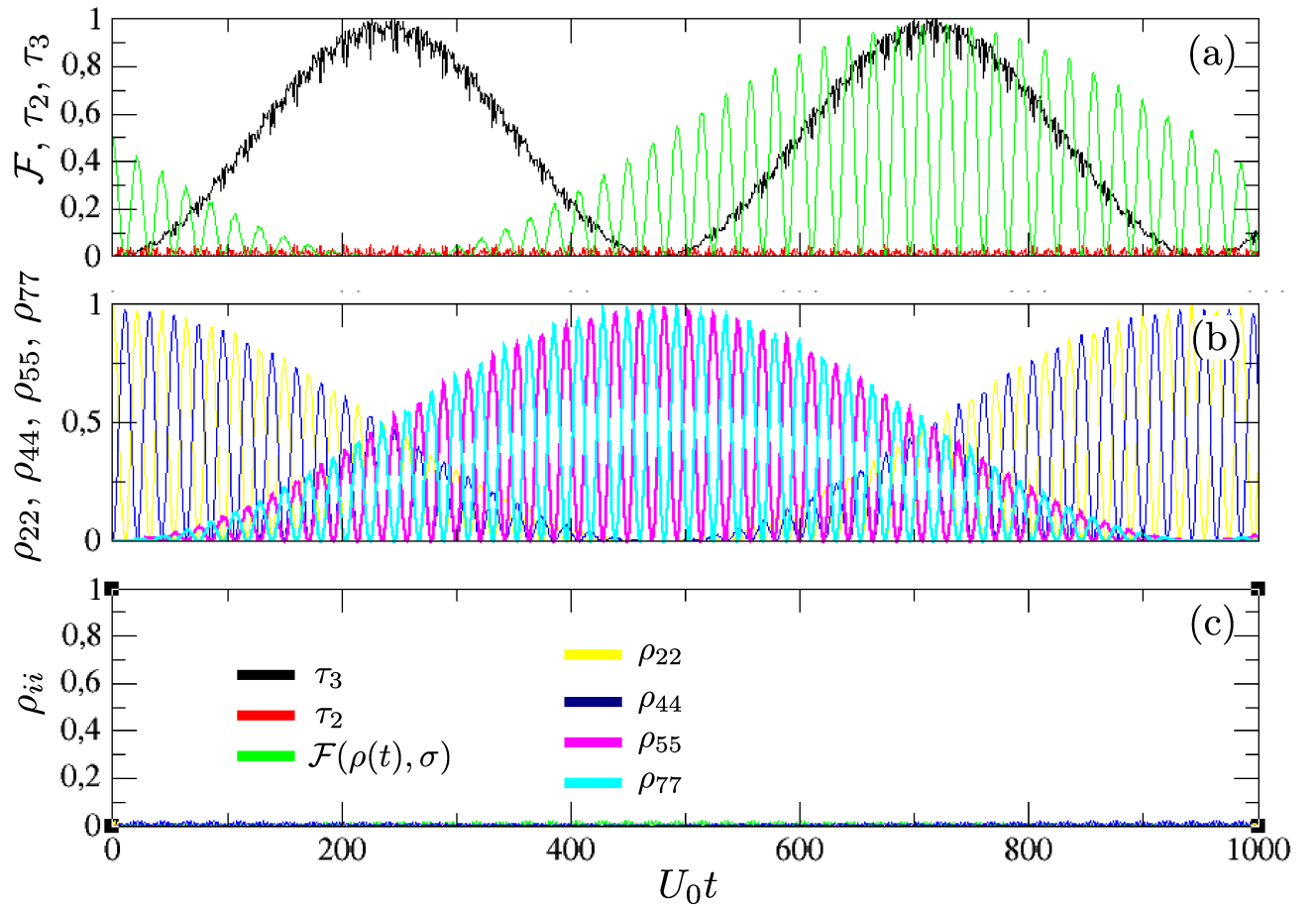


Figura 3.8: Gráficos contendo os critérios de emaranhamento e os elementos diagonais da matriz densidade, em cores: τ_3 (preto); τ_2 (vermelho); $\mathcal{F}(\rho(t), \sigma)$ (verde); $\rho_{22}(t)$ (amarelo); $\rho_{44}(t)$ (azul escuro); ρ_{55} (rosa); ρ_{77} (azul claro). Todos os demais elementos da diagonal de $\rho(t)$ estão inseridos no último gráfico.

Fonte: Próprio autor

A argumentação é exatamente a mesma para provar que os estados $|E_{45\pm}\rangle$ pertencem à classe GHZ, sendo a operação local inversível nesse caso $I \otimes \sigma_x \otimes \sigma_x$.

Capítulo 4

Conclusão

Neste trabalho de conclusão de curso buscou-se apresentar algumas perspectivas gerais sobre o fenômeno de emaranhamento em sistemas puros e mistos multipartite, sua definição formal e o problema da separabilidade. Como aplicação, estudou-se um sistema puro tripartite, focando na implementação de métodos numéricos que permitem o cálculo de alguns quantificadores de emaranhamento como os 2-tangle e 3-tangle. Buscou-se também justificar a existência de classes de equivalência de emaranhamento evidenciadas pelo critério LOCC, das quais se destacam as GHZ e W. O objetivo era a obtenção, no decorrer da dinâmica, de estados pertencentes a estas classes, naturalmente caracterizando a busca por estados maximamente emaranhados no sistema tripartite com pontos quânticos nanoestruturados.

O primeiro resultado interessante foi a descoberta de um conjunto de parâmetros capaz de criar três subespaços desconexos no hamiltoniano. Com isso, quer-se dizer que para uma dada condição inicial caracterizada por uma configuração de qubits pertencente a um dos subespaços, a dinâmica se mantém no subespaço. Os intervalos dos parâmetros são: $0.1 \leq \Delta \leq 1.0$, $2.0 \leq \beta \leq 3.0$, $0.0 \leq \gamma \leq 1.0$, $\varepsilon_i = 0.0$. Por sua vez, os subespaços desconexos do hamiltoniano são: $S_1 = \{|111\rangle, |000\rangle\}$, $S_2 = \{|101\rangle, |010\rangle\}$, $S_3 = \{|110\rangle, |100\rangle, |011\rangle, |001\rangle\}$. Dessa maneira, para cada condição inicial respectiva a um dos subespaços ocorre uma dinâmica particular. No subespaço S_1 obtém-se o GHZ dado em (3.14) com fases $\phi = \pm \frac{\pi}{2}$. No subespaço S_2 obtém-se os estados $E_{36} \pm$ conforme

em (3.15). De acordo com os critérios 2-tangle e 3-tangle tais estados são maximamente emaranhados com emaranhamento genuino triplo e, pelo critério LOCC, provou-se o seu pertencimento à classe de estados GHZ. Por fim, no subespaço S_3 , ocorrem os estados $E_{27\pm}$ e $E_{45\pm}$, das formas (3.18) e (3.19), respectivamente. Novamente os critérios 2-tangle e 3-tangle indicam que são estados maximamente emaranhados, e pela existência de operadores locais inversíveis, prova-se o seu pertencimento à classe de equivalência GHZ.

Futuros trabalhos procuram obter as condições físicas para a geração dinâmica de estados W. Resultados preliminares apontam que um estado próximo ao W foi obtido para um conjunto de parâmetros muito particular, dado por $\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 1.0$, $\varepsilon_2 = 0.1$, $\Delta = 0.4$ (tornou-se também assimétrica a taxa de tunelamento do segundo qubit por $V_{34} = V_{43} = \frac{0.8\Delta}{2}$), $\beta = 2.0$, $\gamma = 1.0$ e exclusivamente com a condição inicial $\rho_{22}(0) = 1$. Nessas condições obteve-se $\tau_3 = 0.2$ e uma quase superposição tripla dos estados componentes do W, conforme em (2.30).

Projeta-se para a continuidade da pesquisa aplicações de métodos mais analíticos para a obtenção de estados emaranhados, explorando-se o espectro de energia do hamiltoniano e construção de hamiltonianos efetivos para ditar a dinâmica.

Referências Bibliográficas

- [1] E. SCHRODINGER. Discussion of probability relations between separated systems. *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 31:555, 1935.
- [2] A. EINSTEIN et al. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Physical Review Letter*, 47:777, 1935.
- [3] C.H. BENNET et al. Teleporting an unknown quantum state via dual classical and einstein-podolsky-rosen channels. *Physical Review Letter*, 70:1895, 1993.
- [4] D. BOUWMEESTER et al. Experimental quantum teleportation. *Nature*, 390:575, 1997.
- [5] W. PFAFF et al. Unconditional quantum teleportation between distant solid-state quantum bits. *Science*, 345:532, 2014.
- [6] J. REN et al. Ground-to-satellite quantum teleportation. *Science*, 549:70, 2017.
- [7] G. TOSI et al. Silicon quantum processor with robust long-distance qubit couplings. *Nature Communications*, 8, 2017.
- [8] P. A. S. OLIVEIRA. *Emaranhamento eletrônico em moléculas de pontos quânticos semicondutores*. Dissertação, Universidade Federal de Uberlândia, 2015.
- [9] R. HORODECKI et al. Quantum entanglement. *Reviews of Modern Physics*, 81:865, 2009.
- [10] D. S. CAVALCANTI. *Em busca de um entendimento completo acerca do emaranhamento*. Dissertação, Universidade Federal de Minas Gerais, 2006.

- [11] M. B. PLENIO. An introduction to entanglement measures. *Quantum Information and Computation*, 7:1, 2007.
- [12] W. K. WOOTERS. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. *Physical Review Letters*, 80:2245, 1998.
- [13] D. SUTER et al. *Entanglement measures*, 2017 (accessed Dezember 7, 2018).
https://qnap.e3.physik.tu-dortmund.de/suter/Vorlesung/QIV_WS15/4.4_Entanglement.pdf.
- [14] V. COFFMAN et al. Distributed entanglement. *Physical Review A*, 61:2306, 1998.
- [15] T. HAYASHI et al. Coherent manipulation of electronic states in a double quantum dot. *Physical Review Letters*, 91:226804, 2003.
- [16] T. FUJISAWA et al. Correlated coherent oscillations in coupled semiconductor charge qubits. *Physical Review Letters*, 103:56802, 2009.
- [17] P. A OLIVEIRA et al. Bell states and entanglement dynamics on two coupled quantum molecules. *Annals of Physics*, 356:244, 2015.
- [18] F. M. SOUZA et al. Lindblad formalism based on fermion-to-qubit mapping for nonequilibrium open quantum systems. *Physical Review A*, 96:2110, 2017.
- [19] C. COHEN-TANNOUDJI et al. *Quantum Mechanics*. Wiley, 1991.
- [20] D. J. GRIFFITHS. *Introduction to Quantum Mechanics*. Addison-Wesley Professional, 2004.
- [21] J. J. SAKURAI. *Modern Quantum Mechanics*. Pearson, 2010.
- [22] U. FANO. Description of states in quantum mechanics by density matrix and operator techniques. *Reviews of Modern Physics*, 29:74, 1957.
- [23] J.S BELL. On the einstein podolsky rosen paradox. *Physics*, 1:195, 1964.

- [24] M. A. NIELSEN et al. *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition*. Cambridge University Press, 2011.
- [25] W. DUR. Three qubits can be entangled in two inequivalent ways. *Physical Review A*, 62:2314, 2000.
- [26] D. M. GREENBERGER et al. *Going beyond Bell Theorem*, 1989 (accessed Dezember 2, 2018). <https://arxiv.org/pdf/0712.0921.pdf>.