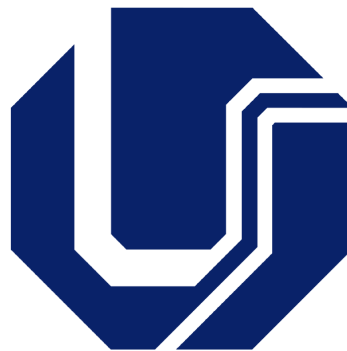

Efeitos da Inicialização na Formação de Emaranhamento Quântico em Qubits de Carga

Ellen Martins Fernandes



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Uberlândia
2024

Ellen Martins Fernandes

**Efeitos da Inicialização na Formação de
Emaranhamento Quântico em Qubits de Carga**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós Graduação do Instituto de Física da Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

Área de concentração: Informação Quântica

Orientador: Prof. Dr. Fabrício Macedo de Souza

Uberlândia

2024

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da UFU, MG, Brasil.

F363e
2024 Fernandes, Ellen Martins, 1999-
 Efeitos da inicialização na formação de emaranhamento quântico em
 qubits de carga [recurso eletrônico] / Ellen Martins Fernandes. - 2024.

 Orientador: Fabrício Macedo de Souza.
 Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Uberlândia,
Programa de Pós-graduação em Física.
 Modo de acesso: Internet.
 Disponível em: <http://doi.org/10.14393/ufu.di.2024.5169>
 Inclui bibliografia.
 Inclui ilustrações.

 1. Física. I. Souza, Fabrício Macedo de, 1975-, (Orient.). II.
Universidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós-graduação em
Física. III. Título.

CDU: 53

André Carlos Francisco
Bibliotecário Documentalista - CRB-6/3408



ATA DE DEFESA - PÓS-GRADUAÇÃO

Programa de Pós-Graduação em:	Física				
Defesa de:	Dissertação de Mestrado				
Data:	31 de julho de 2024	Hora de início:	09:00	Hora de encerramento:	11:40
Matrícula do Discente:	12222FIS002				
Nome do Discente:	Ellen Martins Fernandes				
Título do Trabalho:	<i>Efeitos da inicialização de estados na formação de emaranhamento quântico de Qubits de carga</i>				
Área de concentração:	Física				
Linha de pesquisa:	Informação Quântica				
Projeto de Pesquisa de vinculação:	N.A				

Reuniu-se por meio de videoconferência, a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Física, assim composta: Professores Doutores: José Maria Villas-Bôas - INFIS/UFU, Antônio Carlos Ferreira Seridônio - UNESP e Fabrício Macedo de Souza - INFIS/UFU, presidente da banca.

Iniciando os trabalhos o presidente da mesa, Dr, Fabrício Macedo de Souza apresentou a Comissão Examinadora e a candidata, agradeceu a presença do público, e concedeu à discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação da Discente e o tempo de arguição e resposta foram conforme as normas do Programa.

A seguir o senhor(a) presidente concedeu a palavra, pela ordem sucessivamente, aos(às) examinadores(as), que passaram a arguir o(a) candidato(a). Ultimada a arguição, que se desenvolveu dentro dos termos regimentais, a Banca, em sessão secreta, atribuiu o resultado final, considerando o(a) candidato(a):

Aprovada

Esta defesa faz parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre.

O competente diploma será expedido após cumprimento dos demais requisitos, conforme as normas do Programa, a legislação pertinente e a regulamentação interna da UFU.

Nada mais havendo a tratar foram encerrados os trabalhos. Foi lavrada a presente

ata que após lida e achada conforme foi assinada pela Banca Examinadora.



Documento assinado eletronicamente por **ANTONIO CARLOS FERREIRA SERIDONIO, Usuário Externo**, em 31/07/2024, às 15:14, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **José Maria Villas Boas, Professor(a) do Magistério Superior**, em 01/08/2024, às 08:50, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Fabício Macedo de Souza, Professor(a) do Magistério Superior**, em 01/08/2024, às 13:21, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **5568015** e o código CRC **967A315D**.

Referência: Processo nº 23117.048243/2024-01

SEI nº 5568015

Agradecimentos

Aos cachorrinhos Fred, Sidney, Arthur, Spike e Rex que fazem ou fizeram parte da minha vida, e aos gatos Zod, Santa Mônica e Pacato que habitam minha casa atualmente.

Aos meus familiares que nunca duvidaram de meu potencial e sempre me apoiaram apesar de minhas escolhas não necessariamente parecerem as melhores.

À minha mãe particularmente, que sempre investiu tudo de si em mim durante todo esse tempo.

Ao meu namorado Juliano, que me acompanhou durante toda essa jornada, apoiando-me incondicionalmente.

Aos meus amigos Carlos, Douglas, Gabriel, Glaucielly, Isabelle, Isaque, Letícia e Thayane, os quais sempre estiveram aqui.

À Tia Nazir, que foi a primeira professora a ter uma compreensão diferente de mim e soube adaptar-me à sala de aula.

Ao Professor Dr. Fabrício Macedo de Souza, pela sua orientação durante todo o Mestrado com suas correções e incentivos.

À CAPES e aos PDFs de diversos livros e notas de aulas de física e matemática, disponíveis na internet, os quais tanto contribuíram para a minha aprendizagem, tornando o conhecimento acessível.

*"Borboletinha tá na cozinha
fazendo chocolate
para a madrinha
Poti, poti
perna de pau
olho de vidro
e nariz de pica-pau pau pau"
(Mário Lúcio de Freitas)*

Resumo

Os efeitos da inicialização eletrônica de estados quânticos no emaranhamento em sistemas eletrônicos permanecem uma questão em aberto. Nossa pesquisa concentra-se em um modelo de sistema composto por moléculas de pontos quânticos ligadas a reservatórios eletrônicos. Estabelecemos dois qubits eletrônicos que interagem entre si por meio da repulsão de Coulomb, de modo que a interação entre Coulomb e o processo de salto resultam na formação de estados emaranhados. Aqui analisamos como um pulso de tensão de porta Gaussiana, que injeta elétrons nos qubits de forma controlada no tempo, pode interferir no grau de emaranhamento. Para tanto calculamos diferentes quantidades como fidelidade, entropia de Von Neumann e negatividade. Nossos resultados mostram que o ajuste adequado da largura do pulso de inicialização é crucial para a formação de estados altamente emaranhados, iluminando assim uma possível implementação experimental futura de qubits eletrônicos.

Palavras-chave: Inicialização. Emaranhamento. Reservatório. Porta Gaussiana. Qubits. Repulsão de Coulomb. Equação de Lindblad.

Abstract

The effects of electronic initialization of quantum states on the entanglement in electronic systems remain an open question. Our research focuses on a system model comprising of quantum dot molecules attached to electronic reservoirs. Two electronic qubits interact with each other via Coulomb repulsion. The interplay between Coulomb and hopping process results on the formation of entangled states. Here we analyse how a Gaussian gate voltage pulse, that injects electrons into the qubits in a time controlled way, can interfere on the entanglement degree. To this aim we calculate different quantities such as fidelity, Von Neumann entropy and negativity . Ours results show that the proper adjustment of the initialization pulse width is crucial to the formation of highly entangled states, thus shining light on possible future experimental implementation of electronic qubits.

Keywords: Initialization. Entanglement. Reservoir. Gaussian Gate. Qubits. Coulomb Repulsion. Lindblad Equation.

Lista de ilustrações

- Figura 1 – Representação a esquerda de dois bits e a direita um estado quântico $|\psi\rangle$ para um único qubit na forma de uma esfera de Bloch. 24
- Figura 2 – (a) Micrografia eletrônica de varredura de um dispositivo quádruplo de pontos quânticos para dois qubits de carga. (b) Circuito equivalente do dispositivo. As interações de Coulomb são modeladas pelo acoplamento de capacitores C's. O acoplamento do *intra-qubits* é caracterizado por Δ_1 e Δ_2 entre os pontos, e Γ 's representam os *Gates* de voltagem entre pontos e condutores. Fonte: Imagem extraída do artigo "*Multiple two-qubit operations for a coupled semiconductor charge qubit*"(FUJISAWA et al., 2011) 26
- Figura 3 – Ilustração do sistema estudado. Quatro PQ (círculos brancos numerados) são organizados para formar uma estrutura de dois qubits, onde τ é a constante de acoplamento entre pontos quânticos, J e J' são respectivamente as interações Coulombianas diretas e indiretas e $\Gamma(t)$ é o pulso gaussiano responsável pela injeção de elétrons. 28
- Figura 4 – Função espectral do sistema em relação à energia e ao acoplamento *intra-qubit* τ . Para estabelecer o emaranhamento com separação energética clara, a escolha de τ é destacada por um círculo branco, localizado em $\tau = 10\mu eV$ e no nível energético de $1meV$, facilitando a visualização de que, para esse valor de tunelamento, é possível obter os estados $|0110\rangle$ e $|1001\rangle$ energeticamente bem separados dos demais. . . 32
- Figura 5 – Transições virtuais entre níveis de energia. 33
- Figura 6 – Representação de dois Qubits emaranhados, cuja frequência de oscilação entre os estados é dada por Ω 34

Figura 7 – Projetores variando no tempo no primeiro <i>qubit</i> para diferentes parâmetros de σ e Γ_0 , onde são representado os valores esperados do projetores $ 1111\rangle$ (linha cinza pontilhada), $ 0000\rangle$ (linha preta tracejada-pontilhada), $ 0110\rangle$ (linha preta sólida), $ 1001\rangle$ (linha preta tracejada) e o pulso (linha cinza), considerando as escolhas de (σ, Γ_0) como constam na Tabela 4.	54
Figura 8 – Dinâmica das ocupações n_1 (linha preta) e n_2 (linha tracejada) e representação do pulso (linha cinza), no primeiro Qubit Quântico para diferentes parâmetros, sendo $a = (133, 0.1)$, $b = (133, 0.5)$, $c = (47, 0.1)$ e $d = (47, 0.5)$	56
Figura 9 – Gráfico de mapa de cores que mostra os valores máximos para o projetor $ 0110\rangle$ variando a largura do pulso σ e a força de acoplamento Γ_0 , onde é selecionado alguns pontos (σ, Γ_0) rotulados como $a = (133, 0.1)$, $b = (133, 0.5)$, $c = (47, 0.1)$ e $d = (47, 0.5)$ para analisar diferentes inicializações.	57
Figura 10 – <i>Plots</i> referentes ao sistema sem efeito de decorrência após o bloqueio da porta do reservatório: (1) Fidelidade, (2) Defeito de Idempotência, (3) Entropia de Von Neumann, (4) Entropia parcial de Von Neumann, onde $a = (133, 0.1)$ (linha preta tracejada); $b = (133, 0.5)$ (linha cinza pontilhada); $c = (47, 0.1)$ (linha cinza); $d = (47, 0.5)$ (linha pontilhada preta), caso ideal (linha pontilhada vermelha), isto é, onde é desconsiderado o efeito de inicialização de modo que o sistema inicia apenas no estado $ 0110\rangle$	59
Figura 11 – Negatividade para diferentes pares de parâmetros de (σ, Γ_0) , onde $a = (133, 0.1)$ (linha preta tracejada); $b = (133, 0.5)$ (linha cinza pontilhada); $c = (47, 0.1)$ (linha cinza); $d = (47, 0.5)$ (linha pontilhada preta), caso ideal (linha pontilhada vermelha).	60
Figura 12 – Sistema sob efeito de decoerência apresentando o amortecimento da dinâmica entre projetores ao longo do tempo para diferentes parâmetros de (σ, Γ_0) , onde são representado os valores esperados do projetores $ 1111\rangle$ (linha cinza pontilhada), $ 0000\rangle$ (linha preta tracejada-pontilhada), $ 0110\rangle$ (linha preta sólida), $ 1001\rangle$ (linha preta tracejada) e o pulso (linha cinza), sendo $a = (133, 0.1)$, $b = (133, 0.5)$, $c = (47, 0.1)$ e $d = (47, 0.5)$	61

- Figura 13 – *Plots* para o sistema sob efeito de decoerência:(1) Fidelidade, (2) Defeito de Idempotência, (3) Entropia de Von Neumann, (4) Entropia parcial de Von Neumann, onde onde $a = (133, 0.1)$ (linha preta tracejada); $b = (133, 0.5)$ (linha cinza pontilhada); $c = (47, 0.1)$ (linha cinza); $d = (47, 0.5)$ (linha pontilhada preta), caso ideal (linha pontilhada vermelha). 62
- Figura 14 – Representação da negatividade calculara para um sistema sob decoerência quântica para diferentes pares de parâmetros de (σ, Γ_0) , onde $a = (133, 0.1)$ (linha preta tracejada); $b = (133, 0.5)$ (linha cinza pontilhada); $c = (47, 0.1)$ (linha cinza); $d = (47, 0.5)$ (linha pontilhada preta), caso ideal (linha pontilhada vermelha) 63
- Figura 15 – *Plots* para o sistema para *dephasing* de 5×10^{-2} GHz:(1) Fidelidade, (2) Defeito de Idempotência, (3) Entropia de Von Neumann, (4) Entropia parcial de Von Neumann, onde onde $a = (133, 0.1)$ (linha preta tracejada); $b = (133, 0.5)$ (linha cinza pontilhada); $c = (47, 0.1)$ (linha cinza); $d = (47, 0.5)$ (linha pontilhada preta), caso ideal (linha pontilhada vermelha). 64
- Figura 16 – Negatividade calculara para um sistema sob *dephasing* de 5×10^{-2} GHz quântica para diferentes pares de parâmetros de (σ, Γ_0) , onde $a = (133, 0.1)$ (linha preta tracejada); $b = (133, 0.5)$ (linha cinza pontilhada); $c = (47, 0.1)$ (linha cinza); $d = (47, 0.5)$ (linha pontilhada preta), caso ideal (linha pontilhada vermelha). 64
- Figura 17 – *Plots* para o sistema para *dephasing* de 5×10^{-1} GHz:(1) Fidelidade, (2) Defeito de Idempotência, (3) Entropia de Von Neumann, (4) Entropia parcial de Von Neumann, onde $a = (133, 0.1)$ (linha preta tracejada); $b = (133, 0.5)$ (linha cinza pontilhada); $c = (47, 0.1)$ (linha cinza); $d = (47, 0.5)$ (linha pontilhada preta), caso ideal (linha pontilhada vermelha). 65
- Figura 18 – Representação da negatividade calculara para um sistema sob *dephasing* de 5×10^{-1} GHz quântica para diferentes pares de parâmetros de (σ, Γ_0) , onde $a = (133, 0.1)$ (linha preta tracejada); $b = (133, 0.5)$ (linha cinza pontilhada); $c = (47, 0.1)$ (linha cinza); $d = (47, 0.5)$ (linha pontilhada preta), caso ideal (linha pontilhada vermelha). 65

Lista de tabelas

- Tabela 1 – Hamiltoniano completo do sistema, onde $\tau_{12} = \tau_{21} = \tau_{34} = \tau_{43} = \tau$ é o acoplamento *intra-qubits* nos quais o sub-índice refere-se à quais PQs estão acoplados. Além disso, as colunas amarelas se referem aos estados $|0110\rangle$ e $|1001\rangle$ nos quais apresentam a interação de Coulomb apenas do tipo cruzada (J'), enquanto as colunas verdes os estados $|0101\rangle$ e $|1010\rangle$ nos quais apresentam a interação de Coulomb apenas do tipo direta (J) e que se acoplam respectivamente com $|0110\rangle$ e $|1001\rangle$ 30
- Tabela 2 – Descrição dos estados e interações de Coulomb em função de ε . A tabela mostra os estados do sistema em relação à energia ε e suas interações de Coulomb correspondentes J e J' com $\tau = 0$ 33
- Tabela 3 – Hamiltoniano reduzido do sistema. 33
- Tabela 4 – Tabela de parâmetros de largura σ e intensidade Γ_0 de acoplamento do pulso de tensão gaussiano dos reservatórios com o sistema, e guai de identificação da curvas referentes às simulações de cada um dos casos. 54

Lista de siglas

ESR *Electron Spin Resonance*

EPR Einstein, Podolsky e Rosen

H_{ef} Hamiltoniano Efetivo

PQ ponto quânticos

QuTiP Quantum Toolbox in Python

Sumário

1	INTRODUÇÃO	23
2	MOLÉCULAS DE PONTOS QUÂNTICO	27
2.1	Sistema de dois <i>Qubits</i>	27
2.1.1	Hamiltoniano	29
2.1.2	Seleção de Parâmetros de Acoplamento para Separação Energética de Estados	31
2.1.3	Hamiltoniano Efetivo	32
3	SISTEMAS QUÂNTICOS ABERTOS	37
3.1	Operador Matriz Densidade	37
3.1.1	Sistemas de Estado Puro	38
3.1.2	Sistemas de Estado Misto	39
3.2	Representações Quânticas	41
3.3	Equação de Lindblad	41
3.3.1	Equação Mestra de Lindblad	44
4	EMARANHAMENTO	49
4.1	Teorema de não-separabilidade de d’Espagnat	49
4.2	Entropia de Von Neumann	50
4.3	Negatividade Quântica	51
4.4	Fidelidade	52
5	EFEITOS DA INICIALIZAÇÃO ELETRÔNICA	53
5.1	Oscilações de Rabi	54
5.2	Bloqueio de Coulomb	55
5.3	Impacto das Características do Pulso na Qualidade da Inicialização dos Qubits	56

5.4	Avaliação da Inicialização por Quantificadores e Indicadores de Emaranhamento	57
5.5	Efeitos da Decoerência na Formação de Emaranhamento	60
6	CONCLUSÃO	67
	REFERÊNCIAS	69

Introdução

Em 1965, Gordon E. Moore, cofundador da Intel, observou uma tendência histórica em que o número de transistores em um circuito integrado dobrava aproximadamente a cada dois anos, enquanto o custo caía drasticamente (MOORE, 1965). Essa observação se confirmou ao longo do tempo e ficou conhecida como a "Lei de Moore". Dessa forma, a medida que a densidade dos transistores aumenta e suas dimensões diminuem, os sistemas se aproximam dos limites da mecânica clássica. Com isso, quando os transistores atingem dimensões de dezenas de nanômetros, os fenômenos da mecânica quântica tornam-se evidentes, pois os comprimentos de onda de De Broglie das partículas começam a ser comparáveis com as dimensões dos sistemas físicos devido a natureza ondulatória das partículas, o que impulsionou a produção de tecnologias que se beneficiem de tais circunstâncias (BENIOFF, 1980).

Na computação clássica, a informação é codificada em *bits* 0 e 1, permitindo o processamento rápido e preciso de soluções numéricas (FRANCO, 2006). De maneira análoga, a computação quântica utiliza *bits* quânticos, também conhecidos como *qubits*, que são sistemas capazes de assumir superposições dos estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$ (NIELSEN; CHUANG, 2001; COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOË, 2019) (vide Figura 1). Essa superposição proporciona um aumento exponencial da eficiência no processamento (KNILL, 2010; NAKAHARA, 2008). Embora esta dissertação considere um sistema *spinless*, o comportamento dos *qubits* analisados será similar ao caso de *spins*.

Apesar disso, os computadores quânticos ainda não superam os clássicos devido às dificuldades inerentes à execução dos *qubits*, necessitando a implementação de estruturas capazes de transpor tais obstáculos. As vantagens da computação quântica são especialmente evidentes em problemas de fatoração e em tarefas de alta complexidade, que podem ser intratáveis ou exigir um tempo proibitivo para solução via máquinas clássicas. Isso levou pesquisadores, como Richard Feynman, a sugerirem a utilização de sistemas quânticos para operações computacionais (FEYNMAN, 1982).

Os qubits são classificados em categorias conforme sua natureza e métodos de manipulação, sendo as principais: *qubits* ópticos que utilizam estados de fótons, como polarização

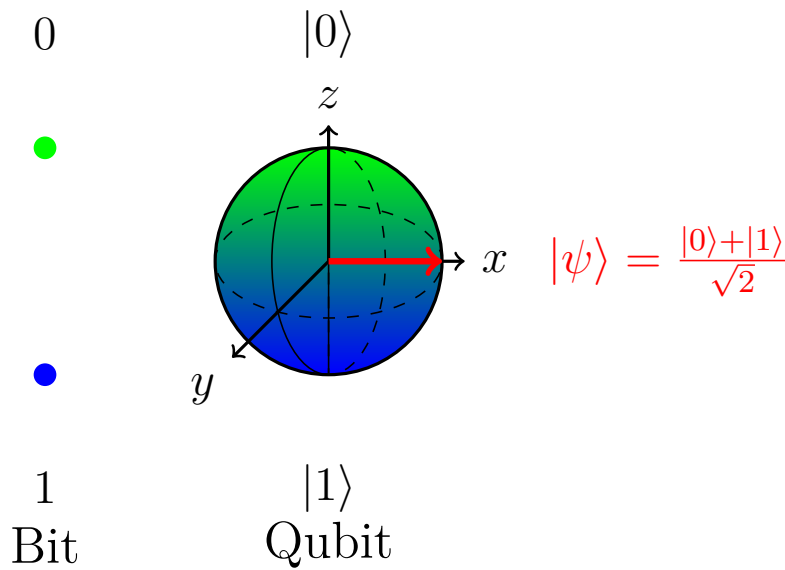


Figura 1 – Representação a esquerda de dois bits e a direita um estado quântico $|\psi\rangle$ para um único qubit na forma de uma esfera de Bloch.

e caminho, para codificar informações quânticas, sendo amplamente usados em comunicações quânticas e criptografia (KOK et al., 2007; BERGOU; HILLERY; SAFFMAN, 2021); *qubits* de síntese coloidal baseados em pontos quânticos produzidos por métodos de síntese química (MURRAY; NORRIS; BAWENDI, 1993), com propriedades ajustáveis que os tornam úteis em aplicações em dispositivos optoeletrônicos, como em fotocondutores e fotodetectores, LEDs e displays (AGARWAL; RAI; MONDAL, 2023; KARIM et al., 2022); *qubits* supercondutores que exploram estados quânticos de supercondutividade, onde a informação é armazenada em superposições de pares de Cooper (SCAPPUCCI et al., 2021; SONG et al., 1994); *qubits* de spin que utilizam o spin de partículas, como elétrons ou núcleos, controlados por campos magnéticos ou elétricos; e *qubits* de carga dos quais se baseiam na presença de elétrons em ilhas condutoras, manipulados por voltagens de porta (LEHNERT et al., 2003; CHATTERJEE et al., 2021; KOILLER et al., 2005).

Nesse sentido, tratando-se de *qubits* de semicondutores, como *qubits* de carga e *qubits* de spins, a principal técnica de produção de pontos quânticos é baseada na litografia (ZWERVER et al., 2022) para definir os contornos e as estruturas como pontos quânticos, poços quânticos, fios quânticos e os eletrodos de controle a fim de manipular os elétrons ou os spins (UDDIN et al., 2022).

Na fabricação por meio da litografia (SCAPPUCCI et al., 2021; SONG et al., 1994), a diferença crucial que caracteriza os *qubits* como de carga ou de spin está na forma como são controlados e lidos. Para os *qubits* de spin, o controle e a leitura dependem da manipulação do spin por meio de eletrodos externos e campos magnéticos, enquanto para os *qubits* de carga, a informação é extraída ajustando a voltagem de porta que controla o potencial químico da ilha (LEHNERT et al., 2003; CHATTERJEE et al., 2021; KOILLER et al., 2005).

A implementação de *qubits* na computação quântica é um desafio notável, principalmente devido aos mecanismos de decoerência. Ao explorar um sistema de dois níveis em nanoestruturas, como ponto quânticos (PQ) semicondutores (LOSS; DIVINCENZO, 1998), a interação com o ambiente induz processos de decoerência nos *qubits*, o que impõe limitações significativas na eficácia dos protocolos de informação quântica, pois afeta a estabilidade dos estados quânticos, tornando crucial o desenvolvimento de métodos para minimizar esses efeitos e garantir operações quânticas precisas e confiáveis.

Com isso, Loss e DiVincenzo se destacaram pela proposta de um método de implementação de portas lógicas, o qual, a partir de estratégias de controle de estados de spins confinados em PQ, executava operações entre *qubits* sem a necessidade de mover partículas. Essas manipulações mostraram-se capazes de minimizar o efeito de decoerência devido à redução das interações dos spins com o ambiente externo, viabilizando manipulações quânticas com maior precisão (LOSS; DIVINCENZO, 1998).

Nesse contexto, é de grande importância a realização de estudos que buscam estabelecer o controle de todo o processo dinâmico, desde a inicialização de estados, passando pelo controle coerente, até a realização das medidas dos estados finais (BEREZOVSKY et al., 2006; BERZOVSKY M. H. MIKKELSEN; COLDREN; AWSCHALOM, 2008; FUJISAWA; HAYASHI; HIRAYAMA, 2004). Trabalhos experimentais já existentes demonstram a manipulação coerente de estados quânticos de spins (ELZERMAN et al., 2004) e operações quânticas com dois qubits usando a carga dos elétrons (FUJISAWA et al., 2011), a partir de pulsos de tensão de porta ou de fonte-dreno, de *Electron Spin Resonance* (ESR) e campos ópticos coerentes (PETTA et al., 2005). Experimentos como estes evidenciam a possibilidade de usar spins eletrônicos como bits quânticos com tempos de decoerência bastante promissores, chegando a milissegundos (BEREZOVSKY M. H. MIKKELSEN; COLDREN; AWSCHALOM, 2008; PETTA et al., 2005).

Considerando a importância do controle dinâmico em sistemas quânticos e a necessidade de superar os desafios impostos pela decoerência (FUJISAWA; HAYASHI; HIRAYAMA, 2004), o artigo "*Multiple two-qubit operations for a coupled semiconductor charge qubit*" (FUJISAWA et al., 2011) traz uma contribuição significativa utilizando um dispositivo de dois *qubits* fabricados por litografia de feixe de elétrons. Este estudo avança na exploração de operações de dois *qubits* em um sistema de *qubits* de carga semicondutores acoplados, realizando manipulações de portas lógicas.

Neste contexto, os autores demonstram a fabricação de um dispositivo de dois qubits, onde em cada *qubit* um elétron é confinado. Este arranjo inovador permite a realização de operações de dois *qubits*, um passo fundamental para a evolução da computação quântica e a investigação de fenômenos quânticos mais complexos (FUJISAWA et al., 2011).

No estudo em questão, os autores descrevem múltiplas operações de dois qubits, nas quais diferentes tipos de operações podem ser realizadas em uma única etapa. Sendo assim, a partir de um acoplamento do tipo Ising (interação eletrostática) entre qubits de

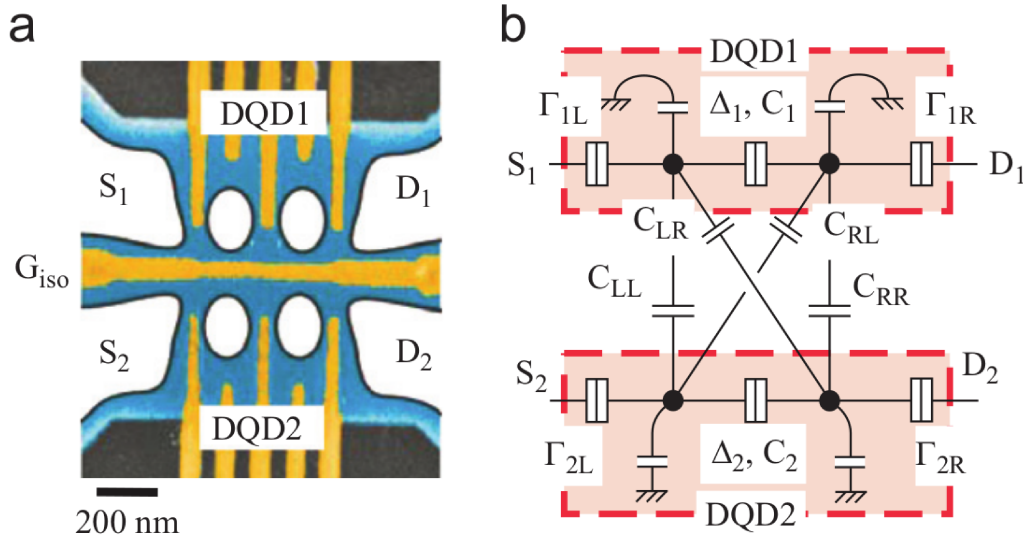


Figura 2 – (a) Micrografia eletrônica de varredura de um dispositivo quádruplo de pontos quânticos para dois qubits de carga. (b) Circuito equivalente do dispositivo. As interações de Coulomb são modeladas pelo acoplamento de capacitores C 's. O acoplamento do *intra-qubits* é caracterizado por Δ_1 e Δ_2 entre os pontos, e Γ 's representam os *Gates* de voltagem entre pontos e condutores. Fonte: Imagem extraída do artigo "Multiple two-qubit operations for a coupled semiconductor charge qubit"(FUJISAWA et al., 2011)

carga semicondutores, mostraram que várias operações de dois *qubits* podem ser realizadas seletivamente apenas escolhendo os alinhamentos adequados de energia do sistema, vide a Figura 2.

Com isso, nesta dissertação será abordada uma série de tópicos importantes que partem do estudo sobre as moléculas de pontos quânticos, focado em um sistema de dois *qubits*, e vai até a análise dos efeitos da inicialização eletrônica na formação de emaranhamento quântico. Para tal faz-se necessário percorrer o formalismo de Operador Matriz Densidade a fim de introduzir um estudo sobre representações quânticas e a Equação de Lindblad, bem como explorar os conceitos de emaranhamento de estados, de sistema bipartites, da quantificação do emaranhamento, da entropia de von Neumann, da negatividade quântica e da fidelidade, que atuam como fundamentos para a compreensão sobre como um pulso de tensão de porta gaussiana, que injeta elétrons nos qubits de forma controlada no tempo, pode interferir no grau de emaranhamento.

Moléculas de Pontos Quântico

Os PQ destacam-se como uma espécie de “*átomos artificiais*” em nanoescala, isto é, são estruturas de baixa dimensionalidade com suas características físicas determinadas pela mecânica quântica, no qual o confinamento é semelhante a uma partícula tridimensional em um modelo de caixa, cujo os níveis de energia podem ser controlados variando o tamanho e forma (SILBEY; ALBERTY; BAWENDI, 2005).

Sendo assim, tais estruturas artificiais, apresentam propriedades ópticas e eletrônicas de grande relevância para a tecnologia, que incluem a capacidade de transportar elétrons, ao confiná-los em regiões minúsculas, e emitir diferentes comprimentos de onda quando excitados opticamente.

2.1 Sistema de dois *Qubits*

Tendo como base todo o conteúdo recém introduzido, e em particular o artigo "*Multiple two-qubit operations for a coupled semiconductor charge qubit*" (FUJISAWA et al., 2011), conforme ilustrado na Figura 3, o sistema foi estabelecido como uma composição de quatro PQs dispostos em duplas determinadas por um fator de tunelamento τ que representa a interação *intra-qubits*, responsável pela formação de dois *qubits* eletrônicos, os quais interagem entre si através da repulsão de Coulomb. É importante ressaltar que a interação de Coulomb considerada aqui ocorre exclusivamente entre os *qubits* e não entre os pontos quânticos individuais. Isso se deve ao fato de que, com a intenção de carregar apenas um dos pontos quânticos de cada *qubit*, é comum que pelo menos um dos pontos esteja vazio, o que inviabiliza a interação de Coulomb entre eles. Além disso, a função espectral é calculada de modo a obter um acoplamento *intra-qubits* suficientemente fraco, de forma que retarde a ocupação total do *qubit*, desfavorecendo o processo de tunelamento que leva a carga do ponto quântico que recebe a injeção para o que é alimentado indiretamente. Esse ajuste é essencial para permitir a obtenção de estados maximamente emaranhados energeticamente bem separados.

Sendo assim, a interação entre a repulsão de Coulomb e o processo de salto, causado

pelo movimento dos elétrons de um ponto quântico para outro, leva à formação de estados emaranhados. Isto é, estados altamente correlacionados de modo que as propriedades de um *qubit* está intrinsecamente ligado as propriedades do outro, impossibilitando a descrição dos estados de cada partícula individualmente, pois formam um sistema quântico unificado cuja descrição completa só é possível quando considerado todas as partículas em conjunto. Com isso, analisaremos como um pulso de tensão da porta gaussiana pode afetar o grau de emaranhamento ao injetar elétrons em qubits de maneira controlada pelo tempo.

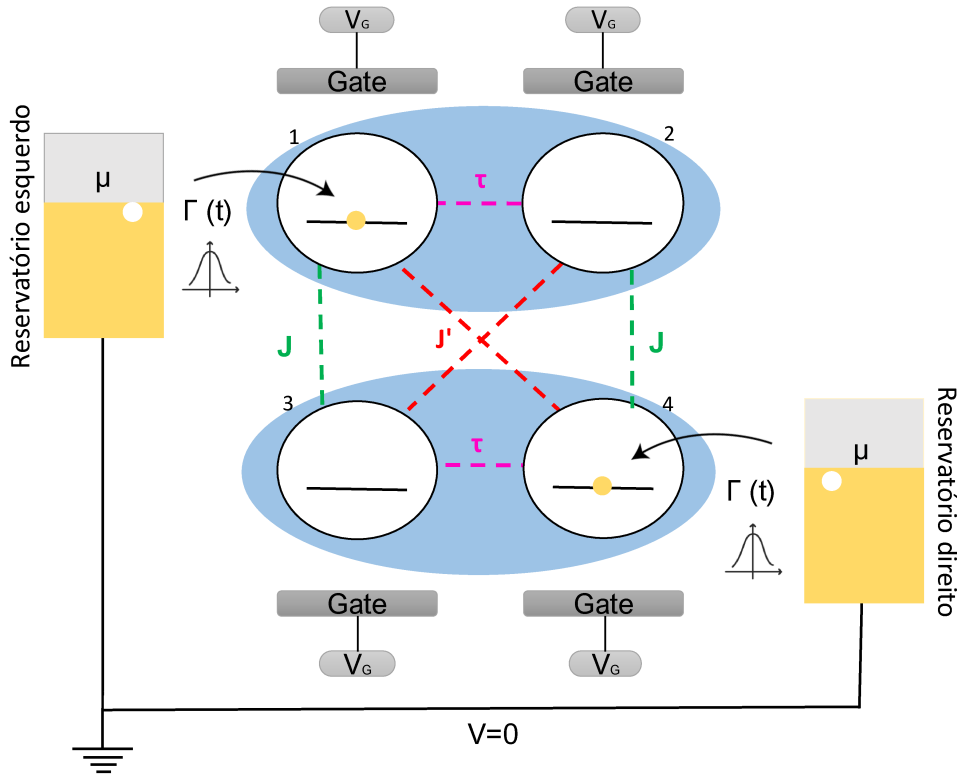


Figura 3 – Ilustração do sistema estudado. Quatro PQ (círculos brancos numerados) são organizados para formar uma estrutura de dois qubits, onde τ é a constante de acoplamento entre pontos quânticos, J e J' são respectivamente as interações Coulombianas diretas e indiretas e $\Gamma(t)$ é o pulso gaussiano responsável pela injeção de elétrons.

Para tal, a Figura 3 ilustra a configuração esquemática do sistema de estudo que inicializa vazio, composto por quatro PQ (círculos brancos numerados), onde o fator τ atua como constante de acoplamento *intra-qubits*, resultando em dois *qubits* (elipses azuis) que interagem entre si por meio de interações Coulombianas diretas J e diagonais J' , promovendo o emaranhamento quântico entre *qubits*. As caixas amarelas e cinza representam reservatórios de elétrons responsáveis pela alimentação dos PQs adjacentes, nos quais a altura de amarelo representa o nível de Fermi dos reservatórios. Setas curvadas representam um pulso gaussiano $\Gamma(t)$ que provoca a injeção de elétrons (pequenos círculos amarelos) no

ponto quântico através da saída de elétrons do reservatório (pequenos círculos brancos). Na parte superior dos PQs do primeiro *qubit* (primeira elipse azul) e na parte inferior dos PQs do segundo *qubit* (segunda elipse azul), são representadas as portas de voltagem responsáveis por ajustar os níveis de energia dos PQs abaixo do nível dos reservatórios, a fim de viabilizar a alimentação dos *qubits*.

Este sistema é considerado *spinless*, visto que a orientação dos *spins* dos elétrons não é relevante para a dinâmica de emaranhamento que será analisada, apenas a informação quanto à ocupação ou não dos PQs. A fim de estabelecer maior rigor, é possível considerar a presença de terminais ferromagnéticos capazes de filtrar os componentes de *spins*, a utilização de uma injeção previamente polarizada, ou ainda, a implementação de outros métodos que induzam uma degenerescência, de forma que a polarização possa ser desconsiderada.

2.1.1 Hamiltoniano

Para descrever o sistema ilustrado na Figura 3, utilizamos o seguinte Hamiltoniano:

$$H_T = H_0 + H_\tau + H_c. \quad (1)$$

O Hamiltoniano inicial é dado por

$$H_0 = \sum_{i=1}^4 \varepsilon_i n_i, \quad (2)$$

onde ε_i representa o nível de energia de cada ponto quântico e $n_i = d_i^\dagger d_i$ é o operador número, formado pelos operadores de criação $d_i^\dagger$ e aniquilação d_i .

O Hamiltoniano de acoplamento intra-qubits é

$$H_\tau = \tau(d_1^\dagger d_2 + d_3^\dagger d_4 + \text{h.c.}), \quad (3)$$

onde h.c. denota o termo conjugado complexo.

Finalmente, o Hamiltoniano de interação coulombiana *entre qubits* é

$$H_c = J(n_1 n_3 + n_2 n_4) + J'(n_1 n_4 + n_2 n_3), \quad (4)$$

onde J e J' são fatores escalares que correspondem à intensidade das interações direta e diagonal, respectivamente. Desta forma, é possível representar o sistema em um modelo Hamiltoniano conforme apresentado na Tabela 1

Para investigar a formação de estados emaranhados, é mais conveniente expressar os operadores na segunda quantização na forma de tensores de spin. Neste contexto a transformação de Jordan-Wigner demonstra-se um método adequado para a transição do formalismo da segunda quantização para uma representação mais oportuna para o

	$ 0000\rangle$	$ 0001\rangle$	$ 0010\rangle$	$ 0011\rangle$	$ 0100\rangle$	$ 0101\rangle$	$ 0110\rangle$	$ 0111\rangle$	$ 1000\rangle$	$ 1001\rangle$	$ 1010\rangle$	$ 1011\rangle$	$ 1100\rangle$	$ 1101\rangle$	$ 1110\rangle$	$ 1111\rangle$
$ 0000\rangle$	$\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 + \varepsilon_4$															
$ 0001\rangle$		$\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 + J' + J$	$-\tau_{34}$													
$ 0010\rangle$		$-\tau_{43}$	$\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_4 + J' + J$													
$ 0011\rangle$				$\varepsilon_1 + \varepsilon_2$												
$ 0100\rangle$					$\varepsilon_1 + \varepsilon_3 + \varepsilon_4 + J' + J$				$-\tau_{12}$							
$ 0101\rangle$					$\varepsilon_1 + \varepsilon_3 + J$	$-\tau_{34}$				$-\tau_{12}$						
$ 0110\rangle$					$-\tau_{43}$	$\varepsilon_2 + \varepsilon_4 + J'$					$-\tau_{12}$					
$ 0111\rangle$								ε_1				$-\tau_{12}$				
$ 1000\rangle$					$-\tau_{21}$				$\varepsilon_2 + \varepsilon_3 + \varepsilon_4 + J'$ J							
$ 1001\rangle$					$-\tau_{21}$					$\varepsilon_2 + \varepsilon_3 + J'$	$-\tau_{34}$					
$ 1010\rangle$						$-\tau_{21}$				$-\tau_{43}$	$\varepsilon_2 + \varepsilon_4 + J$					
$ 1011\rangle$								$-\tau_{21}$				ε_2				
$ 1100\rangle$													$\varepsilon_3 + \varepsilon_4$			
$ 1101\rangle$														ε_3	$-\tau_{34}$	
$ 1110\rangle$														$-\tau_{43}$	ε_4	
$ 1111\rangle$																0

Tabela 1 – Hamiltoniano completo do sistema, onde $\tau_{12} = \tau_{21} = \tau_{34} = \tau_{43} = \tau$ é o acoplamento *intra-qubits* nos quais o sub-índice refere-se à quais PQs estão acoplados. Além disso, as colunas amarelas se referem aos estados $|0110\rangle$ e $|1001\rangle$ nos quais apresentam a interação de Coulomb apenas do tipo cruzada (J'), enquanto as colunas verdes os estados $|0101\rangle$ e $|1010\rangle$ nos quais apresentam a interação de Coulomb apenas do tipo direta (J) e que se acoplam respectivamente com $|0110\rangle$ e $|1001\rangle$.

cálculo de grandezas físicas relacionadas à informação quântica (SOUZA; SANZ, 2017; SHARMILA et al., 2024). Nosso conjunto de quatro operadores de aniquilação podem ser reescritos da seguinte forma:

$$\begin{aligned} d_1 &= \sigma_- \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} & d_2 &= \sigma_z \otimes \sigma_- \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \\ d_3 &= \sigma_z \otimes \sigma_z \otimes \sigma_- \otimes \mathbb{1} & d_4 &= \sigma_z \otimes \sigma_z \otimes \sigma_z \otimes \sigma_- \end{aligned} \quad (5)$$

onde $\sigma_- = \frac{1}{2}(\sigma_x - i\sigma_y)$ e $\sigma_+ = \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y)$, com $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ são matrizes de Pauli, enquanto os operadores $d_i^\dagger$ são obtidos via transposto conjugado.

Neste sistema, a ocupação de cada ponto quântico é representado na base computacional por $|0\rangle$ e $|1\rangle$, que significam respectivamente cheio e vazio, e a descrição completa do estado do sistema é dada pelo produto de Kronecker dos estados de cada subsistema, ou seja, cada ponto quântico. Sendo assim, a base completa é $\{|0000\rangle, |0001\rangle, |0010\rangle, |0011\rangle, |0100\rangle, |0101\rangle, |0110\rangle, |0111\rangle, |1000\rangle, |1001\rangle, |1010\rangle, |1011\rangle, |1100\rangle, |1101\rangle, |1110\rangle, |1111\rangle\}$, onde 0 significa um elétron e 1 nenhum elétron no ponto quântico correspondente.

2.1.2 Seleção de Parâmetros de Acoplamento para Separação Energética de Estados

A fim de aprimorar a manipulação de estados quânticos, investigamos estratégias ideais para ajustar os parâmetros de acoplamento, visando uma separação energética otimizada, foi adotado $J' = 1meV$ e $J = 2meV$ como valores para as interação Coulombianas e $\varepsilon_n = 0$ para $n = 1, \dots, 4$.

A análise da função espectral definida como:

$$A(\varepsilon) = \sum_n \frac{2\eta}{(\varepsilon - \varepsilon_n)^2 + \eta^2}, \quad (6)$$

onde a soma é tomada sobre os autovalores ε da Eq.(1) e $\eta \rightarrow 0^+$ (BRUUS; FLENSBERG; PRESS, 2004).

A Figura 4 revela o espectro do sistema como função da energia ε e do acoplamento *intra-qubits* τ , onde na ausência de acoplamento entre PQs, isto é, para $\tau = 0$ apresentam-se cinco grupos de auto-energias degeneradas, as quais se mantêm até fatores de acoplamento *intra-qubits* suficientemente pequenos.

Em particular para $\varepsilon = 1$ tem-se a formação dos estados contendo $|0110\rangle$ e $|1001\rangle$, e aumentando ligeiramente τ obtêm-se a formação do estado emaranhado da forma

$$|\psi(t)\rangle = \frac{|0110\rangle + e^{i\phi} |1001\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (7)$$

através de tensões de porta.

O sistema é inicializado em $|0110\rangle$, mantendo a calibração de τ pequena o suficiente para viabilizar a formação do estado dado pela equação (7), por isto, nestas simulações foi selecionado $\tau = 10\mu eV$, tal como em (FUJISAWA et al., 2011).

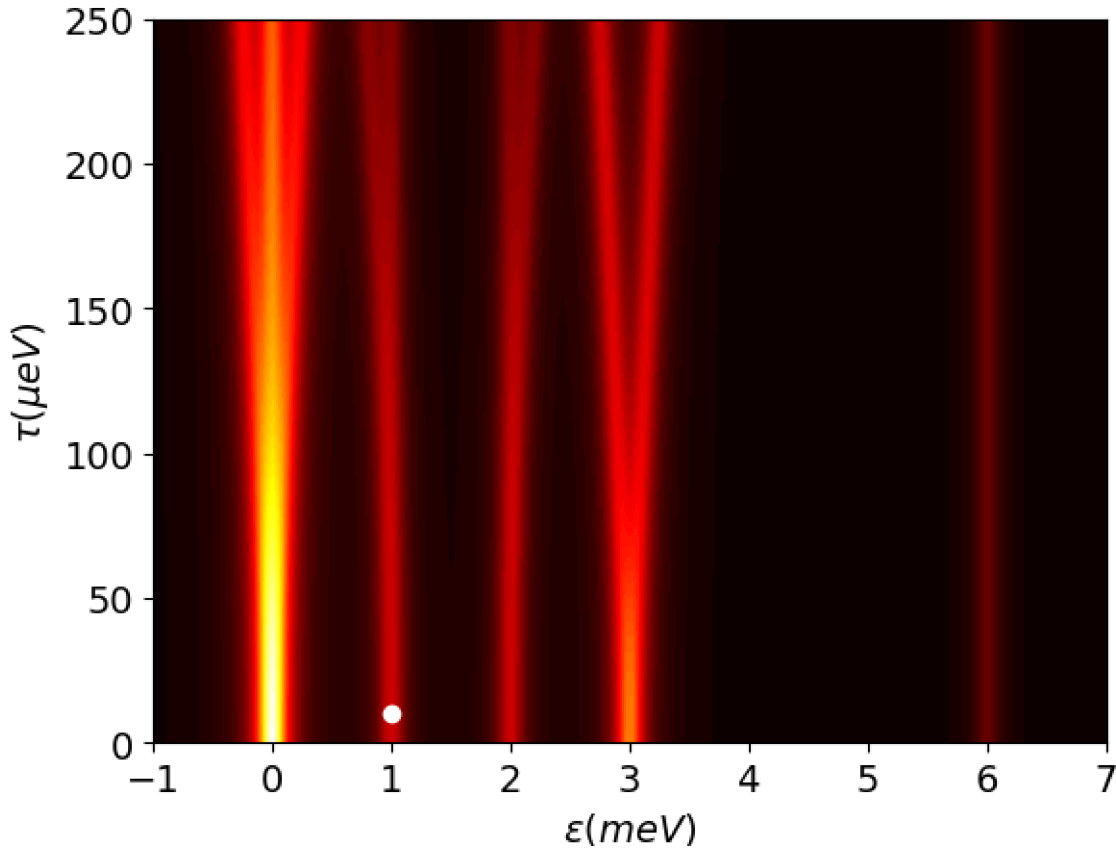


Figura 4 – Função espectral do sistema em relação à energia e ao acoplamento *intra-qubit* τ . Para estabelecer o emaranhamento com separação energética clara, a escolha de τ é destacada por um círculo branco, localizado em $\tau = 10\mu eV$ e no nível energético de $1meV$, facilitando a visualização de que, para esse valor de tunelamento, é possível obter os estados $|0110\rangle$ e $|1001\rangle$ energeticamente bem separados dos demais.

2.1.3 Hamiltoniano Efetivo

Para simplificar o Hamiltoniano completo e focar nos aspectos fundamentais do comportamento do sistema quântico, utilizamos o conceito de Hamiltoniano Efetivo. Este modelo oferece uma abordagem alternativa que facilita a análise dos componentes essenciais da dinâmica quântica.

Escolhemos destacar os estados em verde e amarelo da Tabela 1 devido às suas funções específicas na análise das transições quânticas e do emaranhamento. Os estados destacados em amarelo representam o estado emaranhado que pretendemos estudar. Já os estados destacados em verde são cruciais porque, para realizar a transição de um estado amarelo para outro, é necessário passar por transições virtuais intermediárias que envolvem esses estados verdes.

Para descrever estes estados de forma mais simples, é possível reescrevê-los da seguinte

ε (meV)	Autoestados	Interação de Coulomb
0	$ 0011\rangle, 0111\rangle, 1011\rangle, 1100\rangle, 1101\rangle, 1110\rangle, 1111\rangle$	-
1	$ 0110\rangle, 1001\rangle$	J'
2	$ 0101\rangle, 1010\rangle$	J
3	$ 0001\rangle, 0010\rangle, 0100\rangle, 1000\rangle$	$J + J'$
6	$ 0000\rangle$	$2J + 2J'$

Tabela 2 – Descrição dos estados e interações de Coulomb em função de ε . A tabela mostra os estados do sistema em relação à energia ε e suas interações de Coulomb correspondentes J e J' com $\tau = 0$.

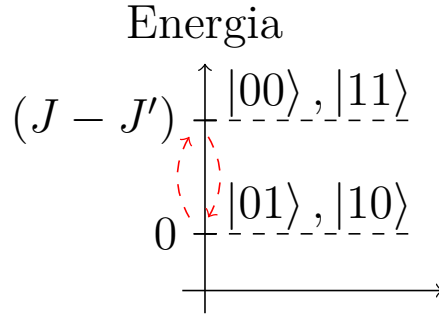


Figura 5 – Transições virtuais entre níveis de energia.

forma:

$$\begin{aligned}
 |0110\rangle &= |01\rangle & |0101\rangle &= |00\rangle \\
 |1001\rangle &= |10\rangle & |1010\rangle &= |11\rangle.
 \end{aligned} \tag{8}$$

A Figura 5 ilustra as transições virtuais cíclicas entre os níveis de energia no qual o nível zero é referente à energia inicial, enquanto na Tabela 3 é representado o novo Hamiltoniano fazendo $\hat{H} \rightarrow \hat{H} - J'\mathbb{1}$, em que $\mathbb{1}$ é a matriz identidade.

	$ 00\rangle$	$ 01\rangle$	$ 10\rangle$	$ 11\rangle$
$ 00\rangle$	$(J - J')$	$-\tau$	$-\tau$	
$ 01\rangle$	$-\tau$			$-\tau$
$ 10\rangle$	$-\tau$			$-\tau$
$ 11\rangle$		$-\tau$	$-\tau$	$(J - J')$

Tabela 3 – Hamiltoniano reduzido do sistema.

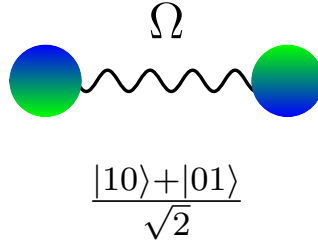


Figura 6 – Representação de dois Qubits emaranhados, cuja frequência de oscilação entre os estados é dada por Ω

A partir de $\hat{H}$ dado pela Tabela 3, é possível obter um modelo de Hamiltoniano Efetivo (H_{ef}) de dois níveis onde $H_{ef} = H_d + V$, sendo H_d o Hamiltoniano diagonal e V o Hamiltoniano de interação, tal que

$$H_{ef} = \begin{pmatrix} 0 & \Omega \\ \Omega & 0 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

de acordo com a base $\{|01\rangle, |10\rangle\}$, onde a frequência Ω , representa uma escala de tempo característica (SHARMILA et al., 2024), isto é, a periodicidade das oscilação entre os estados da base, como ilustrado pela Figura 6. Logo, utilizando o teorema de perturbação de 2ª ordem, pode-se calcular Ω conforme abaixo,

$$\begin{aligned} \Omega &= \langle 01 | H_{ef} | 10 \rangle \\ &= \langle 01 | H_d | 10 \rangle + \sum_{i \in B} \frac{\langle 01 | V | B_i \rangle \langle B_i | V^\dagger | 10 \rangle}{(\varepsilon - \varepsilon_{B_i})} \\ &= 0 + \frac{\langle 01 | V | 00 \rangle \langle 00 | V^\dagger | 10 \rangle}{(\varepsilon - \varepsilon_{00})} + \frac{\langle 01 | V | 11 \rangle \langle 11 | V_I^\dagger | 10 \rangle}{(\varepsilon - \varepsilon_{11})} \\ &= \frac{(-t)(-t)}{-(J - J')} + \frac{(-t)(-t)}{-(J - J')} \\ &= \frac{2\tau^2}{(J' - J)}, \end{aligned} \quad (10)$$

onde foi determinando Ω na ordem de 5×10^{-2} GHz que equivale à 20 ns.

Com isso, sendo $H_{ef} = \Omega \sigma_x$, e desconsiderando os processos de decoerência e a presença de reservatório de carga, a dinâmica quântica livre pode ser descrita por $|\psi(t)\rangle =$

$e^{-iH_{ef}t} |01\rangle$, onde

$$\begin{aligned}
 e^{-iH_{ef}t} &= e^{-i\Omega\sigma_x t} = \mathbb{1} - i\Omega\sigma_x t - \frac{(\Omega\sigma_x t)^2}{2} + i\frac{(\Omega\sigma_x t)^3}{3!} - \dots \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - i\Omega t \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \frac{\Omega^2 t^2}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \dots \\
 &= \begin{pmatrix} 1 - \frac{\Omega^2 t^2}{2} + \dots & -i\Omega t + \frac{i\Omega^3 t^3}{3!} + \dots \\ -i\Omega t + \frac{i\Omega^3 t^3}{3!} + \dots & 1 - \frac{\Omega^2 t^2}{2} + \dots \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \cos(\Omega t) & -i \sin(\Omega t) \\ -i \sin(\Omega t) & \cos(\Omega t) \end{pmatrix} \tag{11}
 \end{aligned}$$

Portanto,

$$|\psi(t)\rangle = \cos(\Omega t) \mathbb{1} |01\rangle - i \sin(\Omega t) \sigma_x |01\rangle, \tag{12}$$

isto é,

$$|\psi(t)\rangle = \cos(\Omega t) |01\rangle - i \sin(\Omega t) |10\rangle. \tag{13}$$

Com base nesses resultados, além de determinar a frequência característica do sistema, que é um parâmetro importante para fins experimentais na geração real de estados emaranhados (SHARMILA et al., 2024), é possível calcular as probabilidades de encontrar os estados $|01\rangle$ e $|10\rangle$ como $P_{01} = \cos^2(\Omega t)$ e $P_{10} = \sin^2(\Omega t)$, respectivamente. Essas probabilidades são úteis para verificar a validade dos resultados numéricos obtidos.

Sistemas Quânticos Abertos

A maioria dos sistemas quânticos observados na natureza não se encontra em estado isolado, mas interage continuamente com um ambiente externo. Tais sistemas são denominados sistemas quânticos abertos. Essas interações podem exercer uma influência substancial sobre a dinâmica do sistema, originando um fenômeno conhecido como dissipação quântica. A dissipação quântica é o processo pelo qual a informação presente no sistema é transferida para o ambiente, representando um dos principais desafios para a eficiência dos cálculos quânticos devido à perda de coerência (BREUER; PETRUCCIONE et al., 2002).

Apesar de aparentemente indesejável, a dissipação quântica constitui um aspecto fundamental da física quântica, desempenhando um papel crucial como recurso necessário e benéfico em diversos processos físicos, tais como o resfriamento a laser de átomos (FILHO, 2001; FALLEK et al., 2024) e a transferência de energia em sistemas biológicos (SOUZA; SIGOLI, 2012). Ademais, a compreensão aprofundada dos sistemas quânticos abertos é vital para o avanço de tecnologias quânticas emergentes, como a computação quântica e a comunicação quântica.

3.1 Operador Matriz Densidade

Na mecânica quântica, o estado do sistema pode ser descrito como uma mistura probabilística de diversos estados, cada um com sua própria probabilidade de ocorrência:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k c_k(t) |u_k\rangle \quad (14)$$

em que $\sum_k |c_k(t)|^2 = 1$.

Dessa forma, desde que os estados $|\psi_k(t)\rangle$ sejam ortonormais, isto é, os vetores $|\psi_k(t)\rangle$ sejam mutualmente ortogonais e normalizados, a probabilidade de se encontrar o conjunto de autovalores associados a $|\psi_k(t)\rangle$ é $|c_k(t)|^2$.

A partir da equação (14), é possível associar as médias dos vetores de autoestados do sistema, permitindo a concepção de um “operador de média”. Este operador é capaz de fornecer uma descrição simplificada das misturas estatísticas, como demonstrado a seguir.

3.1.1 Sistemas de Estado Puro

Para facilitar a discussão sobre o operador densidade, é essencial introduzir o estudo de sistemas de estados puros. Em seguida, exploraremos o operador densidade para estados mistos.

Para a construção do operador desejado, considere um dado observável A e um estado $|\psi(t)\rangle$, podemos escrever:

$$\langle\psi(t)| A |\psi(t)\rangle = \sum_{n,p} \langle u_n | c_n^*(t) A c_p(t) | u_p \rangle \quad (15)$$

$$= \sum_{n,p} c_n^*(t) c_p(t) \langle u_n | A | u_p \rangle \quad (16)$$

$$= \sum_{n,p} c_n^*(t) c_p(t) A_{np} \quad (17)$$

A evolução temporal de $|\psi(t)\rangle$ segundo a equação de Schrödinger é dada por:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (18)$$

em que $H(t)$ é o Hamiltoniano do sistema, e

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle\psi(t)| = \langle\psi(t)| H(t) \quad (19)$$

é o complexo conjugado.

Analogamente, pode-se obter:

$$\langle u_p | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | u_n \rangle = \langle u_p | c_p | u_p \rangle \langle u_n | c_n^* | u_n \rangle \quad (20)$$

$$= c_n^*(t) c_p(t). \quad (21)$$

Definindo o operador densidade $\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$, podemos reescrever algumas das equações anteriores em termos de $\rho(t)$:

$$\sum_n |c_n(t)|^2 = \sum_n \langle u_n | c_n^* c_n | u_n \rangle = \sum_n \rho_{nn}(t). \quad (22)$$

Observa-se que os elementos da soma estão todos na diagonal, isto é, equivalem ao cálculo do traço da matriz ρ :

$$\sum_n \rho_{nn}(t) = \text{tr}\{\rho\} = 1, \quad (23)$$

o que expressa a conservação da probabilidade.

Além disso, para o cálculo do valor esperado do observável A :

$$\begin{aligned}
 \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle &= \sum_{n,p} \rho_{pn}(t) A_{pn} \\
 &= \sum_{n,p} \langle u_n | \rho(t) \delta_{pn} A | u_p \rangle \\
 &= \sum_p \langle u_p | \rho(t) A | u_p \rangle \\
 &= \text{tr}\{\rho(t)A\},
 \end{aligned} \tag{24}$$

e da equação de Schrödinger:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}\rho(t) &= \frac{d}{dt}(|\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|) \\
 &= \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| + |\psi(t)\rangle \frac{d}{dt} \langle \psi(t)| \\
 &= \frac{1}{i\hbar} H(t) |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| + \frac{1}{-i\hbar} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| H(t) \\
 &= \frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho(t)]
 \end{aligned} \tag{25}$$

Adicionalmente, para operadores de estados puros, como representado por $\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$, tem-se:

$$\rho^\dagger(t) = (|\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|)^\dagger = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| = \rho(t) \tag{26}$$

$$\rho^2(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \psi(t)\rangle \langle \psi(t)| = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| = \rho(t) \tag{27}$$

$$\text{tr}\{\rho^2(t)\} = \text{tr}\{\rho(t) \cdot \rho(t)\} = \text{tr}\{\rho(t)\} = 1. \tag{28}$$

Percebe-se que $\rho(t)$ possui propriedades de operador projetor, que, como será verificado mais adiante, são válidas apenas para estados puros.

3.1.2 Sistemas de Estado Misto

Para abordar estados de mistura estatística, é necessário ajustar a definição do operador densidade de acordo com as condições do problema, pois agora existem várias contribuições p_k , cada uma com um peso diferente, de forma que sempre:

$$\sum_k p_k = 1 \tag{29}$$

onde $0 \leq p_1, p_2, \dots, p_k, \dots \leq 1$.

Para o calcular a probabilidade $\mathcal{P}_k(a_n)$, isto é, a probabilidade de se observar a_n na medida de A , dado um certo estado $|\psi_k\rangle$, realiza-se a seguinte operação:

$$\mathcal{P}_k(a_n) = \langle \psi_k | P_n | \psi_k \rangle. \tag{30}$$

onde P_n é o operador de projeção associado ao resultado a_n , tal que $P_n = |a_n\rangle \langle a_n|$.

Assim, para obtermos a probabilidade geral, isto é, o somatório de todas as contribuições de pesos $\mathcal{P}_k(a_n)$ relativos a algum p_k dessa mistura estatística, efetua-se:

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_k p_k \mathcal{P}_k(a_n), \quad (31)$$

e, analogamente à equação (24),

$$\mathcal{P}_k(a_n) = \text{tr}\{\rho_k P_n\}. \quad (32)$$

de modo que ρ_k assume o mesmo resultado que para o caso de um estado puro, isto é,

$$\rho_k = |\psi_k\rangle \langle \psi_k|. \quad (33)$$

Este resultado refere-se ao valor de ρ_k para apenas um dos estados da mistura estatística estudada. Agora, para descrever o operador de densidade total do sistema, deve-se somar todas as contribuições ρ_k relativos ao peso de cada um deles, ou seja,

$$\rho = \sum_k p_k \rho_k. \quad (34)$$

Com o ρ definido para misturas estatísticas, é possível estudar suas propriedades, como o traço:

$$\text{tr}\{\rho\} = \text{tr}\left\{\sum_k p_k \rho_k\right\} = \sum_k p_k \text{tr}\{\rho_k\} = \sum_k p_k = 1, \quad (35)$$

pois o $\text{tr}\{\rho_k\} = 1$ para cada contribuição, pela mesma razão que o traço era igual a 1 para um estado puro.

Em relação à medição do observável, é possível substituir a equação (32) na equação (31). Isso permite calcular $\mathcal{P}(a_n) = \text{tr}\{\rho P_n\}$ e estender essa abordagem do estado puro para o estado misto, representando o valor observável como uma soma de contribuições.

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n \mathcal{P}(a_n) = \sum_n a_n \text{tr}\{\rho P_n\} = \text{tr}\left\{\rho \sum_n a_n P_n\right\} = \text{tr}\{\rho A\}. \quad (36)$$

Por último, é importante destacar algumas exceções para os estados mistos. Por exemplo:

$$\rho^2 = \left(\sum_k p_k \rho_k\right) \left(\sum_k p_k \rho_k\right) \quad (37)$$

$$= \sum_k p_k^2 \rho_k \rho_k \quad (38)$$

$$= \sum_k p_k^2 |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \psi_k\rangle \langle \psi_k| \quad (39)$$

$$= \sum_k p_k^2 |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \neq \rho \quad (40)$$

e

$$\text{tr}\{\rho^2\} = \text{tr}\left\{\sum_k p_k^2 \rho_k \rho_k\right\} = \sum_k p_k^2 \text{tr}\{\rho_k\} = \sum_k p_k^2 < 1. \quad (41)$$

Após a consolidação dessa discussão sobre o operador densidade para estados puros e mistos, é estabelecido as bases necessárias para o estudo das formas de representações quânticas referentes a próxima sessão.

3.2 Representações Quânticas

A representação de Schödinger descreve estados quânticos usando funções de onda. Desta forma, os operadores são fixados enquanto a equação de Schödinger se altera com o tempo, e os observáveis são representados como operadores Hermitianos que atuam na função de onda. Enquanto isso, a representação de Heisenberg foca na evolução dos operadores no tempo, mantendo os estados quânticos fixos. Por fim, a representação de interação que combina elementos das representações de Schrödinger e Heisenberg para tratar interações com campos, constituindo uma representação intermediária a qual tanto os operadores quanto os estados estão sujeitos a dependência temporal (BREUER; PETRUCCIONE et al., 2002).

A partir disso, é feita a transição da representação de Schrödinger para a representação de interação. Essa mudança é especialmente vantajosa, pois a representação de interação simplifica a análise de sistemas quânticos ao separar a dinâmica livre das interações, facilitando o uso da teoria de perturbações e o tratamento de interações dependentes do tempo (SAKURAI; NAPOLITANO, 2011).

3.3 Equação de Lindblad

Considerando o seguinte Hamiltoniano total, na forma:

$$H = H_S + H_R + V_I \quad (42)$$

onde $H_0 = H_S + H_R$ representa o Hamiltoniano inicial, composto pelos Hamiltonianos do sistema H_S e do reservatório H_R , e V_I o potencial de interação. De modo geral, uma equação mestra para a dinâmica do sistema é obtida traçando-se o banho sobre a equação de movimento de Von Neumann (BANCHI et al., 2018) para o sistema combinado.

Sendo assim, ao lidar com a representação de interação a equação de movimento para a matriz densidade tem a seguinte forma na representação de interação:

$$\rho^{(I)}(t) = e^{iH_0 t} \rho^{(S)}(t) e^{-iH_0 t}, \quad (43)$$

em que $\rho^{(I)}$ e $\rho^{(S)}$ estão na representação de Interação e de Schrödinger respectivamente.

Assim, considerando a equação anterior com $\hbar = 1$, ao tomar a derivada de $\rho^{(I)}$, obtém-se:

$$\begin{aligned}\dot{\rho}^{(I)}(t) &= iH_0 e^{iH_0 t} \rho^{(S)} e^{-iH_0 t} - i e^{iH_0 t} \rho^{(S)} H_0 e^{-iH_0 t} + e^{iH_0 t} \dot{\rho}^{(S)} e^{-iH_0 t} \\ &= i[H_0, \rho^{(I)}] - i[H, \rho^{(I)}]\end{aligned}\quad (44)$$

$$\begin{aligned}&= i[H_0, \rho^{(I)}] - i[H_0, \rho^{(I)}] - i[V_I, \rho^{(I)}] \\ &= -i[V_I, \rho^{(I)}]\end{aligned}\quad (45)$$

e sendo,

$$\rho^{(I)}(t) = \rho^{(I)}(t_0) - i \int_{t_0}^t dt_1 [V_I(t_1), \rho^{(I)}(t_1)] \quad (46)$$

que repetindo uma segunda interação

$$\rho^{(I)}(t) = \rho^{(I)}(t_0) - i \int_{t_0}^t dt_1 [V_I(t_1), \rho^{(I)}(t_1)] + (-i)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} dt_1 dt_2 [V_I(t_1), [V_I(t_2), \rho^{(I)}(t_2)]] \quad (47)$$

e que por sucessivas interações fracas, converge para:

$$\rho^{(I)}(t) = \rho^{(I)}(t_0) + \sum_{n=1} (-i)^n \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} [V_I(t_1), \dots, [V_I(t_n), \rho^{(I)}(t_n)]] \quad (48)$$

Considerando que um sistema aberto S é caracterizado pela particularidade de que todas as observações relevantes estão ligadas a este subsistema. Os observáveis associados a S são todos da forma $A \otimes I_R$, onde A representa um operador que atua no espaço de Hilbert do sistema H_S e I_R é a matriz identidade no espaço de Hilbert do reservatório H_R . Se o estado do sistema total é representada por uma matriz de densidade ρ , então os valores esperados de todos os observáveis que atuam em H_S são calculados usando a seguinte fórmula (BREUER; PETRUCCIONE et al., 2002):

$$\langle A \rangle = \text{tr}_S \{ A \rho_S \} \quad (49)$$

onde $\rho_S = \text{tr}_R \rho$, que representa a matriz de densidade reduzida do sistema quântico aberto.

Agora tomando o traço sobre o reservatório na equação (47):

$$\begin{aligned}\rho_S^{(I)}(t) &= \text{tr}_R \rho^{(I)}(t_0) - i \int_{t_0}^t dt_1 \text{tr}_R [V_I(t_1), \rho^{(I)}(t_1)] \\ &\quad - \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} dt_1 dt_2 \text{tr}_R [V_I(t_1), [V_I(t_2), \rho^{(I)}(t_2)]]\end{aligned}\quad (50)$$

Assim,

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_S^{(I)}(t) &= -i[V_I, \rho^{(I)}(t_0)] + \int_{t_0}^t dt_1 [V_I(t_1), \rho^{(I)}(t_1)] \\ &= -i[V_I, \rho^{(I)}(t_0)] + \int_{t_0}^t dt_1 [V_I, [V_I, \rho^{(I)}(t_1)]]\end{aligned}\quad (51)$$

e supondo o estado inicial entre o sistema e o ambiente não correlacionados, isto é, as propriedades do sistema e do ambiente não estão interligadas nem dependentes umas das outras, o $\text{tr}_R[V_I, \rho^{(I)}(t_0)] = 0$, fazendo o primeiro termo da expansão nulo. Com isso, a matriz densidade do reservatório é insignificamente afetada pela interação, permitindo a aproximação do estado do sistema total no tempo t como um produto tensorial $\rho^{(I)} \approx \rho_S^{(I)}(t) \otimes \rho_R$.

Sendo assim, utilizando a representação de $\rho_S(t) = e^{\mathcal{M}(t)\rho(t_0)}$ cujo $\mathcal{M}(t)\mathcal{X}$ é um super operador da forma:

$$\mathcal{M}(t)\mathcal{X} = - \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} dt_1 dt_2 \text{tr}_R [V_I, [V_I, \mathcal{X} \otimes \rho_R]] \quad (52)$$

onde $\dot{\rho}_S^{(I)}(t) = \dot{\mathcal{M}}(t)\rho(t)$, ou seja,

$$\dot{\rho}_S^{(I)}(t) = - \int_{t_0}^t ds \text{tr}_R [V_I(t), [V_I(s), \rho_S^{(I)}(t) \otimes \rho_R]] \quad (53)$$

Essa equação é conhecida como equação não-Markoviana, e tem como característica principal o fato de que a mudança na matriz de densidade em um tempo t depende dos estados em todos os momentos $s > t$. Apesar de simplificar a derivação das equações de movimento, ela apresenta vários desafios. A estrutura não é facilitada, pois a solução numérica de uma expressão integro-diferencial desse tipo é complexa e demanda um grande esforço computacional, tornando sua implementação numérica praticamente intratável.

Nesse contexto, introduz-se a aproximação Markoviana na qual $\rho_S(s)$ é substituído por $\rho_S(t)$ que resulta na equação de Redfield

$$\dot{\rho}_S^{(I)}(t) = - \int_{t_0}^t ds \text{tr}_R [V_I(t), [V_I(s), \rho_S^{(I)}(t) \otimes \rho_R]] \quad (54)$$

que agora é não-markoviana devido a dependência explícita do estado inicial.

A partir desse ponto será omitido o índice (I) , que indica a representação de interação. Agora estendendo a integração em um intervalo até o infinito e fazendo a substituição $s \rightarrow t - s$, é possível obter uma equação mestre totalmente Markoviana:

$$\dot{\rho}_S(t) = - \int_{t_0}^{\infty} ds \text{tr}_B [V_I(t), [V_I(t-s), \rho_S(t) \otimes \rho_B]] \quad (55)$$

na chamada aproximação de Born-Markov, válida quando a escala de tempo da evolução da dinâmica do sistema grande comparada a escala de tempo com a qual as correlações no reservatório decaem, isto é, sobre efeito de memória curta.

Para obter a equação mestra de Lindblad, assume-se que o potencial de interação pode ser escrito na forma $V_I = \sum_i [A_i \otimes B_i^* + \text{h.c.}]$ onde $A = V_i d_i$ e $B = c_{ki}$ são operadores de colapso do reservatório cujo índice i é do reservatório e k da função de onda e h.c o hermitiano complexo conjugado, possibilitando escrever a equação mestra em termos de operadores de sistemas e funções de correlação de reservatório.

Sendo assim, considerando $t \rightarrow \infty$ e $t_0 = 0$, pode-se reescrever a equação mestra na forma:

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_S(t) &= - \int_0^\infty \text{tr}_R \{ [V_I(t)V_I(t-s)\rho_S \otimes \rho_R - V_I(t)\rho_S(t) \otimes \rho_R V_I(t-s) \\ &= -V_I(t-s)\rho_S(t) \otimes \rho_R V_I(t) + \rho_S \otimes \rho_R V_I(t-s)V_I(t)] \},\end{aligned}\quad (56)$$

ou seja, sabendo que

$$\begin{aligned}\text{tr}_R \{ (A_i \otimes B_i)(A_{i'} \otimes B_{i'})\rho_S \otimes \rho_R \} &= \text{tr}_R \{ A_i A_{i'} \rho_S \otimes B_i B_{i'} \rho_R \} \\ &= A_i A_{i'} \rho_S \text{tr}_R \{ B_i B_{i'} \rho_R \} \\ &= A_i A_{i'} \rho_S \langle B_i B_{i'} \rangle\end{aligned}\quad (57)$$

e conhecida a propriedade cíclica do traço pela simetria do produto interno de Frobenius, isto é, o traço é invariante sob deslocamentos circulares, obtemos a equação mestra em termo dos operados do sistema e funções de correlação na seguinte forma:

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_S(t) &= - \sum_{i,i',k,k'} \int_0^\infty ds [V_i(t)d_i(t)V_{i'}(t-s)d_{i'}(t-s)\rho_S \langle c_{ki}^*(t)c_{k'i'}^*(t-s) \rangle \\ &\quad + V_i^*(t)d_i^*(t)V_{i'}(t-s)d_{i'}(t-s)\rho_S \langle c_{ki}(t)c_{k'i'}^*(t-s) \rangle \\ &\quad + V_i(t)d_i(t)V_{i'}^*(t-s)d_{i'}^*(t-s)\rho_S \langle c_{ki}^*(t)c_{k'i'}(t-s) \rangle \\ &\quad + V_i^*(t)d_i^*(t)V_{i'}^*(t-s)d_{i'}^*(t-s)\rho_S \langle c_{ki}(t)c_{k'i'}(t-s) \rangle \\ &\quad - V_i(t)d_i(t)\rho_S V_{i'}(t-s)d_{i'}(t-s)\rho_S \langle c_{k'i'}^*(t-s)c_{ki}^*(t) \rangle \\ &\quad - V_i^*(t)d_i^*(t)\rho_S V_{i'}(t-s)d_{i'}(t-s)\rho_S \langle c_{k'i'}^*(t-s)c_{ki}(t) \rangle \\ &\quad - V_i(t)d_i(t)\rho_S V_{i'}^*(t-s)d_{i'}^*(t-s)\rho_S \langle c_{k'i'}(t-s)c_{ki}^*(t) \rangle \\ &\quad - V_i^*(t)d_i^*(t)\rho_S V_{i'}^*(t-s)d_{i'}^*(t-s)\rho_S \langle c_{k'i'}(t-s)c_{ki}(t) \rangle \\ &\quad - V_i(t-s)d_i(t-s)\rho_S V_{i'}(t)d_{i'}(t)\rho_S \langle c_{k'i'}^*(t)c_{ki}^*(t-s) \rangle \\ &\quad - V_i^*(t-s)d_i^*(t-s)\rho_S V_{i'}(t)d_{i'}(t)\rho_S \langle c_{k'i'}^*(t)c_{ki}(t-s) \rangle \\ &\quad - V_i(t-s)d_i(t-s)\rho_S V_{i'}^*(t)d_{i'}^*(t)\rho_S \langle c_{k'i'}(t)c_{ki}^*(t-s) \rangle \\ &\quad - V_i^*(t-s)d_i^*(t-s)\rho_S V_{i'}^*(t)d_{i'}^*(t)\rho_S \langle c_{k'i'}(t)c_{ki}(t-s) \rangle \\ &\quad + \rho_S V_i(t-s)d_i(t-s)V_{i'}(t)d_{i'}(t) \langle c_{ki}^*(t-s)c_{k'i'}^*(t) \rangle \\ &\quad + \rho_S V_i^*(t-s)d_i^*(t-s)V_{i'}(t)d_{i'}(t) \langle c_{ki}(t-s)c_{k'i'}^*(t) \rangle \\ &\quad + \rho_S V_i(t-s)d_i(t-s)V_{i'}^*(t)d_{i'}^*(t) \langle c_{ki}^*(t-s)c_{k'i'}(t) \rangle \\ &\quad + \rho_S V_i^*(t-s)d_i^*(t-s)V_{i'}^*(t)d_{i'}^*(t) \langle c_{ki}(t-s)c_{k'i'}(t) \rangle].\end{aligned}\quad (58)$$

3.3.1 Equação Mestra de Lindblad

Reescrevendo a equação (58) na representação de Schrödinger, busca-se obter a equação mestra de Lindblad. possibilita a descrição precisa da evolução temporal de sistemas quânticos abertos, incorporando de maneira consistente os efeitos de dissipação e decoerência.

Sendo assim, a partir da relação de comutação para o modelo de partícula livre em que $H_{0i} = \sum_{ki} \varepsilon_{ki} c_{ki}^* c_{ki}$, podemos obter:

$$\begin{aligned}
[H_{0i'}, c_{ki}] &= \sum_{k'i'} (\varepsilon_{k'i'} c_{k'i'}^* c_{k'i'} c_{ki} - c_{ki} \varepsilon_{k'i'} c_{k'i'}^* c_{k'i'}) \\
&= - \sum_{k'i'} \varepsilon_{k'i'} ([\delta_{ki,k'i'} - c_{ki} c_{k'i'}^*] c_{k'i'} + c_{ki} c_{k'i'}^* c_{k'i'}) \\
&= - \sum_{k'i'} \varepsilon_{k'i'} (\delta_{ki,k'i'} c_{k'i'} - c_{ki} c_{k'i'}^* c_{k'i'} + c_{ki} c_{k'i'}^* c_{k'i'}) \\
&= - \sum_{k'i'} \varepsilon_{k'i'} \delta_{ki,k'i'} c_{k'i'} \\
&= -\varepsilon_{ki} c_{ki},
\end{aligned} \tag{59}$$

onde,

$$\begin{aligned}
c_{ki}^{(I)} &= e^{iH_0 t} c_{ki}^{(S)} e^{-iH_0 t} \\
&= c_{ki}^{(S)} - it \varepsilon_{ki} c_{ki}^{(S)} + \left(\frac{i^2 t^2}{2!} \right) (-\varepsilon_{ki})^2 c_{ki}^{(S)} + \dots \\
&= \left[1 - it \varepsilon_{ki} + \left(\frac{i^2 t^2}{2!} \right) \varepsilon_{ki}^2 + \dots \right] c_{ki}^{(S)} \\
&= e^{-it \varepsilon_{ki}} c_{ki}^{(S)},
\end{aligned} \tag{60}$$

de modo que, através das equações (44) e (58) é possível determinar $\rho_S^{(S)}$:

$$\begin{aligned}
\dot{\rho}_S^{(S)}(t) &= -i[H_0, \rho_S^{(S)}] - \sum_{i,i',k,k'} \int_0^\infty ds [V_i d_i e^{-iH_0 s} V_{i'} d_{i'} e^{iH_0 s} \rho_S^{(S)} e^{i\epsilon_{ki} t} e^{i\epsilon_{k'i'}(t-s)} \langle c_{ki}^* c_{k'i'} \rangle \\
&\quad + V_i^* d_i^* e^{-iH_0 s} V_{i'} d_{i'} e^{iH_0 s} \rho_S^{(S)} e^{-i\epsilon_{ki} t} e^{i\epsilon_{k'i'}(t-s)} \langle c_{ki} c_{k'i'}^* \rangle \\
&\quad + V_i d_i e^{-iH_0 s} V_{i'}^* d_{i'}^* e^{iH_0 s} \rho_S^{(S)} e^{i\epsilon_{ki} t} e^{-i\epsilon_{k'i'}(t-s)} \langle c_{ki}^* c_{k'i'} \rangle \\
&\quad + V_i^* d_i e^{-iH_0 s} V_{i'}^* d_{i'}^* e^{iH_0 s} \rho_S^{(S)} e^{-i\epsilon_{ki} t} e^{-i\epsilon_{k'i'}(t-s)} \langle c_{ki} c_{k'i'}^* \rangle \\
&\quad - V_i d_i e^{-iH_0 s} \rho_S^{(S)} V_{i'} d_{i'} e^{iH_0 s} e^{i\epsilon_{k'i'}(t-s)} e^{i\epsilon_{ki} t} \langle c_{k'i'}^* c_{ki} \rangle \\
&\quad - V_i^* d_i^* e^{-iH_0 s} \rho_S^{(S)} V_{i'} d_{i'} e^{iH_0 s} e^{i\epsilon_{k'i'}(t-s)} e^{-i\epsilon_{ki} t} \langle c_{k'i'}^* c_{ki} \rangle \\
&\quad - V_i d_i e^{-iH_0 s} \rho_S^{(S)} V_{i'}^* d_{i'}^* e^{iH_0 s} e^{-i\epsilon_{k'i'}(t-s)} e^{i\epsilon_{ki} t} \langle c_{k'i'} c_{ki}^* \rangle \\
&\quad - V_i^* d_i^* e^{-iH_0 s} \rho_S^{(S)} V_{i'}^* d_{i'}^* e^{iH_0 s} e^{-i\epsilon_{ki}(t-s)} e^{-i\epsilon_{k'i'} t} \langle c_{ki} c_{k'i'} \rangle \\
&\quad - V_i d_i e^{iH_0 s} \rho_S^{(S)} V_{i'} d_{i'} e^{-iH_0 s} e^{i\epsilon_{k'i'} t} e^{i\epsilon_{ki}(t-s)} \langle c_{k'i'}^* c_{ki} \rangle \\
&\quad - V_i^* d_i^* e^{iH_0 s} \rho_S^{(S)} V_{i'} d_{i'} e^{-iH_0 s} e^{i\epsilon_{k'i'} t} e^{-i\epsilon_{ki}(t-s)} \langle c_{k'i'}^* c_{ki} \rangle \\
&\quad - V_i d_i e^{iH_0 s} \rho_S^{(S)} V_{i'}^* d_{i'}^* e^{-iH_0 s} e^{-i\epsilon_{k'i'} t} e^{i\epsilon_{ki}(t-s)} \langle c_{k'i'} c_{ki}^* \rangle \\
&\quad - V_i^* d_i^* e^{iH_0 s} \rho_S^{(S)} V_{i'}^* d_{i'}^* e^{-iH_0 s} e^{-i\epsilon_{k'i'} t} e^{-i\epsilon_{ki}(t-s)} \langle c_{k'i'} c_{ki} \rangle \\
&\quad + \rho_S^{(S)} V_i d_i e^{iH_0 s} V_{i'} d_{i'} e^{-iH_0 s} e^{i\epsilon_{ki}(t-s)} e^{i\epsilon_{k'i'} t} \langle c_{ki}^* c_{k'i'} \rangle \\
&\quad + \rho_S^{(S)} V_i^* d_i^* e^{iH_0 s} V_{i'} d_{i'} e^{-iH_0 s} e^{-i\epsilon_{ki}(t-s)} e^{i\epsilon_{k'i'} t} \langle c_{ki} c_{k'i'}^* \rangle \\
&\quad + \rho_S^{(S)} V_i d_i e^{iH_0 s} V_{i'}^* d_{i'}^* e^{-iH_0 s} e^{i\epsilon_{ki}(t-s)} e^{-i\epsilon_{k'i'} t} \langle c_{ki}^* c_{k'i'} \rangle \\
&\quad + \rho_S^{(S)} V_i^* d_i^* e^{iH_0 s} V_{i'}^* d_{i'}^* e^{-iH_0 s} e^{-i\epsilon_{ki}(t-s)} e^{-i\epsilon_{k'i'} t} \langle c_{ki} c_{k'i'} \rangle],
\end{aligned} \tag{61}$$

que devido a hermeticidade dos termos C^*C^* e CC reduz-se a

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_S^{(S)}(t) = & -i[H_0, \rho_S^{(S)}] - \sum_{i,i',k,k'} \int_0^\infty ds [V_i^* d_i^* e^{-iH_0 s} V_{i'} d_{i'} e^{iH_0 s} \rho_S^{(S)} e^{-i\epsilon_{ki} t} e^{i\epsilon_{k'i'}(t-s)} \langle c_{ki} c_{k'i'}^* \rangle \\ & + V_i d_i e^{-iH_0 s} V_{i'}^* d_{i'}^* e^{iH_0 s} \rho_S^{(S)} e^{i\epsilon_{ki} t} e^{-i\epsilon_{k'i'}(t-s)} \langle c_{k'i'}^* c_{ki} \rangle \\ & - V_i^* d_i^* e^{-iH_0 s} \rho_S^{(S)} V_{i'} d_{i'} e^{iH_0 s} e^{i\epsilon_{k'i'}(t-s)} e^{-i\epsilon_{ki} t} \langle c_{k'i'}^* c_{ki} \rangle \\ & - V_i d_i e^{-iH_0 s} \rho_S^{(S)} V_{i'}^* d_{i'}^* e^{iH_0 s} e^{-i\epsilon_{k'i'}(t-s)} e^{i\epsilon_{ki} t} \langle c_{k'i'} c_{ki}^* \rangle \\ & - V_i^* d_i^* e^{iH_0 s} \rho_S^{(S)} V_{i'} d_{i'} e^{-iH_0 s} e^{i\epsilon_{k'i'} t} e^{-i\epsilon_{ki}(t-s)} \langle c_{k'i'}^* c_{ki} \rangle \\ & - V_i d_i e^{iH_0 s} \rho_S^{(S)} V_{i'}^* d_{i'}^* e^{-iH_0 s} e^{-i\epsilon_{k'i'} t} e^{i\epsilon_{ki}(t-s)} \langle c_{k'i'} c_{ki}^* \rangle \\ & + \rho_S^{(S)} V_i^* d_i^* e^{iH_0 s} V_{i'} d_{i'} e^{-iH_0 s} e^{-i\epsilon_{ki}(t-s)} e^{i\epsilon_{k'i'} t} \langle c_{ki} c_{k'i'}^* \rangle \\ & + \rho_S^{(S)} V_i d_i e^{iH_0 s} V_{i'}^* d_{i'}^* e^{-iH_0 s} e^{i\epsilon_{ki}(t-s)} e^{-i\epsilon_{k'i'} t} \langle c_{ki}^* c_{k'i'} \rangle] \end{aligned} \quad (62)$$

De forma que, para um sistema fermiônico, $\langle c_{ki} c_{k'i'}^* \rangle = \delta_{ki,k'i'}(1 - \mathcal{F}_i)$ e $\langle c_{k'i'}^* c_{ki} \rangle = \delta_{ki,k'i'} \mathcal{F}_i$, onde $\mathcal{F}_i$ vale 0 ou 1 se o reservatório é vazio ou cheio respectivamente, com isso,

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_S^{(S)}(t) = & -i[H_0, \rho_S^{(S)}] - \sum_{i,i',k,k'} \int_0^\infty ds [V_i^* d_i^* e^{-iH_0 s} V_{i'} d_{i'} e^{iH_0 s} \rho_S^{(S)} e^{-i\epsilon_{ki} s} (1 - \mathcal{F}_i) \\ & + V_i d_i e^{-iH_0 s} V_{i'}^* d_{i'}^* e^{iH_0 s} \rho_S^{(S)} e^{i\epsilon_{ki} s} \mathcal{F}_i \\ & - V_i^* d_i^* e^{-iH_0 s} \rho_S^{(S)} V_{i'} d_{i'} e^{iH_0 s} e^{i\epsilon_{ki} s} \mathcal{F}_i \\ & - V_i d_i e^{-iH_0 s} \rho_S^{(S)} V_{i'}^* d_{i'}^* e^{iH_0 s} e^{-i\epsilon_{ki} s} (1 - \mathcal{F}_i) \\ & - V_i^* d_i^* e^{iH_0 s} \rho_S^{(S)} V_{i'} d_{i'} e^{-iH_0 s} e^{i\epsilon_{ki} s} \mathcal{F}_i \\ & - V_i d_i e^{iH_0 s} \rho_S^{(S)} V_{i'}^* d_{i'}^* e^{-iH_0 s} e^{-i\epsilon_{ki} s} (1 - \mathcal{F}_i) \\ & + \rho_S^{(S)} V_i^* d_i^* e^{iH_0 s} V_{i'} d_{i'} e^{-iH_0 s} e^{-i\epsilon_{ki} s} (1 - \mathcal{F}_i) \\ & + \rho_S^{(S)} V_i d_i e^{iH_0 s} V_{i'}^* d_{i'}^* e^{-iH_0 s} e^{i\epsilon_{ki} s} \mathcal{F}_i] \end{aligned} \quad (63)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_S^{(S)}(t) = & -i[H_0, \rho_S^{(S)}] - \sum_{ki} \int_0^\infty ds \left\{ V_i^* d_i^* e^{-iH_0 s} V_{i'} d_{i'} e^{iH_0 s} \rho_S^{(S)} \right. \\ & - V_i d_i e^{-iH_0 s} \rho_S^{(S)} V_{i'}^* d_{i'}^* e^{iH_0 s} \\ & - V_i d_i e^{iH_0 s} \rho_S^{(S)} V_{i'}^* d_{i'}^* e^{-iH_0 s} \\ & \left. + \rho_S^{(S)} V_i^* d_i^* e^{iH_0 s} V_{i'} d_{i'} e^{-iH_0 s} \right\} e^{-i\epsilon_{ki} s} (1 - \mathcal{F}_i) \\ & + \left\{ V_i d_i e^{-iH_0 s} V_{i'}^* d_{i'}^* e^{iH_0 s} \rho_S^{(S)} \right. \\ & - V_i^* d_i^* e^{-iH_0 s} \rho_S^{(S)} V_{i'} d_{i'} e^{iH_0 s} \\ & - V_i^* d_i^* e^{iH_0 s} \rho_S^{(S)} V_{i'} d_{i'} e^{-iH_0 s} \\ & \left. + \rho_S^{(S)} V_i d_i e^{iH_0 s} V_{i'}^* d_{i'}^* e^{-iH_0 s} \right\} e^{i\epsilon_{ki} s} \mathcal{F}_i. \end{aligned} \quad (64)$$

Como o reservatório possui um número muito grande de graus de liberdade, é possível aproximá-lo ao infinito e simplificar a equação (64) ao fazer a soma em k onde $\mathcal{D}_i$ representa a densidade de estado no reservatório i (LIDAR, 2020)

$$\sum_k \rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon_{ki} \mathcal{D}_i(\varepsilon_{ki}) e^{-i\varepsilon_{ki}s} \quad (65)$$

$$\mathcal{D}_{is} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon e^{-i\varepsilon s} = \mathcal{D}_{is} 2\pi\delta(s) = \Gamma_i(t)\delta(s), \quad (66)$$

resultando em:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_S^{(S)}(t) = & -i[H_0, \rho_S^{(S)}] + \sum_i \frac{1}{2} \Gamma_i(t) (1 - \mathcal{F}_i) \left\{ 2d_i \rho_S^{(S)} d_i^* - d_i^* d_i \rho_S^{(S)} - \rho_S^{(S)} d_i^* d_i \right\} \\ & + \sum_i \frac{1}{2} \Gamma_i(t) \mathcal{F}_i \left\{ 2d_i^* \rho_S^{(S)} d_i - d_i d_i^* \rho_S^{(S)} - \rho_S^{(S)} d_i d_i^* \right\}. \end{aligned} \quad (67)$$

que representa a equação mestra de Lindblad, a qual governa a evolução temporal da matriz de densidade reduzida. Essa expressão é de extrema relevância para esta dissertação, visto que, permite obter a evolução do sistema ao longo do tempo, incorporando tanto evoluções unitárias, provenientes de sistemas fechados, quanto evoluções não-unitárias, que incluem efeitos dissipativos e incoerentes devido à interação com o ambiente.

Para a evolução não unitária de sistemas quânticos, é comum o uso de equações mestras, destacando-se a biblioteca Quantum Toolbox in Python (QuTiP) (JOHANSSON; NATION; NORI, 2012). A função “qutip.mesolve” é utilizada tanto para a evolução segundo a equação de Schrödinger quanto para a equação mestra, determinando automaticamente qual utilizar: a equação de Schrödinger quando nenhum operador de colapso é fornecido, ou a equação mestra se os operadores de colapso são fornecidos. A principal diferença é que a equação mestra descreve processos de dissipação no sistema quântico devido à interação com o ambiente, enquanto a equação de Schrödinger considera o sistema como fechado.

Emaranhamento

O emaranhamento quântico é um fenômeno decorrente da mecânica quântica, no qual duas ou mais partículas se tornam correlacionadas de tal maneira que o estado de uma partícula está intrinsecamente conectado ao estado da outra. Nesse contexto, a não-separabilidade quântica, foi descrita pela primeira vez por Einstein, Podolsky e Rosen (EPR) e Schödinger. No famoso artigo EPR (EINSTEIN; PODOLSKY; ROSEN, 1935), por meio de um experimento mental, é demonstrado que, para a validade da mecânica quântica, partículas entrelaçadas podem se influenciar instantaneamente a qualquer distância, violando o conceito de “realismo local”, o qual postula que as propriedades físicas dos objetos existem independentemente da observação e que objetos distantes não podem influenciar-se instantaneamente. Isso levou os autores a propor a existência de alguma teoria mais completa, com variáveis ocultas, que seria capaz de oferecer uma descrição real da física.

Por sua vez, Schrödinger, observou que quando dois sistemas conhecidos interagem e depois se separam, as informações sobre o estado de cada um não podem ser expressas logicamente como uma soma de estados individuais (SCHRÖDINGER, 1935), enfatizando a natureza não “não-local” da mecânica quântica. Deste evento, origina-se o teorema da não-separabilidade de d’Espagnat: *“Se dois sistemas interagiram no passado, em geral não é possível atribuir um único vetor de estado a nenhum dos dois subsistemas”* (D’ESPAGNAT, 1971), isto é, a interação provoca o emaranhamento de subsistemas correlacionados (BLUM, 2012; PEREZ, 2000).

4.1 Teorema de não-separabilidade de d’Espagnat

Seja dois sistemas com funções de onda:

$$|\phi(1)\rangle = \sum_{m_1} a(m_1) |m(1)\rangle; \quad |\phi(2)\rangle = \sum_{m_2} a(m_2) |m(2)\rangle; \quad (68)$$

que podem interagir, de modo que a função de onda do sistema composto é dada pelo produto indissociável:

$$|\psi(1, 2)\rangle = a(m_1 m_2) |m_1 m_2\rangle; \quad a(m_1 m_2) \neq a(m_1) a(m_2); \quad (69)$$

O operador matriz densidade correspondente é

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle\psi| = \sum_{m_1 m_2, m'_1 m'_2} a(m_1 m_2) a^*(m'_1 m'_2) |m_1 m_2\rangle \langle m'_1 m'_2|. \quad (70)$$

Ao extrair o subsistema $H(1)$, traçando sobre o subsistema $H(2)$:

$$\begin{aligned} \hat{R}(1) &= \text{Tr}_2 \hat{\rho} \\ &= \sum_{m_2} \langle m_2 | \hat{\rho} | m_2 \rangle \\ &= \sum_{m_1 m_2 m'_1} a(m_1 m_2) a^*(m'_1 m_2) |m_1\rangle \langle m'_1| \end{aligned} \quad (71)$$

o resultado não permite escrever a densidade reduzida como $\hat{R}(1) = |\phi(1)\rangle \langle\phi(1)|$ a menos que $a(m_1 m_2) = a(m_1) a(m_2)$ seja separável. Sendo assim, segue-se deste teorema que a interação leva ao emaranhamento de subsistemas correlacionados, e que isso aparece nos termos fora da diagonal da matriz de densidade (PEREZ, 2000).

4.2 Entropia de Von Neumann

Na teoria de Informação Quântica, a entropia é uma medida associado a um estado de desordem, aleatoriedade ou incerteza do sistema, onde a entropia de von Neumann (NEUMANN, 2013) destaca-se como uma generalização da entropia clássica de Shannon (SHANNON, 1948) para a mecânica quântica, que quantifica a informação contida em um estado, quando muitas cópias idênticas e independentes estão disponíveis (BOES et al., 2019).

A entropia de von Neumann utilizada nesta dissertação é definida da seguinte forma:

$$S = -\text{Tr}\{\rho \log_2 \rho\} \quad (72)$$

onde é uma generalização quântica da entropia de Shannon, se $\{p_i\}_i$ são os autovalores λ_i do operador densidade ρ , em que é utilizada base logarítmica 2 para medir a informação em bits (MAZIERO, 2015; CAO et al., 2024). Desta forma, a entropia de von Neumann é igual a entropia de Shannon de uma variável aleatória $\mathcal{X}_\rho$, cuja distribuição de probabilidade são os autovalores de ρ ,

$$S(\rho) = H(\mathcal{X}_\rho) = -\sum_i p_i \log_2 p_i, \quad (73)$$

isto é,

$$S = - \sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i \quad (74)$$

capturando tanto a quantidade de informação (grau de incerteza ou aleatoriedade do sistema) quanto as correlações (maneira como diferentes partes de um sistema estão relacionadas ou interdependentes).

Em suma, a entropia de von Neumann é uma medida útil e informativa de emaranhamento em certos contextos, pois cumpre diversas propriedades, fornecendo informações sobre a natureza do emaranhamento (BOES et al., 2019; VEDRAL et al., 1997).

A partir desta medida, será possível avaliar os efeitos da inicialização sobre o sistema total, verificando o quanto a injeção de carga afeta o grau de desordem do sistema, e principalmente, identificar a formação de estados emaranhados, pelo cálculo da entropia parcial de von Neumann, pois ela revela a presença de correlações quânticas entre subsistemas, indicando a formação de emaranhamento.

4.3 Negatividade Quântica

No contexto da Mecânica Quântica a negatividade é uma medida de emaranhamento quântico baseada no critério de Peres-Horodecki de separabilidade, conhecido como "*positive partial transpose*" (PPT). Com isso, dado um estado geral que atua nos subsistemas A e B , sua transposta parcial é definida como $\rho^{T_B} = \mathcal{I}_A \otimes T_B \rho$, onde $\mathcal{I}_A$ é a identidade aplicado ao subsistema A , e T_B é a transposição aplicado ao subsistema B . Se ρ é separável, todos os autovalores de (ρ^{T_B}) devem ser não negativos. Assim, se ρ^{T_B} tiver um autovalor negativo, ρ é emaranhado, sendo a recíproca verdadeira, se e somente se, a dimensão do espaço de produto para 2x2 ou 2x3 (HORODECKI; HORODECKI; HORODECKI, 1996).

O critério de Horodecki é inconclusivo para dimensões maiores, de forma que em espaços de dimensão superior, ele não pode determinar com certeza se o estado é separável ou emaranhado. Fazendo necessária a complementação com testes mais avançados, como aqueles baseados em testemunhas de emaranhamento.

A Negatividade de um subsistema A é definido em termos da matriz densidade como:

$$\mathcal{N}(\rho) = \frac{\|\rho^{T_A}\| - 1}{2} \quad (75)$$

onde ρ^{T_A} é a transposta parcial de ρ com relação o subsistema A , e $\|\mathcal{X}\| = \text{Tr}\{|\mathcal{X}|\} = \text{Tr}\{\sqrt{\mathcal{X}^\dagger \mathcal{X}}\}$ representa a norma do traço ou a soma dos valores singulares do operador $\mathcal{X}$.

Desta forma, os autovalores λ_i de ρ^{T_A} podem ser usados para calcular a negatividade,

$$\mathcal{N} = \left\| \sum_{\lambda_i < 0} \lambda_i \right\| = \sum_i \frac{\|\lambda_i\| - \lambda_i}{2} \quad (76)$$

isto é, a contribuição à negatividade vem apenas dos autovalores negativos quando $\|\lambda_i\| \neq \lambda_i$ (NAKANO; PIANI; ADESSO, 2013; HORODECKI; HORODECKI; HORODECKI, 1996).

4.4 Fidelidade

No contexto da Mecânica Quântica, a fidelidade é uma medida de similaridade entre dois estados quânticos (JOZSA, 1994). Ela é definida para dois estados quânticos ρ e σ como:

$$F(\rho, \sigma_{target}) = \left(\text{Tr} \sqrt{\sqrt{\rho} \sigma_{target} \sqrt{\rho}} \right)^2 \quad (77)$$

Sendo assim, se para um dado estado σ emaranhado a fidelidade apenas é capaz de medir o quão próximo ρ está daquele específico estado, não sendo capaz de verifica se um estado é separável ou emaranhado, e por isso, não segue as características esperadas dos quantificadores de emaranhamento.

Analogamente, outra ferramenta útil na teoria da informação quântica, é o defeito de idempotência $\delta_A = 1 - \text{Tr}\{\rho_A^2\}$ (ANGELO et al., 1999; ABDEL-ATY, 2008). Esta medida pode fornecer informações importantes sobre o estado de um sistema quântico, atuando como um indicador de pureza do estado, visto que, conforme apresentado na sessão 3.1, $\text{Tr}\{\rho^2\} = 1$ para estados puros, e $\text{Tr}\{\rho^2\} < 1$ para estados mistos. Com isso, embora também não seja caracterizável como um quantificador de emaranhamento, esta ferramenta pode indicar indiretamente a presença de emaranhamento em um sistema, a partir da aplicação do traço sob um dos subsistemas. Dessa forma, embora ρ seja puro, o defeito de idempotência poderá ser maior que zero quando $\text{Tr}\{\rho_A^2\} < 1$, isto é, se houver correlações entre subsistemas.

Sendo importante destacar que a identificação precisa do emaranhamento em estados mistos requer o uso de critérios específicos de emaranhamento ou medidas de entropia, e que o uso de técnicas como o cálculo da fidelidade e defeito de idempotência contribuem como ferramentas complementares na análise de correlações quânticas.

Efeitos da Inicialização Eletrônica

Nesta etapa, serão apresentados os resultados das simulações realizadas com base no sistema descrito na seção 2.1 e na equação mestra de Lindblad (67). Além disso, a partir das ferramentas descritas no capítulo, a qualidade da inicialização será avaliada de acordo com a formação máxima de emaranhamento do sistema.

Conforme discutido na Seção 2.1, inicialmente o sistema molecular está livre de carga, ou seja, seu estado é representado por $|1111\rangle$, onde $\langle 1111|n_i|1111\rangle = 0$ para $i = 1, 2, 3, 4$, indicando que cada um dos PQs está vazio. A fim de evoluí-lo para um estado emaranhado, como descrito na equação (7), é necessário primeiro realizar a transição $|1111\rangle \rightarrow |0110\rangle$. Para isso, elétrons são controladamente injetados dos terminais dos reservatórios em PQ₁ e PQ₄, conforme ilustrado na Figura 3.

O acoplamento entre os *qubits* e os reservatórios é descrito pelo parâmetro de taxa de tunelamento $\Gamma(t)$. Para simplificar, considera-se um pulso de tensão de porta modulado gaussiano que proporciona

$$\Gamma(t) = \Gamma_0 e^{-[(t-t_0)/\sigma]^2}, \quad (78)$$

onde t_0 é o tempo central do pulso, σ sua largura e o parâmetro Γ_0 fornece a intensidade do acoplamento. Com isso, é possível controlar temporalmente a taxa de tunelamento eletrônico dos reservatórios para os *qubits*.

Durante a injeção de carga dependente do tempo, não ocorre estritamente a formação do estado desejado $|0110\rangle$, pois há a população de outros estados como $|0000\rangle$, $|1000\rangle$, entre outros, com amplitudes de probabilidade as quais podem alcançar proporções significativas. Na Figura 7, são mostrados os valores esperados de quatro projetores: $\langle P_{0110} \rangle$ (linha preta sólida), $\langle P_{1001} \rangle$ (linha preta tracejada), $\langle P_{0000} \rangle$ (linha preta tracejada-pontilhada), $\langle P_{1111} \rangle$ (linha cinza pontilhada) e o pulso (linha cinza). Nessas simulações foi escolhido um conjunto de quatro pares de parâmetros (σ, Γ_0) diferentes como apresentados na Tabela 4:

	$\sigma(\text{ps})$	$\Gamma_0(\text{meV})$	linha
a	133	0.1	
b	133	0.5	
c	47	0.1	
d	47	0.5	
ideal	-	-	

Tabela 4 – Tabela de parâmetros de largura σ e intensidade Γ_0 de acoplamento do pulso de tensão gaussiano dos reservatórios com o sistema, e guai de identificação da curvas referentes às simulações de cada um dos casos.

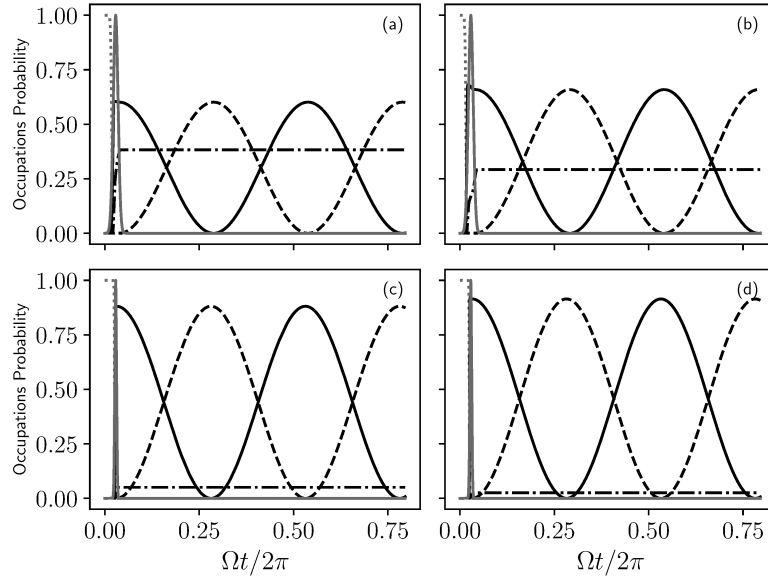


Figura 7 – Projtores variando no tempo no primeiro *qubit* para diferentes parâmetros de σ e Γ_0 , onde são representado os valores esperados do projtores $|1111\rangle$ (linha cinza pontilhada), $|0000\rangle$ (linha preta tracejada-pontilhada), $|0110\rangle$ (linha preta sólida), $|1001\rangle$ (linha preta tracejada) e o pulso (linha cinza), considerando as escolhas de (σ, Γ_0) como constam na Tabela 4.

5.1 Oscilações de Rabi

As oscilações de Rabi referem-se a um fenômeno no qual um sistema quântico, quando exposto a um acoplamento entre dois níveis, alterna periodicamente entre dois estados específicos. Este efeito é crucial no controle de qubits, onde a coerência e a manipulação precisa dos estados quânticos são essenciais para operações de computação quântica. A frequência dessas oscilações é determinada pela amplitude do campo aplicado e pela interação entre os estados do sistema.

Antes da ativação do pulso $\langle P_{1111} \rangle = 1$, indicando que o sistema está inicialmente vazio de carga. Após a abertura da porta, a dinâmica é iniciada com oscilações do tipo Rabi entre $\langle P_{0110} \rangle$ e $\langle P_{1001} \rangle$, enquanto o projetor $\langle P_{0000} \rangle$ atinge um valor estacionário, sugerindo que durante o processo de inicialização há uma probabilidade finita de que quatro elétrons tenham sido injetados na estrutura de qubits. Estados adicionais (não

mostrados) podem também apresentar pequenos valores durante a dinâmica.

Na Figura 7, nos painéis (a) e (b), observamos um valor considerável para $\langle P_{0000} \rangle$, ao passo que nos painéis (c) e (d) esse valor é suprimido devido ao estreitamento do pulso, pois a medida que o pulso sofre estreitamento a injeção de cargas é suprimida. Além disso, é possível observar que ao aumentar Γ_0 para um σ fixo, conforme ilustrado dos painéis (a) para (b) e (c) para (d), ocorre uma redução em $\langle P_{0000} \rangle$ e uma ligeira elevação de estados populacionais não apresentado. Percebe-se que o aumento do parâmetro de acoplamento Γ_0 , provoca a ocorrência de um crescimento em $\langle P_{0110} \rangle$, que intensifica as oscilações de Rabi entre $\langle P_{0110} \rangle$ e $\langle P_{1001} \rangle$. Complementarmente, no painel (d), verificam-se amplitudes de oscilações próximas de um, indicando uma dinâmica dominada pelos estados $|0110\rangle$ e $|1001\rangle$.

5.2 Bloqueio de Coulomb

Na Figura 8 é mostrada a dinâmica da ocupação de PQ_1 e PQ_2 ao longo do tempo, na qual ambas as ocupações $n_1 = \langle d_1^\dagger d_1 \rangle$ e $n_2 = \langle d_2^\dagger d_2 \rangle$ apresentam um aumento apreciável dentro da largura do pulso, onde $n_1 > n_2$ devido ao acoplamento direto de PQ_1 com o reservatório à esquerda. Este acoplamento é responsável por injetar carga em PQ_1 , e consequentemente, carregar indiretamente o PQ_2 devido ao tunelamento com PQ_1 .

O bloqueio de Coulomb é um fenômeno essencial em sistemas de pontos quânticos, especialmente em sistemas fermiônicos onde a interação e exclusão eletrônica desempenham um papel crucial. Esse bloqueio ocorre devido à repulsão coulombiana entre elétrons, que impede que múltiplos elétrons ocupem o mesmo estado quântico ou estados próximos com energias semelhantes dentro do ponto quântico. No contexto deste sistema, isso significa que quando um elétron entra no ponto quântico PQ_1 , ele cria uma barreira potencial que impede a entrada imediata de outro elétron até que o primeiro tenha transitado para PQ_2 .

Essa dinâmica de bloqueio é modulada por pulsos de tensão de porta gaussianas, os quais permitem a entrada de um elétron em PQ_1 . A partir da Figura 8 nos painéis de (a) para (b) e de (c) para (d) é possível observar que, ao aumentar a intensidade do pulso, mesmo mantendo constante a sua duração, o elétron tende a permanecer em PQ_1 por um período prolongado antes de saltar para PQ_2 . Esse fenômeno de bloqueio retarda a transição, sugerindo que o controle preciso da intensidade e da duração dos pulsos de tensão é crucial para manipular a dinâmica dos elétrons no sistema.

Além disso, ao se avaliar o painel (a), observa-se que, embora as populações máximas de n_1 e n_2 estejam próximas de 1, são produzidos mais estados não desejados em comparação com as outras sub-figuras. Isso ocorre também porque um σ maior permite uma ocupação superior devido à maior duração do pulso, mesmo quando combinado a um Γ_0 fraco. Essa interpretação é corroborada pelos valores mínimos das ocupações, que não se aproximam de zero nos painéis (a) e (b). Por outro lado, ao diminuir σ , como

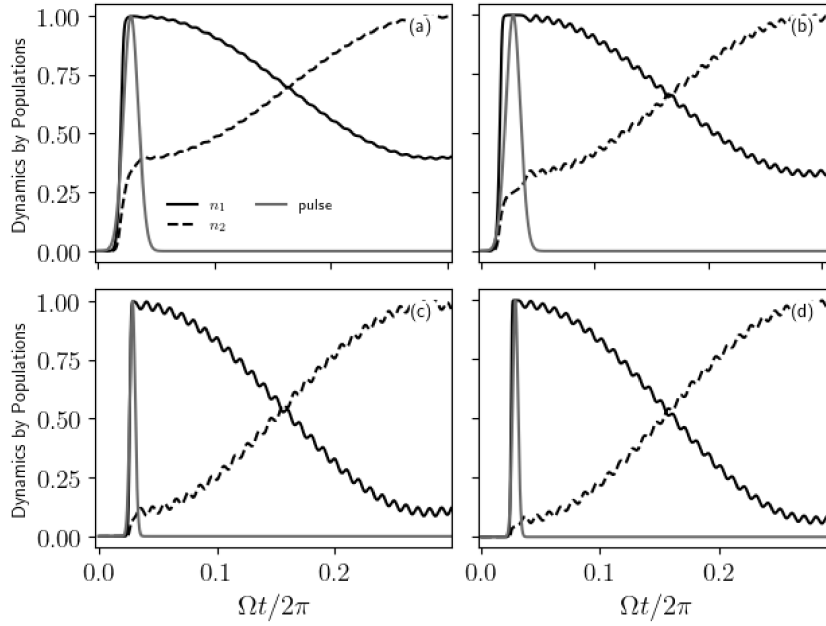


Figura 8 – Dinâmica das ocupações n_1 (linha preta) e n_2 (linha tracejada) e representação do pulso (linha cinza), no primeiro Qubit Quântico para diferentes parâmetros, sendo $a = (133, 0.1)$, $b = (133, 0.5)$, $c = (47, 0.1)$ e $d = (47, 0.5)$.

mostrado nos painéis (c) e (d), suprime-se a formação de estados indesejados. Este efeito pode ser evidenciado ao comparar com a amplitude das grandes oscilações no painel (a) com (c) ou (b) com (d), indicando uma melhoria na inicialização de estados emaranhados, enfatizando novamente a importância do fator σ no processo de inicialização.

5.3 Impacto das Características do Pulso na Qualidade da Inicialização dos Qubits

Para compreender melhor o impacto do pulso de tensão da porta na inicialização dos qubits, na Figura 9 é mostrado o valor máximo de $\langle P_{0110} \rangle$ ao longo de toda a dinâmica para diferentes valores de Γ_0 e σ . Um resultado destacado é a melhoria significativa de $\langle P_{0110} \rangle_{max}$ em cenários onde Γ_0 é elevado e σ é baixo. No entanto, devido às limitações da técnica baseada na equação de Lindblad, o fator de Γ_0 precisa ser pequeno o suficiente para evitar a sobreposição das bandas em razão do alargamento de níveis, provocado pelo acoplamento discreto-contínuo. Na representação gráfica, os pontos (a), (b), (c) e (d) correspondem aos conjuntos de parâmetros utilizados nas Figuras 7.

Em configurações com valores mais altos de σ , como nos pontos (a) e (b), é evidente uma maior ativação de estados como $|0000\rangle$, conforme observado nas Figuras 7 nos painéis (a) e (b), resultando na supressão de $\langle P_{0110} \rangle_{max}$. Por outro lado, configurações com valores mais baixos de σ , como nos pontos (c) e (d), favorecem a excitação do estado $|0110\rangle$ em detrimento de estados não desejados, o que contribui para uma inicialização mais eficaz

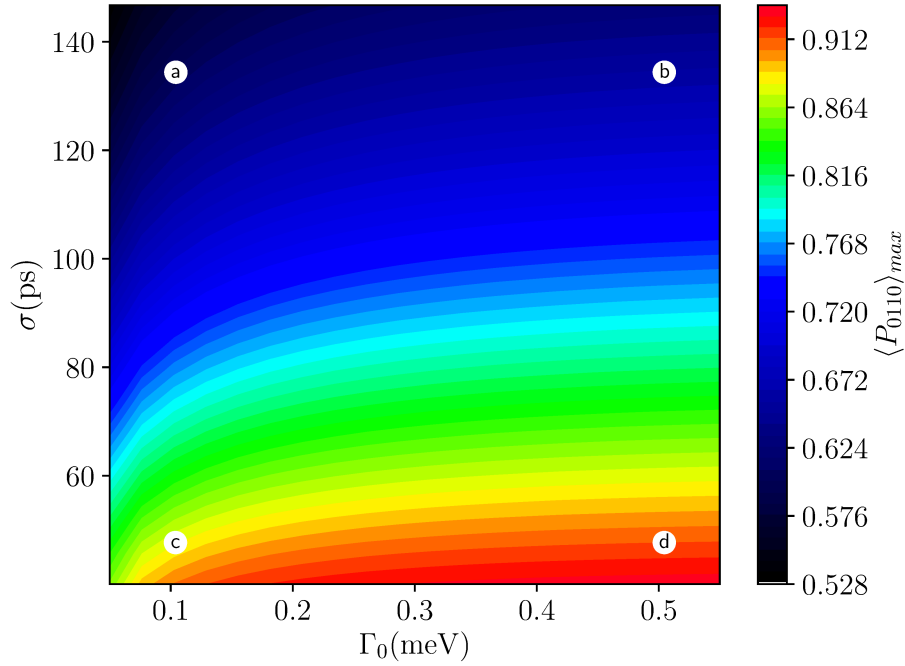


Figura 9 – Gráfico de mapa de cores que mostra os valores máximos para o projetor $|0110\rangle$ variando a largura do pulso σ e a força de acoplamento Γ_0 , onde é selecionado alguns pontos (σ, Γ_0) rotulados como $a = (133, 0.1)$, $b = (133, 0.5)$, $c = (47, 0.1)$ e $d = (47, 0.5)$ para analisar diferentes inicializações.

dos qubits.

5.4 Avaliação da Inicialização por Quantificadores e Indicadores de Emaranhamento

Como discutido no Capítulo 4, a identificação e quantificação do emaranhamento quântico é uma tarefa complexa que frequentemente exige a combinação de múltiplos métodos. Cada método de quantificação de emaranhamento, como a fidelidade, defeito de idempotência, a entropia de von Neumann e a negatividade, possui características e limitações específicas. A fidelidade, por exemplo, mede a proximidade de um estado quântico em relação a um estado de referência, enquanto o defeito de idempotência quantifica a pureza de um estado a partir do traço parcial de ρ^2 . Já a entropia de von Neumann e sua variante parcial fornecem informações sobre a aleatoriedade e a correlação entre partes de um sistema quântico, sendo medidas diretas de quantificação de emaranhamento. Por fim, a negatividade, que se baseia no critério de separabilidade, avalia o sinal dos autovalores da transposta parcial ρ^{TB} para detectar o emaranhamento, também servindo como uma medida eficaz de quantificação do emaranhamento no sistema.

Nesse sentido, é essencial utilizar uma combinação desses métodos para uma avaliação

completa, uma vez que cada um pode revelar diferentes aspectos da presença e do grau de emaranhamento. Na presente sessão, será apresentado os resultados obtidos utilizando esses diversos quantificadores e indicadores, fornecendo uma análise detalhada e abrangente do emaranhamento nos sistemas estudados.

Nas medições de formação de emaranhamento das Figuras 10 e 11, é apresentado a simulação do caso ideal, onde o sistema quântico é fechado, de modo que o efeito de inicialização é desconsiderado e a dinâmica do sistema inicia totalmente no estado $|0110\rangle$. Com isso, é possível avaliar o efeito da injeção de cargas nos *qubits* para os casos (a)-(b) e (c)-(d), onde são apresentados valores máximos próximos, e com (b) e (d) se sobressaindo em relação aos seus pares devido ao aumento de Γ_0 . Isso sugere que a intensidade do pulso contribui para uma melhor preparação de estados emaranhados. No entanto, esse aumento também resulta na formação indesejada de projetores residuais, explicando o aumento das oscilações rápidas presentes na Figura 11 e nos painéis (2) e (4) da Figura 10. Assim, embora um Γ_0 maior melhore a produção de estados emaranhados, o fator decisivo para a qualidade é σ , que deve ser menor.

Na Figura 10, o painel (1) representa a fidelidade em relação ao estado de referência σ_{target} , dado pela equação (7). Observa-se que as simulações *c* (linha cinza) e *d* (linha pontilhada preta) se aproximam mais da simulação do caso ideal do que as simulações *a* (linha preta tracejada) e *b* (linha cinza pontilhada), indicando uma melhoria significativa na qualidade da inicialização. Contudo, ao comparar o painel (1) com os painéis (2) e (4) da Figura 10 e com a Figura 11, fica claro que a periodicidade em (1) é o dobro das demais. Isso ocorre porque a fidelidade mede apenas a proximidade de um estado ρ a um estado alvo específico, considerando a fase. Dessa forma, o mínimo entre dois picos de fidelidade corresponde, na verdade, a um ponto de máximo emaranhamento, destacando uma das falhas da fidelidade como medidor de emaranhamento.

Para complementar as informações sobre a qualidade das simulações na Figura 10, o painel (2) exibe o defeito de idempotência. Antes da inicialização da dinâmica, esse valor está centrado em zero. Na primeira metade da duração do pulso, ocorre uma elevação súbita, seguida por uma queda brusca, na segunda metade do pulso. Depois, a medição do traço parcial oscila entre pontos de máximo, indicando menor pureza, e pontos de mínimo, onde o estado está mais próximo do puro. Comparando com o caso ideal, cujas oscilações são limitadas entre $0 \leq \sigma_A \leq \frac{1}{2}$, as simulações (c) e (d) são as que mais se aproximam, embora seus pontos de máximo sejam superiores a $\frac{1}{2}$ e seus pontos de mínimo também superiores a 0, em razão dos defeitos inerentes à inicialização. Em contrapartida, as simulações (a) e (b) apresentam oscilações de baixa amplitude, indicando a presença de uma maior mistura estatística durante toda a dinâmica, em razão de uma concentração maior na formação de estados não desejados, como vistos na Figura 7.

Enquanto isso, no painel (3) da Figura 10, é apresentada a entropia de von Neumann total do sistema. Durante a injeção do pulso, observa-se uma elevação súbita, seguida

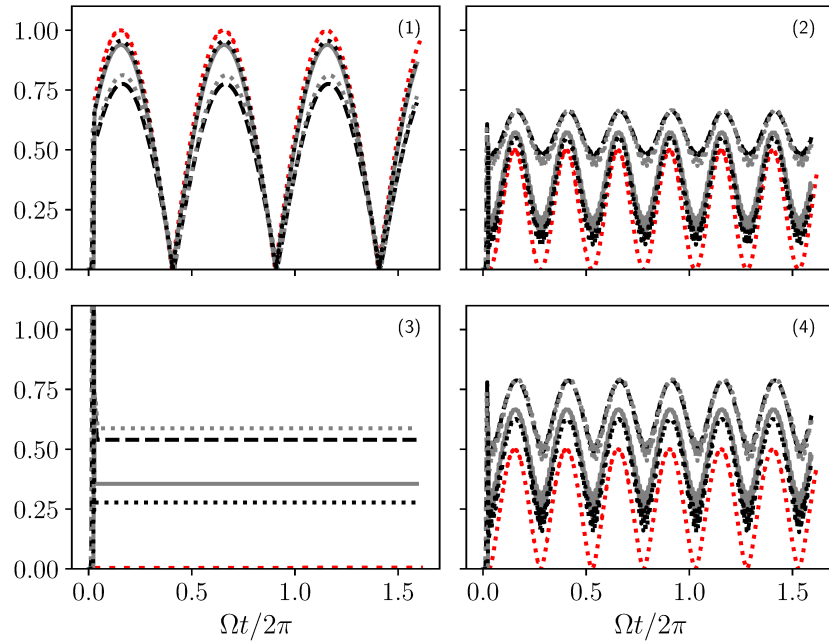


Figura 10 – *Plots* referentes ao sistema sem efeito de decorrência após o bloqueio da porta do reservatório: (1) Fidelidade, (2) Defeito de Idempotência, (3) Entropia de Von Neumann, (4) Entropia parcial de Von Neumann, onde $a = (133, 0.1)$ (linha preta tracejada); $b = (133, 0.5)$ (linha cinza pontilhada); $c = (47, 0.1)$ (linha cinza); $d = (47, 0.5)$ (linha pontilhada preta), caso ideal (linha pontilhada vermelha), isto é, onde é desconsiderado o efeito de inicialização de modo que o sistema inicia apenas no estado $|0110\rangle$.

por uma queda que varia entre as simulações, sobre influência de σ e de Γ_0 , que afetam o sistema quando em contato com o reservatório em intensidades diferentes. Durante a dinâmica subsequente, ao isolar o sistema, a entropia não aumenta, estabilizando-se em um valor constante, de modo que para os caso (a) e (b), obtêm-se um maior grau de desordem residual no sistema. Destacando-se o painel (4), ao expor a entropia parcial de von Neumann, em que nas simulações (a), (b), (c) e (d), também é revelada uma elevação súbita da entropia durante o pulso, seguida por um declínio que define o nível a partir do qual as oscilações se seguem. Portanto, ao comparar os painéis (3) e (4), é possível observar que a modulação do valor mínimo da entropia parcial equivale ao nível em que a entropia total do sistema se estabiliza, de modo que para pulsos mais curtos a desordem resultante no sistema é menor.

A partir das observações coletadas na Figura 10, pode-se inferir que as simulações (c) e (d) apresentam um desempenho superior na geração de estados maximamente emaranhados. No entanto, para uma análise mais precisa, a avaliação da negatividade na Figura 11 revela uma maior detecção de emaranhamento, confirmando que essas simulações de fato produzem estados maximamente emaranhados com maior sucesso.

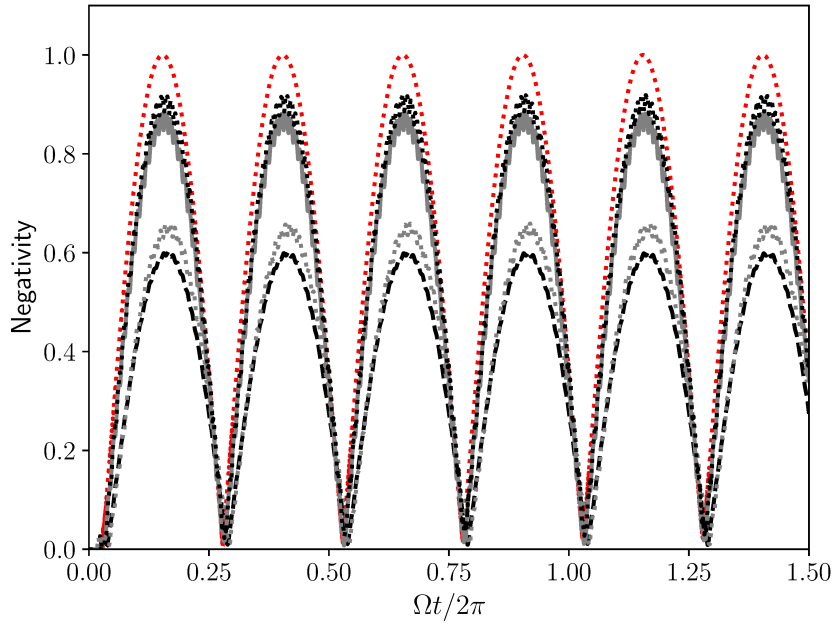


Figura 11 – Negatividade para diferentes pares de parâmetros de (σ, Γ_0) , onde $a = (133, 0.1)$ (linha preta tracejada); $b = (133, 0.5)$ (linha cinza pontilhada); $c = (47, 0.1)$ (linha cinza); $d = (47, 0.5)$ (linha pontilhada preta), caso ideal (linha pontilhada vermelha).

5.5 Efeitos da Decoerência na Formação de Emaranhamento

A decoerência é um processo inevitável neste sistema, pois sobre a estrutura a qual são construído os pontos quânticos litográficos, acontecem efeitos de ruídos por flutuações nos níveis de energia aleatórias e vibrações produzindo fônons, e os elétrons confinados nos *qubits* acabam por interagir eletrostaticamente com o gás de elétrons presente na estrutura semicondutora, culminando em processos de perdas. Nesta sessão, será analisado como a decoerência afeta a formação de estados emaranhados, a partir dos mesmos quantificadores apresentados anteriormente: fidelidade, traço parcial de ρ^2 , entropia de von Neumann e negatividade. Com a introdução da decoerência, observamos que a negatividade, a fidelidade e o traço parcial apresentam um amortecimento acompanhado de um decréscimo contínuo. Em contraste, a entropia de von Neumann total e parcial também sofre amortecimento, mas com um aumento subsequente. A seguir, será discutido os resultados apresentados nas figuras, destacando as mudanças observadas devido à decoerência.

É importante notar que as linhas pontilhadas em vermelho representam simulações de casos ideais que desconsideram o efeito de decoerência durante a inicialização, apenas adicionando *dephasing* na dinâmica já iniciada. Esta abordagem é comumente adotada em simulações que estudam a dinâmica de emaranhamento entre qubits. No entanto, o

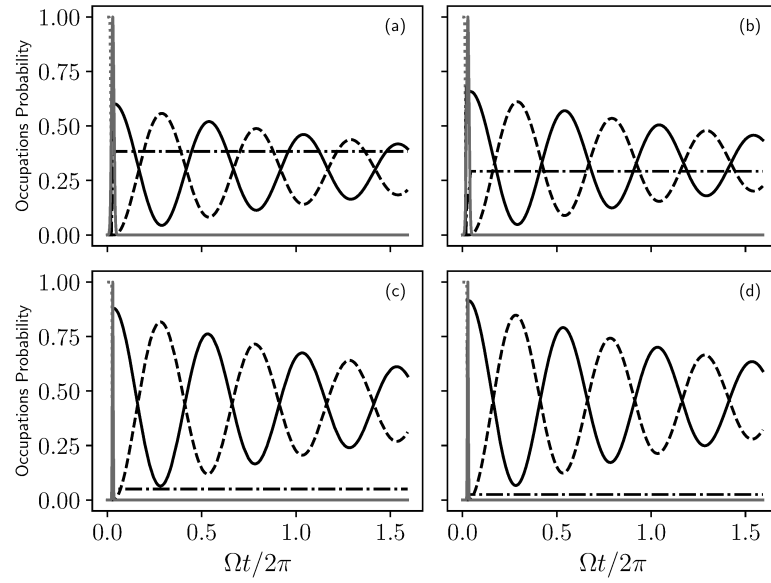


Figura 12 – Sistema sob efeito de decoerência apresentando o amortecimento da dinâmica entre projetores ao longo do tempo para diferentes parâmetros de (σ, Γ_0) , onde são representado os valores esperados dos projetores $|1111\rangle$ (linha cinza pontilhada), $|0000\rangle$ (linha preta tracejada-pontilhada), $|0110\rangle$ (linha preta sólida), $|1001\rangle$ (linha preta tracejada) e o pulso (linha cinza), sendo $a = (133, 0.1)$, $b = (133, 0.5)$, $c = (47, 0.1)$ e $d = (47, 0.5)$.

diferencial das simulações apresentadas aqui é que se consideram as perdas desde a fase inicial do processo de formação dos estados emaranhados.

Na figura 12 é exibido o comportamento da dinâmica dos valores esperados dos projetores dos estados $|0110\rangle$, $|1001\rangle$ e $|0000\rangle$ sob a adição do *dephasing* de 1×10^{-2} GHz, isto é, o sistema permanece com um acoplamento fraco com o ambiente mesmo após a pulso, gerando erros de fase. Deste modo, é possível observar um efeito de atenuação no comportamento oscilatório dos estados em entrelaçamento quântico, $|0110\rangle$ e $|1001\rangle$, pois o emaranhamento é uma forma de correlação quântica muito sensível a interações com o ambiente, como a decoerência. Por conseguinte a interferência quântica que sustenta o emaranhamento é destruída pela interação com o ambiente, levando ao amortecimento das oscilações.

Por outro lado, o estado $|0000\rangle$ não exibe alterações significativas sob a decoerência porque é um estado de produto puro e não emaranhado, nessa condição não há correlações quânticas entre os qubits que podem ser perturbadas pelo ambiente. Logo, a decoerência não tem um efeito notável sobre a dinâmica dos projetores desse estado, como fica nítido ao comparar a Figura 7 com a Figura 12.

Na Figura 13, o painel (1) mostra a fidelidade em relação ao estado de referência σ_{target} . Observa-se que todas as simulações, incluindo a (linha preta tracejada), b (linha cinza pontilhada), c (linha cinza), e d (linha pontilhada preta), apresentam uma redução na fidelidade em comparação ao caso sem decoerência (Figura 10). Um efeito semelhante

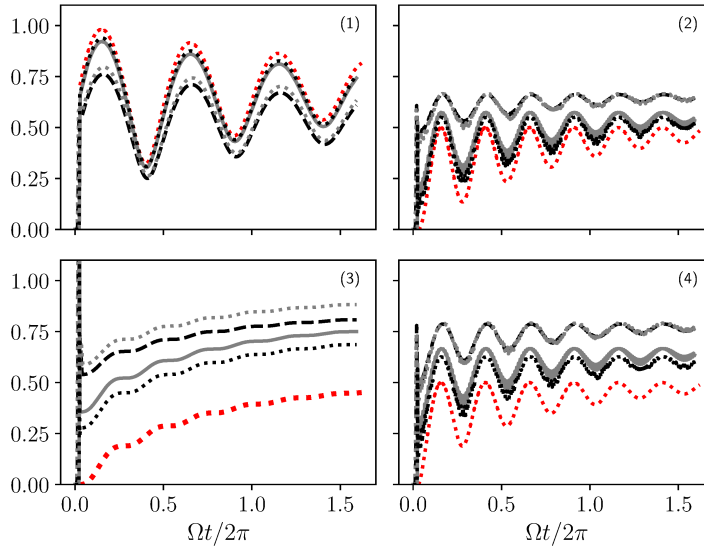


Figura 13 – Plots para o sistema sob efeito de decoerência: (1) Fidelidade, (2) Defeito de Idempotência, (3) Entropia de Von Neumann, (4) Entropia parcial de Von Neumann, onde $a = (133, 0.1)$ (linha preta tracejada); $b = (133, 0.5)$ (linha cinza pontilhada); $c = (47, 0.1)$ (linha cinza); $d = (47, 0.5)$ (linha pontilhada preta), caso ideal (linha pontilhada vermelha).

é observado no painel (2), onde o grau de impureza do sistema aumenta como o tempo. Isso indica que a decoerência reduz tanto a proximidade dos estados gerados em relação à σ_{target} quanto a pureza, devido a um aumento da formação de estados não desejados ao longo da dinâmica do sistema, comprometendo assim, a qualidade do emaranhamento.

O painel (3) da Figura 13 exibe a evolução da entropia de von Neumann total sob crescimento oscilante devido ao acoplamento com o reservatório, diferentemente do que acontecia no painel (3) da Figura 10. Este aumento oscilante ocorre porque o sistema está em interação constante com o ambiente, o que provoca flutuações na desordem do sistema, refletidas na entropia de von Neumann.

Enquanto isso, no painel (4) da Figura 13, a entropia parcial de von Neumann mostra um aumento modulado, sobreposto ao crescimento da entropia total, resultando em um efeito contínuo de amortecimento. Esse comportamento pode ser entendido como resultado da decoerência, que afeta as partes do sistema de forma diferenciada. A entropia parcial mede a desordem em uma parte específica do sistema, e seu aumento modulado indica que as correlações entre as partes do sistema estão sendo gradualmente destruídas devido ao *dephasing*.

A Figura 14 complementa a análise apresentando a negatividade a qual devido a adição da decoerência, manifesta uma redução na negatividade em todas as simulações, evidenciando o amortecimento do emaranhamento. No entanto, as simulações c e d mantêm valores de negatividade relativamente mais altos, inclusive muito próximos à simulação ideal com *dephasing*, em comparação com a e b . Isso sugere que, mesmo com a presença de decoerência, certos parâmetros de controle podem atenuar seus efeitos, permitindo a

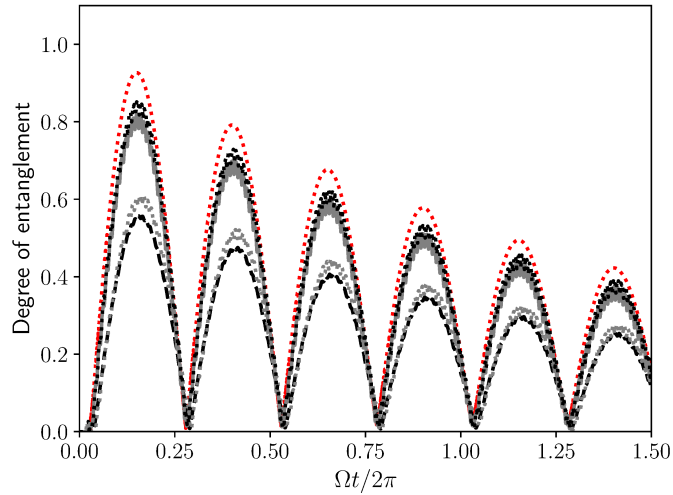


Figura 14 – Representação da negatividade calculada para um sistema sob decoerência quântica para diferentes pares de parâmetros de (σ, Γ_0) , onde $a = (133, 0.1)$ (linha preta tracejada); $b = (133, 0.5)$ (linha cinza pontilhada); $c = (47, 0.1)$ (linha cinza); $d = (47, 0.5)$ (linha pontilhada preta), caso ideal (linha pontilhada vermelha)

formação de estados emaranhados de maneira mais eficaz.

A fim de obter uma melhor análise a cerca dos efeitos da adição de *dephasing* foi realizado diversas simulações aumentando sua intensidade até a destruição da dinâmica do sistema, das quais iremos destacar para *dephasing* de 5×10^{-2} GHz e de 5×10^{-1} GHz, onde na primeira ainda se observa a formação de emaranhamento e na segunda na qual o efeito é totalmente destrutivo.

Para um *dephasing* de 5×10^{-2} GHz, como mostrado nas Figuras 15 e 16, apesar do grande efeito de desordem indicado pelos gráficos de entropia, é possível alcançar bons resultados na formação de emaranhamento para a primeira oscilação. Na Figura 15, para os caso c e d , são observados valores máximos de fidelidade, entre 0.75 e 1, e simultaneamente, mínimos de defeito de idempotência, entre 0.50 e 0.75, apontando uma menor pureza, isto é, um provável ponto de maior emaranhamento no sistema, que posteriormente é confirmado pela negatividade na Figura 16, apresentando um pico superior à 0.6 nesse mesmo instante.

Em contrapartida, para um *dephasing* de 5×10^{-1} GHz o efeito de amortecimento é forte o suficiente para impedir a existência de oscilações. Sendo assim, ao observar os casos c e d , para a Figura 17 a fidelidade cresce no começo e se prolonga durante a dinâmica, indicando uma boa proximidade do estado alvo, entre 0.5 e 0.75, ao mesmo tempo que o defeito de idempotência aumenta após o pulso e se prolonga superiormente à 0.5, indicando uma menor pureza em razão de um maior nível de desordem do sistema, como demonstrado pelo crescimento rápido da entropia de von Neumann total e parcial. Com isso, a partir da Figura 18, justifica-se o amortecimento crítico sofrido pela negatividade, revelando uma baixa formação de emaranhamento no sistema.

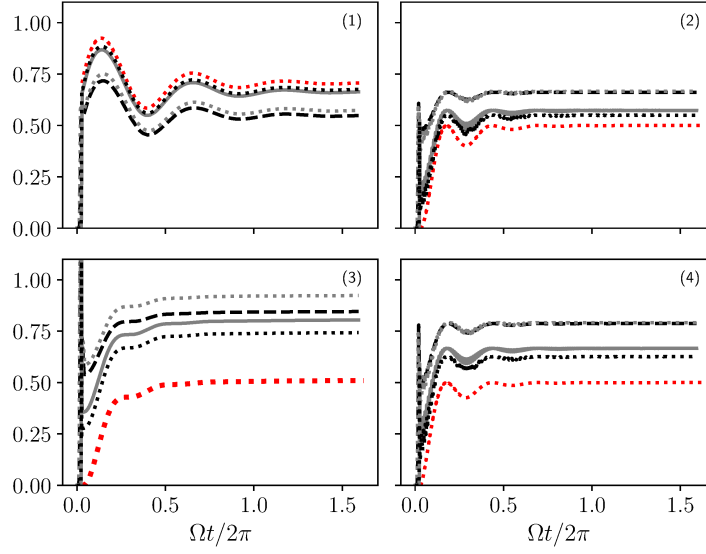


Figura 15 – *Plots* para o sistema para *dephasing* de 5×10^{-2} GHz: (1) Fidelidade, (2) Defeito de Idempotência, (3) Entropia de Von Neumann, (4) Entropia parcial de Von Neumann, onde onde $a = (133, 0.1)$ (linha preta tracejada); $b = (133, 0.5)$ (linha cinza pontilhada); $c = (47, 0.1)$ (linha cinza); $d = (47, 0.5)$ (linha pontilhada preta), caso ideal (linha pontilhada vermelha).

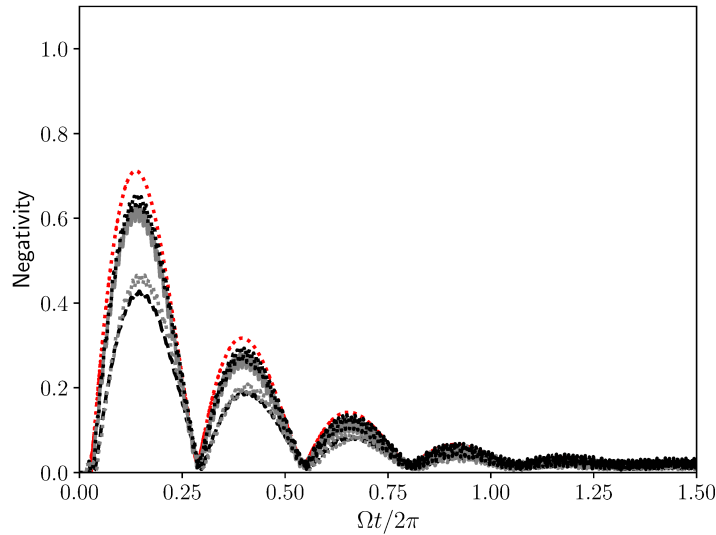


Figura 16 – Negatividade calculada para um sistema sob *dephasing* de 5×10^{-2} GHz quântica para diferentes pares de parâmetros de (σ, Γ_0) , onde $a = (133, 0.1)$ (linha preta tracejada); $b = (133, 0.5)$ (linha cinza pontilhada); $c = (47, 0.1)$ (linha cinza); $d = (47, 0.5)$ (linha pontilhada preta), caso ideal (linha pontilhada vermelha).

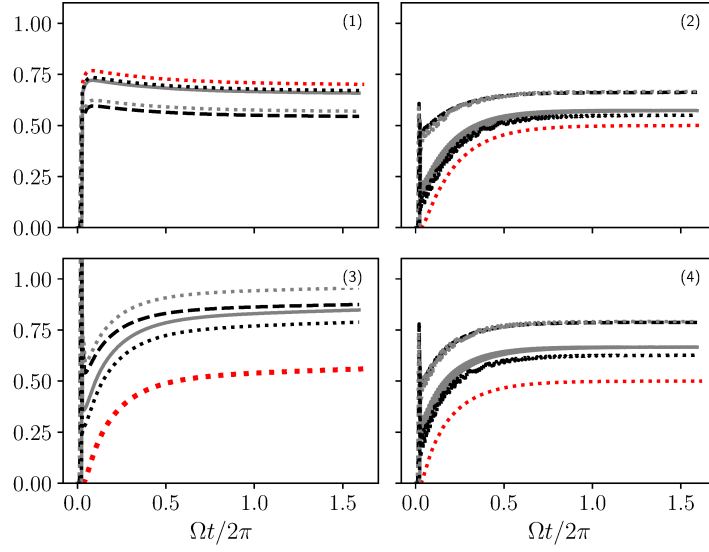


Figura 17 – *Plots* para o sistema para *dephasing* de 5×10^{-1} GHz: (1) Fidelidade, (2) Defeito de Idempotência, (3) Entropia de Von Neumann, (4) Entropia parcial de Von Neumann, onde $a = (133, 0.1)$ (linha preta tracejada); $b = (133, 0.5)$ (linha cinza pontilhada); $c = (47, 0.1)$ (linha cinza); $d = (47, 0.5)$ (linha pontilhada preta), caso ideal (linha pontilhada vermelha).

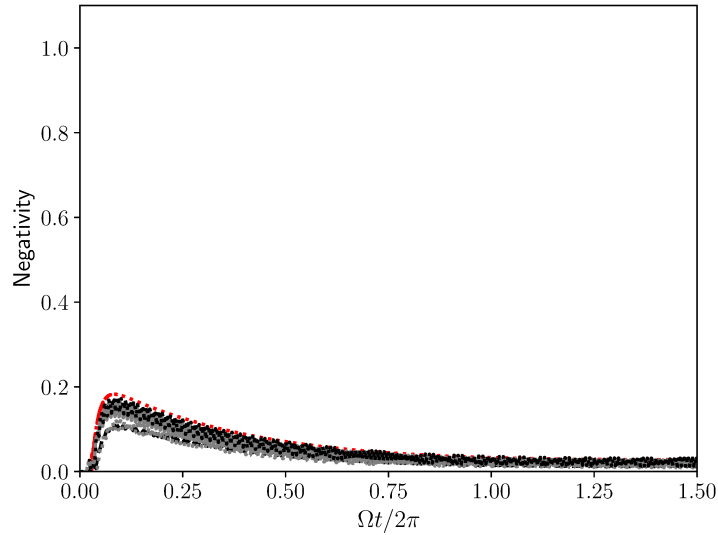


Figura 18 – Representação da negatividade calculada para um sistema sob *dephasing* de 5×10^{-1} GHz quântica para diferentes pares de parâmetros de (σ, Γ_0) , onde $a = (133, 0.1)$ (linha preta tracejada); $b = (133, 0.5)$ (linha cinza pontilhada); $c = (47, 0.1)$ (linha cinza); $d = (47, 0.5)$ (linha pontilhada preta), caso ideal (linha pontilhada vermelha).

Conclusão

Os resultados das simulações realizadas a partir das medições de emaranhamento, como fidelidade, defeito de idempotência, entropia de von Neumann e negatividade demonstraram que a qualidade da inicialização eletrônica neste sistema é fortemente influenciada pela configuração dos parâmetros de pulso de tensão e taxa de tunelamento. Observou-se que valores mais baixos de σ e maiores de Γ_0 promovem uma inicialização mais eficaz do estado $|0110\rangle$, devido a minimização na probabilidade de gerar outros estados. A análise dos projetores revelou que pulsos mais curtos e intensos favorecem a dinâmica oscilatória de Rabi entre os estados $|0110\rangle$ e $|1001\rangle$, proporcionando uma formação mais controlada dos estados emaranhados.

Além disso, observou-se que mesmo com a presença de *dephasing*, a escolha assertiva dos parâmetros de controle pode atenuar a decoerência, permitindo a formação de estados emaranhados de maneira mais eficaz, e que embora um Γ_0 maior intensifique a produção de estados emaranhados, o fator σ é decisivo para a qualidade final da inicialização. Complementarmente, a adição de decoerência na dinâmica durante e após o pulso, revelaram um amortecimento considerável das oscilações de Rabi, e conseqüentemente, uma redução contínua na qualidade do emaranhamento, mostrando a importância de se considerar os efeitos de inicialização a fim de otimizar emaranhamento envolvendo *qubits*.

A partir deste estudo, é possível investigar outros pontos que não foram trabalhados ainda, como por exemplo, a adição de um sorvedouro de cargas para ser capaz de replicar a primeira oscilação seguidamente, amenizando o efeito contínuo de amortecimento, bem como mecanismos para provocar relaxação na dinâmica de emaranhamento, para manter o sistema emaranhado em períodos mais longos. Outro ponto interessante a ser trabalhado, é o estudo de outros quantificadores de emaranhamento, e a avaliação de critérios desejáveis quanto a sua qualidade, a fim de compreender quais são os limites de aplicabilidade e vantagens de cada quantificador.

Referências

ABDEL-ATY, M. A qualitative perspective on the dynamics of a single-cooper-pair box with a phase-damped cavity. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, IOP Publishing, v. 41, n. 18, p. 185304, 2008.

AGARWAL, K.; RAI, H.; MONDAL, S. Quantum dots: An overview of synthesis, properties, and applications. **Materials Research Express**, IOP Publishing, v. 10, n. 6, p. 062001, 2023.

ANGELO, R. et al. Rapid decoherence in integrable systems: A border effect. **Physical Review E**, APS, v. 60, n. 5, p. 5407, 1999.

BANCHI, L. et al. Modelling non-markovian quantum processes with recurrent neural networks. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 20, n. 12, p. 123030, 2018.

BENIOFF, P. The computer as a physical system: A microscopic quantum mechanical hamiltonian model of computers as represented by turing machines. **Journal of Statistical Physics**, v. 22, p. 563–591, 1980. ISSN 1572-9613.

BEREZOVSKY, J. et al. Nondestructive optical measurements of a single electron spin in a quantum dot. **Science**, v. 314, n. 5807, p. 1916–1920, 2006.

BEREZOVSKY M. H. MIKKELSEN, N. G. S. J.; COLDREN, L. A.; AWSCHALOM, D. D. Picosecond coherent optical manipulation of a single electron spin in a quantum dot. **Science**, v. 320, n. 5874, p. 349–352, 2008.

BERGOU, J. A.; HILLERY, M.; SAFFMAN, M. **Quantum information processing**. [S.l.]: Springer, 2021.

BLUM, K. **Density matrix theory and applications**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. v. 64.

BOES, P. et al. Von neumann entropy from unitarity. **Physical Review Letters**, American Physical Society (APS), v. 122, n. 21, maio 2019. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.210402>>.

BREUER, H.-P.; PETRUCCIONE, F. et al. **The theory of open quantum systems**. [S.l.]: Oxford University Press on Demand, 2002.

BRUUS, H.; FLENSBERG, K.; PRESS, O. U. **Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction**. OUP Oxford, 2004. (Oxford Graduate Texts). ISBN 9780198566335. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=CktuBAAAQBAJ>>.

CAO, K. et al. Quantum phase transitions in the alternating xy chain with three-site interactions. **Physica B: Condensed Matter**, Elsevier, v. 682, p. 415876, 2024.

CHATTERJEE, A. et al. Semiconductor qubits in practice. **Nature Reviews Physics**, Nature Publishing Group UK London, v. 3, n. 3, p. 157–177, 2021.

COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. **Quantum Mechanics, Volume 1: Basic Concepts, Tools, and Applications**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2019.

D'ESPAGNAT, B. **Conceptual foundations of quantum mechanics**. [S.l.]: Benjamin-Cummings. Menlo Park, 1971.

EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B.; ROSEN, N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? **Physical review**, APS, v. 47, n. 10, p. 777, 1935.

ELZERMAN, J. M. et al. Single-shot read-out of an individual electron spin in a quantum dot. **Nature**, Springer Science and Business Media LLC, v. 430, n. 6998, p. 431–435, jul. 2004. ISSN 1476-4687. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/nature02693>>.

FALLEK, S. D. et al. Rapid exchange cooling with trapped ions. **Nature Communications**, Nature Publishing Group UK London, v. 15, n. 1, p. 1089, 2024.

FEYNMAN, R. P. Simulating physics with computers. **International Journal of Theoretical Physics**, v. 21, p. 467–488, 1982. ISSN 1572-9575.

FILHO, R. L. C. Resfriamento e aprisionamento de átomos neutros com laser. **Physicae**, v. 2, n. 1, p. 23–30, 2001.

FRANCO, N. **Cálculo numérico**. [S.l.]: Pearson, 2006. ISBN 9788576050872.

FUJISAWA, T.; HAYASHI, T.; HIRAYAMA, Y. Controlled decoherence of a charge qubit in a double quantum dot. **Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena**, American Vacuum Society, v. 22, n. 4, p. 2035–2038, 2004.

FUJISAWA, T. et al. Multiple two-qubit operations for a coupled semiconductor charge qubit. **Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures**, v. 43, n. 3, p. 730–734, 2011. ISSN 1386-9477. NanoPHYS 09. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1386947710004303>>.

HORODECKI, M.; HORODECKI, P.; HORODECKI, R. Separability of mixed states: necessary and sufficient conditions. **Physics Letters A**, v. 223, n. 1, p. 1–8, 1996. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960196007062>>.

JOHANSSON, J.; NATION, P.; NORI, F. Qutip: An open-source python framework for the dynamics of open quantum systems. **Computer Physics Communications**, Elsevier BV, v. 183, n. 8, p. 1760–1772, ago. 2012. ISSN 0010-4655. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2012.02.021>>.

- JOZSA, R. Fidelity for mixed quantum states. **Journal of modern optics**, Taylor & Francis, v. 41, n. 12, p. 2315–2323, 1994.
- KARIM, M. R. et al. Synthesis, characterization and modelling of colloidal quantum dots. In: **Progress in Nanoscale and Low-Dimensional Materials and Devices: Properties, Synthesis, Characterization, Modelling and Applications**. [S.l.]: Springer, 2022. p. 117–153.
- KNILL, E. Quantum computing. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 463, n. 7280, p. 441–443, 2010.
- KOILLER, B. et al. Silicon-based spin and charge quantum computation. **Anais da Academia Brasileira de Ciências**, SciELO Brasil, v. 77, p. 201–222, 2005.
- KOK, P. et al. Linear optical quantum computing with photonic qubits. **Reviews of modern physics**, APS, v. 79, n. 1, p. 135, 2007.
- LEHNERT, K. et al. Measurement of the excited-state lifetime of a microelectronic circuit. **Physical review letters**, APS, v. 90, n. 2, p. 027002, 2003.
- LIDAR, D. A. **Lecture Notes on the Theory of Open Quantum Systems**. 2020.
- LOSS, D.; DIVINCENZO, D. P. Quantum computation with quantum dots. **Phys. Rev. A**, American Physical Society, v. 57, p. 120–126, Jan 1998. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.57.120>>.
- MAZIERO, J. Entendendo a entropia de von neumann. **Revista brasileira de Ensino de Física**, SciELO Brasil, v. 37, p. 1314, 2015.
- MOORE, G. Cramming more components onto integrated circuits. **Electronics**, v. 38, n. 8, p. 114, 1965.
- MURRAY, C.; NORRIS, D. J.; BAWENDI, M. G. Synthesis and characterization of nearly monodisperse cde (e= sulfur, selenium, tellurium) semiconductor nanocrystallites. **Journal of the American Chemical Society**, ACS Publications, v. 115, n. 19, p. 8706–8715, 1993.
- NAKAHARA, M. **Quantum computing: from linear algebra to physical realizations**. [S.l.]: CRC press, 2008.
- NAKANO, T.; PIANI, M.; ADESSO, G. Negativity of quantumness and its interpretations. **Physical Review A**, APS, v. 88, n. 1, p. 012117, 2013.
- NEUMANN, J. v. **Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik**. [S.l.]: Springer-Verlag, 2013. v. 38.
- NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. Quantum computation and quantum information. **Phys. Today**, v. 54, n. 2, p. 60, 2001.
- PEREZ, R. Entanglement and quantum computation: an overview. Oak Ridge National Lab.(ORNL), Oak Ridge, TN (United States), 2000.
- PETTA, J. R. et al. Coherent manipulation of coupled electron spins in semiconductor quantum dots. **Science**, v. 309, p. 2180, 9 2005. Disponível em: <link.gale.com/apps/doc/A137627153/AONE?u=anon~3394a558&sid=bookmark-AONE&xid=24752d7f>.

- SAKURAI, J.; NAPOLITANO, J. **Modern quantum mechanics 2nd ed.** [S.l.]: Pearson, 2011.
- SCAPPUCCI, G. et al. Crystalline materials for quantum computing: Semiconductor heterostructures and topological insulators exemplars. **MRS Bulletin**, Springer, v. 46, n. 7, p. 596–606, 2021.
- SCHRÖDINGER, E. The present status of quantum mechanics. **Die Naturwissenschaften**, v. 23, n. 48, p. 1–26, 1935.
- SHANNON, C. E. A mathematical theory of communication. **The Bell system technical journal**, Nokia Bell Labs, v. 27, n. 3, p. 379–423, 1948.
- SHARMILA, B. et al. Cooper-pair beam splitter as a feasible source of entangled electrons. **Phys. Rev. A**, American Physical Society, v. 109, p. 062439, Jun 2024. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.109.062439>>.
- SILBEY, R.; ALBERTY, R.; BAWENDI, M. **Physical Chemistry**. Wiley, 2005. ISBN 9780471658979. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=__b-wQgAACAAJ>.
- SONG, Y. et al. Magnetically confined plasma reactive ion etching of gaas/algaas/ alas quantum nanostructures. **Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena**, American Vacuum Society, v. 12, n. 6, p. 3388–3392, 1994.
- SOUZA, E. R.; SIGOLI, F. A. Princípios fundamentais e modelos de transferência de energia inter e intramolecular. **Química Nova**, SciELO Brasil, v. 35, p. 1841–1847, 2012.
- SOUZA, F. M.; SANZ, L. Lindblad formalism based on fermion-to-qubit mapping for nonequilibrium open quantum systems. **Physical Review A**, American Physical Society (APS), v. 96, n. 5, nov. 2017. ISSN 2469-9934. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.96.052110>>.
- UDDIN, W. et al. Silicon-based qubit technology: progress and future prospects. **Bulletin of Materials Science**, Springer, v. 45, n. 1, p. 46, 2022.
- VEDRAL, V. et al. Quantifying entanglement. **Physical Review Letters**, American Physical Society (APS), v. 78, n. 12, p. 2275–2279, mar. 1997. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.78.2275>>.
- ZWERVER, A. et al. Qubits made by advanced semiconductor manufacturing. **Nature Electronics**, Nature Publishing Group UK London, v. 5, n. 3, p. 184–190, 2022.