

# Colaboração Acadêmica e Militar: Avanços nas Tecnologias Quânticas com Ênfase em Emissores Quânticos

Augusto R. Rodrigues, Julio C. V. Chagas, Luiz F. A. Ferrão, Gabriel F. S. Fernandes, Francisco B. C. Machado, Rene F. K. Spada, André J. C. Chaves  
Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA), São José dos Campos/SP – Brasil

**Resumo** — O trabalho apresenta pesquisas recentes no âmbito do Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA) que podem se relacionar com as tecnologias quânticas. O foco foi em emissores quânticos que emitem um único fóton por ciclo. Foram explorados materiais bidimensionais derivados do grafeno, como os hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAHs), propostos como emissores ideais. O estudo destacou as propriedades e aplicações do grafeno e dos PAHs, evidenciando seu potencial para o desenvolvimento de novos materiais e dispositivos. O *phenalenyl*, um tipo de PAH com propriedades promissoras para armazenamento de energia e eletrônica orgânica, também foi abordado. O estudo ressaltou a importância da colaboração entre academia, indústria e governo na formação de especialistas e investimentos em infraestrutura adequada para impulsionar o desenvolvimento das tecnologias quânticas.

## I. INTRODUÇÃO

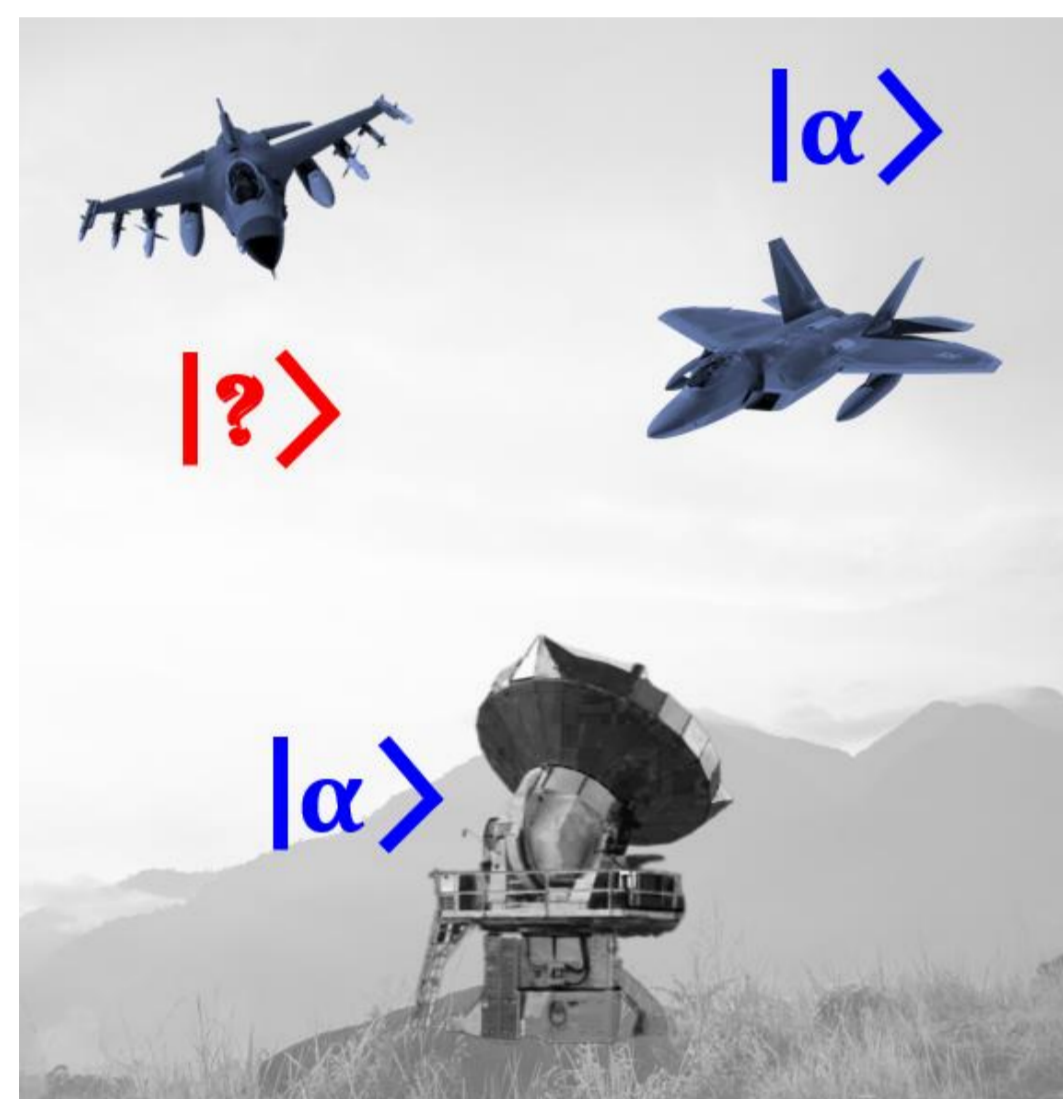


Fig. 1. Comunicação quântica: segurança nas transmissões

As tecnologias quânticas, baseadas nos princípios da mecânica quântica, surgem como uma área promissora com potencial disruptivo em vários cenários, incluindo aplicações militares. Essas tecnologias variam em termos de prontidão, indo desde princípios básicos (TRL 1) até prontidão operacional em cenários reais (TRL 9). A aplicação militar dessas tecnologias, conhecida como "quantum warfare", demanda compreensão e monitoramento contínuo. Para isso, uma abordagem colaborativa envolvendo governo, indústria e academia é essencial. O governo cria políticas e regulamentações, enquanto a indústria aplica e comercializa as tecnologias, colaborando com a academia para impulsionar a inovação.

A comunicação quântica utiliza as propriedades quânticas da luz, como superposição e emaranhamento, para transmitir informações de maneira altamente segura e resistente a interceptações. O procedimento básico envolve a codificação do estado quântico desejado em um sistema quântico por uma das partes e a transmissão desse sistema para a outra parte.

A exploração do emaranhamento é utilizada para preparar o estado quântico desejado à distância. Em seguida, ocorre o teletransporte do estado quântico e do emaranhamento entre as partes, permitindo a comunicação segura conforme ilustrado na Fig. 1: o radar codifica o estado quântico  $|\alpha\rangle$  e o transmite para a aeronave amiga. Utilizando o emaranhamento, o estado quântico é transferido de forma segura. A aeronave inimiga, que não participa do emaranhamento, não possui acesso à informação transmitida ( $|\ ? \rangle$ ). Um aspecto-chave da pesquisa acadêmica é o desenvolvimento de fontes de fótons únicos para comunicação quântica segura, capazes de usar essas propriedades quânticas. Várias abordagens físicas, como materiais bidimensionais derivados do grafeno, estão sendo exploradas para criar essas fontes. O programa computacional Columbus é utilizado para investigar propriedades atômicas e é exemplificado por meio da análise do *phenalenyl*, um hidrocarboneto aromático policíclico (PAH) que tem aplicações em armazenamento de energia e eletrônica orgânica.

## II. GRAFENO

O grafeno é um material muito útil devido às suas propriedades eletrônicas, térmicas e mecânicas. Consiste em uma camada atômica única de carbono arranjada hexagonalmente, com ligações  $\sigma$  planares e nuvens eletrônicas  $\pi$  perpendiculares que permitem o fluxo de elétrons. O grafeno tem aplicações em fotônica, optoeletrônica e como base para novos materiais bidimensionais.

Variantes do grafeno podem ser obtidas por substituições químicas e defeitos estruturais. Substituições químicas incluem a troca de átomos de carbono por outros elementos, como boro e nitrogênio, ou metais de transição para criar propriedades magnéticas. Defeitos de vacância aumentam a reatividade por ligações pendentes. O corte do grafeno leva a moléculas chamadas hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAHs), que têm potencial tecnológico similar ao grafeno, permitindo modulação de propriedades e manipulação de estados excitados.

A forma e bordas dos PAHs influenciam suas propriedades, com bordas *zigzag* sendo reativas e *armchair* mais estáveis. No Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA), pesquisas exploraram estruturas eletrônicas de PAHs estáveis como acenos, periácenos e sistemas com defeitos de vacância.

A interação  $\pi$ - $\pi$  entre PAHs foi estudada, considerando deformações no empilhamento. Modificações químicas, como substituições de carbono por boro ou nitrogênio, afetam o caráter radicalar e a estabilidade dos PAHs.

Estudos também abordaram a separação de PAHs em acenos menores e incorporação de estruturas anti-aromáticas. Foram caracterizados estados excitados e espectros de absorção em PAHs, bem como o deslocamento de Stokes relacionado à excitação eletrônica. Recentemente, o foco tem sido em substituições químicas específicas para propriedades eletrônicas, como dispositivos de transporte de cargas via *singlet fission* e substituições completas por pares BN, resultando em BN-PAHs com propriedades eletrônicas mais estáveis.

## III. CÁLCULO DE DENSIDADE DE SPIN POR MÉTODOS MULTI-CONFIGURACIONAIS

O *phenalenyl* ( $C_{13}H_9$ ) é uma molécula composta por três anéis de benzeno dispostos triangularmente, possuindo 13 elétrons  $\pi$ , ao menos um dos quais é desemparelhado. Isso o classifica como um PAH. Suas características eletrônicas o tornam um candidato para aplicações em armazenamento de energia e eletrônica orgânica.

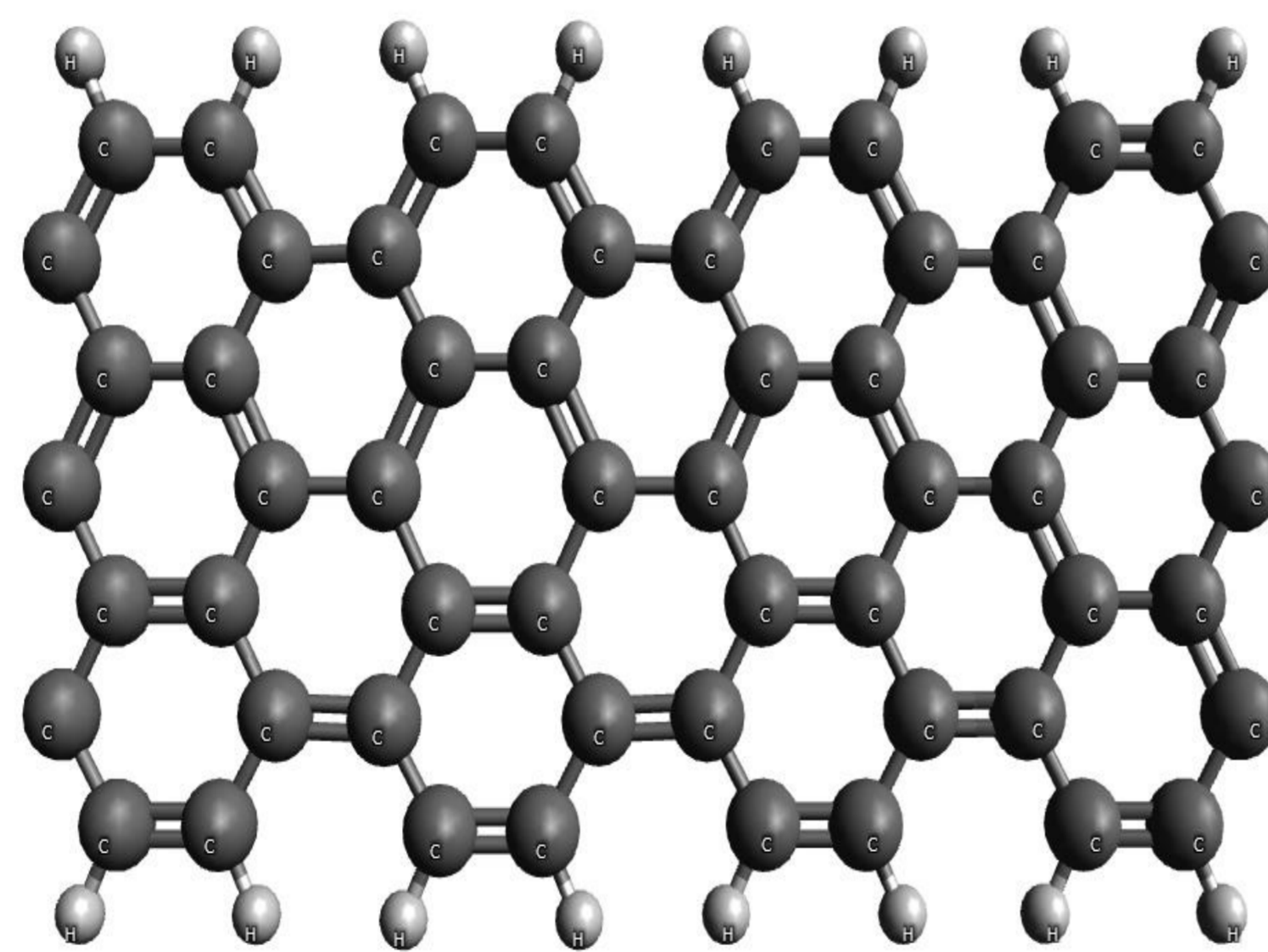
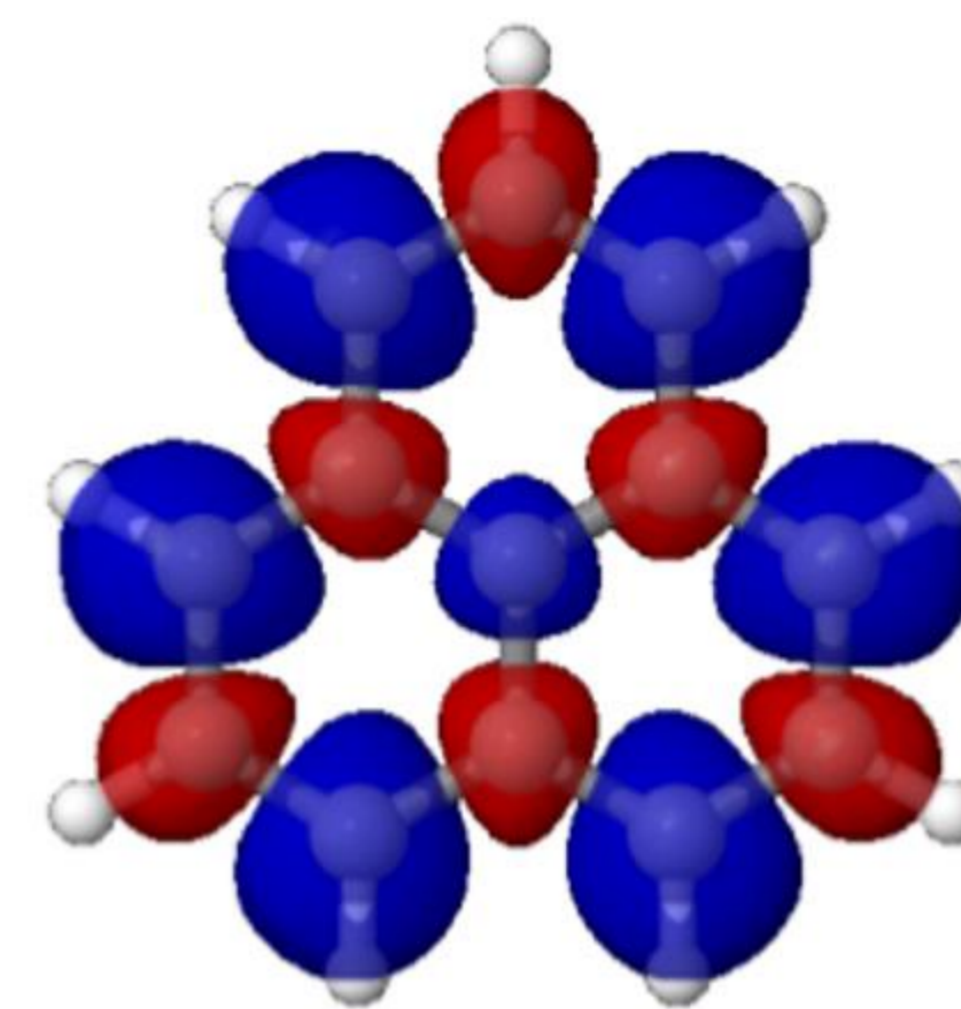


Fig. 2. Exemplo de um corte em uma estrutura molecular de grafeno



$$\varphi_k^{[\alpha]} = \varphi_k^{[\beta]}$$

$$\text{Densidade de Spin} \\ \sum \mu = 2M = 1$$

Fig. 3. Orbitais naturais de densidade de spin. Azul e vermelho representam valores positivos e negativos, respectivamente.

Modificações na estrutura, geralmente substituindo átomos de carbono por nitrogênio ou boro, permitem ajustar as propriedades eletrônicas, incluindo a ordem energética de estados excitados. Isso é relevante para dispositivos que exploram fenômenos como a fluorescência atrasada e a fissão de spin.

Para explorar essas propriedades, métodos de estrutura eletrônica são empregados, resolvendo a equação de Schrödinger com o hamiltoniano da molécula. Em condições sem campos externos, o hamiltoniano molecular não relativístico comuta com operadores de spin  $\hat{S}^2$  e  $\hat{S}_z$ . A densidade de spin é utilizada para representar elétrons desemparelhados em estados eletrônicos. Métodos como a teoria do funcional de densidade (DFT) fornecem densidades de spin, mas a escolha da aproximação pode influenciar os resultados. Uma abordagem confiável baseada em função de onda, recentemente implementada para o método MCSCF (sigla do inglês para campo auto-consistente multi-configuracional), utiliza a abordagem gráfica do grupo unitário do programa Columbus. Essa implementação calcula a matriz de densidade de spin, obtendo autovalores e autovalores que representam orbitais naturais de densidade de spin. A soma desses autovalores resulta na densidade de spin total do sistema. A Fig. 3 representa orbitais naturais de densidade de spin com a densidade de spin total para o estado fundamental do *phenalenyl* calculados pelo método MCSCF.

O isovalor é  $\pm 0,001 e \text{Å}^{-3}$  para a densidade de spin total e  $\pm 0,05 \text{Å}^{-3/2}$  para os orbitais. Azul e vermelho representam valores positivos e negativos, respectivamente.

A aplicação do método MCSCF revelou que a densidade de spin calculada corresponde aos valores esperados para sistemas como o  $C_{13}H_9$ , com um elétron desemparelhado, onde o valor previsto para  $\hat{S}^2$  é 0,75. A função de onda multi-configuracional reproduz essa expectativa, enquanto a alternância de sinais na densidade de spin entre átomos de carbono é alcançada por conjuntos de spin-orbitais idênticos. A implementação também foi comparada com aproximações da DFT, mostrando diferenças nos valores esperados para  $\hat{S}^2$ . Dessa forma, a abordagem no software Columbus permite a análise precisa de propriedades de spin complexas em sistemas poliaromáticos, viabilizando o uso desses resultados para o desenvolvimento de novos dispositivos com base em suas características de spin.

## IV. CONCLUSÃO

O trabalho teve como objetivo apresentar pesquisas recentes do ITA que podem impulsionar as tecnologias quânticas, especialmente no contexto militar. Destacou-se a importância de especialistas no campo, bem como a relevância das tecnologias quânticas na defesa. Foi dada ênfase no desenvolvimento de emissores quânticos capazes de transmitir informações seguras usando propriedades quânticas da luz.

Para isso, foram explorados materiais como o grafeno e os hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAHs) como emissores quânticos. Suas propriedades únicas foram discutidas, mostrando potencial para comunicação quântica e outras aplicações. A ferramenta de simulação Columbus foi mencionada como útil na investigação das propriedades eletrônicas desses materiais.

Foi ressaltada a importância da colaboração entre academia, indústria e governo para impulsionar as tecnologias quânticas. A estratégia de selecionar cuidadosamente materiais e softwares de simulação precisos foi indicada como aceleradora do progresso. Investir em formação de especialistas e infraestrutura foi destacado como essencial para avançar nas capacidades quânticas, especialmente na área militar.

No geral, a pesquisa conjunta entre esses setores foi apontada como caminho para acelerar a aplicação das tecnologias quânticas em segurança, criptografia e comunicações. Isso pode levar a soluções inovadoras que beneficiarão diversas áreas.

## REFERÊNCIAS

- M. Krelina, "Quantum technology for military applications," *EPJ Quantum Technology*, vol. 8, no. 1, p. 24, 2021.
- H. Etkowitz and C. Zhou, "Hélice triplíce: inovação e empreendedorismo universidade-indústria-governo," *Estudos Avançados*, vol. 31, pp. 23-48, 2017.
- N. Gisin and R. Thew, "Quantum communication," *Nature Photonics*, vol. 1, no. 3, pp. 165-171, 2007.
- P. Senellart, G. Solomon, and A. White, "High-performance semiconductor quantum-dot single-photon sources," *Nature Nanotechnology*, vol. 12, no. 11, pp. 1026-1039, 2017.
- X. Liu and M. C. Hersam, "2D materials for quantum information science," *Nature Reviews Materials*, vol. 4, no. 10, pp. 669-684, 2019.
- X. Liu and M. C. Hersam, "2D materials for quantum information science," *Nature Reviews Materials*, vol. 4, no. 10, pp. 669-684, 2019.
- M. Pinheiro, F. B. C. Machado, F. Plasser, A. J. A. Aquino, and H. Lischka, "A systematic analysis of excitonic properties to seek optimal singlet fission: the BN substitution patterns in tetracene," *Journal of Materials Chemistry C*, vol. 8, no. 23, pp. 7793-7804, 2020.
- R. F. K. Spada, M. P. Franco, R. Nieman, A. J. A. Aquino, R. Shepard, F. Plasser, and H. Lischka, "Spin density calculation via the graphical unitary group approach," *Molecular Physics*, p. e2091049, 2022.
- H. Lischka, R. Shepard, R. M. Pitzer, I. Shavitt, M. Dallos, T. Müller, P. G. Szalay, M. Seth, G. S. Kedziora, S. Yabushita et al., "High-level multireference methods in the quantum-chemistry program system COLUMBUS: analytic MR-CISD and MR-AQCC gradients and MR-AQCC-LRT for excited states, GUGA spin-orbit CI and parallel CI density," *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 3, no. 5, pp. 664-673, 2001.