



MERYNILDA FERREIRA DE MIRANDA

**EMARANHAMENTO TÉRMICO E COERÊNCIA QUÂNTICA
DE UM ÚNICO ELÉTRON EM UM PONTO QUÂNTICO
DUPLO COM INTERAÇÃO RASHBA**

LAVRAS – MG

2022

MERYNILDA FERREIRA DE MIRANDA

**EMARANHAMENTO TÉRMICO E COERÊNCIA QUÂNTICA DE UM ÚNICO
ELÉTRON EM UM PONTO QUÂNTICO DUPLO COM INTERAÇÃO RASHBA**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós Graduação em Física, área de concentração em Matéria Condensada, para a obtenção do título de Mestre.

Prof. Dr. Moises Porfirio Rojas Leyva

Orientador

Prof. Dr. Onofre Rojas Santos

Coorientador

LAVRAS – MG

2022

**Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema de Geração de Ficha Catalográfica da Biblioteca
Universitária da UFLA, com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).**

Miranda, Merynilda Ferreira.

Emaranhamento térmico e coerência quântica de um único
elétron em um ponto quântico duplo com interação Rashba /
Merynilda Ferreira Miranda. - 2022.

90 p. : il.

Orientador(a): Moises Porfirio Rojas Leyva.

Coorientador(a): Onofre Rojas Santos.

Dissertação (mestrado acadêmico) - Universidade Federal de
Lavras, 2022.

Bibliografia.

1. Ponto Quântico Duplo. 2. Interação Rashba. 3. Coerência
Quântica. I. Leyva, Moises Porfirio Rojas. II. Santos, Onofre Rojas.
III. Título.

MERYNILDA FERREIRA DE MIRANDA

**EMARANHAMENTO TÉRMICO E COERÊNCIA QUÂNTICA DE UMÚNICO ELÉTRON
EM UM PONTO QUÂNTICO DUPLO COM INTERAÇÃO RASHBA**

**THERMAL ENTANGLEMENT AND QUANTUM COHERENCE OF A SINGLE
ELECTRON IN A DOUBLE QUANTUM DOT WITH RASHBA INTERACTION**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós Graduação em Física, área de concentração em Matéria Condensada, para a obtenção do título de Mestre.

APROVADA em 22 de Março de 2022.

Prof. Dr. Cleverson Figueiras UFLA
Prof. Dr. Clebson dos Santos Cruz UFOB



Prof. Dr. Moises Porfirio Rojas Leyva
Orientador



Prof. Dr. Onofre Rojas Santos
Co-Orientador

LAVRAS - MG

2022

Dedico este trabalho a minha avó paterna Otacilia Costa (in memoriam) e ao meu avô materno Osvaldo Furtado (in memoriam), que sempre estarão em minhas inspirações.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente, a Deus por toda força e perseverança que me concedeu para que conseguisse realizar mais uma etapa em minha formação acadêmica. Por conseguinte, agradeço a instituição UFLA (Universidade Federal de Lavras) e ao DFI (Departamento de Física) pela oportunidade. Ao Prof. Dr. Moisés Rojas por sua excelente orientação, paciência, dedicação e por todo conhecimento transmitido de uma forma tão clara. Como também ao Prof. Dr. Onofre Rojas, que sempre se mostrou disponível para me ajudar. Também agradeço aos membros da minha dissertação aos Prof. Dr. Saulo da Silva, Prof. Dr. Igor de Oliveira, Prof. Dr. Cleverson Filgueiras e Prof. Dr. Clebson dos Santos por tudo que contribuíram neste trabalho.

Agradeço a todos os meus familiares que me acompanharam nessa caminhada, que não me permitiram desistir. Especialmente, aos meus pais, Antônio Costa e Elzarina Furtado, por todo amor e apoio que sempre me proporcionaram. A minha irmã Jessica Miranda, que sempre me apoiou e encorajou a seguir o mestrado, mesmo que fosse distante de nossa casa. Não poderia deixar de citar os meus avós Otacilia Costa e Osvaldo Furtado, que sempre se orgulharam da pessoa que me tornei e o caminho que escolhi. Sei que de onde estiverem, estão felizes com mais essa conquista. Agradeço a um grande amigo que o mestrado me deu, Jesus Nunes, por todo conhecimento, risadas e apoio que me proporcionou. Por fim, mas não menos importante, ao meu namorado Tarciso Júnior, que me encorajou a seguir no mestrado, como também me proporcionou companheirismo, apoio e amizade. Agradeço muito a você e a sua família que são a minha também.

RESUMO

Nos últimos anos, o aperfeiçoamento das técnicas de produção de materiais permitiu grandes avanços e aplicações entre os dispositivos eletrônicos, devido as manipulações sobre a carga *e*/ou *spin* dos elétrons. Uma dessas aplicações, são os sistemas de baixa dimensionalidade, em particular, os pontos quânticos, que apresentam como característica principal o confinamento do elétron nas três dimensões espaciais. Nesta dissertação é proposto o estudo da coerência quântica térmica em um ponto quântico duplo semicondutor. Aqui consideramos um único elétron em um ponto quântico duplo com interação spin-órbita tipo Rashba na presença de um campo magnético externo. Expressões analíticas para concorrência térmica e coerência correlacionada são obtidas usando o formalismo da matriz densidade. O principal objetivo desta dissertação é proporcionar uma boa compreensão dos efeitos da temperatura, do parâmetro de tunelamento, do efeito Rashba e do desdobramento *Zeeman* na coerência quântica. Além disso, os nossos resultados mostram que podemos usar o acoplamento Rashba para sintonizar o emaranhamento térmico e a coerência quântica do sistema. E finalmente, nos concentramos no papel desempenhado pelo emaranhamento térmico e a coerência correlacionada responsável pelas correlações quânticas. Observamos que a coerência correlacionada é mais robusta que o emaranhamento térmico, de modo que algoritmos quânticos baseados apenas em coerência correlacionada podem ser mais fortes do que aqueles baseados no emaranhamento.

Palavras-chave: Ponto Quântico Duplo; Interação Rashba; Informação Quântica; Emaranhamento Térmico; Coerência Quântica.

ABSTRACT

In recent years, the improvement of materials production techniques allowed great advances and applications among electronic devices, due to manipulations on the charge and/or *spin* of electrons. One of these applications are low-dimensional systems, in particular, quantum dots, whose main characteristic is the confinement of the electron in three spatial dimensions. This dissertation proposes the study of thermal quantum coherence in a double semiconductor quantum dot. Here we consider a single electron in a double quantum dot with spin-orbit Rashba interaction in the presence of an external magnetic field. Analytical expressions for thermal concurrency and correlated coherence are obtained using the density matrix formalism. The main objective of this dissertation is to provide a good understanding of the effects of temperature, the tunneling parameter, the Rashba effect and *Zeeman* splitting on quantum coherence. Furthermore, our results show that we can use Rashba coupling to tune the thermal entanglement and quantum coherence of the system. And finally, we focus on the role played by thermal entanglement and the correlated coherence responsible for quantum correlations. We observe that correlated coherence is more robust than thermal entanglement, so quantum algorithms based only on correlated coherence can be stronger than those entanglement based.

Keywords: Double Quantum Dot; Rashba Interaction; Quantum Information; Thermal Entanglement; Quantum Coherence.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Foto por Microscopia de um ponto quântico semiconductor.	15
Figura 2.2 – Representação de um elétron confinado em um ponto quântico. . .	15
Figura 2.3 – Densidade de estados para semicondutores sob confinamento 0,1,2 e 3 dimensões.	16
Figura 2.4 – Na esquerda, temos uma imagem por microscopia eletrônica. Existem cinco eletrodos tensionados negativamente, responsáveis pela formação dos pontos quânticos. Eles se dividem: barreiras de tunelamento V_L, V_C, V_R e modificação de potencial $V_l V_r$. Um dos pontos se localiza no lado esquerdo (<i>left</i> – L) e outro no lado direito (<i>right</i> – R), estão entre a fonte (<i>Source</i> – S) e o dreno (<i>Drain</i> – D) e V_{SD} é a diferença de potencial. Na figura da direita, temos a representação do bloqueio de Coulomb.	20
Figura 3.1 – Ilustração de um poço quântico assimétrico, causado pela interação Rashba. A direção de crescimento está no eixo z	23
Figura 3.2 – Algumas das inúmeras aplicações que a interação <i>spin</i> -órbita tipo Rashba apresenta na spintrônica.	24
Figura 3.3 – Propriedade do espectro de energia de Rashba. Em a) temos o momento angular de <i>spin</i> bloqueado no momento linear; b) espectro de energia para um elétron livre; c) espectro de energia para um elétron na presença de um campo magnético e d) espectro de energia para um elétron na presença do efeito Rashba.	27
Figura 4.1 – Esfera de Bloch na representação de um <i>qubit</i> arbitrário $ \psi\rangle$ e dos <i>qubits</i> $ 0\rangle$ e $ 1\rangle$	31
Figura 4.2 – Distância mínima \mathcal{C} de um dado operador densidade $\hat{\rho}$ a um conjunto de operadores quânticos incoerentes \mathcal{I} . A elipse preta representa o conjunto de todos os estados quânticos e a elipse azul representa o conjunto dos estados incoerentes.	51
Figura 5.1 – Representação esquemática do modelo físico do ponto quântico duplo com interação Rashba α . O <i>spin</i> de um elétron é representado pela pequena esfera deslocalizada entre dois pontos quânticos. . . .	55

Figura 5.2 – Representação das possibilidades de localizar o elétron no sistema de ponto quântico duplo por efeito de tunelamento t , na presença de um campo magnético externo \vec{B}	56
Figura 5.3 – Representação das possibilidades da orientação do estado de <i>spin</i> e localização do elétron por intermédio do acoplamento de Rashba α , na presença do campo magnético externo \vec{B}	57
Figura 6.1 – Figura (a): o espectro de energia ε <i>versus</i> o parâmetro de desdobramento de Zeeman Δ , com dois casos particulares, $\alpha = 0$ e $t = 0$ (curvas tracejadas) e $\alpha = 0.1$ e $t = 2$ (curvas sólidas). Na figura (b) temos o comportamento da Concorrência $\mathcal{C}_{(T=0)}$ <i>versus</i> o parâmetro de desdobramento de Zeeman Δ , com valores fixos em α e $t = 2$. Ambos os gráficos para temperatura zero, $T = 0$	63
Figura 6.2 – Concorrência $\mathcal{C}_{(T=0)}$ <i>versus</i> o acoplamento de Rashba α . Para $t = 0$ (curvas sólidas) e $t = 2$ (curvas tracejadas), fixas em temperatura T zero. Aqui escolhemos, $\Delta = 0.5$ (curvas verdes), $\Delta = 2.0$ (curvas azuis) e $\Delta = 4.0$ (curvas vermelhas).	65
Figura 6.3 – Descrição da densidade de concorrência \mathcal{C} . Em (a) temos a concorrência <i>versus</i> temperatura T e parâmetro de tunelamento t , com valores fixos de $\Delta = 2$ e $\alpha = 1$. Em (b) temos a concorrência <i>versus</i> temperatura T e parâmetro do efeito Zeeman Δ , com valores fixos em $t = 0.5$ e $\alpha = 1$. A linha vermelha representa o contorno entre a região emaranhada (azul) e a região não emaranhada (branca).	68
Figura 6.4 – Concorrência \mathcal{C} em função do parâmetro da temperatura T na escala logarítmica para $\Delta = 2$ e $t = 1$. Aqui $\alpha = 1$ (curva vermelha), $\alpha = 2$ (curva verde) e $\alpha = 10$ (curva azul).	69
Figura 6.5 – Os efeitos térmicos sobre as populações do operador densidade $\hat{\rho}_{AB}(T)$. A curva azul corresponde a população ρ_{11} e a curva vermelha corresponde a população ρ_{22} . Consideramos os valores dos parâmetros $\Delta = 2$ e $t = 1$. Aqui as curvas sólidas correspondem a $\alpha = 0.1$ e as curvas tracejadas correspondem a $\alpha = 10$	70

Figura 6.6 – Coerência correlacionada C_{cc} representada pela curva azul e a concorrência C pela curva vermelha *versus* a temperatura T na escala logarítmica para diferentes valores do parâmetro θ . Em particular, fixamos os parâmetros em $\Delta = 2$, $t = 1$ e $\alpha = 10$. Nas Figuras (a) $\theta = 0$, (b) $\theta = \frac{\pi}{8}$, (c) $\theta = \frac{0,95\pi}{4}$ e (d) $\theta = \frac{\pi}{4}$ 73

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
2	PONTOS QUÂNTICOS	13
2.1	Heteroestruturas Semicondutoras	13
2.2	Pontos Quânticos	14
2.3	Pontos Quânticos Duplos	18
3	INTERAÇÃO DE RASHBA	21
3.1	Spintrônica	21
3.2	Interação <i>Spin-Órbita</i>	21
3.3	Efeito Rashba	22
4	COERÊNCIA QUÂNTICA E CORRELAÇÕES QUÂNTICAS	28
4.1	Informação Quântica	28
4.1.1	Esfera de Bloch	29
4.2	Operador Densidade	31
4.2.1	Descrição do Estado Puro na Representação do Vetor de Estado	32
4.2.2	Descrição do Estado Puro na Representação do Operador Densidade	33
4.2.3	Estado Misto	36
4.2.4	Operador Densidade Reduzido e Traço Parcial	38
4.3	Emaranhamento Quântico	39
4.3.1	Emaranhamento de Estados Puros	41
4.3.2	Emaranhamento de Estados Mistos	42
4.3.3	Crítério de Peres-Horodecki	44
4.3.4	Quantificadores de Emaranhamento	45
4.3.5	Emaranhamento de Formação e Concorrência	46
4.3.6	Emaranhamento Quântico Térmico	48
4.4	Coerência Quântica	48
4.5	Entropia Relativa da Coerência	51
4.6	Norma- l_1	52
4.7	Coerência Correlacionada	52
5	O MODELO	55
5.1	Descrição da Molécula Quântica com Interação Rashba	55
5.2	Função de Partição e Operador Densidade	60

6	RESULTADOS E DISCUSSÕES	62
6.1	Concorrência para $T = 0$	62
6.2	Concorrência para $T > 0$	66
6.3	Coerência Correlacionada	71
7	Considerações Finais	76
	REFERÊNCIAS	78
	APENDICE A – Elementos da Matriz Densidade no Banho Térmico	87
	APENDICE B – Concorrência para $T = 0$	89

1 INTRODUÇÃO

O final do século XX foi marcado por inúmeros avanços significativos na Física da Matéria Condensada devido ao desenvolvimento das *Heteroestruturas Semicondutoras* (CHO; ARTHUR, 1975). Mas precisamente, esse desenvolvimento está ligado a evolução das técnicas responsáveis pelas alterações nas propriedades ópticas e eletrônicas dos sistemas, em particular, os *Pontos Quânticos*-(PQs) (BIMBERG; GRUNDMANN; LEDENTSOV, 1999; MICHLER, 2009). Os pontos quânticos são estruturas cristalinas que se formam nas heteroestruturas e apresentam aos portadores de carga (elétrons e buracos¹) confinamento tridimensional em seu regime, suas dimensões se encontram na escala dos nanômetros (10^{-9} m) e por causa da redução de dimensão, exibem níveis de energia em casos discretos, caso similar aos átomos, são conhecidos também como átomos artificiais. Assumindo o controle sobre as características dos PQs, podemos realizar manipulações em suas propriedades ópticas e elétricas (PRADO, 2016), magnéticas (MADHAV; CHAKRABORTY, 1994) e termodinâmicas (FILGUEIRAS; ROJAS; ROJAS, 2020).

É possível construir pontos quânticos acoplados via tunelamento (BRACKER et al., 2006). Estes dispositivos chamados de *Ponto Quântico Duplo*-(PQD), *Molécula Artificial* ou *Molécula Quântica*, apresentam aplicações na computação e informação quântica (LOSS; DIVINCENZO, 1998; BENNETT; DIVINCENZO, 2000). Existem propostas para os pontos quânticos duplos usando somente a carga do elétron (GORMAN; HASKO; WILLIAMS, 2005b), seu estado de *spin* (BENITO et al., 2017; ANJOU; BURKARD, 2019) e até as duas características ao mesmo tempo (YANG; COPPERSMITH; FRIESEN, 2020; MIELKE; PETTA; BURKARD, 2021), como *qubit*². Um *qubit* é um sistema de dois níveis que exibe longos tempos de coerência suficiente para operações quânticas. Podem ser manipulados por campos magnéticos externos e conduzir informações quânticas (DOVICCHI, 1993).

A vantagem de usar o estado de *spin* em dispositivos eletrônicos, se deve ao fato de ser o candidato ideal para o *qubit*. As informações que o *spin* carrega podem ser compreendidas pela *Interação Spin-Órbita*-(ISO) (HENDRICKX et al., 2020; FRONING et al., 2021). A ISO é um fenômeno que esclarece a interação entre o *spin* com o movimento

¹ É a ausência de um elétron no cristal, fenômeno causado quando o elétron passa para a banda de valência.

² O bit quântico ou simplesmente *qubit* é o termo usado para um bit quântico de informação.

do elétron no material. Nos materiais semicondutores, a ISO apresenta dois tipos diferentes, ou seja, *Interação Spin-Órbita tipo Rashba* (BYCHKOV; RASHBA, 1984) e *Interação Spin-Órbita Dresselhaus* (DRESSELHAUS, 1955). A primeira se deve a falta de simetria de inversão na estrutura, enquanto a segunda é assimétrica de inversão em massa. O interesse no processamento da SOI tem aumentado nos últimos anos, à medida que um conjunto de aplicações foi relatado recentemente. Uma delas é a memória quântica acoplada à órbita de *spin* de um PQD (CHOTORLISHVILI et al., 2019). Recentemente, no trabalho (LI et al., 2018) relataram a influência do acoplamento Rashba em portas de *qubit* com transporte simultâneo em PQDs e o transporte do *spin* entre PQs vizinhos é afetado pela interação spin-órbita (GINZEL et al., 2020).

Por outro lado, a partir da teoria de recursos quânticos (STRELTSOV; ADESSO; PLENIO, 2017; CHITAMBAR; GOUR, 2019), temos, em particular, a *Coerência Quântica* e as *Correlações Quânticas* que representam aspectos da superposição quântica. O *Emaranhamento Quântico*, um caso particular das correlações quânticas, é o elemento central na teoria quântica. Ganhou o status de recurso físico disponível com o advento da teoria quântica da informação (CHUANG, 2010) apresentando aplicações na informação quântica (BENNETT et al., 1996; BENNETT; DIVINCENZO, 2000), criptografia quântica (BENNETT, 1992; CAMARGO et al., 2016), teletransporte quântico (QIN; TIAN; YANG, 2013; ROJAS; SOUZA; ROJAS, 2017; FREITAS; FILGUEIRAS; ROJAS, 2019), codificação quântica (SCHUMACHER, 1995; GULLANS et al., 2021), supercondutividade (KEIMER et al., 2015), transição de fase quântica (VOJTA, 2003), fundamentos da mecânica quântica (KENYON, 2019), biologia quântica (LI et al., 2012), e outros (AMICO et al., 2008).

Diferente das correlações quânticas, que são definidas a partir dos subsistemas que formam o sistema total, a coerência quântica é definida a partir de um sistema simples, um único sistema (BAUMGRATZ; CRAMER; PLENIO, 2014). A coerência quântica é fundamental para o surgimento do emaranhamento assim como de outras correlações quânticas, como é o caso da discórdia quântica (OLLIVIER; ZUREK, 2001). É um recurso físico para a computação quântica e informação quântica (MA et al., 2016), transporte quântico (HUELGA; PLENIO, 2013; LEVI; MINTERT, 2014), física de nanoescala (KARLSTRÖM et al., 2011; VAZQUEZ et al., 2012) e outros (DEVEAUD; QUATTROPANI; SCHWENDIMANN, 2009). Várias medidas da coerência quântica

foram propostas e suas propriedades foram investigadas em detalhes ao longo dos anos (BAUMGRATZ; CRAMER; PLENIO, 2014; ALEINER; BROUWER; GLAZMAN, 2002). Recentemente, uma nova medida chamada *Coerência Correlacionada* foi introduzida para investigar a relação entre a coerência quântica e as correlações quânticas. A coerência correlacionada é uma medida de coerência com as partes locais removidas, ou seja, toda a coerência no sistema é armazenada inteiramente dentro das correlações quânticas (TAN et al., 2016; KRAFT; PIANI, 2018).

Dessa forma, este trabalho tem como foco, estudar o emaranhamento térmico e a coerência quântica, em particular, coerência correlacionada, de um elétron confinado em um sistema eletrônico de ponto quântico duplo com interação tipo Rashba. O roteiro para quantificar o emaranhamento quântico, como também a coerência correlacionada, é usar o formalismo do operador densidade no equilíbrio térmico, a partir disso, calculamos a concorrência, bem como a coerência correlacionada do nosso modelo e fundamentalmente, a eficiência do parâmetro de Rashba para melhorar o desempenho térmico do emaranhamento quântico. O presente trabalho é dividido da seguinte forma: no capítulo 2 apresentamos uma revisão sobre os pontos quânticos. No capítulo 3 apresentamos uma revisão a respeito da interação *spin*-órbita tipo Rashba. No capítulo 4 introduzimos as correlações quânticas e a coerência quântica, seus possíveis quantificadores, como também mostramos o formalismo do operador densidade e um breve comentário sobre a informação quântica. No capítulo 5, apresentamos o nosso modelo quântico, como também uma breve revisão sobre a função de partição, operador densidade no equilíbrio térmico e o emaranhamento térmico. No capítulo 6 discutimos os resultados mais interessantes do comportamento do emaranhamento, populações e coerência correlacionada levando em conta os efeitos da temperatura, acoplamento Rashba, desdobramento *Zeeman* e o parâmetro de tunelamento. Por fim, no capítulo 7 apresentamos nossas conclusões.

2 PONTOS QUÂNTICOS

2.1 Heteroestruturas Semicondutoras

A nanociência estuda os princípios fundamentais (átomos e moléculas) em dimensões nanométricas (MELO; PIMENTA, 2010). Suas técnicas e aplicações são empregadas na nanotecnologia que se diversifica nas áreas da física, engenharia, eletrônica, computação, química, biologia, medicina, etc. A iniciativa de estudar materiais na escala atômica não é recente, pois o físico Richard Phillips Feynman, durante uma conferência, afirmou que havia muito espaço “*lá embaixo*”, falando sobre os átomos e moléculas. A discussão girava em torno da dificuldade de manipulação e controle dos materiais nanométricos, mencionando assim, uma revolução tecnológica. Chegou-se no ponto de que assumindo o controle sobre o átomo, seria possível desenvolver uma variedade maior de aplicações nos materiais. A viabilidade da nanociência e nanotecnologia foi possível devido ao desenvolvimento de ferramentas tecnológicas que permitiram a capacidade de manipulação e obtenção de imagens, como o microscópio de varredura por tunelamento eletrônico, que utiliza o tunelamento de elétrons para geração de imagens de superfície em um computador (GOLDSTEIN et al., 2017). Essa revolução tecnológica foi possível graças a Mecânica Quântica, que lida com fenômenos físicos em escalas atômicas.

Os materiais semicondutores ganharam uma atenção maior após a demonstração do efeito transistor em 1947 pelos físicos J. Bardeen e W. Brattain (BARDEEN; BRATTAIN, 1948), que é considerada uma das mais importantes descobertas na área da matéria condensada. Uma melhoria no transistor ocorreu após dois anos, com a iniciação de pesquisas em materiais monocristalinos que se tornaram os mais utilizados. Até o final dos anos 1950, os materiais eram do tipo *bulk* e em 1970, começa o desenvolvimento de materiais nanoestruturados. A proposta de fabricação e junção de materiais diferentes, foi apresentada pelos físicos L. Esaki e R. Tsu em 1970 (ESAKI L. E TSU, 1970), que abriram caminho para o desenvolvimento de trabalhos tanto experimentais quanto teóricos, com o intuito de compreender a natureza dos estados ópticos e eletrônicos das junções de materiais nanoestruturados. Esses materiais ficaram conhecidos como sistemas híbridos e denominados de heteroestruturas semicondutoras.

As heteroestruturas semicondutoras são materiais com estruturas e composições diferentes, interligados na mesma área de interação, que chamamos de heterojunção¹. Essa interação permite o controle dos parâmetros como a banda de energia, locomobilidade de cargas e outros (BUENO et al., 2019). O objetivo de intercalar os materiais se deve a capacidade de exploração do movimento dos elétrons na estrutura do material, onde a restrição de incompatibilidade da rede cristalina é eliminada. Independente da técnica, a quantização do movimento é realizada pela diferença entre os parâmetros dos materiais no processo de fabricação. Através da técnica de Epitaxia por Feixe Molecular (do inglês-*Molecular Beam Epitaxy*- MBE)², pode-se construir heteroestruturas com níveis de energia quantizadas na direção de crescimento do material, e assim, apresentar liberdade nas outras direções espaciais. Pela técnica de MBE temos os *Poços Quânticos* (OLIVEIRA et al., 1995), *Fios Quânticos* (OLIVEIRA et al., 2005) e os *Pontos Quânticos* (BIMBERG; GRUNDMANN; LEDENTSOV, 1999; MICHLER, 2009). Atualmente, se busca o entendimento, compreensão e controle dos fenômenos quânticos associados a essas heteroestruturas.

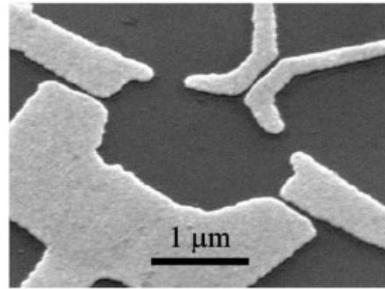
2.2 Pontos Quânticos

Os pontos quânticos-(PQs) são nanopartículas de materiais semicondutores e seus tamanhos variam de 100 nm a 500 nm, conforme a Figura 2.1. Os materiais nanoestruturados são formados por milhares de átomos e apresentam propriedades ópticas e elétricas muito interessantes para os sistemas de baixa dimensionalidade. A maioria de suas propriedades dependem do seu tamanho, forma e composição. A propriedade comum a todos os pontos quânticos é a corrente que percorre por ele ou a capacitância entre seus terminais, ser variável em várias ordens de magnitude quando sua carga é alterada por um único elétron (MICHLER, 2009).

¹ É a interface entre dois materiais no estado sólido, incluindo estruturas cristalinas e informe de materiais semicondutores, condutores e isolantes.

² Consiste no crescimento de camadas de cristais sobre um substrato, geralmente aquecido e sob condições de ultra alto vácuo (UHV), submetido a uma fonte térmica de evaporação, onde a camada crescida apresenta as mesmas condições e estrutura do seu substrato.

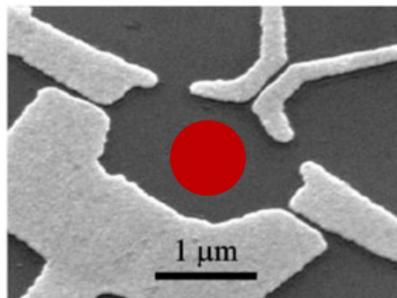
Figura 2.1 – Foto por Microscopia de um ponto quântico semiconductor.



Fonte: Extraído de (SILVA, 2013).

Devido a redução, o elétron inserido em um sistema de PQ é confinado nas três dimensões espaciais, Figura 2.2. Uma das alterações que o confinamento quântico causa é a mudança na densidade de estado³ do material. Quando o elétron é confinado no PQ, apresenta níveis de energia em valores discretos, caso similar aos átomos, logo, os PQs também são chamados de átomos artificiais (ASHOORI, 1996).

Figura 2.2 – Representação de um elétron confinado em um ponto quântico.

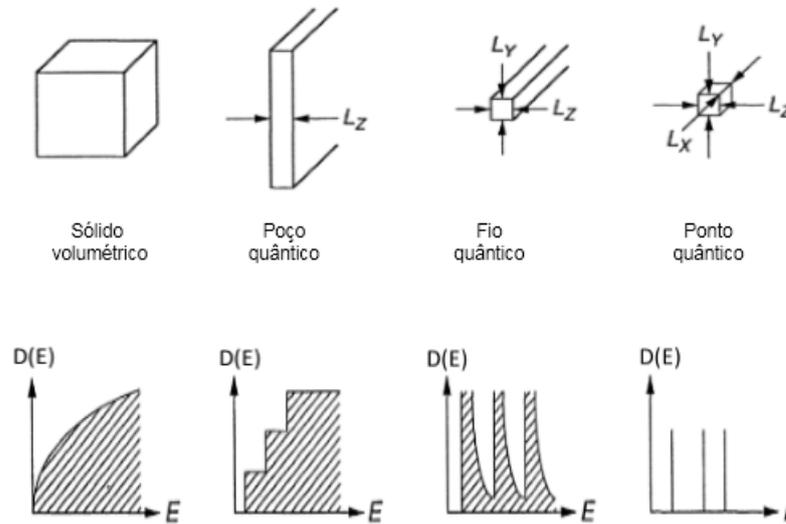


Fonte: Modificado de (SILVA, 2013).

Na Figura 2.3, observamos os efeitos na redução dimensional da densidade de estados. Para o sólido volumétrico a densidade de estados é uma função contínua. Na situação do poço quântico notamos uma quebra na continuidade da função. Para o fio quântico a densidade de estados é caracterizada por singularidades e para o ponto quântico é dado por uma série de funções deltas, como nos átomos, depende apenas do número de níveis confinados.

³ Esse parâmetro físico é uma função que descreve o número N de estados disponíveis por energia em relação a unidade de volume, representado pela expressão: $g(E) = \frac{2}{V} \frac{dN}{dE}$. O número 2 está relacionado ao fato de que dois *spins* opostos podem ocupar cada estado de energia, ou seja, Princípio da exclusão de Pauli, e V é o volume total do material ou cristal.

Figura 2.3 – Densidade de estados para semicondutores sob confinamento 0,1,2 e 3 dimensões.



Fonte: Extraído de (HERMAN; SITTE, 2013).

O potencial do núcleo do ponto quântico é substituído pelo potencial de confinamento, resultando em uma forte quantização dos níveis de energia que podem ser controlados mudando o tamanho, forma, e a profundidade do poço de potencial. Os PQs são manipulados externamente por sua estrutura eletrônica, modificação estrutural e por campos elétricos externos. Ademais, podemos utilizá-los para simular átomos ou moléculas, para manipular os elétrons (SZAFRAN, 2020). O confinamento do elétron pode ser calculado pelo poço de potencial em mecânica quântica, através da equação de Schrodinger (COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOE, 1986)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi + V_z \psi = \varepsilon \psi, \quad (2.1)$$

\hbar é a constante de Planck, m é a massa do elétron, ψ é a função de onda, V_z é o potencial e ε é a energia do sistema.

Pelo método de separação de variáveis, teremos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_x}{\partial x^2} = \varepsilon_x \psi_x, \quad (2.2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_y}{\partial y^2} = \varepsilon_y \psi_y. \quad (2.3)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_z}{\partial z^2} + V_z \psi_z = \varepsilon_z \psi_z, \quad (2.4)$$

As equações (2.2) e (2.3), podem ser escritas da seguinte forma

$$\frac{\partial^2 \psi_x}{\partial x^2} + k_x^2 \psi_x = 0, \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial^2 \psi_y}{\partial y^2} + k_y^2 \psi_y = 0, \quad (2.6)$$

onde $k_{x,y}^2 = \frac{2m\varepsilon_{x,y}}{\hbar^2}$ e suas respectivas energias: $\varepsilon_{x,y} = \frac{k_{x,y}^2 \hbar^2}{2m}$. As soluções das equações (2.5) e (2.6), podem ser dadas pelas soluções da partícula livre

$$\psi_x = e^{ik_x x}, \quad (2.7)$$

$$\psi_y = e^{ik_y y}. \quad (2.8)$$

Para a eq. (2.4)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_z}{\partial z^2} - (\varepsilon_z - V_z) \psi_z = \frac{\partial^2 \psi_z}{\partial z^2} + k_z^2 \psi_z = 0, \quad (2.9)$$

em que $k_z^2 = \frac{2m(\varepsilon_z - V_z)}{\hbar^2}$. A solução da eq. (2.9), é dada pela solução do oscilar harmônico

$$\psi_z = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n_z \pi}{a}\right), \quad (2.10)$$

o termo $\sqrt{\frac{2}{a}}$ é resultado da normalização da função de onda e a é a espessura do poço de potencial. Assim, sua energia

$$\varepsilon_z = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2} n_z^2. \quad (2.11)$$

A energia total do sistema

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) + \varepsilon_z^{n_z}. \quad (2.12)$$

O elétron confinado em um poço quântico tem seu espectro de energia alterado e somente alguns valores são permitidos, ou seja, para cada estado permitido o elétron pode mover-se nas direções x e y , no entanto, não na direção z , como vemos na eq. (2.12). Temos energia contínua nas direções $x - y$, somadas a energia discreta na direção z . Notamos que o movimento do elétron e a energia associada tornaram-se quantizadas e o sistema comporta-se dinamicamente como um sistema bidimensional, fenômeno que descreve a formação de poços quânticos. Para os fios quânticos temos um sistema unidimensional com movimento somente na direção x . A sua energia

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m}k_x^2 + \varepsilon_y^{n_y} + \varepsilon_z^{n_z}. \quad (2.13)$$

E por fim, para os pontos quânticos a energia é dada por

$$\varepsilon = \varepsilon_x^{n_x} + \varepsilon_y^{n_y} + \varepsilon_z^{n_z}, \quad (2.14)$$

com $n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3$. Comparando a eq. (2.12) com a eq. (2.14), notamos que a primeira descreve a quantização parcial da energia, enquanto que a eq. (2.14) mostra que a energia foi completamente discretizada nas três direções, confirmando a similaridade dos pontos quânticos com os átomos reais. As aplicabilidades dos pontos quânticos se diversificam em marcadores biológicos (MCHUGH et al., 2019), medicina diagnóstica (YONG et al., 2007), LEDs (SANDRI et al., 2017), transistores, células solares, informação quântica (LOSS; DIVINCENZO, 1998; DIVINCENZO, 2005) e outros (BENITO et al., 2017; ANJOU; BURKARD, 2019).

2.3 Pontos Quânticos Duplos

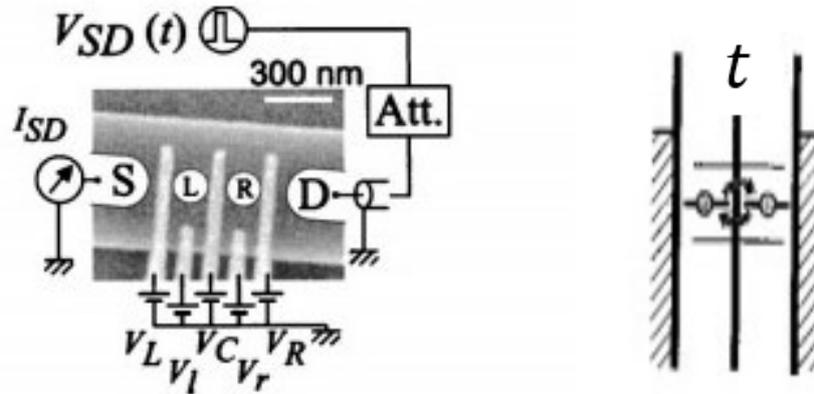
Com base no que foi apresentado na subseção anterior, podemos agora apresentar os sistemas formados por mais de um ponto quântico. Quando temos dois ou mais pontos quânticos acoplados por tunelamento, denominamos de ponto quântico duplo-(PQD) ou simplesmente de molécula artificial ou quântica (GORMAN; HASKO; WILLIAMS, 2005a). O acoplamento de tunelamento entre eles é controlado externamente pela diferença de potencial, e uma série de fenômenos podem ser estudados por conta desse controle (LI; YOU, 2014; GINZEL et al., 2020). Nos PQDs temos a liberdade de manipular tanto a carga do elétron quanto o estado de *spin*, como também, os

dois ao mesmo tempo. Atualmente, existem inúmeras propostas de aplicações dos PQDs devido serem de fácil integração com a eletrônica existente e a vantagem de escalabilidade (ITAKURA; TOKURA, 2003), como também apresentam propostas de medição do emaranhamento quântico de dois elétrons confinados em pontos quânticos duplos acoplados (SZAFRAN, 2020). São aplicados no teletransporte quântico (QIN; TIAN; YANG, 2013), ruído quântico (PURKAYASTHA et al., 2020), pontos quânticos multieletrônicos (RAO; GHOSH; PANIGRAHI, 2008), correlações quânticas térmicas em dois *qubits* de carga de pontos quânticos duplos acoplados (FILGUEIRAS; ROJAS; ROJAS, 2020). Mais recente, um projeto conceitual para máquinas de calor quântico foi estabelecido usando dois sistemas de pontos quânticos duplos acoplados como substância de trabalho (OLIVEIRA; ROJAS; FILGUEIRAS, 2021).

De acordo com o trabalho de Hayashi e colaboradores (FUJISAWA; HAYASHI; HIRAYAMA, 2004), podemos compreender o funcionamento de um ponto quântico duplo eletrônico a partir de sua interação com uma fonte, encarregada de fornecer uma corrente de elétrons ao sistema, um dreno, responsável pela medida da corrente após sua saída. Este PQD foi crescido a partir de uma heteroestrutura de *GaAs-AlGaAs*, seu formato foi dado por portas metálicas V_L, V_C, V_R, V_l e V_r na presença de um gás de elétrons, conforme a Figura 2.4. O elétron é manipulado a partir da diferença de potencial V_{SD} , que pode ser entendido da seguinte forma: após o início do sistema, V_{SD} é desligado, $V_{SD} = 0$, o PQD pode ser ajustado no regime de bloqueio de Coulomb⁴, Figura 2.4. Neste caso, o parâmetro de acoplamento de tunelamento t , evita que o elétron entre ou saia do sistema, permitindo apenas que oscile do ponto quântico esquerdo (L, do inglês-*Left*) ao direito (R, do inglês-*Right*) e vice-versa. Durante essa manipulação, temos a formação de um sistema artificial de dois níveis, onde o elétron ocupa o ponto quântico da esquerda $|L\rangle$ ou o ponto da direita $|R\rangle$, situação essa que define, o *qubit* de carga no PQD.

⁴ A partir de condições apropriadas, onde existe apenas tunelamento entre os pontos quânticos, interações de Coulomb isolam de forma eficaz o PQD da fonte e do dreno, fazendo com que o elétron fique oscilando somente na estrutura do ponto quântico duplo.

Figura 2.4 – Na esquerda, temos uma imagem por microscopia eletrônica. Existem cinco eletrodos tensionados negativamente, responsáveis pela formação dos pontos quânticos. Eles se dividem: barreiras de tunelamento V_L, V_C, V_R e modificação de potencial V_l, V_r . Um dos pontos se localiza no lado esquerdo (*left* – L) e outro no lado direito (*right* – R), estão entre a fonte (*Source* – S) e o dreno (*Drain* – D) e V_{SD} é a diferença de potencial. Na figura da direita, temos a representação do bloqueio de Coulomb.



Fonte: Extraído de (FUJISAWA; HAYASHI; HIRAYAMA, 2004).

Após a manipulação, V_{SD} é religado causando o tunelamento do elétron ao dreno para gerar a medida da corrente. Não levando em consideração o tempo de manipulação, ocorre a formação de dois níveis eletrônicos no sistema de PQD, que para nosso caso, veremos com mais detalhes sobre esses níveis no capítulo 5.

No desenvolvimento do nosso ponto quântico duplo, estamos interessados no regime de bloqueio de Coulomb, pois a partir dele, iremos realizar manipulações e observações no comportamento da carga e do estado de *spin* do elétron. Na próxima seção, iremos estudar um tipo de manipulação chamada de acoplamento *spin*-órbita tipo Rashba, que será acrescentada ao nosso modelo.

3 INTERAÇÃO DE RASHBA

3.1 Spintrônica

Os fenômenos relacionados ao *spin* do elétron apresentam aspectos importantes à teoria quântica (HENDRICKX et al., 2020; FRONING et al., 2021). Nas últimas décadas, a busca por uma alternativa aos materiais semicondutores convencionais, que se baseiam na carga do elétron, resultou em uma nanotecnologia denominada Spintrônica, que utiliza o *spin* do elétron para produzir um novo tipo de corrente que os circuitos integrados podem processar como informação. A spintrônica surgiu para aprimorar os dispositivos eletrônicos baseando-se tanto na carga, quanto no *spin* para detecção, armazenamento, transporte e processamento de informação quântica. Oferecendo aumento de velocidade no processamento, diminuição no consumo de energia e densidades de integração mais potentes do que as convencionais (IGOR; FABIAN; SARMA, 2004).

A partir do confinamento do elétron em pontos quânticos, suas propriedades podem ser controladas externamente e a dinâmica do *spin* pode executar operações como *qubit*. Mas isso só é possível se a quantização do movimento do elétron inibir a relaxação do *spin* e dos processos de decoerência, fazendo com que o estado do *spin* seja coerente em uma escala de tempo maior que nanosegundos (VELDHORST et al., 2014). Para considerar o estado de *spin* no ponto quântico duplo é necessário compreender os processos que podem induzir a relaxação no sistema. Um tempo longo é essencial para que o estado do *spin* durante o processo de transporte se mantenha uniforme, ou seja, não perca informações quânticas. Uma das causas de relaxação é a Interação *Spin-Órbita* (HENDRICKX et al., 2020; FRONING et al., 2021).

3.2 Interação *Spin-Órbita*

A interação *spin-órbita*-(ISO) é o acoplamento que surge entre o momento de dipolo magnético do *spin* do elétron com o campo magnético induzido por um campo elétrico \vec{E} local. O \vec{E} pode ser aplicado externamente na estrutura do material ou pode surgir por conta de imperfeições em sua estrutura (SCHLIEMANN, 2017). Um exemplo a respeito do surgimento da ISO pode ser analisado através de um gás de elétrons formado na interface de uma heteroestrutura, devido a diferença no *gap* de

energia dos materiais ocorre uma distorção no potencial, logo, os elétrons sentem um \vec{E} perpendicular ao seu movimento. Com isso, é induzido um campo magnético \vec{B}_{ind} e o *spin* se acopla a este campo gerando a interação que conhecemos por *spin*-órbita. A característica fundamental da ISO é que os elétrons experimentam mesmo na ausência de um campo magnético, um campo magnético efetivo que se acopla ao momento magnético do elétron. Em situações parecidas, os auto estados permitidos ao elétron podem ter a degenerescência de *spin* levantada tanto pela influência de um campo magnético externo aplicado ao material, conhecido como desdobramento *Zeeman*, como também pela ISO (MANCHON et al., 2015).

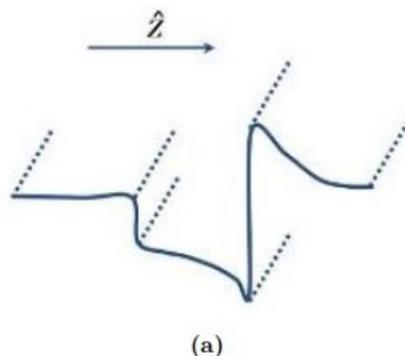
A interação *spin*-órbita em semicondutores consiste em dois casos distintos que são a interação Rashba (BYCHKOV, 1984) e interação Dresselhaus (DRESSELHAUS, 1955). A interação Rashba é o resultado da ISO em um sólido que apresenta inversão assimétrica na estrutura do potencial de confinamento (*Structural Inversion Asymmetry* - SIA), enquanto a interação Dresselhaus ocorre quando a assimetria vem da estrutura da rede cristalina (*Bulk Inversion Asymmetry* - BIA). Por conta da SIA e BIA há um aumento considerável das possibilidades de realização de alterações nas propriedades eletrônicas ou ópticas do material (LI et al., 2018; CHOTORLISHVILI et al., 2019; GINZEL et al., 2020).

3.3 Efeito Rashba

Em 1960 Emmanuel I. Rashba mostrou que a quebra de simetria gerava outro acoplamento *spin*-órbita, conhecido como SIA, ou simplesmente, efeito Rashba, acoplamento Rashba ou interação Rashba (BYCHKOV, 1984). Percebeu-se que a degenerescência do *spin* poderia ser quebrada tanto pela assimetria BIA, como também pela falta de simetria ao longo da direção de crescimento da heteroestrutura que hospeda um gás de elétron bidimensional, veja a Figura 3.1. Uma das causas para o surgimento do efeito Rashba se deve ao aparecimento de imperfeições interfaciais no crescimento do material que não foi dopado com a mesma concentração do elemento dopante, com isso, surge na região de confinamento, que também é a região de crescimento da heteroestrutura, gradiente de potencial. Esse gradiente induz um campo elétrico, que gera uma distorção local da função de onda e como consequência, quebra a simetria das bandas eletrônicas por conta da falta de simetria no potencial de confinamento.

Esse efeito também pode ser obtido por meio de campos elétricos externos sobre a heteroestrutura (MANCHON et al., 2015).

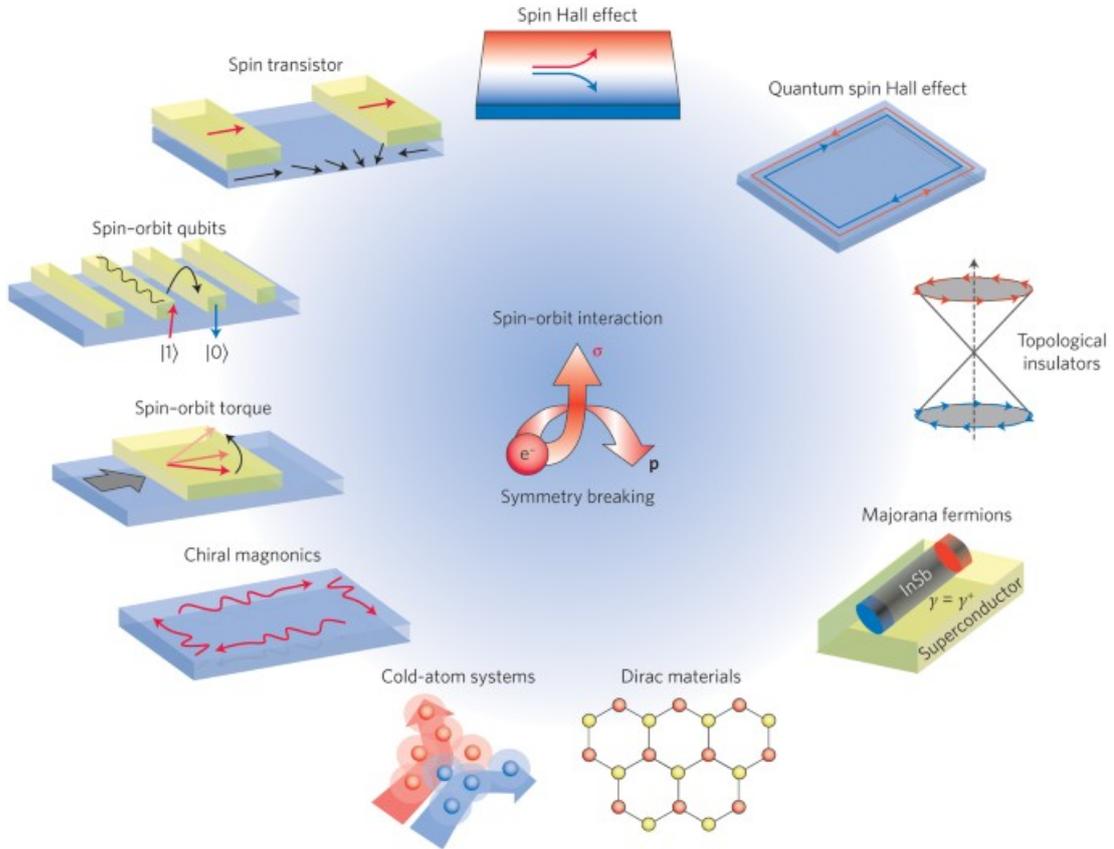
Figura 3.1 – Ilustração de um poço quântico assimétrico, causado pela interação Rashba. A direção de crescimento está no eixo z .



Fonte: Extraído de (RIBEIRO, 2018).

Atualmente, a exploração do efeito Rashba está no centro de pesquisas da spintrônica, como é o caso da proposta de um transistor de efeito de campo de *spin* (DATTA; DAS, 1990), construção de *qubits* para dispositivos quânticos topológicos (WANG et al., 2018a), preservação da informação e controle sobre o *qubit* (MUTTER; BURKARD, 2021), polarização de *spins* em pontos quânticos (NOWAK; SZAFRAN, 2013), controle sobre a interação de troca entre elétrons em pontos quânticos duplos (LIU et al., 2018), influência de Rashba em portas de *qubit* com transporte simultâneo em pontos quânticos duplos (LI et al., 2018) e outros (SILVA; ROCCA, 2003; POSZWA, 2018). Assumir o controle é extremamente importante à física do *spin* para desenvolver tecnologias baseados no seu funcionamento.

Figura 3.2 – Algumas das inúmeras aplicações que a interação *spin*-órbita tipo Rashba apresenta na spintrônica.



Fonte: Extraído de (MANCHON et al., 2015).

Podemos desenvolver o Hamiltoniano de Rashba, por meio das equações básicas do eletromagnetismo. Partindo da ideia de um elétron livre em um material, com massa m , *spin* σ e velocidade \vec{v} perpendicular a um campo elétrico $\vec{E} = -E_0\hat{z}$, esse elétron experimenta um campo magnético induzido \vec{B}_{ind} dado por

$$\vec{B}_{ind} = \frac{\vec{v} \times \vec{E}}{c^2}, \quad (3.1)$$

onde c^2 é a velocidade da luz. Lembrando que o momento magnético do elétron é $\frac{\mu_B \vec{\sigma}}{2}$, e se acopla com \vec{B}_{ind} , gerando a ISO, em particular, a interação *spin*-órbita tipo Rashba, descrita pelo Hamiltoniano

$$\hat{H}_R = \frac{\mu_B}{2} \vec{B}_{ind} \cdot \vec{\sigma}, \quad (3.2)$$

substituindo a eq. (3.1) na eq. (3.2), teremos

$$\hat{H}_R = \frac{\mu_B}{2mc^2} (\vec{p} \times \vec{E}) \cdot \vec{\sigma}. \quad (3.3)$$

O elétron movimentar-se no plano $x - y$, com isso, podemos escrever o momento do elétron em termo de suas componentes $\vec{p} = \vec{p}_x \hat{x} + \vec{p}_y \hat{y}$, logo, o Hamiltoniano de Rashba assume a seguinte forma

$$\hat{H}_R = \frac{\mu_B E_0}{2mc^2} (\vec{p} \times \hat{z}) \cdot \vec{\sigma}, \quad (3.4)$$

podendo ser reescrito da seguinte maneira

$$\hat{H}_R = \alpha (\vec{p} \times \hat{z}) \cdot \vec{\sigma}, \quad (3.5)$$

onde $\alpha = \frac{\mu_B E_0}{2mc^2} = \frac{\mu_B}{2mc^2} \frac{\partial V}{\partial z}$. Ou mais explicitamente

$$\hat{H}_R = \alpha (\sigma_x \vec{p}_y - \sigma_y \vec{p}_x) \hat{z}, \quad (3.6)$$

em que $\sigma_{x,y}$ são as matrizes de *Pauli*.

Em nosso modelo, proposto nessa dissertação, vamos trabalhar apenas com o acoplamento de Rashba atuando na direção x e com isso teremos uma interação *spin*-órbita tipo Rashba unidimensional

$$\hat{H}_R = -\alpha \sigma_y \vec{p}_x \hat{z}. \quad (3.7)$$

O acoplamento de Rashba α é o termo de proporcionalidade das equações (3.6) e (3.7). É independente da direção de crescimento da heteroestrutura, é invariante sob rotações no plano $x - y$ do material, além de ser proporcional ao gradiente de potencial, logo, pode ser manipulado externamente. A partir da falta de simetria no potencial de confinamento, podemos manipular os estados de *spin* por intermédio da variação do potencial aplicado no ponto quântico ou ponto quântico duplo através de eletrodos (NITTA et al., 1997). A interação *spin*-órbita provoca mudanças no espectro de energia, surgimento de pontos de anti-cruzamentos (*ant-crossings*) entre as energias, provoca mistura de estados de *spins*, como também causa a quebra da degenerescência deles.

À vista disso, gostaríamos de apresentar como se dá esse ultimo efeito. Para isso, consideramos um gás de elétrons bidimensional na presença da interação de Rashba, eq. (3.6). portanto, o Hamiltoniano desse sistema será

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \alpha (\sigma_x \vec{p}_y - \sigma_y \vec{p}_x) \hat{z}, \quad (3.8)$$

onde temos, energia cinética do elétron somada a contribuição do efeito Rashba. Diagonalizando o Hamiltoniano, encontramos as auto energias do sistema

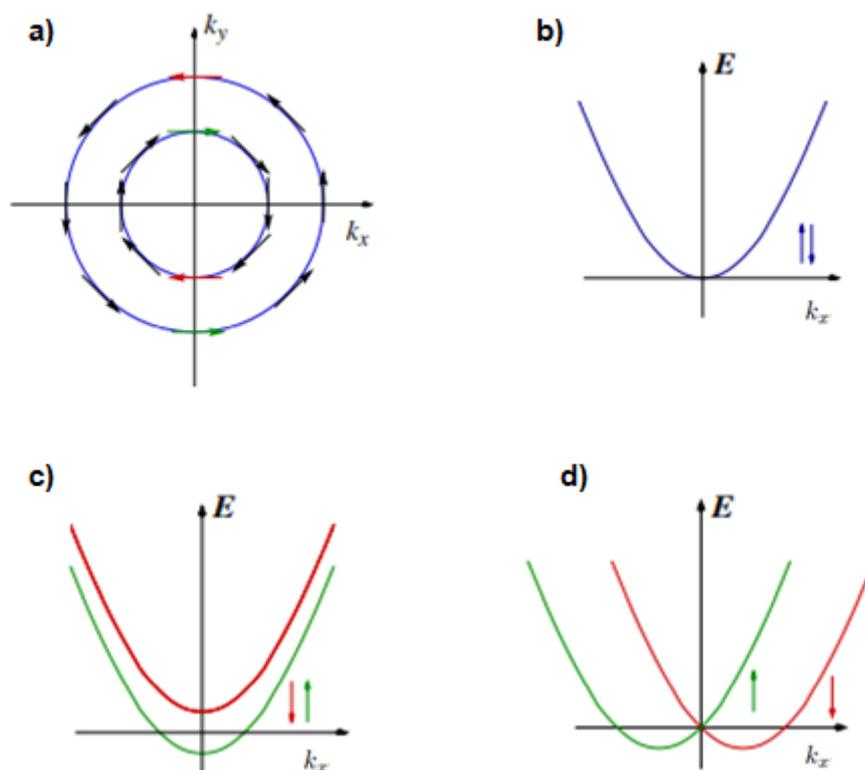
$$E_{\pm} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \alpha k, \quad (3.9)$$

no qual, $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$. Os auto estados são dados por ondas planas

$$|\psi_{\pm}\rangle = \frac{e^{ik \cdot r}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i e^{-i\theta} \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

Se o elétron se movimenta na direção x o estado do *spin* se apresenta na forma *up* $|\uparrow\rangle$ e *down* $|\downarrow\rangle$, similar para a direção y , (veja na Figura 3.3 a)). Nas Figuras 3.3 b)-d), apresentamos o espectro de energia E em função do momento k_x para um gás de elétrons em situações diferentes. Em b), para uma partícula livre o espectro de energia é duplamente degenerado. Já em c), na presença de um campo magnético, a degenerescência é eliminada pelo desdobramento *Zeeman* e há formação de lacunas entre os estados de *spins*. Por outro lado, na presença do efeito Rashba, d), a degenerescência é removida, no entanto, sem aberturas de lacunas entre os estados. (BERCIOUX; LUCIGNANO, 2015).

Figura 3.3 – Propriedade do espectro de energia de Rashba. Em a) temos o momento angular de *spin* bloqueado no momento linear; b) espectro de energia para um elétron livre; c) espectro de energia para um elétron na presença de um campo magnético e d) espectro de energia para um elétron na presença do efeito Rashba.



Fonte: Extraído de (BERCIOUX; LUCIGNANO, 2015).

A partir do que foi apresentado, iremos desenvolver nossa pesquisa com a presença da interação de Rashba, pois ela é crucial para o desenvolvimento do nosso estudo assim como para nossos futuros resultados.

4 COERÊNCIA QUÂNTICA E CORRELAÇÕES QUÂNTICAS

Coerência quântica e correlações quânticas representam aspectos da superposição quântica. Enquanto que as correlações quânticas são definidas em um sistema que envolve, pelo menos, dois subsistemas (SUN; MAO; LUO, 2017), a coerência quântica pode ser definida por um único sistema (BAUMGRATZ; CRAMER; PLENIO, 2014), mesmo com suas particularidades, esses dois conceitos estão relacionados entre si. Tanto a coerência quântica quanto as correlações quânticas são recursos físicos valiosos para várias áreas da mecânica quântica, como a informação e computação quântica (BENNETT; DIVINCENZO, 2000). Iniciaremos este capítulo com alguns tópicos da informação quântica que são essenciais para compreensão deste trabalho.

4.1 Informação Quântica

Nas últimas décadas, as áreas de computação quântica e informação quântica passaram por um acelerado desenvolvimento. Tudo se iniciou em 1982, com o físico Richard Feynman, onde levantou o fato de que os sistemas clássicos não eram capazes de modelar de forma eficiente os sistemas quânticos e estes só poderiam ser descritos por meio de sistemas quânticos. Três anos após, o físico Deutsch (DEUTSCH, 1985) mostrou a possibilidade em desenvolver computadores quânticos com uma capacidade maior de processamento comparado aos computadores clássicos. No ano de 1994 o matemático Peter Shor (SHOR, 1994) publica sua proposta referente ao algoritmo quântico, com a finalidade de fatoração de números inteiros grandes. A partir desse marco na informação quântica, as pesquisas na área não pararam e tem despertado enorme interesse por conta de inúmeras aplicações em diversos setores. Atualmente, algumas áreas como física do estado sólido, óptica quântica, ressonância magnética nuclear e outras, estão de certa forma envolvidas com a informação quântica, pois por intermédio dela, ganham destaque no centro acadêmico e tecnológico para mais investimentos e avanços científicos.

Na computação clássica temos o *bit* como unidade básica de informação, por meio dele podemos armazená-la e entender a sua manipulação. o *bit* apresenta os valores 0 ou 1, sendo que o valor 0 representa ausência de corrente elétrica no sistema eletrônico e o valor 1 descreve a presença da corrente. No entanto, podem assumir somente

um dos dois valores, ou é 0 ou é 1 para o sistema. Na computação quântica teremos simultaneamente, os dois valores (estados), ou seja, uma superposição de estados. Os estados são denotados da forma: $|0\rangle$ e $|1\rangle$, são chamados de *bits* quânticos ou *qubits*. O termo *qubits* foi criado pelo físico norte americano Benjamin Schumacher, responsável por descobrir uma forma de interpretar os estados quânticos como informações. O *qubits* é representado por estados ortogonais que são associados a qualquer estado quântico de dois níveis de energia como exemplo, a polarização vertical e horizontal de um fóton, *spin* de um elétron e outros (CHUANG, 2010). A substituição do *bit clássico* pelo *qubit* se deve a superposição de estados. Pois, podemos ter estados que representam uma superposição na base computacional ao mesmo tempo que é necessário somente uma única partícula para escrever esse estado. Esse fenômeno não é possível na mecânica clássica, logo, os computadores quânticos apresentam uma vantagem, nesse aspecto, em relação aos clássicos (LOSS; DIVINCENZO, 1998).

Geralmente, a representação matricial para os vetores de um *qubit* são

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

4.1.1 Esfera de Bloch

Uma maneira de visualizar o estado de um *qubit* é dado pela esfera de Bloch. Ela apresenta uma visualização tridimensional desse estado, dado pela Figura (4.1). Um *qubit* arbitrário $|\psi\rangle$ representado por $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, onde os termos α e β são números complexos e devem satisfazer $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Iremos escrever α e β em termos da representação polar de um número complexo. De tal modo que

$$\alpha = ae^{ir_1}|0\rangle, \quad (4.2)$$

$$\beta = be^{ir_2}|1\rangle, \quad (4.3)$$

onde a, b e $r_{1,2} \in \mathbb{R}$. De modo que temos

$$|\psi\rangle = ae^{ir_1}|0\rangle + be^{ir_2}|1\rangle. \quad (4.4)$$

Multiplicando por e^{-ir_1}

$$e^{-ir_1} |\psi\rangle = a|0\rangle + be^{i(r_2-r_1)}|1\rangle = a|0\rangle + be^{i\phi}|1\rangle, \quad (4.5)$$

onde $\phi = r_2 - r_1$. Pelo fato de os vetores serem normalizados, $|a|^2 + |b|^2 = 1$, podemos escrever

$$a = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right),$$

$$b = \text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right),$$

como e^{ir_1} é uma fase irrelevante no estado $e^{-ir_1} |\psi\rangle$, consideremos então o estado como

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\phi} \text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle. \quad (4.6)$$

Devido a condição de normalização e a representação múltipla de um estado por vários vetores, podemos simplificar a representação de um *qubit*. Onde teremos apenas duas variáveis θ e ϕ que $\in \mathbb{R}$. Com essa simplificação, podemos descrever os estados usando uma parametrização bem simpática, ou seja, escrever esses vetores em termos das coordenadas esféricas. Lembrando que em coordenadas esféricas

$$x = \cos\phi \text{sen}\theta, \quad (4.7)$$

$$y = \text{sen}\phi \text{sen}\theta, \quad (4.8)$$

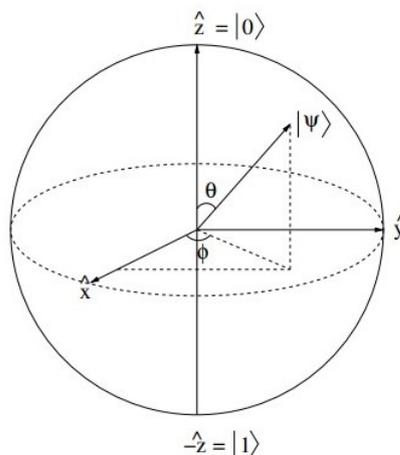
$$z = \cos\theta. \quad (4.9)$$

Como estamos interessados em vetores normalizados, nosso trabalho será realizar a conversão do estado de um *qubit* em coordenadas esféricas. Para isso, devemos saber localizar os pontos mais importantes na esfera.

Para o estado $|0\rangle$ teremos $\theta = 0$, isso implica que $x = 0, y = 0$ e $z = 1$.

Para o estado $|1\rangle$ teremos $\theta = \pi$, isso implica que $x = 0, y = 0$ e $z = -1$.

Figura 4.1 – Esfera de Bloch na representação de um *qubit* arbitrário $|\psi\rangle$ e dos *qubits* $|0\rangle$ e $|1\rangle$.



Fonte: (DOVICCHI, 1993).

Os pontos quânticos semicondutores são hospedeiros promissores para *qubits* na corrida para a construção de um processador quântico. No próximo capítulo, apresentaremos o nosso modelo que é constituído por um par de *qubits* inseridos em um sistema formado por pontos quânticos duplo. Para atingir nossos objetivos quantitativos, precisamos desenvolvê-los no formalismo do operador densidade, visto que é uma ferramenta matemática capaz de descrever tanto sistema quânticos puros quanto os sistemas quânticos misturados. O apresentaremos na seção a seguir.

4.2 Operador Densidade

A mecânica quântica é geralmente descrita pelo formalismo do vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ ¹, no qual, esse vetor apresenta o máximo de informações que podemos obter a respeito do sistema quântico. No entanto, há outra formulação conhecida como operador densidade $\hat{\rho}(t)$ ² que também descreve o estado quântico do sistema. Esse mecanismo alternativo é matematicamente equivalente à abordagem do vetor de estado, contudo, fornece uma linguagem mais conveniente para tratar sobre alguns sistemas quânticos (COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOE, 1986). Geralmente, iniciamos os estudos em

¹ Essa notação foi introduzida por Dirac em 1926. O símbolo $|\ \rangle$ é chamado de "ket", enquanto que seu dual $\langle \ |$ é chamado de "bra", de modo que juntos formam um "bracket" $\langle \ | \ \rangle$, que representa o produto escalar entre os vetores de estado.

² O operador densidade foi introduzido na mecânica quântica em 1927, por Landau e Von Neumann. No entanto, o artigo que reavivou o interesse no assunto, sugerindo uma interpretação instrumentalista foi "Description of States in Quantum Mechanics by Density Matrix and Operator Techniques", escrito por (FANO, 1957).

mecânica quântica com os estados quânticos bem definidos, também conhecidos como estados puros $|\psi(t)\rangle$, que fornecem toda a informação possível sobre as propriedades de um sistema, como sua evolução temporal, possíveis resultados de medições e etc. Além das leis físicas, realiza previsão sobre o seu comportamento em experimentos futuros (CHUANG, 2010).

Por outro lado, é extremamente comum tratar de estados quânticos que não podem ser descritos por vetores de estado, ou seja, um estado quântico em que não dispomos de informação suficiente para determinar o estado do sistema, com isso, é necessário a descrição baseada no formalismo do operador densidade. Quando tratamos de estados quânticos mistos (mistura de estados puros) é o operador densidade quem apresenta o formalismo matemático de maneira adequada para realizar tal representação. Visto que, ele surgiu da necessidade de retratar os estados quânticos que não podem ser descritos pelo vetor de estado. O operador densidade foi desenvolvido pelo matemático J.Von Neumann (NEUMANN, 1927) e apresenta todas as informações possíveis de um sistema quântico. Ademais, o operador densidade também chamado de matriz densidade, quando aplicado em uma base, é válido para qualquer sistema, isto é, tanto para casos de sistemas puros como também, para os sistemas mistos. Mostraremos como é a sua representação para o caso de um estado puro e posteriormente, para o estado misto.

4.2.1 Descrição do Estado Puro na Representação do Vetor de Estado

Um estado puro é a representação de um conjunto de indivíduos de tal forma que cada um deles podem ser representados pelo mesmo vetor de estado em um determinado espaço vetorial chamado espaço de Hilbert \mathcal{H} (PESSOA, 2019). O sistema quântico puro, pode ser representado pela seguinte função de estado, em um dado instante t , que pertence ao espaço de \mathcal{H}

$$|\psi(t)\rangle = \sum_i c_i(t) |u_i\rangle, \quad (4.10)$$

onde $|u_i\rangle$ são vetores que formam uma base ortonormal e completa no espaço \mathcal{H} , e $c_i(t)$ são as amplitudes de probabilidade do sistema quântico ser encontrado em cada estado $|u_i\rangle$. Esse termo está sujeito a seguinte condição

$$\sum_i |c_i(t)|^2 = 1, \quad (4.11)$$

que expressa o fato de $|\psi(t)\rangle$ ser normalizada.

Se um observável \hat{A} que apresenta elementos de matriz

$$\langle u_i | \hat{A} | u_j \rangle = A_{ij}, \quad (4.12)$$

o valor médio desse observável em um dado instante t

$$\langle \hat{A} \rangle_{(t)} = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \sum_{ij} c_i^*(t) c_j(t) A_{ij}. \quad (4.13)$$

A evolução temporal de $|\psi(t)\rangle$ é descrita pela equação de Schrodinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle, \quad (4.14)$$

onde $\hat{H}(t)$ é o Hamiltoniano do sistema quântico.

4.2.2 Descrição do Estado Puro na Representação do Operador Densidade

A partir da eq. (4.13), percebemos que os coeficientes $c_i(t)$ participam na determinação dos valores médios, por meio da expressão $c_i^*(t)c_j(t)$. Esse produto representa os elementos de matriz do operador $|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$, que também podem ser observados da mesma forma quando aplicamos um projetor no *ket* $|\psi(t)\rangle$ na eq. (4.10), que teremos

$$\langle u_j | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | u_i \rangle = c_i^*(t) c_j(t), \quad (4.15)$$

com isso, torna-se natural introduzir o operador densidade $\hat{\rho}(t)$ por meio da expressão

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|, \quad (4.16)$$

representado na base $\{|u_i\rangle\}$, onde os elementos

$$\rho_{ij} = \sum_{ij} \langle u_i | \hat{\rho}(t) | u_j \rangle = c_i^*(t) c_j(t). \quad (4.17)$$

A partir de agora, comprovaremos que o operador densidade $\hat{\rho}(t)$ é suficiente para descrever o estado quântico do sistema. Para isso, iremos reescrever as expressões (4.11), (4.13) e (4.14) no formalismo do operador densidade.

- Com base no que obtemos na eq. (4.17), a relação apresentada na eq. (4.11) nos afirma que a soma dos elementos da diagonal principal de $\hat{\rho}(t)$ é igual a 1

$$\begin{aligned}\sum_i \rho_{ii}(t) &= \sum_i \langle u_i | \hat{\rho}(t) | u_i \rangle \\ &= \sum_i |c_i(t)|^2 = 1,\end{aligned}$$

a soma dos elementos da diagonal principal pode ser denominado de traço unitário se essa soma for igual a 1, logo, podemos reescrever

$$\sum_i \rho_{ii}(t) = \text{Tr} \hat{\rho}(t) = 1. \quad (4.18)$$

- Usando agora as equações (4.12) e (4.17), a eq. (4.13) que descreve o valor médio de um observável, assume a seguinte forma quando aplicamos nela a *Relação de Completeza* $\sum_n |u_n\rangle\langle u_n|$

$$\langle \hat{A} \rangle_{(t)} = \langle \psi(t) | \sum_j |u_j\rangle\langle u_j| \hat{A} \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| \psi(t) \rangle,$$

$$\langle \hat{A} \rangle_{(t)} = \sum_{ji} \langle u_i | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | u_j \rangle \langle u_j | \hat{A} | u_i \rangle,$$

$$\langle \hat{A} \rangle_{(t)} = \sum_i \langle u_i | \hat{\rho}(t) \hat{A} | u_i \rangle. \quad (4.19)$$

A eq. (4.19) nos fornece os elementos da diagonal principal, portanto, se somarmos

$$\langle \hat{A} \rangle_{(t)} = \text{Tr} \{ \hat{\rho}(t) \hat{A} \}. \quad (4.20)$$

- A evolução temporal do operador densidade $\hat{\rho}(t)$ pode ser deduzida a partir da equação de Schrodinger (eq. (4.14))

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|,$$

aplicando a regra do produto, teremos

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)], \quad (4.21)$$

onde a eq. (4.21) é a equação de *Von Neumann*. A evolução temporal também pode ser dada de forma equivalente por uma transformação unitária aplicada no operador densidade

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t,0) \hat{\rho}(0) \hat{U}^\dagger(t,0). \quad (4.22)$$

Para que um certo operador $\hat{\rho}$ seja de fato classificado como operador densidade $\hat{\rho}(t)$ é necessário que ele se submeta a algumas propriedades para ser dito como tal. Caso contrário, não é considerado um operador densidade. As propriedades aplicáveis ao operador densidade do estado puro

1. O traço do operador densidade $\hat{\rho}(t)$ é igual a um

$$\text{Tr}(\hat{\rho}(t)) = 1. \quad (4.23)$$

Essa propriedade é de suma importância, pois quando não é obedecida, concluímos que não é um operador densidade $\hat{\rho}(t)$. O traço é um invariante algébrico, ou seja, não depende da base. Além do mais, essa soma deve ser igual a um, porque expressa a conservação da probabilidade dentro da mecânica quântica.

2. $\hat{\rho}(t)$ é Hermitiano

$$\hat{\rho}^\dagger(t) = \hat{\rho}(t). \quad (4.24)$$

3. $\hat{\rho}(t)$ é idempotente

$$\hat{\rho}^2(t) = \hat{\rho}(t). \quad (4.25)$$

4. O traço do operador densidade ao quadrado também deve ser igual a um

$$\text{Tr}\hat{\rho}^2(t) = 1. \quad (4.26)$$

Para um dado operador $\hat{\rho}$ ser realmente um operador densidade $\hat{\rho}(t)$ do caso puro é necessário que todas as propriedades citadas acima sejam satisfeitas.

4.2.3 Estado Misto

Os estados "mistos" são descritos pela superposição incoerente dos estados puros. A superposição incoerente nos afirma que para calcular a probabilidade de um determinado resultado, de um sistema formado por estados misturados, deve-se primeiramente calcular a probabilidade individual de cada estado puro e, posteriormente, aplicar uma média a cada um dos estados, chamada de "peso". O conceito de estado misto como uma mistura de estados puros é resultado das primeiras conexões entre a mecânica quântica e a mecânica estatística. A mecânica estatística clássica lida, idealmente, com misturas estatísticas de estados mecânicos clássicos, cada um caracterizado por valores definidos de todas as variáveis. Os estados puros da mecânica quântica foram identificados, em analogia, aos estados mecânicos clássicos e a mecânica estatística quântica ficou responsável pelas misturas de estados puros (FANO, 1957).

Na eq. (4.10), temos uma função de estado bem definida pelo vetor de estado. Quando trabalhamos com sistemas quânticos mistos, essa representação não é possível. O operador densidade $\hat{\rho}(t)$ para esse caso é definido (COHEN-TANNOUJJI; DIU; LALOE, 1986)

$$\hat{\rho}(t) = \sum_i p_i |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)|, \quad (4.27)$$

onde $|\psi_i(t)\rangle$ é cada estado que compõe a mistura quântica e p_i são as probabilidades clássicas de se obter cada um dos estados envolvidos no sistema quântico, onde $\sum_i p_i = 1$.

O operador densidade do caso misto $\hat{\rho}(t)$ deve satisfazer as seguintes propriedades

1. O traço do operador densidade $\hat{\rho}(t)$ é igual a um

$$\text{Tr}(\hat{\rho}(t)) = 1. \quad (4.28)$$

2. $\hat{\rho}(t)$ é Hermitiano

$$\hat{\rho}^\dagger(t) = \hat{\rho}(t). \quad (4.29)$$

3. O $\hat{\rho}(t)$ para o caso misto não é idempotente

$$\hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho}, \quad (4.30)$$

o que possibilita autovalores de $\hat{\rho}(t)$ entre 0 e 1.

4. O traço sobre o quadrado do operador densidade $\hat{\rho}(t)$ é menor que 1

$$\text{Tr}\hat{\rho}^2(t) < 1. \quad (4.31)$$

Essa propriedade é extremamente útil para realizar a distinção entre os operadores do caso puro e caso misto, pois se obtermos $\text{Tr}\hat{\rho}(t) = 1$, o sistema quântico se encontra em um estado puro. Se $\text{Tr}\hat{\rho}(t) < 1$, o sistema se encontra em uma mistura de estados.

Para exemplificar as aplicações das propriedades do operador densidade tomemos a seguinte matriz

$$\hat{\chi} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{4} & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.32)$$

Fazendo uso da eq. (4.28), teremos

$$\text{Tr}(\hat{\chi}) = \text{Tr}\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + 0\right) = 1. \quad (4.33)$$

Aplicando agora a eq. (4.29)

$$(\hat{\chi})^\dagger = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{4} & 0 & 0 \end{pmatrix} = \hat{\chi}. \quad (4.34)$$

Utilizando a eq. (4.30)

$$(\hat{\chi})^2 = \begin{pmatrix} \frac{5}{16} & 0 & \frac{1}{8} \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{8} & 0 & \frac{1}{16} \end{pmatrix},$$

$$(\hat{\chi})^2 \neq \hat{\chi}. \quad (4.35)$$

E finalmente, aplicando a ultima propriedade do caso misto, (4.31)

$$Tr(\hat{\chi})^2 = Tr \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{4} & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 = Tr \begin{pmatrix} \frac{5}{16} & 0 & \frac{1}{8} \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{8} & 0 & \frac{1}{16} \end{pmatrix},$$

$$Tr(\hat{\chi})^2 = \left(\frac{5}{16} + \frac{1}{4} + \frac{1}{16} \right),$$

$$Tr(\hat{\chi})^2 < 1. \quad (4.36)$$

Os elementos que se encontram na diagonal principal do operador densidade, ρ_{ii} , estão associados com as probabilidades de encontrar o sistema no estado $|\psi_i\rangle$ e são chamados de Populações. Os elementos que estão fora da diagonal, ρ_{ij} , são associados aos efeitos de interferência, também chamados de coerência quântica, entre os estados $|\psi_i\rangle$ e $|\psi_j\rangle$. Quando $\rho_{ij} = 0$, entendemos que não existe superposição quântica que possam gerar efeitos de interferência entre os estados $|\psi_i\rangle$ e $|\psi_j\rangle$, (COHEN-TANNOUJJI; DIU; LALOE, 1986).

4.2.4 Operador Densidade Reduzido e Traço Parcial

O operador densidade reduzido é uma ferramenta matemática essencial para estudar sistemas quânticos compostos. Para tal análise, em um sistema composto de dois subsistemas A e B, também chamados de bipartidos, o operador densidade do sistema composto é $\hat{\rho}_{AB}$, muitas vezes chamado de estado global ou total. O operador densidade que descreve o subsistema A é $\hat{\rho}_A$, sendo obtido por meio da operação do traço parcial sobre o subsistema B da matriz densidade do sistema global $\hat{\rho}_{AB}$. Assim temos que

$$\hat{\rho}_A = Tr_B(\hat{\rho}_{AB}), \quad (4.37)$$

e para obter B temos

$$\hat{\rho}_B = Tr_A(\hat{\rho}_{AB}), \quad (4.38)$$

onde Tr_A e Tr_B , são os traços parciais sobre cada subsistema. O operador densidade reduzido nos possibilita estudar a coerência quântica local. A partir do que foi apresentado sobre o operador densidade, agora podemos falar a respeito de uma das correlações quânticas que se faz presente neste trabalho: O Emaranhamento Quântico.

4.3 Emaranhamento Quântico

No ano 1935 os físicos Albert Einstein, Boris Podolsky e Nathan Rosen, publicam um artigo intitulado: *Can Quantum Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?* (EINSTEIN; PODOLSKY; ROSEN, 1935), que estremeceu as bases da mecânica quântica. Nesse artigo, eles tinham como base o Princípio da Localidade (nenhuma informação pode ser transmitida a uma velocidade superior a da luz), para afirmar que a teoria quântica era incompleta. Por meio de argumentos teóricos, o EPR, como ficou conhecido os autores, chegam ao consenso de que um sistema quântico não deveria ser caracterizado somente por uma função de onda, mas em adição, por uma quantidade λ denominada de variável oculta (GRIFFITHS, 2011).

Para chegar a essa conclusão, o EPR considerou duas partículas quânticas correlacionadas. De tal maneira que quando era realizada uma medida em uma delas, partícula A (localizada na terra, por exemplo), estabelecia uma medida indireta na partícula B (localizada na lua, por exemplo). Pelos postulados da mecânica quântica, sabemos que quando se realiza uma medida em um dado estado quântico global ele sofre alteração instantânea mesmo que suas partículas (ou subsistemas) estejam bem distantes uma da outra, a essa situação chamamos de Não-Local. Todavia, o EPR introduziu uma hipótese de realismo local onde afirmava que a escolha sobre qual observável a ser medido na terra, não pode afetar de maneira instantânea (ou pelo menos com velocidade superior a da luz) o estado da partícula que se encontra na lua. De acordo com o EPR, a condição necessária para que uma certa propriedade física seja

um elemento de realidade, é a certeza na previsão do valor dessa propriedade antes de se realizar uma medida (PESSOA, 2019).

A questão da teoria do EPR era que não apresentava indicações quantitativas e somente em 1964, com o físico John Bell (BELL, 1964) surge a primeira indicação da existência da não localidade na teoria quântica. Para comprovar, na década de 1980 Alain Aspect e colaboradores (ASPECT; GRANGIER; ROGER, 1981; ASPECT; DALIBARD; ROGER, 1982) obtêm resultados empíricos observados por Bell, confirmando assim, a não localidade na mecânica quântica. Para uma revisão com mais detalhes a cerca dos aspectos históricos do emaranhamento quântico, sugerimos (RIGOLIN, 2005; COELHO, 2013; DUARTE, 2019)

O emaranhamento quântico está necessariamente associado às correlações quânticas entre os vários subsistemas que compõe o sistema global (HORODECKI et al., 2009). O emaranhamento pode ser classificado pelo número de subsistemas que estão presentes no sistema global, como exemplo, temos o emaranhamento constituído por dois subsistemas.

$$|\Psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle \pm |10\rangle), \quad (4.39)$$

$$|\Phi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle \pm |11\rangle), \quad (4.40)$$

conhecidos como *Estados de Bell*³. Para casos de emaranhamento acima de dois subsistemas denominamos de emaranhamento multipartidos. Podemos descrever o emaranhamento de maneira quantitativa:

Dado um sistema quântico global \mathcal{G} composto de N subsistemas \mathcal{G}_i tal que o espaço de Hilbert \mathcal{H} associado a ele seja dado pelo produto tensorial dos subsistemas associados ao sistema quântico global, teremos (RIGOLIN, 2005)

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}_1 \otimes \mathcal{G}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{G}_N = \otimes_{i=1}^N \mathcal{G}_i. \quad (4.41)$$

Com base na eq. (4.41) podemos ir um pouco mais além para compreender quando um sistema global está emaranhado ou quando ele é dito separável. Para isso, podemos partir de um contexto mais geral, onde nos apoiamos na descrição dos vetores

³ São estados quânticos maximamente emaranhados de dois *qubits*.

de estado e do operador densidade para o emaranhamento e a separabilidade. Iremos analisar, primeiramente, para o caso do estado puro e posteriormente, para o caso geral, estados mistos.

4.3.1 Emaranhamento de Estados Puros

Já é sabido que um sistema quântico pode ser associado a um espaço de Hilbert \mathcal{H} , portanto, para sistemas compostos o espaço de estado é formado pelo produto tensorial dos estados de cada subsistema, eq. (4.41). Logo, para o caso do estado puro, teremos

DEFINIÇÃO 1: *Dado um vetor de estado $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ composto de N subsistemas $|\Psi\rangle_i$ é dito ser separável quando pode ser decomposto em produto tensorial dos subsistemas*

$$|\Psi\rangle = |\Psi_1\rangle \otimes |\Psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\Psi_N\rangle = \otimes_{i=1}^N |\Psi\rangle_i, \quad (4.42)$$

onde $|\Psi\rangle_i \in \mathcal{H}_i$. Caso não seja possível escrevê-lo pelo produto tensorial o sistema é dito emaranhado.

Para exemplificar, temos um sistema bipartido, aplicado na base computacional $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$. Temos dois vetores de estado que descrevem esse sistema

$$|\varphi\rangle = \frac{1}{2} (|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle), \quad (4.43)$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle). \quad (4.44)$$

O estado da eq. (4.43) é um exemplo de estado separável pois é escrito pelo produto tensorial dos estados

$$|\varphi\rangle = |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_1 + |1\rangle_1) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_2 + |1\rangle_2). \quad (4.45)$$

Já o estado da eq. (4.44) é dito emaranhado pois não pode ser dado pelo produto tensorial. Tomemos

$$|\psi\rangle = |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle = (x_1|0\rangle_1 + y_1|1\rangle_1) \otimes (x_2|0\rangle_2 + y_2|1\rangle_2),$$

$$|\psi\rangle = x_1x_2|00\rangle + x_1y_2|01\rangle + y_1x_2|10\rangle + y_1y_2|11\rangle,$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle). \quad (4.46)$$

Para a eq. (4.46) ser verdade, notamos que existem apenas quatro possibilidades, na qual $x_1x_2 = y_1y_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ e $x_1y_2 = y_1x_2 = 0$. Entretanto, para $x_1y_2 = 0$ teremos $x_1 = 0$ ou $y_2 = 0$, logo $x_1x_2 = y_1y_2 = 0 \neq \frac{1}{\sqrt{2}}$. O mesmo resultado obtemos com as duas últimas possibilidades. Concluimos que não é possível escrevermos o estado $|\psi\rangle$ por meio de um produto tensorial entre os vetores, isso nos afirma que o estado $|\psi\rangle$ é emaranhado.

Podemos escrever a definição 1 no formalismo do operador densidade para os estados puros, dada pela definição 2.

DEFINIÇÃO 2: *Dado um sistema quântico A composto de N subsistemas A_i descrito por um operador densidade $\hat{\rho}$ é dito ser separável quando pode ser decomposto em um produto tensorial de operadores densidade*

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2 \otimes \hat{\rho}_3 \otimes \dots \otimes \hat{\rho}_N = \otimes_{i=1}^N \hat{\rho}_i, \quad (4.47)$$

onde $\hat{\rho}_i \in A_i$, A indica o operador densidade que atua em \mathcal{H} , logo, A_i indica os subsistemas de operadores densidade que atuam em \mathcal{H}_i .

4.3.2 Emaranhamento de Estados Mistos

Para os estados mistos, teremos uma formulação um pouco mais elaborada para realizar a distinção entre estados separáveis e emaranhados. Para isso, empregaremos o formalismo do operador densidade $\hat{\rho}$.

DEFINIÇÃO 3: *Estados mistos representados pela seguinte expressão*

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B \otimes \dots \otimes \hat{\rho}_N, \quad (4.48)$$

são chamados de estados mistos fatoráveis.

Agora, estados mistos que são representados pela seguinte expressão

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i \hat{\rho}_A^i \otimes \hat{\rho}_B^i \otimes \dots \otimes \hat{\rho}_N^i, \quad (4.49)$$

onde $p_i > 0$ com $\sum_i p_i = 1$ são probabilidades de origem clássica e $\hat{\rho}_A^i, \hat{\rho}_B^i, \dots, \hat{\rho}_N^i$ são os operadores densidade de cada subsistema que compõe o sistema global $\hat{\rho}$. Sistemas que apresentam essa descrição são chamados de estados mistos separáveis.

Os estados mistos que não obedecem a eq. (4.49) são chamados de estados emaranhados.

Um exemplo de um estado emaranhado é o *Estado de Werner*⁴

$$\hat{\rho}_W = \frac{1}{8}\mathbb{1} + \frac{1}{2}|\Psi_-\rangle\langle\Psi_-|, \quad (4.50)$$

onde $\mathbb{1}$ é o operador identidade e $|\Psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle)$. Alguns exemplos de estados separáveis

$$\hat{\phi} = \frac{1}{2}(|00\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11|),$$

$$\hat{\chi} = (|000\rangle\langle 000| + |111\rangle\langle 111| + |001\rangle\langle 001|).$$

Com base no que foi apresentado nas definições acima, o que de fato classifica um estado quântico como separável ou emaranhado são as correlações quânticas presentes em seus subsistemas. Nas equações (4.42) e (4.48), realizando medições locais, teremos como resultado sistemas totalmente não correlacionados. Enquanto que na eq. (4.49) e para estados emaranhados, eles apresentam correlações quânticas em seus sistemas globais. No entanto, quando tratamos de correlações em sistemas separáveis, as correlações são expressadas através da distribuição de probabilidades clássicas, para o emaranhamento não é possível realizar essa distribuição.

O emaranhamento é um recurso físico exclusivo da mecânica quântica e extremamente útil para desempenhar inúmeras funções além de apresentar diversas aplicabilidades (RAIMOND; BRUNE; HAROCHE, 2001; KAMTA; STARACE, 2002). Logo, a nossa tarefa é saber se o sistema é emaranhado ou separável. Segundo as definições apresentadas anteriormente, é entendido de forma clara quando um sistema é separável. No entanto, decidir se um estado é separável ou emaranhado não é trivial e somente com as definições apresentadas nas equações (4.42), (4.47) e (4.48) não é possível, pois elas não são operacionais. A grande questão é dada quando um sistema pede a sua identificação, caracterização e quantificação do emaranhamento no sistema, isso no caso quando ele existe. Para realizar esses procedimentos não é uma tarefa fácil uma vez que essa questão ainda está em aberto, devido não ser totalmente compreendida e não apresentar uma forma geral para realizar esses procedimentos. O que temos atualmente, são critérios operacionais que são responsáveis para dizer se um dado sistema apresenta ou não emaranhamento. A essas operações chamamos

⁴ São estados que permanecem invariantes quando a mesma transformação unitária é aplicada localmente a ambos os sistemas.

de *Critérios de Separabilidade*. Todos os critérios de separabilidade desenvolvidos até o momento apresentam limitações por conta das condições do sistema quântico estudado, um exemplo é a dimensão do sistema quântico, uma vez que ainda não existe um critério geral que possa classificar um estado quântico como separável ou emaranhado. Citamos algumas referências que tratam desses critérios, como o de Peres (PERES, 1996), Horodecki (HORODECKI; HORODECKI; HORODECKI, 1996), Decomposição de Schmidt (NIELSEN; CHUANG, 2002), Nielsen e Kempe (NIELSEN; KEMPE, 2001), e outros (HORODECKI, 1997; CHEN; WU, 2002).

4.3.3 Critério de Peres-Horodecki

O critério de Peres-Horodecki (PERES, 1996), também conhecido como *Transposição Parcial Positiva*-(PPT), é aplicado em sistemas quânticos tanto para o caso de estados puros como também para estados gerais. A sua vantagem é apresentar uma condição necessária e suficiente para estados que pertencem ao espaço de Hilbert de dimensão $2 \otimes 2$ e $2 \otimes 3$. O critério de Peres-Horodecki demonstra que a operação da transposta do operador densidade $\hat{\rho}^T$ do caso misto está ligado ao emaranhamento (HORODECKI et al., 2009). Esse critério se sustenta na observação de que se o operador densidade $\hat{\rho}$ representa um estado físico, logo a sua transposta $\hat{\rho}^T$ também representa um estado físico. Lembrando que uma matriz densidade $\hat{\rho}$ apresenta autovalores positivos, logo, a sua transposta $\hat{\rho}^T$ também apresenta autovalores positivos. Dado o operador densidade global

$$\hat{\rho} = \sum_{m,n,\mu,\nu} p_{m,n,\mu,\nu} |m,\mu\rangle\langle n,\nu|, \quad (4.51)$$

se tomarmos a sua transposta parcial $\hat{\rho}^{TP}$, com relação ao segundo fator, teremos

$$\hat{\rho}^{TP} = \sum_{m,n,\mu,\nu} p_{m,n,\mu,\nu} |m,\nu\rangle\langle n,\mu|, \quad (4.52)$$

desenvolve apenas a transposição do segundo fator, representado pelas letras gregas, do produto tensorial do sistema global.

Os autovalores da matriz parcialmente transposta $\hat{\rho}^{TP}$ apresentam duas observações

- Se $\hat{\rho}^{TP}$ apresenta um ou mais autovalores negativos o estado é emaranhado.
- Se $\hat{\rho}^{TP}$ apresenta autovalores positivos, o estado é separável.

Esse fato é de suma importância, pois pode ser aplicado em qualquer representação do operador densidade, não importando em que base $\hat{\rho}$ está escrito. Basta apenas aplicar a transposta parcial na matriz densidade $\hat{\rho}^T$ e analisar seus autovalores. Assim, o sistema quântico descrito pelo operador densidade $\hat{\rho}$ será dito emaranhando quando apresentar em sua transposta parcial autovalores negativos.

4.3.4 Quantificadores de Emaranhamento

Com a descoberta que o emaranhamento quântico é um recurso utilizável para inúmeras aplicações nas áreas de informação e computação quânticas, é natural se fazerem a seguinte pergunta: *Quanto desse recurso é necessário para efetuar uma determinada tarefa?* com isso foi levantada também outra questão: *Como podemos quantificar de maneira adequada o emaranhamento no sistema?.* Nos últimos anos tem se investido bastante na busca de bons quantificadores de emaranhamento, onde cada um deles apresentam vantagens como também, apresentam limitações. Na literatura encontramos diversos que apresentam funções específicas, como os quantificadores que se baseiam na eficiência de protocolos de informação quântica (HASSANIEN; ELHOSENY; KACPRZYK, 2018), conversão de estados (LEE et al., 2011) e outros. Diante disso, surgiram algumas propriedades (que são operacionais) para se quantificar o emaranhamento. Porém, essa questão ainda está em aberto, além de ser bastante delicada, pois ainda não se chegou a um consenso de uma propriedade geral para os quantificadores. Mas, gostaríamos de apresentar nesta dissertação algumas propriedades que até o momento, são aceitas pela maioria (BRUB, 2002; MINTERT et al., 2005; PIZA, 2009). São elas

1. Se um dado operador densidade $\hat{\rho}$ é separável, logo o emaranhamento quântico $E_{\hat{\rho}} = 0$;
2. $E_{\hat{\rho}}$ não sofre variação diante de uma transformação unitária local

$$E_{\hat{\rho}} = E(U_A \otimes U_B \hat{\rho} U_A^\dagger \otimes U_B^\dagger). \quad (4.53)$$

3. $E_{\hat{\rho}}$ não aumenta por LOCC;

4. Se duas pessoas A e B compartilham os estados α e β sobre sistemas que são independentes, podemos dizer que elas compartilham $\alpha \otimes \beta$ e os seus quantificadores devem obedecer

$$E(\alpha \otimes \beta) \leq E_\alpha + E_\beta. \quad (4.54)$$

5. $E_{\hat{\rho}}$ deve ser uma função convexa no espaço dos operadores

$$E\left(\sum_i p_i \hat{\rho}_i\right) \leq \sum_i p_i E_{\hat{\rho}_i}. \quad (4.55)$$

A propriedade (1) é a condição natural que somente estados não separáveis apresentam emaranhamento. A propriedade (2) afirma que uma medida de emaranhamento $E_{\hat{\rho}}$ deve ser invariante diante de uma mudança de base local, isso implica que também deve ser invariante diante de transformações unitárias locais. A propriedade (3) afirma que se Λ representa um mapa que pode ser implementado por operações não locais e comunicação clássica, então $E_\Lambda \leq E_{\hat{\rho}}$. E a propriedade (4) enuncia que o sistema global $\hat{\rho}$ é descrito pelo produto tensorial entre os subsistemas independentes $\alpha \otimes \beta$ e o quantificador deve obedecer a eq. (4.54). A propriedade (5) também conhecida como *Convexidade* é uma das propriedades satisfeitas pela maioria dos quantificadores, no qual, afirma que a medida do emaranhamento diminui diante de dois ou mais estados mistos. A expressão dada em ((4.55)) mostra que se temos um certo conjunto de estados $\hat{\rho}_i$ e perdemos alguma informação de $\hat{\rho}_i$, o resultado disso será a diminuição no emaranhamento quântico do sistema.

A partir das propriedades apresentadas anteriormente, existem alguns quantificadores que obedecem a todos os requisitos citados, como a entropia relativa de emaranhamento (E_R) (VEDRAL et al., 1997), emaranhamento destilável (E_D) (BENNETT et al., 1996) e o emaranhamento de formação (E_{OF}), este último é de interesse para aplicação em nosso modelo.

4.3.5 Emaranhamento de Formação e Concorrência

Se pensarmos que o emaranhamento quântico de estados mistos pode ser resultado de uma média de misturas de estados puros, chegaremos à definição do

emaranhamento de formação (E_{OF}) (WOOTTERS, 2001). Desse modo, o emaranhamento de formação parte da definição das médias das entropias dos estados puros que formam a mistura estatística, de acordo com a seguinte equação

$$E_{OF}(\hat{\rho}) = \min \sum_i \hat{\rho}_i \varepsilon(\psi_i), \quad (4.56)$$

onde $\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ e $\varepsilon(\psi_i)$ é a entropia de *Von Neumann* para o estado puro ψ_i .

Para sistema bipartido, onde a dimensionalidade do espaço de Hilbert é 2×2 , temos soluções exatas para a eq. (4.56), logo para esse caso teremos

$$E_{OF}(\hat{\rho}) = -x \log_2(x) - (1-x) \log_2(1-x), \quad (4.57)$$

em que

$$x = 1 + \frac{\sqrt{1-C^2}}{2}, \quad (4.58)$$

no qual C é denominado de *Concorrência*.

A concorrência C é uma função monótona do emaranhamento, como também, é um quantificador de sua medida (WOOTTERS, 2001). A concorrência é aplicada em sistemas quânticos que apresentam um par de *qubits* (WOOTTERS, 1998). Até o momento, a concorrência C é um caso particular somente para um par de *qubits*, no entanto, existem algumas propostas para utilizá-la em sistemas que apresentam um número superior a um par de *qubits* (UHLMANN, 2000; AUDENAERT; VERSTRAETE; MOOR, 2001; RUNGTA et al., 2001). Normalmente a concorrência é utilizada por meio do E_{OF} , segundo as equações (4.57) e (4.58). Geralmente, a concorrência é obtida por meio de uma matriz R

$$R = \hat{\rho} \cdot (\sigma^y \otimes \sigma^y) \cdot \hat{\rho}^* \cdot (\sigma^y \otimes \sigma^y), \quad (4.59)$$

em que $\hat{\rho}$ é o operador densidade, σ^y é a matriz de *Pauli* e $\hat{\rho}^*$ é o conjugado do operador densidade. A concorrência $C(\hat{\rho})$ é definida da seguinte forma

$$C(\hat{\rho}) = \max(0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4}), \quad (4.60)$$

onde os λ_i são os autovalores, em ordem decrescente, da matriz R . Assim, quando $\mathcal{C}(\hat{\rho}) = 0$, o sistema não é emaranhado. Por outro lado, se $\mathcal{C}(\hat{\rho}) = 1$ o sistema é maximamente emaranhado. E por fim, $0 < \mathcal{C}(\hat{\rho}) < 1$ o sistema é parcialmente emaranhado.

4.3.6 Emaranhamento Quântico Térmico

A descoberta a respeito da existência do emaranhamento quântico quando o sistema se encontra em equilíbrio com um dado reservatório térmico, se deve a Nielsen (NIELSEN, 1998) e Arnesen e colaboradores (ARNESEN; BOSE; VEDRAL, 2001). Nielsen estudou uma cadeia de *spins*, uma de dois *qubits*, onde obteve resultados que mostravam a existência de emaranhamento quando os dois *qubits* estavam a uma certa temperatura. Além disso, ele pode comprovar que se o sistema estivesse sujeito a um campo magnético externo, até uma certa temperatura, era possível aumentar o emaranhamento do sistema. A esse tipo de emaranhamento denominamos de emaranhamento térmico.

O emaranhamento de um sistema em um banho térmico pode ser investigado pelo formalismo do operador densidade (dado pela eq. (5.16)), juntamente com a função de partição (dado pela eq. (5.15)) que se aplica a esse sistema. É evidente que o operador densidade, no equilíbrio térmico, é uma função da temperatura e com isso, o emaranhamento térmico pode ser medido, de maneira análoga, ao quantificador concorrência (apresentado na eq. (4.60)).

4.4 Coerência Quântica

A coerência quântica é normalmente associada a capacidade de um estado quântico manifestar fenômenos de interferência que é uma propriedade fundamental da mecânica quântica. Ela é uma condição necessária tanto para o emaranhamento quântico quanto para o surgimento de outras correlações quânticas como é o caso da discórdia quântica (OLLIVIER; ZUREK, 2001; GIROLAMI; ADESSO, 2011). Além de ser um importante recurso físico para a computação quântica e processamento de informações quânticas (WILDE, 2013; MA et al., 2016) também é essencial para a termodinâmica de baixas temperaturas (LOSTAGLIO; JENNINGS; RUDOLPH, 2015), transporte de elétrons em redes biomoleculares (LEVI; MINTERT, 2014), física de nanoescala (VAZQUEZ et al., 2012) e outros (DEVEAUD; QUATTROPANI; SCHWENDIMANN, 2009). De maneira diferente das correlações quânticas que são definidas em um sistema que envolve pelo

menos dois subsistemas, a coerência quântica pode ser definida para um único sistema (BAUMGRATZ; CRAMER; PLENIO, 2014). A teoria da coerência quântica ganhou primeiramente destaque na óptica quântica onde foi bem estudada e desenvolvida (MANDEL; WOLF, 1995; GLAUBER, 2007). No entanto, recentemente iniciou-se os primeiros passos para o desenvolvimento de uma estrutura rigorosa para quantificar a coerência quântica para casos de estados gerais, juntamente, com as medidas necessárias no âmbito da teoria da informação quântica (LEVI; MINTERT, 2014).

Os efeitos da coerência quântica são normalmente associados aos elementos fora da diagonal principal de uma matriz densidade $\hat{\rho}$ com respeito a uma base de referência particular $\{|i\rangle\}$. Observamos que a coerência quântica depende da base e esta depende do problema físico em que é desenvolvida. A maneira de caracterizar a coerência quântica é fundamentada na identificação de um conjunto de estados incoerentes juntamente com operações incoerentes que mapeiam o conjunto sobre si (STRELTSOV et al., 2015; KRAFT; PIANI, 2018). Existe uma semelhança entre a teoria de recursos da coerência quântica com a teoria de recursos do emaranhamento quântico, pois as operações locais e a comunicação clássica LOCC, são em analogia, as operações incoerentes que mapeiam o conjunto de estados separáveis sobre si. A partir da estrutura da coerência quântica é possível estabelecer medidas apropriadas que desaparecem para qualquer estado incoerente, além disso, satisfazem condições de monotonicidade em canais incoerentes. As medidas coerentes que respeitam essas condições são chamadas de monótonos de coerência, similar ao monótono de emaranhamento. Sabendo disso, gostaríamos de apresentar um conjunto de propriedades que qualquer medida adequada de coerência quântica deve satisfazer (BAUMGRATZ; CRAMER; PLENIO, 2014; STRELTSOV et al., 2015). Mas, antes disso, vamos caracterizar a coerência quântica para afirmar se um dado sistema apresenta coerência quântica.

De acordo com (BAUMGRATZ; CRAMER; PLENIO, 2014), o primeiro procedimento para se realizar uma medida de coerência quântica é notar quais os estados são incoerentes. Para isso, escolhemos uma base de referência fixa particular $\{|i\rangle\}$, que pertença ao espaço de Hilbert \mathcal{H} . Definimos como estados incoerentes \mathcal{I} aqueles cuja matriz densidade $\hat{\delta}$ é diagonal em tal base e formam um conjunto $\mathcal{I} \subset \mathcal{H}$. Assim, todos os operadores densidade incoerentes $\hat{\delta} \in \mathcal{I}$, são da forma

$$\hat{\delta} = \sum_{i=1}^d \delta_i |i\rangle\langle i|, \quad (4.61)$$

em que δ_i são as probabilidades, d é a dimensão do sistema no espaço de \mathcal{H} . O estado que não é representado na forma da eq. (4.61) é chamado de estado coerente.

O segundo procedimento está relacionado a dinâmica do sistema que pode ser representado pelas operações incoerentes, e para isso, é necessário especificá-las de acordo com o conjunto dos operadores Kraus $\{\hat{K}_i\}$, que devem satisfazer

$$\sum_i \hat{K}_i^\dagger \hat{K}_i = 1, \quad (4.62)$$

como também

$$\hat{K}_i \mathcal{I} \hat{K}_i^\dagger \subset \mathcal{I}, \quad (4.63)$$

para todo e qualquer i . É considerado um mapa de preservação de traços positivos Λ e uma operação incoerente, se puderem ser escritos da forma

$$\Lambda(\hat{\delta}) = \sum_i K_i \hat{\delta} K_i^\dagger. \quad (4.64)$$

Os mapas transformam estados incoerentes em estados incoerentes, de acordo com a eq. (4.63), nenhuma coerência quântica é testemunhada, mesmo se a análise fosse feita somente em um resultado individual i .

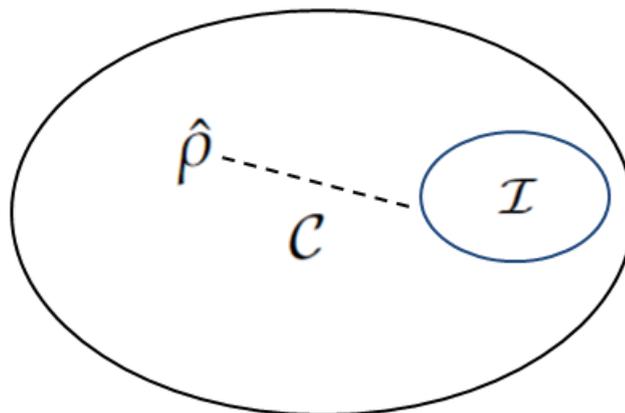
Para quantificar a coerência quântica e definir os monótonos de coerência quântica, iremos apresentar algumas propriedades que definem uma medida razoável de coerência quântica $\mathcal{C}(\hat{\rho})$ (BAUMGRATZ; CRAMER; PLENIO, 2014)

1. $\mathcal{C}(\hat{\rho}) = 0$, se $\hat{\rho} \in \mathcal{I}$, ou seja, a coerência quântica $\mathcal{C}(\hat{\rho})$ deve ser zero para todos os estados incoerentes \mathcal{I} ;
2. $\mathcal{C}(\hat{\rho})$ não aumenta sob operações incoerentes, ou seja, $\mathcal{C}(\hat{\rho}) \geq \mathcal{C}(\Lambda(\hat{\rho}))$ com $\Lambda(\hat{\rho}) \subseteq \mathcal{I}$;
3. $\mathcal{C}(\hat{\rho})$ não aumenta em média sob seletiva de operações incoerentes, ou seja, $\mathcal{C}(\hat{\rho}) \geq \sum_i p_i \mathcal{C}(\hat{\rho}_i)$, com probabilidades $p_i = \text{Tr}[\hat{K}_i \hat{\rho} \hat{K}_i^\dagger]$ e estados $\hat{\rho}_i = \frac{\hat{K}_i \hat{\rho} \hat{K}_i^\dagger}{p_i}$ e os operadores Kraus incoerentes \hat{K}_i obedecendo a $\hat{K}_i \mathcal{I} \hat{K}_i^\dagger \subseteq \mathcal{I}$;

4. $\mathcal{C}(\hat{\rho})$ é uma função convexa da matriz densidade $\mathcal{C}(\sum_i p_i \hat{\rho}_i) \leq \sum_i p_i \mathcal{C}(\hat{\rho}_i)$.

Observamos que as propriedades (3) e (4) implicam automaticamente na propriedade (2). A razão pela qual listamos todas as condições acima é que (semelhantes às medidas de emaranhamento) podem existir quantificadores significativos de coerência quântica que satisfazem as propriedades (1) e (2), mas para os quais as propriedades (3) e (4) são violadas ou não podem ser provadas. Uma quantidade que satisfaz as propriedades (1), (2) e (3) é chamada de monótono de coerência (BAUMGRATZ; CRAMER; PLENIO, 2014). Atualmente, existem diversas maneiras de quantificar a coerência quântica sendo propostas na literatura (HU et al., 2018), algumas satisfazem as propriedades acima, enquanto outras satisfazem parcialmente. As medidas que obedecem integralmente a essas propriedades são Entropia Relativa de Coerência e Norma- l_1 , enquanto a maioria, obedecem parcialmente. Essas medidas são também conhecidas como medidas de distância, pois por meio delas podemos calcular a distância mínima que um dado estado quântico $\hat{\rho}$ se encontra em relação a um conjunto de estados incoerentes \mathcal{I} , dado na Figura abaixo.

Figura 4.2 – Distância mínima \mathcal{C} de um dado operador densidade $\hat{\rho}$ a um conjunto de operadores quânticos incoerentes \mathcal{I} . A elipse preta representa o conjunto de todos os estados quânticos e a elipse azul representa o conjunto dos estados incoerentes.



Fonte: Produção do próprio autor.

4.5 Entropia Relativa da Coerência

A entropia relativa \mathcal{C}_{rel} foi desenvolvida para quantificar as correlações quânticas, como o emaranhamento. No entanto, percebeu-se que era viável utilizá-la para

quantificar a coerência quântica. Sendo expressada da seguinte forma (BAUMGRATZ; CRAMER; PLENIO, 2014)

$$C_{rel.} = Tr[\hat{\rho} \log_2(\hat{\rho})] - Tr[\hat{\rho} \log_2(\hat{\sigma})], \quad (4.65)$$

onde $\hat{\rho}$ é o operador densidade e $\hat{\sigma}$ são os estados quânticos incoerentes. A eq. (4.65) é a expressão geral da entropia relativa da coerência. Para casos particulares existe uma expressão que facilita os cálculos, dada por

$$C_{rel.} = S(\hat{\rho}_{diag}) - S(\hat{\rho}), \quad (4.66)$$

em que $S(\hat{\rho}) = -Tr[\hat{\rho} \log_2(\hat{\rho})]$ é a entropia de *Von Neumann* e $\hat{\rho}_{diag}$ são os elementos da diagonal principal da matriz densidade.

4.6 Norma- l_1

Assim como a entropia relativa da coerência a Norma l_1 é uma medida genuína de distância de medida da coerência quântica, que é dada pela soma do valor absoluto dos elementos fora da diagonal da matriz densidade. Assim,

$$C_{l_1} = \sum_{i \neq j} |\langle i | \hat{\rho} | j \rangle|. \quad (4.67)$$

É importante observar que os quantificadores da coerência quântica dependem da base (BAUMGRATZ; CRAMER; PLENIO, 2014). Apresentaremos a aplicação da Norma l_1 no próximo capítulo.

A coerência quântica, em particular, lida também com sistemas quânticos correlacionados. Um desses sistemas que gostaríamos de apresentar é a Coerência Correlacionada C_{cc} .

4.7 Coerência Correlacionada

A coerência quântica em um dado sistema bipartido pode estar contida localmente ou nas correlações entre os subsistemas (TAN et al., 2016). A parte da coerência quântica contida nas correlações é denominada de Coerência Correlacionada C_{cc} . Para compreender a coerência correlacionada C_{cc} , considere um estado bipartido $\hat{\rho}_{AB}$ que

apresenta uma coerência total $\mathcal{C}(\hat{\rho}_{AB})$ em relação as seguintes bases de referência local $\{|a\rangle_A\}$ e $\{|b\rangle_B\}$. Logo, se tratarmos somente de A estaremos quantificando a coerência quântica do subsistema A, que é chamado de coerência local de A, $\mathcal{C}_l(\hat{\rho}_A)$. A mesma situação é para o subsistema B, $\mathcal{C}_l(\hat{\rho}_B)$. Comumente, quando somamos as coerências locais de cada subsistema, não é necessariamente a mesma que a coerência total do sistema quântico, com isso, podemos dizer que uma das partes das coerências quânticas não seja armazenada localmente, mas dentro das correlações do próprio sistema (KRAFT; PIANI, 2018). Matematicamente, descrevendo a coerência correlacionada para um dado sistema quântico bipartido $\hat{\rho}_{AB}$, ela é da seguinte forma (TAN et al., 2016)

$$\mathcal{C}_{cc}(\hat{\rho}_{AB}) = \mathcal{C}_l(\hat{\rho}_{AB}) - \mathcal{C}_l(\hat{\rho}_A) - \mathcal{C}_l(\hat{\rho}_B), \quad (4.68)$$

onde a coerência correlacionada $\mathcal{C}_{cc}(\hat{\rho}_{AB})$ é o resultado da subtração das coerências locais, $\mathcal{C}_l(\hat{\rho}_A)$ e $\mathcal{C}_l(\hat{\rho}_B)$, da coerência total $\mathcal{C}_l(\hat{\rho}_{AB})$, do sistema quântico global. Os $\hat{\rho}_A$ e $\hat{\rho}_B$ são os operadores densidade reduzidos dos subsistemas A e B, que são dados de acordo com as equações (4.7) e (4.7)

$$\hat{\rho}_A = Tr_B(\hat{\rho}_{AB}),$$

$$\hat{\rho}_B = Tr_A(\hat{\rho}_{AB}).$$

É preciso ter certo cuidado com a escolha da base, pois o resultado sofre alteração, logo a coerência correlacionada dependente da base (TAN et al., 2016; KRAFT; PIANI, 2018). Uma vez obtidos os operadores densidades reduzidos locais é possível escolher uma base incoerente para cada uma das coerências locais, que vai nos permitir diagonalizar $\hat{\rho}_A$ e $\hat{\rho}_B$. Para atingir esse objetivo, é necessário realizar uma transformação unitária na matriz densidade reduzida. Para isso, utilizamos a seguinte matriz unitária U

$$U = \begin{pmatrix} \cos \theta & -e^{i\varphi} \sin \theta \\ e^{-i\varphi} \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (4.69)$$

A partir dessa transformação unitária, podemos monitorar a coerência global e as coerências locais através dos parâmetros θ e φ . Os novos operadores densidades são dados pelas seguintes expressões

$$\tilde{\rho}_A = U\hat{\rho}_AU^\dagger, \quad (4.70)$$

$$\tilde{\rho}_B = U\hat{\rho}_BU^\dagger. \quad (4.71)$$

A transformação unitária do estado quântico bipartido $\hat{\rho}_{AB}$ é dado por

$$\tilde{\rho}_{AB} = \tilde{U}\hat{\rho}_{AB}\tilde{U}^\dagger, \quad (4.72)$$

onde $\tilde{U} = U \otimes \mathbb{1}$. A partir desses resultados, temos a coerência correlacionada. Mostraremos sua aplicação em nosso sistema quântico.

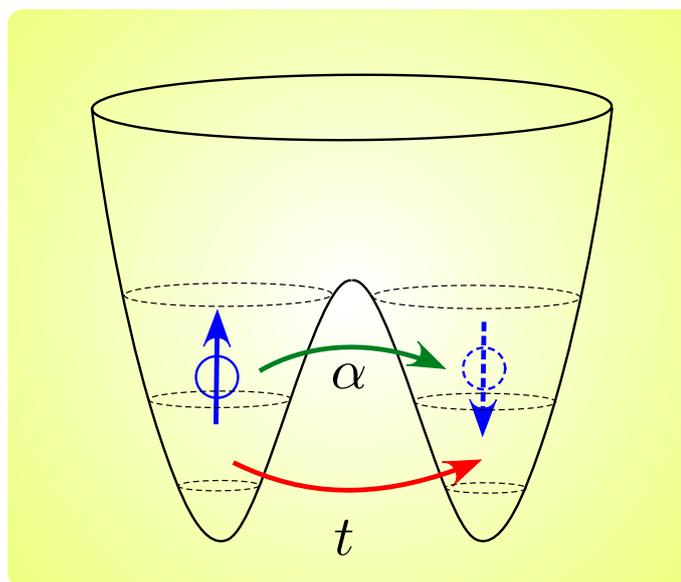
5 O MODELO

Neste capítulo fazemos a apresentação do nosso modelo semiconductor de ponto quântico duplo eletrônico com interação de Rashba. Aqui apresentamos e discutimos cada parâmetro que inserimos no nosso sistema, como também desenvolvemos suas auto energias e autoestados. Além do mais, apresentamos o operador densidade no equilíbrio térmico que descreve o nosso sistema quando está inserido em um banho térmico.

5.1 Descrição da Molécula Quântica com Interação Rashba

O nosso modelo quântico, baseado no trabalho de Yi-Chao Li et al. (LI et al., 2018), é constituído por um único elétron confinado em ponto quântico duplo semiconductor com interação *spin*-órbita tipo Rashba, na presença de um campo magnético externo constante. A partir desse confinamento, estudaremos a coerência quântica gerada por dois estados quânticos do elétron: o *qubit* de carga, isto é, sua localização no ponto quântico duplo e o *qubit* dos estados de *spin*. A coerência quântica entre os *qubits* do elétron em um banho térmico e o emaranhamento térmico serão analisados no capítulo 6.

Figura 5.1 – Representação esquemática do modelo físico do ponto quântico duplo com interação Rashba α . O *spin* de um elétron é representado pela pequena esfera deslocalizada entre dois pontos quânticos.

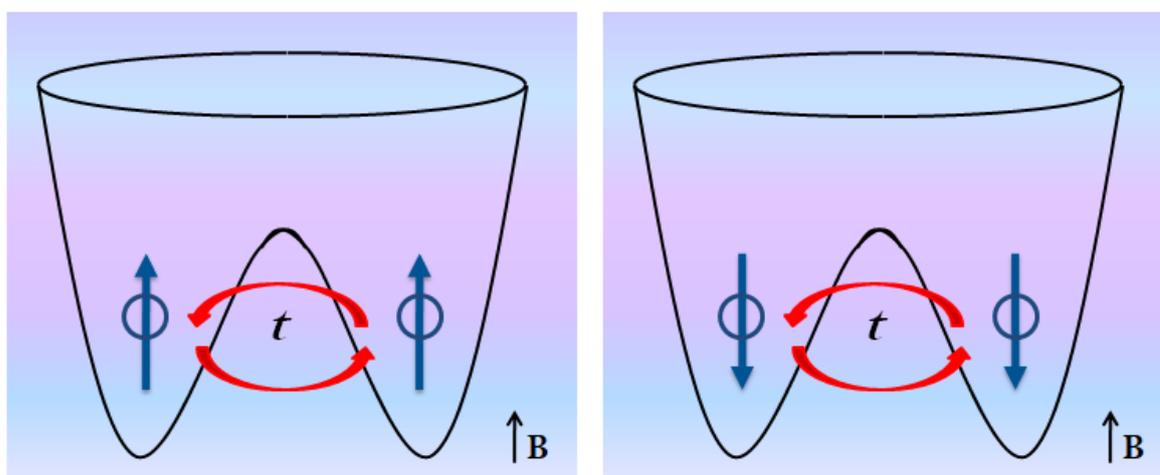


Fonte: Produção do próprio autor (2021).

Na Figura 5.1, temos a representação esquemática do nosso sistema de ponto quântico duplo juntamente com os parâmetros adotados ao modelo.

- t é o parâmetro responsável pela força de tunelamento entre os dois pontos quânticos;
- α é o parâmetro da interação *spin*-órbita tipo Rashba. Esta interação é responsável pelo tunelamento juntamente com o *flip* dos estados de *spin*. Este parâmetro é crucial para o surgimento do emaranhamento no modelo;
- Δ representa o desdobramento *Zeeman* da interação do campo magnético externo \vec{B} e os estados de *spin* do elétron.

Figura 5.2 – Representação das possibilidades de localizar o elétron no sistema de ponto quântico duplo por efeito de tunelamento t , na presença de um campo magnético externo \vec{B} .

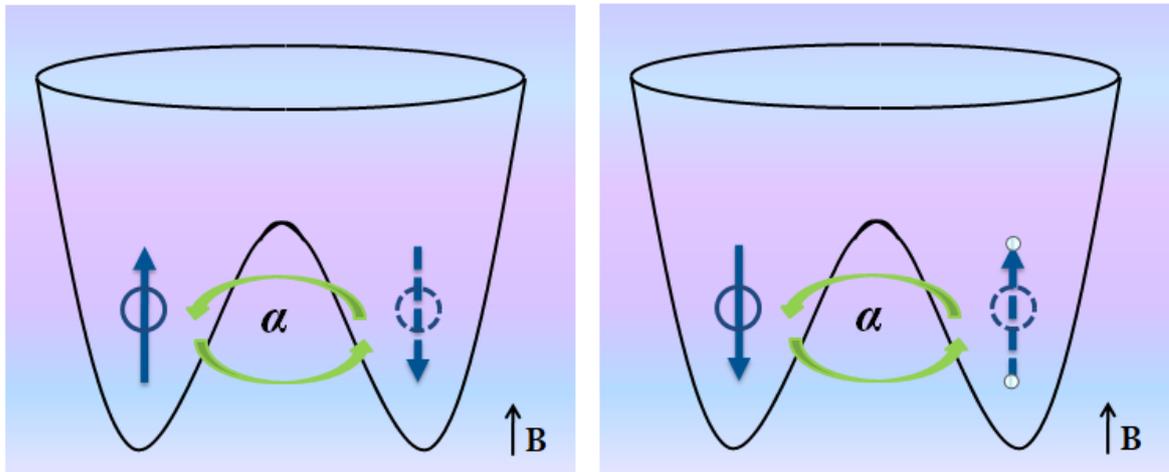


Fonte: Produção do próprio autor (2021).

Nesta molécula quântica, o elétron pode ser localizado no ponto quântico do lado esquerdo (L, do inglês-*Left*), ou no ponto quântico do lado direito (R, do inglês-*Right*), devido ao efeito túnel t entre eles, veja a Figura 5.2. Esse elétron pode apresentar orientação do estado de *spin* voltado para cima (*up* - \uparrow) ou voltado para baixo (*down* - \downarrow) por conta de sua interação com o campo magnético externo. Por outro lado, o parâmetro de Rashba α também é responsável pelo tunelamento do elétron entre os pontos quânticos (LI; YOU, 2014), como também, tem a capacidade de *flipar* o estado de *spin* toda vez que ele muda de ponto quântico, como vemos na Figura 5.3. A partir das

informações a respeito da carga do elétron e do estado de *spin* no ponto quântico duplo, podemos definir os nossos dois *qubits* (WANG et al., 2018b).

Figura 5.3 – Representação das possibilidades da orientação do estado de *spin* e localização do elétron por intermédio do acoplamento de Rashba α , na presença do campo magnético externo \vec{B} .



Fonte: Produção do próprio autor (2021).

O Hamiltoniano do nosso ponto quântico duplo com interação Rashba é dado pela seguinte expressão

$$\hat{H} = \frac{\Delta}{2} (\mathbb{1} \otimes \sigma_z) + t(\tau_x \otimes \mathbb{1}) - \alpha(\tau_y \otimes \sigma_x), \quad (5.1)$$

onde $\mathbb{1}$ é a matriz identidade, Δ é o efeito *Zeeman* gerado pelo campo magnético externo constante \vec{B} ao longo do eixo z , t é a força do acoplamento de tunelamento, α é o parâmetro de interação *spin*-órbita tipo Rashba. os termos τ_x e σ_x (eq. (5.3)), τ_y (eq. (5.4)) e σ_z (eq. (5.5)) são as matrizes de *Pauli*, onde cada uma delas, para o nosso modelo, apresentam a seguinte descrição:

- As matrizes τ_x e τ_y estão associadas a posição do elétron, L ou R , no sistema de ponto quântico duplo;
- As matrizes σ_x e σ_z estão associadas aos estados de *spin* do elétron, (\uparrow) ou (\downarrow), no sistema de ponto quântico duplo.

$$\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

$$\tau_x, \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.3)$$

$$\tau_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.4)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.5)$$

Iremos adotar por convenção, o elétron localizado no lado esquerdo seja escrito como vetor de estado do tipo $|L\rangle$ e o do lado direito $|R\rangle$, para representar a carga do elétron no sistema. Para caracterizar o estado de *spin*, escreveremos $|\uparrow\rangle = |0\rangle$ se estiver voltado para cima e $|\downarrow\rangle = |1\rangle$ se estiver voltado para baixo. Onde, $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ é a base computacional adotada em informação quântica (DIVINCENZO; LOSS, 1998).

O primeiro termo do Hamiltoniano descreve a interação do *spin* do elétron com o campo magnético externo \vec{B} . O segundo termo é responsável pelo tunelamento entre os dois pontos quânticos, permitindo ao elétron a capacidade de oscilação no sistema eletrônico. A única liberdade que o elétron apresenta, sob o efeito do parâmetro t , é a capacidade de mudar de ponto quântico. Já o último termo é a contribuição que o acoplamento de Rashba α gera no sistema. É responsável pelo transporte do *qubit* com rotações simultâneas cada vez que ele oscila entre os pontos quânticos. Quando o elétron muda de ponto quântico com o estado de *spin* $|0\rangle$, por exemplo, o parâmetro de Rashba α produz uma mudança neste estado para $|1\rangle$, essa alteração de estado fornece a capacidade de armazenamento da informação que é transportada pelo sistema quântico (GOLOVACH; LOSS, 2002).

A representação matricial do Hamiltoniano (eq. (5.1)) é dada por

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} \frac{\Delta}{2} & 0 & t & i\alpha \\ 0 & -\frac{\Delta}{2} & i\alpha & t \\ t & -i\alpha & \frac{\Delta}{2} & 0 \\ -i\alpha & t & 0 & -\frac{\Delta}{2} \end{bmatrix}. \quad (5.6)$$

Após a diagonalização do Hamiltoniano, obtemos as seguintes auto energias

$$\varepsilon_1 = \frac{1}{2} \sqrt{\Omega_+^2 + 4\alpha^2}, \quad (5.7)$$

$$\varepsilon_2 = -\frac{1}{2} \sqrt{\Omega_+^2 + 4\alpha^2}, \quad (5.8)$$

$$\varepsilon_3 = \frac{1}{2} \sqrt{\Omega_-^2 + 4\alpha^2}, \quad (5.9)$$

$$\varepsilon_4 = -\frac{1}{2} \sqrt{\Omega_-^2 + 4\alpha^2}, \quad (5.10)$$

onde $\Omega_{\pm} = \Delta \pm 2t$.

Abaixo temos os respectivos autoestados normalizados, na base computacional $\{|L0\rangle, |L1\rangle, |R0\rangle, |R1\rangle\}$ ¹. O primeiro termo do vetor de estado, $|L\rangle$ ou $|R\rangle$, indica a localização da carga do elétron no ponto quântico e o segundo termo, $|0\rangle$ ou $|1\rangle$, representa a orientação do estado de *spin* no nosso sistema quântico. Assim, temos

$$|\varphi_1\rangle = A_+ [ia_+ (|L0\rangle + |R0\rangle) - |L1\rangle + |R1\rangle], \quad (5.11)$$

$$|\varphi_2\rangle = A_- [ia_- (|L0\rangle + |R0\rangle) - |L1\rangle + |R1\rangle], \quad (5.12)$$

$$|\varphi_3\rangle = B_+ [ib_+ (|L0\rangle - |R0\rangle) + |L1\rangle + |R1\rangle], \quad (5.13)$$

$$|\varphi_4\rangle = B_- [ib_- (|L0\rangle - |R0\rangle) + |L1\rangle + |R1\rangle], \quad (5.14)$$

onde

$$A_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2} \sqrt{a_{\pm}^2 + 1}},$$

$$B_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2} \sqrt{b_{\pm}^2 + 1}},$$

¹ A base adotada no modelo pode também ser caracterizada pelas bases $\{|L \uparrow\rangle, |L \downarrow\rangle, |R \uparrow\rangle, |R \downarrow\rangle\}$ ou $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ sem alteração nos resultados e apresentam o mesmo significado físico para o *qubit*. Para não gerar confusão, utilizaremos $\{|L0\rangle, |L1\rangle, |R0\rangle, |R1\rangle\}$.

$$a_{\pm} = \frac{\Omega_{+} \pm \sqrt{\Omega_{+}^2 + 4\alpha^2}}{2\alpha},$$

$$b_{\pm} = \frac{\Omega_{-} \pm \sqrt{\Omega_{-}^2 + 4\alpha^2}}{2\alpha}.$$

5.2 Função de Partição e Operador Densidade

A função de partição é uma função da termodinâmica que descreve as propriedades estatísticas de um sistema em equilíbrio termodinâmico. Sendo uma função das variáveis de estados, podemos determinar as propriedades estatísticas como a energia livre, entropia, energia total, calor específico, pressão e outros (HUANG, 2009). Existem vários formalismos da função de partição, cada um desenvolvido para um tipo de *ensemble* estatístico, como o micro canônico, canônico e grand canônico. A função de partição canônica, aplicada ao *ensemble* canônico, permite que o sistema troque calor com o ambiente, mantendo fixo os parâmetros da temperatura, volume e potencial químico. Ela é definida da seguinte forma (SALINAS, 1997)

$$Z = \sum_i e^{-\beta \varepsilon_i}, \quad (5.15)$$

onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura absoluta e ε_i são as possíveis energias do sistema. Os termos $e^{-\beta \varepsilon_i}$ são denominados de pesos de Boltzmann, pois estão relacionados a probabilidade do sistema estar no estado de energia i .

O estado do sistema no equilíbrio térmico é descrito pelo operador densidade no *ensemble* canônico, expressado da seguinte forma (HUANG, 2009)

$$\hat{\rho}_{(T)} = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{Z}, \quad (5.16)$$

\hat{H} é o Hamiltoniano do sistema e Z é a função de partição.

Usando a relação de completude o operador densidade pode ser escrito da seguinte maneira

$$\hat{\rho}_{(T)} = \sum_i \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{Z} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|, \quad (5.17)$$

em que $\hat{H}|\varphi_i\rangle = \varepsilon_i|\varphi_i\rangle$. Assim, o operador densidade térmico do nosso sistema é dado por

$$\hat{\rho}_{(T)} = \sum_{i=1}^4 \frac{e^{-\beta\varepsilon_i}}{Z} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|. \quad (5.18)$$

Podemos calcular os elementos da matriz densidade $\hat{\rho}_{(T)}$ através da seguinte expressão

$$\rho_{ij} = \langle\varphi_i|\hat{\rho}_{(T)}|\varphi_j\rangle, \quad (5.19)$$

com isso, a representação matricial do operador densidade $\hat{\rho}_{(T)}$, na base $\{|L0\rangle, |L1\rangle, |R0\rangle, |R1\rangle\}$ é dado por

$$\hat{\rho}_{AB}(T) = \begin{bmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \rho_{14} \\ \rho_{12}^* & \rho_{22} & \rho_{14} & \rho_{24} \\ \rho_{13} & \rho_{14}^* & \rho_{11} & -\rho_{12} \\ \rho_{14}^* & \rho_{24} & -\rho_{12}^* & \rho_{22} \end{bmatrix}. \quad (5.20)$$

Os índices A e B fazem referência aos dois *qubits* do nosso modelo, os cálculos desenvolvidos da matriz acima são mostramos no apêndice A. Os elementos da matriz densidade, eq. (5.20), após uma manipulação algébrica, são escritos da seguinte forma,

$$\rho_{11} = \frac{A_+^2 a_+^2 e^{-\beta\varepsilon_1} + A_-^2 a_-^2 e^{-\beta\varepsilon_2} + B_+^2 b_+^2 e^{-\beta\varepsilon_3} + B_-^2 b_-^2 e^{-\beta\varepsilon_4}}{Z},$$

$$\rho_{12} = \frac{i(-A_+^2 a_+ e^{-\beta\varepsilon_1} - A_-^2 a_- e^{-\beta\varepsilon_2} + B_+^2 b_+ e^{-\beta\varepsilon_3} + B_-^2 b_- e^{-\beta\varepsilon_4})}{Z},$$

$$\rho_{13} = \frac{A_+^2 a_+^2 e^{-\beta\varepsilon_1} + A_-^2 a_-^2 e^{-\beta\varepsilon_2} - B_+^2 b_+^2 e^{-\beta\varepsilon_3} - B_-^2 b_-^2 e^{-\beta\varepsilon_4}}{Z},$$

$$\rho_{14} = \frac{i(A_+^2 a_+ e^{-\beta\varepsilon_1} + A_-^2 a_- e^{-\beta\varepsilon_2} + B_+^2 b_+ e^{-\beta\varepsilon_3} + B_-^2 b_- e^{-\beta\varepsilon_4})}{Z},$$

$$\rho_{22} = \frac{A_+^2 e^{-\beta\varepsilon_1} + A_-^2 e^{-\beta\varepsilon_2} + B_+^2 e^{-\beta\varepsilon_3} + B_-^2 e^{-\beta\varepsilon_4}}{Z},$$

$$\rho_{24} = \frac{-A_+^2 e^{-\beta\varepsilon_1} - A_-^2 e^{-\beta\varepsilon_2} + B_+^2 e^{-\beta\varepsilon_3} + B_-^2 e^{-\beta\varepsilon_4}}{Z}.$$

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

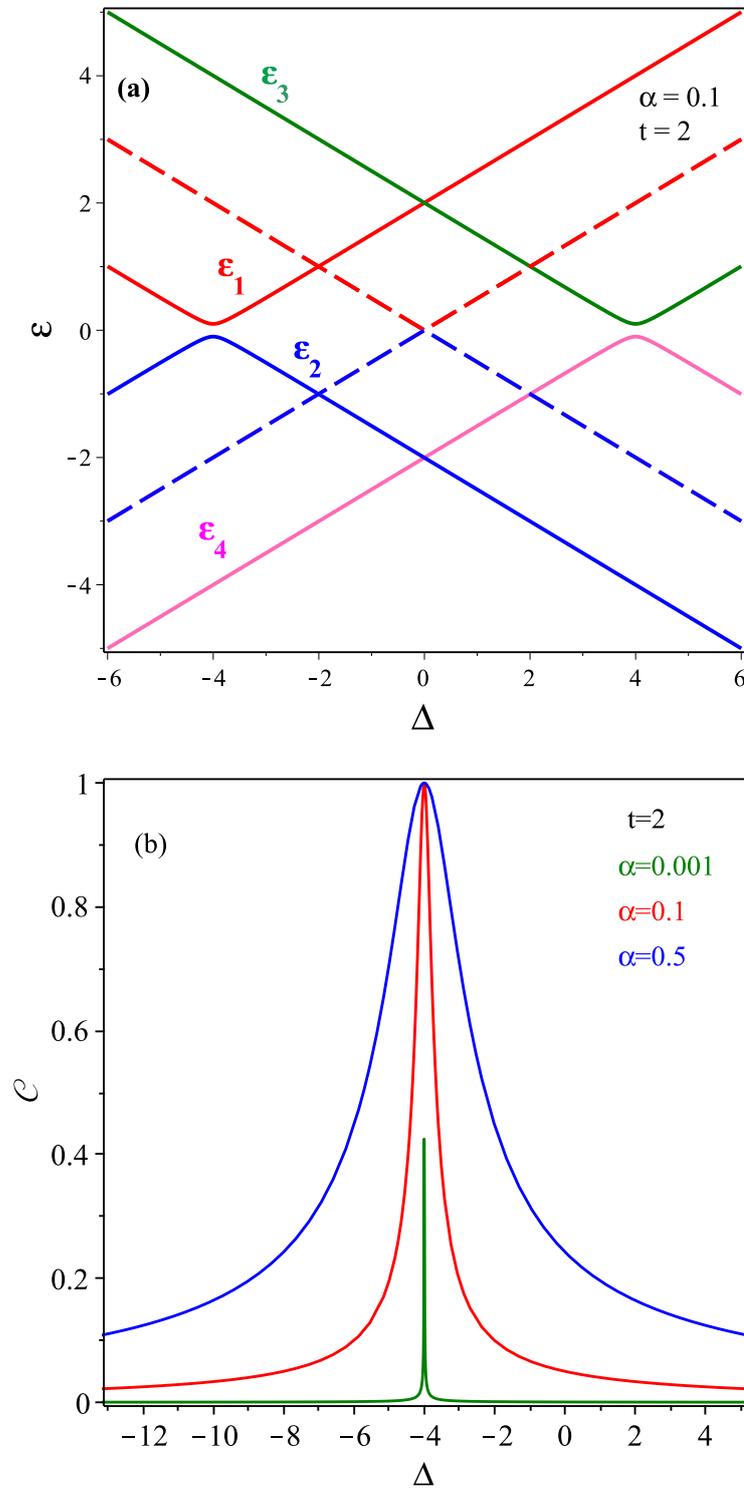
Este capítulo é dedicado à exposição dos resultados a partir do nosso modelo de emaranhamento térmico e coerência quântica de um único elétron em um ponto quântico duplo com interação Rashba, definido pelo Hamiltoniano que descreve o sistema, eq. (5.1). Os resultados são oriundos do confinamento de um único elétron, que apresenta correlações quânticas entre duas de suas características (carga e *spin*), que formam o nosso par de *qubits* e que foram discutidos no capítulo anterior.

6.1 Concorrência para $T = 0$

Vamos analisar primeiramente, o emaranhamento do modelo no regime de temperatura igual a zero, $T = 0$. Neste regime, o sistema se encontra no estado fundamental, dado pela expressão, $|\varphi_2\rangle = A_- [ia_- (|L0\rangle + |R0\rangle) - |L1\rangle + |R1\rangle]$, (dado na eq. (5.12)) e a energia do estado fundamental, $\varepsilon_2 = -\frac{1}{2} \sqrt{\Omega_+^2 + 4\alpha^2}$, (dada na eq. (5.8)). Os detalhes são mostrados no apêndice B.

Analisamos os efeitos e possíveis ganhos sobre o emaranhamento causados pela interação Rashba α , que é o parâmetro em destaque nesse trabalho. Como também, os parâmetros de tunelamento t e o desdobramento de Zeeman Δ . Afim de compreender ainda mais o emaranhamento quando a temperatura T é nula, inicialmente vamos investigar a influencia dos parâmetros no espectro de energia, bem como, a relação direta da formação dos pontos de anti-cruzamentos (do inglês - *anti-crossings*) com o emaranhamento quântico (CHU; ZHU, 2006). Na Figura 6.1 (a), plotamos os níveis de energia em função do desdobramento de Zeeman Δ . Inicialmente, mostramos no mesmo gráfico, as energias degeneradas duas vezes para $t = 0$ e $\alpha = 0$. Onde $\varepsilon_1 = \varepsilon_3$ (linha vermelha tracejada) e $\varepsilon_2 = \varepsilon_4$ (linha azul tracejada). Por outro lado, para as curvas sólidas o tunelamento entre os pontos quânticos, $t = 2$, quebra a degenerescência em $\Delta = 0$. Enquanto isso, o acoplamento Rashba, $\alpha = 0.1$, induz dois pontos de anti-cruzamentos em $\Delta = 4$ para os níveis de energia ε_3 e ε_4 , como também em $\Delta = -4$ para os níveis de energia ε_1 e ε_2 . A partir desses resultados, podemos ver claramente que existe uma forte correlação entre as taxas de tunelamento t entre os pontos quânticos e a quebra da degenerescência dos autoestados. Além disso, uma assinatura clara do parâmetro de Rashba é a formação de anti-cruzamentos no espectro de energia do elétron.

Figura 6.1 – Figura (a): o espectro de energia ε versus o parâmetro de desdobramento de Zeeman Δ , com dois casos particulares, $\alpha = 0$ e $t = 0$ (curvas tracejadas) e $\alpha = 0.1$ e $t = 2$ (curvas sólidas). Na figura (b) temos o comportamento da Concorrência $\mathcal{C}_{(T=0)}$ versus o parâmetro de desdobramento de Zeeman Δ , com valores fixos em α e $t = 2$. Ambos os gráficos para temperatura zero, $T = 0$.

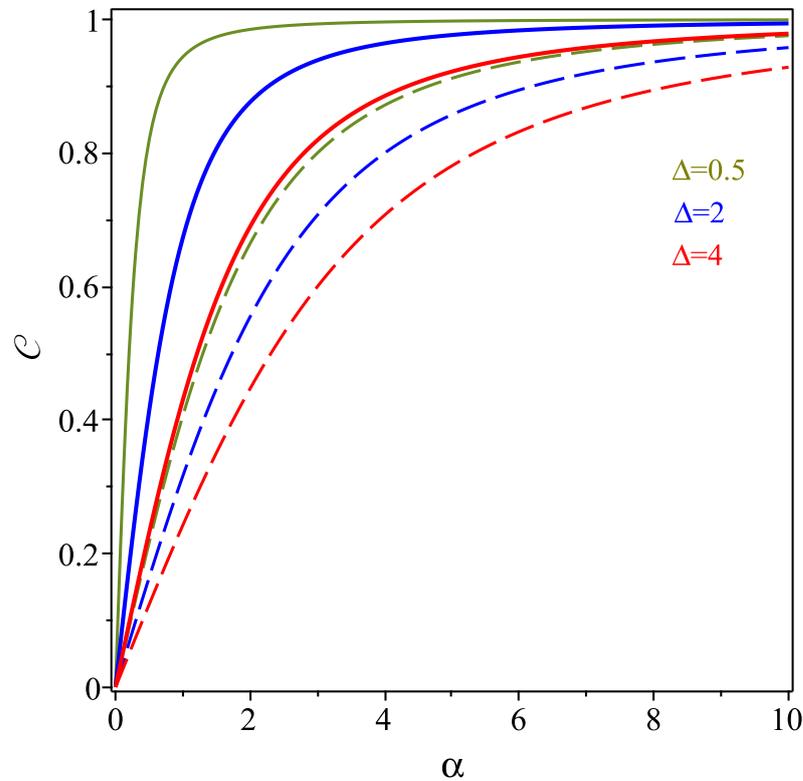


Fonte: Produção do próprio autor (2022).

Na Figura 6.1 (b), temos a concorrência $\mathcal{C}_{(T=0)}$ em função do desdobramento Zeeman Δ , para $t = 2$ e o acoplamento de Rashba α fixo. Observamos três picos de emaranhamento para $\Delta = -4$, que estão associados ao estado fundamental do nosso modelo. Para $\alpha = 0.5$ (curva azul), a concorrência atinge o seu valor máximo, $\mathcal{C}_{(T=0)} = 1$, e o estado do sistema é dado por $|\varphi_2\rangle = -0.5i(|L0\rangle + |R0\rangle) + 0.5(-|L1\rangle + |R1\rangle)$. Fora deste pico, o emaranhamento decai. Para $\alpha = 0.1$ (curva vermelha), o comportamento da concorrência é similar ao caso anterior, $\mathcal{C}_{(T=0)} = 1$, no entanto, o pico é mais estreito. Por outro lado, quando escolhemos o parâmetro de Rashba muito pequeno, $\alpha = 0.001$ (curva verde), observa-se que o emaranhamento decai para $\mathcal{C}_{(T=0)} \approx 0.042$, isso sinaliza a forte dependência que o emaranhamento tem em relação ao acoplamento de Rashba. Já no caso limite, $\alpha = 0$, a concorrência é nula, $\mathcal{C}_{(T=0)} = 0$. Comparando os gráficos do espectro de energia e da concorrência, verificamos que a formação do pico no emaranhamento $\mathcal{C}_{(T=0)}$ ocorre precisamente no mesmo ponto em que observamos a formação do ponto anti-cruzamento no espectro de energia para $\Delta = -4$, entre as energias ε_2 e ε_1 .

Na Figura 6.2, temos o comportamento da concorrência $\mathcal{C}_{(T=0)}$ *versus* o parâmetro de Rashba α para temperatura zero, $T = 0$. Na mesma figura, fazemos duas análises distintas para dois casos do parâmetro de tunelamento t . No primeiro caso, $t = 0$ representado pelas curvas sólidas, e no segundo caso, $t = 2$ representado pelas curvas tracejadas. Para ambos, temos $\Delta = 0.5$ para as curvas verdes, $\Delta = 2$ para as curvas azuis e $\Delta = 4$ para as curvas vermelhas. Inicialmente, para $t = 0$, notamos um aumento súbito da concorrência quando $\Delta = 0.5$ (curva verde sólida), com isso, a concorrência atinge aproximadamente $\mathcal{C}_{(T=0)} \approx 0.9993$, para o valor de $\alpha = 10$. Como vimos anteriormente, somente o estado fundamental $|\varphi_2\rangle$ contribui para o emaranhamento do sistema, logo, é expressado $|\varphi_2\rangle \approx -0.491i(|L0\rangle + |R0\rangle) + 0.508(-|L1\rangle + |R1\rangle)$. Quando consideramos $\alpha \rightarrow \infty$, o estado fundamental do modelo se reduz $|\varphi_2\rangle = -0.5i(|L0\rangle + |R0\rangle) + 0.5(-|L1\rangle + |R1\rangle)$ e a concorrência atinge o seu valor máximo, $\mathcal{C}_{(T=0)} = 1$. Notamos também que a medida que Δ aumenta, o emaranhamento térmico $\mathcal{C}_{(T=0)}$, entre os *qubits* de carga e *spin*, sofrem um decaimento. Para o segundo caso, $t = 2$, podemos ver que assim que o parâmetro de tunelamento aumenta, a concorrência $\mathcal{C}_{(T=0)}$ é mais fraca do que para o regime de tunelamento fraco, (ver curvas tracejadas). Além disso, ainda na mesma figura, observa-se que a concorrência é nula em $\alpha = 0$, para cada parâmetro de t e Δ considerados. Aqui o estado fundamental não emaranhado é dado por $|\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|L1\rangle + |R1\rangle)$.

Figura 6.2 – Concorrência $C_{(T=0)}$ versus o acoplamento de Rashba α . Para $t = 0$ (curvas sólidas) e $t = 2$ (curvas tracejadas), fixas em temperatura T zero. Aqui escolhemos, $\Delta = 0.5$ (curvas verdes), $\Delta = 2.0$ (curvas azuis) e $\Delta = 4.0$ (curvas vermelhas).



Fonte: Produção do próprio autor (2022).

Algo que gostaríamos de deixar ainda mais claro é o fato de o elétron ter probabilidade de ser encontrado em outro ponto quântico, mesmo que o parâmetro de tunelamento seja $t = 0$. Precisamos saber que os parâmetros adotados ao nosso modelo são inteiramente independentes entre si, mas que juntos contribuem para as inúmeras informações que podemos extrair do sistema quântico. O parâmetro de tunelamento é controlado externamente pelo potencial do sistema, onde podemos aumentar ou diminuir a sua interação entre os pontos quânticos. Para que o elétron consiga oscilar no sistema, o valor de t deve ser pequeno. Por outro lado, quando olhamos para o parâmetro do efeito Rashba α , sabemos que ele é o responsável pelas rotações simultâneas no estado de *spin* do elétron, além disso, é responsável pelo transporte no sistema. Conseqüentemente, o parâmetro de Rashba apresenta efeito duplo, com o seu próprio tunelamento, que possibilita ao elétron oscilar entre os pontos quânticos mesmo que o tunelamento t do sistema esteja desligado (LI; YOU, 2014; GINZEL et al., 2020). A interação *spin*-órbita tipo Rashba α não sofre alteração por

conta do potencial, pois o Rashba é resultado de uma assimetria estrutural. Para que possamos alterá-lo precisamos adicionar um campo elétrico ao sistema. Mesmo que o modelo apresente uma parede infinita com $t = 0$, por conta da presença do efeito Rashba o elétron apresenta probabilidade de ser encontrado no outro ponto quântico com o estado de *spin-flip*.

6.2 Concorrência para $T > 0$

Agora vamos analisar a concorrência \mathcal{C} quando a temperatura é diferente de zero. Recordando que as auto energias e os autoestados do sistema quântico, foram calculados no capítulo 5. Quando o modelo está em um banho térmico o estado quântico é dado pelo operador densidade no equilíbrio térmico $\hat{\rho}(T) = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{Z}$, (eq. 5.16), em que \hat{H} é o Hamiltoniano do sistema e Z é a função de partição no banho térmico. Para calcular a concorrência \mathcal{C} precisamos desenvolver a matriz R .

Após algumas manipulações algébricas, a matriz R é dada da seguinte forma

$$R = \begin{bmatrix} K & J & L & M \\ N & K & Q & -L \\ L & -M & K & -J \\ -Q & -L & -N & K \end{bmatrix}, \quad (6.1)$$

onde os elementos da matriz R são

$$K = |\rho_{12}|^2 + |\rho_{14}|^2 + \rho_{11}\rho_{22} - \rho_{13}\rho_{24},$$

$$J = 2(\rho_{11}\rho_{12} - \rho_{13}\rho_{14}),$$

$$L = 2\rho_{12}\rho_{14} + \rho_{13}\rho_{22} - \rho_{11}\rho_{24},$$

$$M = 2(\rho_{11}\rho_{14} - \rho_{12}\rho_{13}),$$

$$N = -2(\rho_{12}\rho_{22} + \rho_{14}\rho_{24}),$$

$$Q = 2(\rho_{12}\rho_{22} + \rho_{14}\rho_{22}). \quad (6.2)$$

Da eq. (6.1), os autovalores de R são

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= K + L + \sqrt{(J - M)(N + Q)}, \\ \lambda_2 &= K + L - \sqrt{(J - M)(N + Q)}, \\ \lambda_3 &= K - L + \sqrt{(J + M)(N - Q)}, \\ \lambda_4 &= K - L - \sqrt{(J + M)(N - Q)}. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Voltando para nossas variáveis originais, teremos

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \left| \rho_{12} \right|^2 + \left| \rho_{14} \right|^2 + (\rho_{11} - \rho_{13})(\rho_{22} + \rho_{24}) - 2(\rho_{12}\rho_{14}) + \\ &\quad + 2\sqrt{\left| (\rho_{12} + \rho_{14})(\rho_{22} + \rho_{24})(\rho_{13} - \rho_{11})(\rho_{12} + \rho_{14}) \right|}, \\ \lambda_2 &= \left| \rho_{12} \right|^2 + \left| \rho_{14} \right|^2 + (\rho_{11} - \rho_{13})(\rho_{22} + \rho_{24}) - 2(\rho_{12}\rho_{14}) \\ &\quad - 2\sqrt{\left| (\rho_{12} + \rho_{14})(\rho_{22} + \rho_{24})(\rho_{13} - \rho_{11})(\rho_{12} + \rho_{14}) \right|}, \\ \lambda_3 &= \left| \rho_{12} \right|^2 + \left| \rho_{14} \right|^2 + (\rho_{11} + \rho_{13})(\rho_{22} - \rho_{24}) + 2(\rho_{12}\rho_{14}) + \\ &\quad + 2\sqrt{\left| (\rho_{12} - \rho_{14})(\rho_{22} - \rho_{24})(\rho_{13} + \rho_{11})(\rho_{14} - \rho_{12}) \right|}, \\ \lambda_4 &= \left| \rho_{12} \right|^2 + \left| \rho_{14} \right|^2 + (\rho_{11} + \rho_{13})(\rho_{22} - \rho_{24}) + 2(\rho_{12}\rho_{14}) \\ &\quad - 2\sqrt{\left| (\rho_{12} - \rho_{14})(\rho_{22} - \rho_{24})(\rho_{13} + \rho_{11})(\rho_{14} - \rho_{12}) \right|}. \end{aligned} \quad (6.4)$$

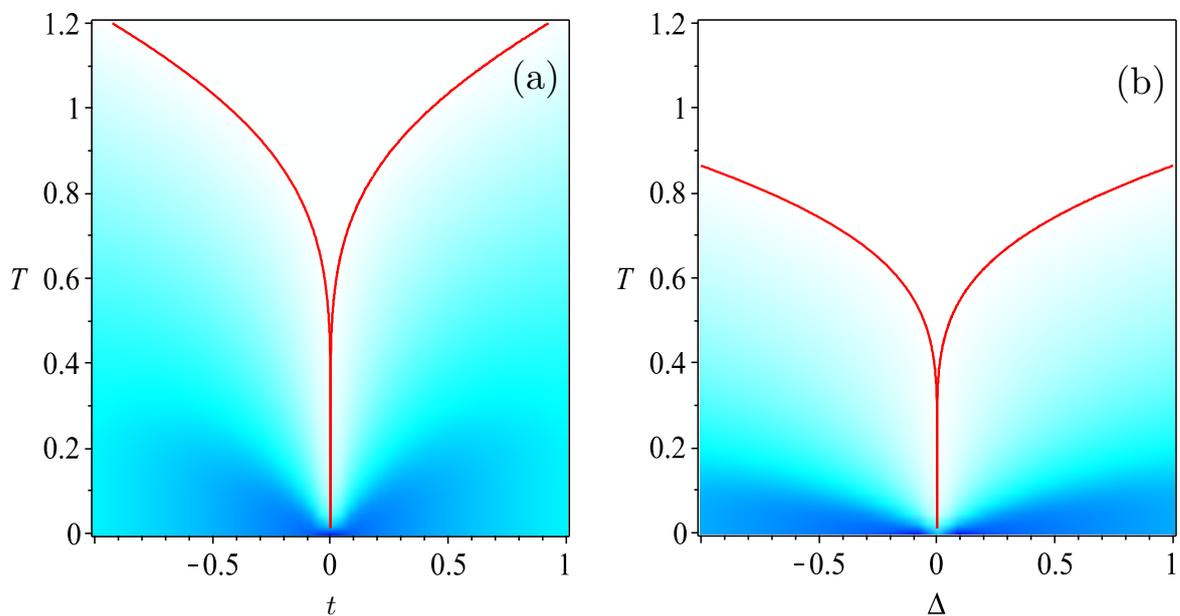
Sabemos que na expressão da concorrência \mathcal{C} os autovalores da matriz R são apresentados em ordem decrescente. Diante dos resultados mostrados nas equações (6.4), não é um trabalho trivial dizer qual dos autovalores é o maior. No entanto, observa-se que λ_1 e λ_3 podem ser os maiores autovalores, assim a concorrência pode ser escrita como

$$\mathcal{C} = \max \left\{ \operatorname{Re} \left(\left| \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_3} \right| - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_4} \right), 0 \right\}. \quad (6.5)$$

Nesse caso, a expressão analítica para o emaranhamento térmico expressado na eq. (6.5), é muito grande para ser fornecida explicitamente nesta dissertação.

Inicialmente, na Figura 6.3 temos a representação da densidade de concorrência C em função dos parâmetros T , t e Δ . Na Figura as regiões em azul, azul celeste e branco indicam respectivamente, região de emaranhamento máximo $C = 1$, região com diferentes graus de emaranhamento $0 < C < 1$ e a região sem emaranhamento $C = 0$. A linha em vermelho indica a fronteira entre as regiões emaranhadas e as regiões não emaranhadas. Na Figura 6.3 (a), ilustramos a densidade de concorrência C em função da temperatura T e do parâmetro de tunelamento t para $\Delta = 2$ e $\alpha = 1$. Uma característica interessante para $t = 0$, é que o sistema é fortemente emaranhado em baixas temperaturas, e há uma temperatura crítica acima da qual o emaranhamento é zero. Notamos também que conforme o parâmetro do efeito túnel t vai aumentando a concorrência vai diminuindo gradativamente, o que indica que o parâmetro de tunelamento enfraquece o emaranhamento quântico.

Figura 6.3 – Descrição da densidade de concorrência C . Em (a) temos a concorrência *versus* temperatura T e parâmetro de tunelamento t , com valores fixos de $\Delta = 2$ e $\alpha = 1$. Em (b) temos a concorrência *versus* temperatura T e parâmetro do efeito Zeeman Δ , com valores fixos em $t = 0.5$ e $\alpha = 1$. A linha vermelha representa o contorno entre a região emaranhada (azul) e a região não emaranhada (branca).

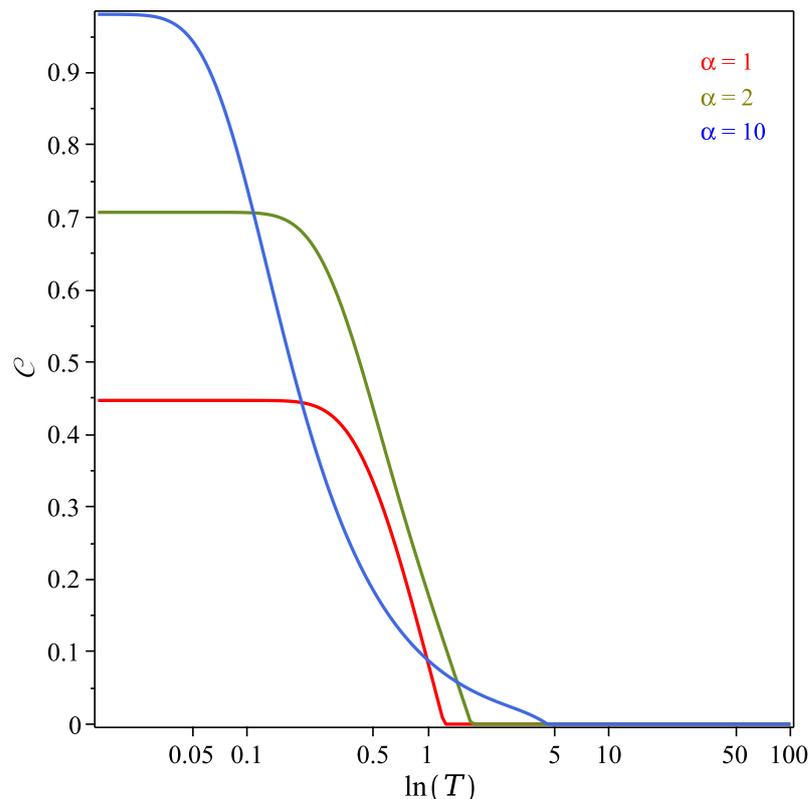


Fonte: Produção do próprio autor (2022).

Para o gráfico (b) temos a densidade de concorrência C em função da temperatura T e do parâmetro de efeito Zeeman Δ para valores fixos de $t = 0.5$ e $\alpha = 1$. Notamos que quando $\Delta = 0$, o sistema é fracamente emaranhado para baixas temperaturas. Mas, rapidamente a concorrência desaparece por flutuações térmicas à medida que a

temperatura vai aumentando. Além do mais, o gráfico da densidade de concorrência \mathcal{C} nos mostra que o emaranhamento é máximo quando os valores de Δ são pequenos para $T = 0$, no entanto, o emaranhamento diminui à medida que Δ aumenta. Por outro lado, quando T aumenta, a concorrência diminui rapidamente até atingir a temperatura limite, a cima da qual o emaranhamento térmico se torna nulo, $\mathcal{C} = 0$.

Figura 6.4 – Concorrência \mathcal{C} em função do parâmetro da temperatura T na escala logarítmica para $\Delta = 2$ e $t = 1$. Aqui $\alpha = 1$ (curva vermelha), $\alpha = 2$ (curva verde) e $\alpha = 10$ (curva azul).

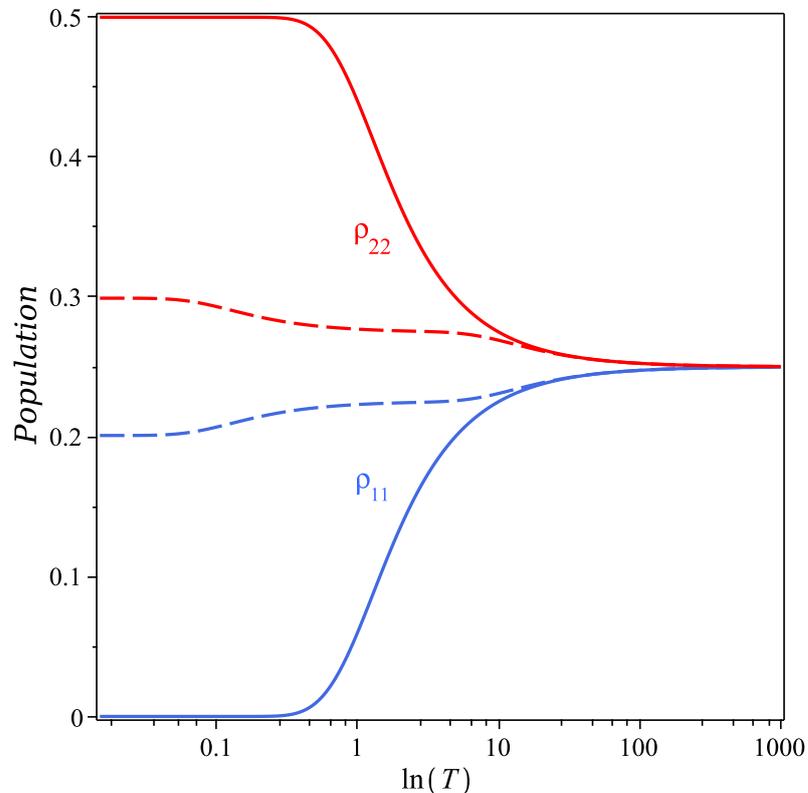


Fonte: Produção do próprio autor (2022).

Na Figura 6.4, retratamos a concorrência \mathcal{C} como função da temperatura T na escala logarítmica para diferentes valores de α , com $\Delta = 2$ e $t = 1$. Notamos que existem dois regimes a considerar: no primeiro caso, para uma forte interação do acoplamento de Rashba, $\alpha = 10$ (curva azul), podemos ver que o valor da concorrência para $T = 0$, é aproximadamente $\mathcal{C} \approx 0.98$. Notamos também que a concorrência tende monotonamente a zero, na temperatura limiar $T_{th} \approx 4,558$. Quando $\alpha = 2$ (curva verde), a concorrência diminui, comparando-a com o caso anterior, pois $\mathcal{C} \approx 0.707$. No entanto, ela diminui mais lentamente conforme a temperatura aumenta e apresenta valor zero na temperatura limiar $T_{th} \approx 1,728$. O segundo caso, corresponde a uma intensidade de acoplamento

fraco, $\alpha = 1$ (curva vermelho), obtemos um emaranhamento fraco $\mathcal{C} \approx 0.447$, quando $T = 0$. Nestas condições, o emaranhamento fraco permanece constante em baixas temperaturas, logo, a concorrência diminui monotonicamente com o aumento de T , até desaparecer completamente na temperatura limiar $T_{th} \approx 1,224$. A partir dessas análises, concluímos que o parâmetro de Rashba pode ser usado no sistema para sintonizar ou desligar o emaranhamento térmico.

Figura 6.5 – Os efeitos térmicos sobre as populações do operador densidade $\hat{\rho}_{AB}(T)$. A curva azul corresponde a população ρ_{11} e a curva vermelha corresponde a população ρ_{22} . Consideramos os valores dos parâmetros $\Delta = 2$ e $t = 1$. Aqui as curvas sólidas correspondem a $\alpha = 0.1$ e as curvas tracejadas correspondem a $\alpha = 10$.



Fonte: Produção do próprio autor (2022).

Na Figura 6.5, temos os efeitos térmicos sobre as populações ρ_{11} (curva azul) e ρ_{22} (curva vermelha), onde apresentam dois resultados para dois valores do acoplamento de Rashba α . Quando o parâmetro de Rashba é fraco $\alpha = 0.1$ em baixas temperaturas, as populações $\rho_{11} \approx 0$ e $\rho_{22} \approx 0.5$, dados pelas curvas sólidas. Esse resultado indica que o elétron se encontra no estado fundamental, $|\varphi_2\rangle \approx \frac{1}{\sqrt{2}}(-|L1\rangle + |R1\rangle)$, no regime de baixas temperaturas. Enquanto que para o caso do acoplamento de Rashba forte $\alpha = 10$, observamos um aumento súbito da população ρ_{11} que atinge $\rho_{11} \approx 0.2$ e uma

diminuição da população $\rho_{22} \approx 0.3$, dado pelas curvas tracejadas quando a temperatura é igual a zero. Em qualquer caso, com o aumento da temperatura independente do valor do acoplamento de Rashba, a população correspondente ao estado ρ_{11} aumenta enquanto que a população do estado ρ_{22} diminui, até que em temperaturas mais altas os auto estados se distribuem igualmente atingindo o valor de 0.25. Isso ocorre por conta do fornecimento de energia que estamos concedendo ao nosso sistema com o aumento da temperatura. Em um determinado ponto o nosso $k_B T$, será bem maior que a diferença entre os estados de energia, logo, o sistema tenderá a esse estado onde serão igualmente populados. Como também, que com a dependência térmica, o sistema não apresenta pontos de *crossings* entre os níveis de energia.

6.3 Coerência Correlacionada

Já sabemos que a coerência correlacionada \mathcal{C}_{cc} captura as correlações quânticas em sistemas quânticos compostos (TAN et al., 2016; KRAFT; PIANI, 2018). A coerência correlacionada \mathcal{C}_{cc} (dada na eq. (4.68)) usualmente é associada a um sistema composto de duas partículas. Para nosso modelo, não temos duas partículas correlacionadas, mas somente um único elétron, onde duas características associadas a essa partícula são responsáveis pelas correlações quânticas. Chamaremos essas características de subsistemas e as classificaremos como

- A é o subsistema local do *qubit* de carga associado a posição no sistema de ponto quântico duplo.
- B é o subsistema local do *qubit* do *spin* no sistema de ponto quântico duplo.

O operador densidade global $\hat{\rho}_{AB}(T)$ do nosso sistema de ponto quântico duplo com interação Rashba é dado pela eq. (5.20), e a partir dele, calculamos o traço parcial de cada subsistema. Para o subsistema A, teremos

$$\hat{\rho}_A(T) = \text{Tr}_B(\hat{\rho}_{AB}(T)), \quad (6.6)$$

Da eq. (6.6) obtemos

$$\hat{\rho}_A(T) = \begin{bmatrix} \rho_{11} + \rho_{22} & \rho_{13} + \rho_{24} \\ \rho_{13} + \rho_{24} & \rho_{11} + \rho_{22} \end{bmatrix}. \quad (6.7)$$

De maneira análoga para o subsistema B

$$\hat{\rho}_B(T) = \begin{bmatrix} 2\rho_{11} & 0 \\ 0 & 2\rho_{22} \end{bmatrix}. \quad (6.8)$$

Observamos que a matriz densidade reduzida da eq. (6.7), precisa de uma transformação unitária (apresentada na eq. (4.69)), pois os termos fora da diagonal não são nulos, isso significa que existem superposições locais. Para análise da coerência correlacionada \mathcal{C}_{cc} efetuamos uma transformação unitária na matriz densidade reduzida $\hat{\rho}_A(T)$, e assim, teremos $\tilde{\rho}_A(T) = U\hat{\rho}_AU^\dagger$. Para $\hat{\rho}_B(T)$ não é necessário realizar qualquer transformação, pois o operador já é incoerente. Por outro lado, a transformação unitária do estado quântico bipartido $\hat{\rho}_{AB}(T)$ é dada por $\tilde{\rho}_{AB}(T) = \tilde{U}\hat{\rho}_{AB}\tilde{U}^\dagger$, onde $\tilde{U} = U \otimes \mathbb{1}$. A transformação unitária mostra a relação entre a coerência global e as coerências locais, para diversas escolhas dos parâmetros θ e φ . Em particular, escolhendo os parâmetros, $\theta = \frac{\pi}{4}$ e $\varphi = 0$, temos uma transformação unitária que elimina as superposições e nos fornece uma nova matriz de $\hat{\rho}_A(T)$

$$\tilde{\rho}_A(T) = \begin{bmatrix} \rho_{11} + \rho_{22} - \rho_{13} - \rho_{24} & 0 \\ 0 & \rho_{11} + \rho_{22} + \rho_{13} + \rho_{24} \end{bmatrix}. \quad (6.9)$$

Para quantificar a coerência correlacionada \mathcal{C}_{cc} precisamos agora calcular $\hat{\rho}_{AB}(T)$ para os valores dos parâmetros em $\theta = \frac{\pi}{4}$ e $\varphi = 0$. Assim temos

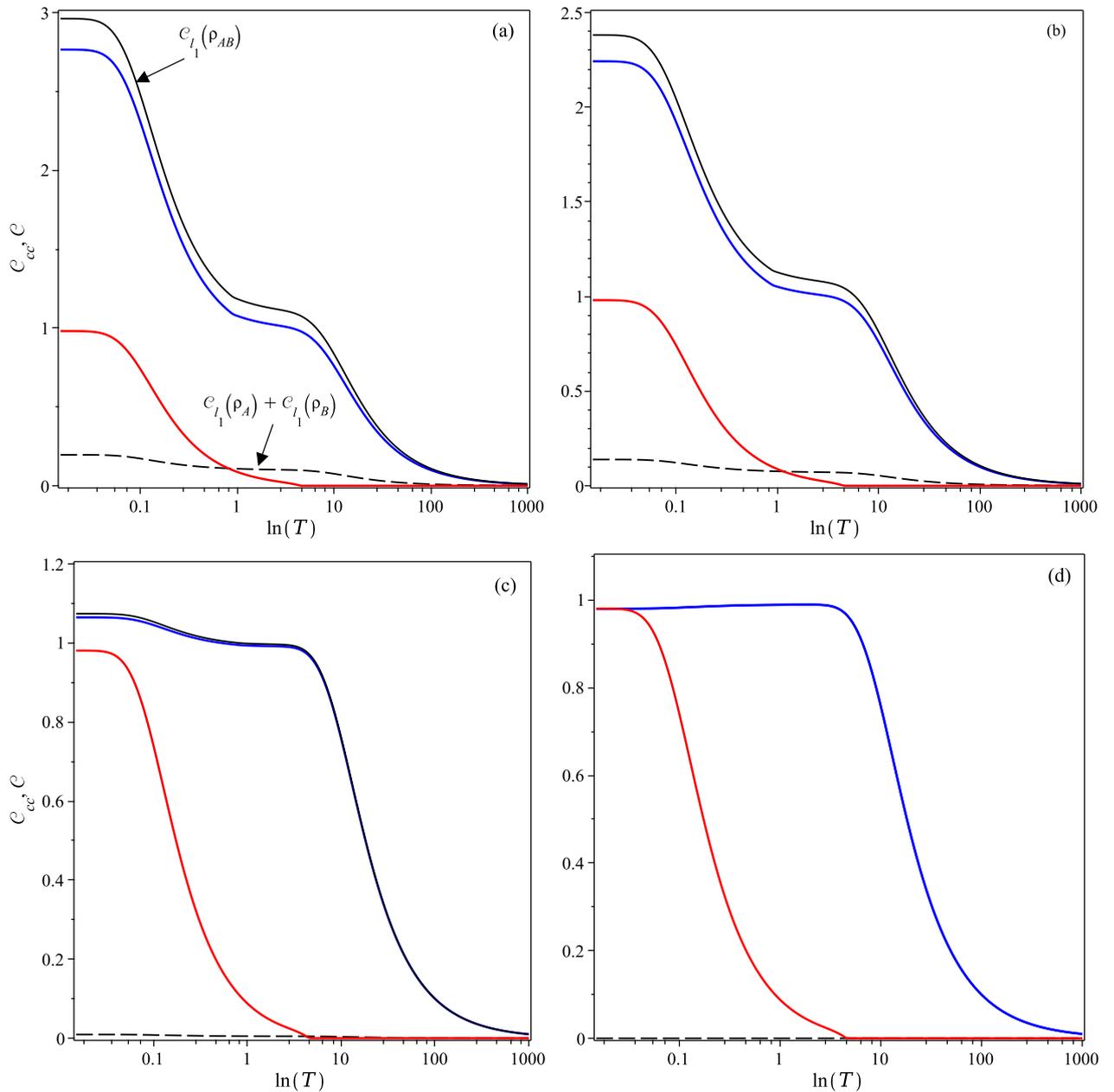
$$\tilde{\rho}_{AB}(T) = \begin{bmatrix} \rho_{11} - \rho_{13} & -\frac{1}{2}(\rho_{14}^* + \rho_{14}) & 0 & \rho_{12} + \frac{1}{2}(\rho_{14} - \rho_{14}^*) \\ -\frac{1}{2}(\rho_{14}^* + \rho_{14}) & \rho_{22} - \rho_{24} & \rho_{12}^* + \frac{1}{2}(\rho_{14} - \rho_{14}^*) & 0 \\ 0 & \rho_{12} + \frac{1}{2}(\rho_{14}^* - \rho_{14}) & \rho_{11} + \rho_{13} & \frac{1}{2}(\rho_{14}^* + \rho_{14}) \\ \rho_{12}^* + \frac{1}{2}(\rho_{14}^* - \rho_{14}) & 0 & \frac{1}{2}(\rho_{14}^* + \rho_{14}) & \rho_{22} + \rho_{24} \end{bmatrix}, \quad (6.10)$$

lembrando que os elementos com (*) indicam o elemento conjugado do operador densidade. Com isso, podemos calcular a norma- l_1 $\mathcal{C}_{l_1}(\hat{\rho})$, (eq. normall1) do operador densidade global $\tilde{\rho}_{AB}(T)$. Deste modo, a coerência correlacionada \mathcal{C}_{cc} é dada por

$$\mathcal{C}_{cc}(\hat{\rho}(T)) = |\rho_{12} + \rho_{14}| + |\rho_{12}^* + \rho_{14}| + |\rho_{12} - \rho_{14}| + |\rho_{12}^* - \rho_{14}|. \quad (6.11)$$

A eq. (6.11) nos fornece as correlações quânticas do modelo livre das superposições quânticas.

Figura 6.6 – Coerência correlacionada \mathcal{C}_{cc} representada pela curva azul e a concorrência \mathcal{C} pela curva vermelha *versus* a temperatura T na escala logarítmica para diferentes valores do parâmetro θ . Em particular, fixamos os parâmetros em $\Delta = 2$, $t = 1$ e $\alpha = 10$. Nas Figuras (a) $\theta = 0$, (b) $\theta = \frac{\pi}{8}$, (c) $\theta = \frac{0,95\pi}{4}$ e (d) $\theta = \frac{\pi}{4}$.



Fonte: Produção do próprio autor (2022).

Nas Figuras 6.6, apresentamos a coerência correlacionada \mathcal{C}_{cc} juntamente com a concorrência \mathcal{C} em função da temperatura T . Aqui fixamos $t = 1$, $\alpha = 10$ e $\Delta = 2$ para diferentes valores de θ , de acordo com cada Figura. Para uma compreensão

mais razoável do comportamento da coerência correlacionada \mathcal{C}_{cc} e da concorrência \mathcal{C} , incluímos a coerência quântica total $\mathcal{C}_{l_1}(\hat{\rho}_{AB})$, (curva preta) e a coerência quântica local $\mathcal{C}_{l_1}(\hat{\rho}_A) + \mathcal{C}_{l_1}(\hat{\rho}_B)$, (curva preta tracejada). Na Figura (a), plotamos a coerência correlacionada \mathcal{C}_{cc} e a concorrência \mathcal{C} em função da temperatura na escala logarítmica $\ln(T)$, na base das energias próprias que correspondem aos ângulos, $\theta = 0$ e $\varphi = 0$, para a transformação U (dada pela eq. (4.69)). Notamos que quando a temperatura $T \rightarrow 0$, a coerência correlacionada \mathcal{C}_{cc} (curva azul) é maior que a curva do emaranhamento térmico \mathcal{C} (curva vermelha). A diferença entre essas duas medidas são as correlações quânticas não emaranhadas. Também notamos que a medida que a temperatura aumenta, o emaranhamento quântico decai até a temperatura limiar $T_{th} \approx 4.5$, enquanto que a coerência quântica total $\mathcal{C}_{l_1}(\hat{\rho}_{AB})$ (curva preta), diminui gradualmente conforme a temperatura aumenta. A coerência quântica local $\mathcal{C}_{l_1}(\hat{\rho}_A) + \mathcal{C}_{l_1}(\hat{\rho}_B)$ (curva preta tracejada) não apresenta grandes valores significativos comparado com as medidas de \mathcal{C}_{cc} , \mathcal{C} e $\mathcal{C}_{l_1}(\hat{\rho}_{AB})$. Isso significa que boa parte da coerência quântica é encontrada nas correlações quânticas.

Na Figura (b), repetimos a mesma análise, contudo, adotamos o valor de $\theta = \frac{\pi}{8}$. Observamos que ocorre uma redução da coerência quântica local juntamente com a coerência quântica total, gerando uma diminuição na coerência correlacionada \mathcal{C}_{cc} . É interessante notar que o comportamento da coerência correlacionada, bem como da coerência quântica total e local, seguem qualitativamente a mesma tendência da Figura (a). Na Figura (c), adotamos o valores dos parâmetros $\theta = \frac{0.95\pi}{4}$ e $\varphi = 0$, onde notamos a ocorrência de uma diminuição considerável da coerência correlacionada \mathcal{C}_{cc} . Além disso, podemos observar que a coerência quântica local é quase nula. Então, vemos que a coerência quântica total é quase inteiramente constituída pela coerência correlacionada, para esta escolha particular de θ . Por outro lado, para altas temperaturas T , após o desaparecimento da concorrência e da coerência quântica local, a coerência quântica total é composta unicamente por correlações quânticas não emaranhadas.

E finalmente, para recuperar a independência da base da coerência correlacionada \mathcal{C}_{cc} , escolhemos a base natural local de $\hat{\rho}_A(T)$, que é obtida escolhendo $\theta = \frac{\pi}{4}$ e $\varphi = 0$, lembrando que a matriz reduzida $\hat{\rho}_B(T)$ já é diagonal. Desta forma, na Figura (d) temos o emaranhamento térmico \mathcal{C} e a coerência correlacionada \mathcal{C}_{cc} , analisados para o caso da base incoerente $\theta = \frac{\pi}{4}$ e $\varphi = 0$. É interessante ver que em baixas temperaturas as

correlações quânticas emaranhadas do sistema quântico são armazenadas inteiramente dentro da coerência quântica, isso indica, neste caso, que a coerência correlacionada captura todo o emaranhamento térmico. À medida que a temperatura aumenta, as flutuações térmicas geram um ligeiro aumento na coerência quântica, enquanto isso, o emaranhamento decai e desaparece na temperatura limiar $T_{th} \approx 4,5$. Finalmente, a coerência correlacionada decai monotonamente a zero, $\mathcal{C}_{cc} = 0$.

7 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Em resumo, neste trabalho estudamos um modelo quântico imerso em um banho térmico. O sistema é composto por um único elétron confinado em um ponto quântico duplo submetido a um campo magnético homogêneo externo. Os pontos quânticos são acoplados por tunelamento juntamente de outro acoplamento de tunelamento *spin-flip* denominado efeito Rashba. O modelo proposto foi resolvido e os efeitos da temperatura na coerência quântica foram analisados. Inicialmente, obtivemos o espectro de energia do modelo que logo em seguida é discutido. Os resultados mostram que o parâmetro de tunelamento contribui para a quebra da degenerescência no espectro de energia, enquanto que o parâmetro da interação Rashba, induz fenômenos de anti-cruzamento (*anti-crossing*) no espectro de energia eletrônica.

Além da discussão a respeito do espectro de energia, investigamos o emaranhamento térmico e a coerência correlacionada. O modelo estudado é particularmente interessante devido a possibilidade de ter correlações quânticas em um único elétron confinado no sistema eletrônico de ponto quântico duplo. A correlação quântica é gerada pelos *qubits* de carga e de *spin*, este último controlado pela interação Rashba. Nossos resultados mostram que a interação Rashba ativa o emaranhamento térmico do sistema e pode ser ajustado convenientemente. Além disso, encontramos uma conexão direta entre o emaranhamento e a coerência quântica. Comparamos a concorrência com a coerência correlacionada, que em última análise, é responsável pelas correlações quânticas. A coerência quântica é um conceito dependente de base, e por conta disso, escolhemos uma base incoerente para a coerência local ($\theta = \frac{\pi}{4}, \varphi = 0$). Para esta escolha de base, a coerência quântica está contida totalmente nas correlações entre os subsistemas.

Em particular, relatamos que a medida de coerência correlacionada é igual à concorrência para baixas temperaturas. O emaranhamento térmico deve então ser visto como um caso particular de coerência quântica. Além disso, o modelo mostrou um aumento peculiar da coerência correlacionada induzido termicamente devido ao surgimento de correlações quânticas não emaranhadas à medida que o emaranhamento diminuía. O emaranhamento quântico desaparece quando T é alto o suficiente, pois a flutuação térmica domina o sistema. No geral, nossos resultados destacam que a

interação Rashba pode ser usada com sucesso para melhorar o desempenho térmico do emaranhamento quântico.

REFERÊNCIAS

- ALEINER, I.; BROUWER, P.; GLAZMAN, L. Quantum effects in coulomb blockade. **Physics Reports**, v. 358, n. 5, p. 309–440, 2002.
- AMICO, L. et al. Entanglement in many-body systems. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 80, p. 517–576, May 2008.
- ANJOU, B. D.; BURKARD, G. Optimal dispersive readout of a spin qubit with a microwave resonator. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 100, p. 245427, Dec 2019.
- ARNESEN, M.; BOSE, S.; VEDRAL, V. Natural thermal and magnetic entanglement in the 1d heisenberg model. **Physical Review Letters**, APS, v. 87, n. 1, p. 017901, 2001.
- ASHOORI, R. Electrons in artificial atoms. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 379, n. 6564, p. 413–419, 1996.
- ASPECT, A.; DALIBARD, J.; ROGER, G. Experimental test of bell's inequalities using time-varying analyzers. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 49, p. 1804–1807, Dec 1982.
- ASPECT, A.; GRANGIER, P.; ROGER, G. Experimental tests of realistic local theories via bell's theorem. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 47, p. 460–463, Aug 1981.
- AUDENAERT, K.; VERSTRAETE, F.; MOOR, B. D. Variational characterizations of separability and entanglement of formation. **Phys. Rev. A**, American Physical Society, v. 64, p. 052304, Oct 2001.
- BARDEEN, J.; BRATTAIN, W. H. The transistor, a semi-conductor triode. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 74, p. 230–231, Jul 1948.
- BAUMGRATZ, T.; CRAMER, M.; PLENIO, M. B. Quantifying coherence. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 113, p. 140401, Sep 2014.
- BELL, J. S. On the einstein podolsky rosen paradox. **Physics Physique Fizika**, APS, v. 1, n. 3, p. 195, 1964.
- BENITO, M. et al. Input-output theory for spin-photon coupling in si double quantum dots. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 96, p. 235434, Dec 2017.
- BENNETT, C. H. Quantum cryptography using any two nonorthogonal states. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 68, p. 3121–3124, May 1992.
- BENNETT, C. H. et al. Purification of noisy entanglement and faithful teleportation via noisy channels. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 76, p. 722–725, Jan 1996.
- BENNETT, C. H.; DIVINCENZO, D. P. Quantum information and computation. **nature**, Nature Publishing Group, v. 404, n. 6775, p. 247–255, 2000.
- BERCIOUX, D.; LUCIGNANO, P. Quantum transport in rashba spin-orbit materials: a review. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, v. 78, n. 10, p. 106001, 2015.
- BIMBERG, D.; GRUNDMANN, M.; LEDENTSOV, N. N. **Quantum dot heterostructures**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1999.

BRACKER, A. S. et al. Engineering electron and hole tunneling with asymmetric inas quantum dot molecules. **Applied Physics Letters**, v. 89, n. 23, p. 233110, 2006.

BRUB, D. Characterizing entanglement. **Journal of Mathematical Physics**, v. 43, n. 9, p. 4237–4251, 2002.

BUENO, R. T. et al. Semicondutores heteroestruturados: uma abordagem sobre os principais desafios para a obtenção e aplicação em processos fotoquímicos ambientais e energéticos. **Química Nova**, SciELO Brasil, v. 42, n. 6, p. 661–675, 2019.

BYCHKOV, Y. A. Properties of 2d electron gas with lifted spectral degeneracy. **JETP Lett.**, v. 39, n. 2, p. 78–81, 1984.

BYCHKOV, Y. A.; RASHBA, E. I. Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, IOP Publishing, v. 17, n. 33, p. 6039–6045, nov 1984.

CAMARGO, A. et al. Simulação do protocolo bb84 de criptografia quântica utilizando um feixe laser intenso. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, SciELO Brasil, v. 39, 2016.

CHEN, K.; WU, L.-A. A matrix realignment method for recognizing entanglement. **Quantum Information and Computation**, v. 3, 06 2002.

CHITAMBAR, E.; GOUR, G. Quantum resource theories. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 91, p. 025001, Apr 2019.

CHO, A.; ARTHUR, J. Molecular beam epitaxy. **Progress in Solid State Chemistry**, v. 10, p. 157–191, 1975.

CHOTORLISHVILI, L. et al. Spin-orbit-coupled quantum memory of a double quantum dot. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 100, p. 174413, Nov 2019.

CHU, W.; ZHU, J.-L. Entangled exciton states and their evaluation in coupled quantum dots. **Applied Physics Letters**, v. 89, n. 5, p. 053122, 2006.

CHUANG, M. A. N. . I. L. **Quantum Computation and Quantum Information**. 7. ed. [S.l.]: United States of America by Cambridge University Press, New York, 2010. v. 1. 10th Anniversary edition.

COELHO, A. S. O. **Emaranhamento multicor para redes de informação quântica**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2013.

COHEN-TANNOUJDI, C.; DIU, B.; LALOE, F. **Quantum mechanics**. [S.l.]: Wiley-VCH, 1986. v. 1.

DATTA, S.; DAS, B. Electronic analog of the electro-optic modulator. **Applied Physics Letters**, v. 56, n. 7, p. 665–667, 1990.

DEUTSCH, D. Quantum theory, the church–turing principle and the universal quantum computer. **Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences**, The Royal Society London, v. 400, n. 1818, p. 97–117, 1985.

DEVEAUD, B.; QUATTROPANI, A.; SCHWENDIMANN, P. **Quantum coherence in solid state systems**. [S.l.]: IOS Press, 2009. v. 171.

DIVINCENZO, D.; LOSS, D. Quantum information is physical. **Superlattices and Microstructures**, v. 23, n. 3, p. 419–432, 1998. ISSN 0749-6036.

DIVINCENZO, D. P. Double quantum dot as a quantum bit. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 309, n. 5744, p. 2173–2174, 2005.

DOVICCHI, J. C. L. Alguns bits de qubits: Uma introdução sobre bits quânticos. **The name of the journal**, v. 4, n. 2, p. 201–213, jul. 1993. An optional note.

DRESSELHAUS, G. Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 100, p. 580–586, Oct 1955.

DUARTE, F. J. **Fundamentals of Quantum Entanglement**. [S.l.]: IOP Publishing Bristol, 2019.

EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B.; ROSEN, N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 47, p. 777–780, May 1935.

ESAKI L. E TSU, R. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors. **IBM J. Res. Dev.**, IBM Corp., v. 14, n. 1, jan 1970.

FANO, U. Description of states in quantum mechanics by density matrix and operator techniques. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 29, p. 74–93, Jan 1957.

FILGUEIRAS, C.; ROJAS, O.; ROJAS, M. Thermal entanglement and correlated coherence in two coupled double quantum dots systems. **Annalen der Physik**, v. 532, n. 8, p. 2000207, 2020.

FREITAS, M.; FILGUEIRAS, C.; ROJAS, M. The effects of an impurity in an ising-xxz diamond chain on thermal entanglement, on quantum coherence, and on quantum teleportation. **Annalen der Physik**, v. 531, n. 11, p. 1900261, 2019.

FRONING, F. N. et al. Ultrafast hole spin qubit with gate-tunable spin–orbit switch functionality. **Nature Nanotechnology**, Nature Publishing Group, v. 16, n. 3, p. 308–312, 2021.

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.

GINZEL, F. et al. Spin shuttling in a silicon double quantum dot. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 102, p. 195418, Nov 2020.

GIROLAMI, D.; ADESSO, G. Quantum discord for general two-qubit states: Analytical progress. **Phys. Rev. A**, American Physical Society, v. 83, p. 052108, May 2011.

GLAUBER, R. J. **Quantum theory of optical coherence: selected papers and lectures**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2007.

GOLDSTEIN, J. I. et al. **Scanning electron microscopy and X-ray microanalysis**. [S.l.]: Springer, 2017.

- GOLOVACH, V. N.; LOSS, D. Electron spins in artificial atoms and molecules for quantum computing. **Semiconductor Science and Technology**, IOP Publishing, v. 17, n. 4, p. 355–366, Mar 2002.
- GORMAN, J.; HASKO, D.; WILLIAMS, D. Charge-qubit operation of an isolated double quantum dot. **Physical review letters**, APS, v. 95, n. 9, p. 090502, 2005.
- GORMAN, J.; HASKO, D. G.; WILLIAMS, D. A. Charge-qubit operation of an isolated double quantum dot. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 95, p. 090502, Aug 2005.
- GRIFFITHS, D. J. **Mecânica Quântica**. 2. ed. [S.l.]: Pearson, 2011.
- GULLANS, M. J. et al. Quantum coding with low-depth random circuits. **Phys. Rev. X**, American Physical Society, v. 11, p. 031066, Sep 2021.
- HASSANIEN, A. E.; ELHOSENY, M.; KACPRZYK, J. Quantum information protocols for cryptography. In: **Quantum Computing: An Environment for Intelligent Large Scale Real Application**. [S.l.]: Springer International Publishing, 2018.
- HENDRICKX, N. et al. A single-hole spin qubit. **Nature communications**, Nature Publishing Group, v. 11, n. 1, p. 1–6, 2020.
- HERMAN, M. A.; SITTER, H. **Molecular beam epitaxy: fundamentals and current status**. 2. ed. [S.l.]: Springer; 2nd ed. 1996. Softcover reprint of the original 2nd ed. 1996, 2013. v. 7.
- HORODECKI, M.; HORODECKI, P.; HORODECKI, R. Separability of mixed states: necessary and sufficient conditions. **Physics Letters A**, Elsevier BV, v. 223, n. 1–2, p. 1–8, Nov 1996. ISSN 0375-9601.
- HORODECKI, P. Separability criterion and inseparable mixed states with positive partial transposition. **Physics Letters A**, v. 232, n. 5, p. 333–339, 1997. ISSN 0375-9601.
- HORODECKI, R. et al. Quantum entanglement. **Reviews of modern physics**, American Physical Society, v. 81, n. 2, p. 865, 2009.
- HU, M.-L. et al. Quantum coherence and geometric quantum discord. **Physics Reports**, Elsevier, v. 762, p. 1–100, 2018.
- HUANG, K. **Introduction to statistical physics**. [S.l.]: CRC press, 2009. v. 1.
- HUELGA, S.; PLENIO, M. Vibrations, quanta and biology. **Contemporary Physics**, Taylor Francis, v. 54, n. 4, p. 181–207, 2013.
- IGOR; FABIAN, J.; SARMA, S. D. Spintronics: Fundamentals and applications. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 76, p. 323–410, Apr 2004.
- ITAKURA, T.; TOKURA, Y. Dephasing due to background charge fluctuations. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 67, p. 195320, May 2003.
- KAMTA, G. L.; STARACE, A. F. Anisotropy and magnetic field effects on the entanglement of a two qubit heisenberg XY chain. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 88, p. 107901, Feb 2002.

- KARLSTRÖM, O. et al. Increasing thermoelectric performance using coherent transport. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 84, p. 113415, Sep 2011.
- KEIMER, B. et al. From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 518, n. 7538, p. 179–186, 2015.
- KENYON, I. R. **Quantum 20/20: Fundamentals, Entanglement, Gauge Fields, Condensates and Topology**. [S.l.]: oxford university press, 2019.
- KRAFT, T.; PIANI, M. Genuine correlated coherence. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, IOP Publishing, v. 51, n. 41, p. 414013, sep 2018.
- LEE, T. et al. Quantum query complexity of state conversion. 2011.
- LEVI, F.; MINTERT, F. A quantitative theory of coherent delocalization. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 16, n. 3, p. 033007, mar 2014.
- LI, C.-M. et al. Witnessing quantum coherence: from solid-state to biological systems. **Scientific reports**, Nature Publishing Group, v. 2, n. 1, p. 1–9, 2012.
- LI, R.; YOU, J. Q. Anisotropic exchange coupling in a nanowire double quantum dot with strong spin-orbit coupling. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 90, p. 035303, Jul 2014.
- LI, Y.-C. et al. Qubit gates with simultaneous transport in double quantum dots. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 20, n. 11, p. 113029, Nov 2018.
- LIU, Z.-H. et al. Control of the two-electron exchange interaction in a nanowire double quantum dot. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 98, p. 241303, Dec 2018.
- LOSS, D.; DIVINCENZO, D. P. Quantum computation with quantum dots. **Phys. Rev. A**, v. 57, p. 120–126, Jan 1998.
- LOSTAGLIO, M.; JENNINGS, D.; RUDOLPH, T. Description of quantum coherence in thermodynamic processes requires constraints beyond free energy. **Nature communications**, Nature Publishing Group, v. 6, n. 1, p. 1–9, 2015.
- MA, J. et al. Converting coherence to quantum correlations. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 116, p. 160407, Apr 2016.
- MADHAV, A. V.; CHAKRABORTY, T. Electronic properties of anisotropic quantum dots in a magnetic field. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 49, p. 8163–8168, Mar 1994.
- MANCHON, A. et al. New perspectives for rashba spin - orbit coupling. **Nature materials**, Nature Publishing Group, v. 14, n. 9, p. 871–882, 2015.
- MANDEL, L.; WOLF, E. **Optical coherence and quantum optics**. [S.l.]: Cambridge university press, 1995.
- MCHUGH, K. J. et al. Biocompatible near-infrared quantum dots delivered to the skin by microneedle patches record vaccination. **Science translational medicine**, American Association for the Advancement of Science, v. 11, n. 523, 2019.

- MELO, C. P. d.; PIMENTA, M. Nanociências e nanotecnologia. **Parcerias estratégicas**, v. 9, n. 18, p. 09–22, 2010.
- MICHLER, P. **Single semiconductor quantum dots**. [S.l.]: Springer, 2009. v. 28.
- MIELKE, J.; PETTA, J. R.; BURKARD, G. Nuclear spin readout in a cavity-coupled hybrid quantum dot-donor system. **PRX Quantum**, American Physical Society, v. 2, p. 020347, Jun 2021.
- MINTERT, F. et al. Measures and dynamics of entangled states. **Physics Reports**, v. 415, n. 4, p. 207–259, 2005. ISSN 0370-1573.
- MUTTER, P. M.; BURKARD, G. All-electrical control of hole singlet-triplet spin qubits at low-leakage points. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 104, p. 195421, Nov 2021.
- NEUMANN, J. v. Wahrscheinlichkeitstheoretischer aufbau der quantenmechanik. **Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse**, v. 1927, p. 245–272, 1927.
- NIELSEN, M. A. **Quantum Information Theory**. Tese (Doutorado em Física) — University of New Mexico, 1998.
- NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. Quantum computation and quantum information. **American Journal of Physics**, v. 70, n. 5, p. 558–559, 2002.
- NIELSEN, M. A.; KEMPE, J. Separable states are more disordered globally than locally. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 86, p. 5184–5187, May 2001.
- NITTA, J. et al. Gate control of spin-orbit interaction in an inverted as heterostructure. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 78, p. 1335–1338, Feb 1997.
- NOWAK, M. P.; SZAFRAN, B. Spin-polarization anisotropy in a narrow spin-orbit-coupled nanowire quantum dot. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 87, p. 205436, May 2013.
- OLIVEIRA, C. et al. Quantum confinement of carriers in heterostructured gaas/gap quantum wires. **Microelectronics Journal**, v. 36, n. 11, p. 1049–1051, 2005. 4th Workshop of Semiconductor Nanodevices and Nanostructured Materials.
- OLIVEIRA, C. R. M. d. et al. **Estudo de confinamento quântico em semicondutores II-VI: Poços quânticos e Pontos quânticos**. Tese (Doutorado), 1995.
- OLIVEIRA, J. L. D. de; ROJAS, M.; FILGUEIRAS, C. Two coupled double quantum-dot systems as a working substance for heat machines. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 104, p. 014149, Jul 2021.
- OLLIVIER, H.; ZUREK, W. H. Quantum discord: A measure of the quantumness of correlations. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 88, p. 017901, Dec 2001.
- PERES, A. Separability criterion for density matrices. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 77, p. 1413–1415, Aug 1996.
- PESSOA, O. J. **Conceitos de física quântica**. 4. ed. [S.l.]: São Paulo: Livraria da Física, 2019. v. 1.

- PIZA, A. de T. **Sistemas quânticos compostos e emaranhamento, sistemas quânticos abertos e decoerência**. Tese (Doutorado) — Notas de aula, Escola de Física Teórica-USP, 2009.
- POSZWA, A. Decoherence of spin states induced by rashba spin-orbit coupling. **Physica Scripta**, IOP Publishing, v. 93, n. 2, p. 025102, jan 2018.
- PRADO, S. J. Estudo das propriedades eletrônicas e ópticas em pontos quânticos duplos. **RECEN-Revista Ciências Exatas e Naturais**, v. 18, n. 2, p. 282–295, 2016.
- PURKAYASTHA, A. et al. Tunable phonon-induced steady-state coherence in a double-quantum-dot charge qubit. **npj Quantum Information**, Nature Publishing Group, v. 6, n. 1, p. 1–7, 2020.
- QIN, L.-G.; TIAN, L.-J.; YANG, G.-H. Quantum entanglement and teleportation in a vertical quantum dot. **International Journal of Theoretical Physics**, Springer, v. 52, n. 12, p. 4313–4322, 2013.
- RAIMOND, J. M.; BRUNE, M.; HAROCHE, S. Manipulating quantum entanglement with atoms and photons in a cavity. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 73, p. 565–582, Aug 2001.
- RAO, D. D. B.; GHOSH, S.; PANIGRAHI, P. K. Generation of entangled channels for perfect teleportation using multielectron quantum dots. **Phys. Rev. A**, American Physical Society, v. 78, p. 042328, Oct 2008.
- RIBEIRO, A. S. L. **Interações Rashba e Dresselhaus induzidas por deriva de spin**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2018.
- RIGOLIN, G. G. **Estados quânticos emaranhados**. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Estadual de Campinas Instituto de Física, 2005.
- ROJAS, M.; SOUZA, S.; ROJAS, O. Entangled state teleportation through a couple of quantum channels composed of xxz dimers in an ising-xxz diamond chain. **Annals of Physics**, v. 377, p. 506–517, 2017. ISSN 0003-4916.
- RUNGTA, P. et al. Universal state inversion and concurrence in arbitrary dimensions. **Phys. Rev. A**, American Physical Society, v. 64, p. 042315, Sep 2001.
- SALINAS, S. R. **Introdução a física estatística**. 2. ed. [S.l.]: Edusp, 1997. v. 9. (2, v. 9).
- SANDRI, C. et al. Pontos quânticos ambientalmente amigáveis: Destaque para o óxido de zinco. **Química Nova**, scielo, v. 40, p. 1215 – 1227, Out 2017.
- SCHLIEMANN, J. Colloquium: Persistent spin textures in semiconductor nanostructures. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 89, p. 011001, Jan 2017.
- SCHUMACHER, B. Quantum coding. **Phys. Rev. A**, American Physical Society, v. 51, p. 2738–2747, Apr 1995.
- SHOR, P. Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring. In: **Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science**. [S.l.: s.n.], 1994. p. 124–134.

- SILVA, E. A. de Andrada e; ROCCA, G. C. L. Rashba spin splitting in semiconductor quantum wires. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 67, p. 165318, Apr 2003.
- SILVA, E. dos S. **Ponto quântico com interação de Rashba no limite de largura de banda zero**. Dissertação (Mestrado em física), 2013.
- STRELTSOV, A.; ADESSO, G.; PLENIO, M. B. Colloquium: Quantum coherence as a resource. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 89, p. 041003, Oct 2017.
- STRELTSOV, A. et al. Measuring quantum coherence with entanglement. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 115, p. 020403, Jul 2015.
- SUN, Y.; MAO, Y.; LUO, S. From quantum coherence to quantum correlations. **EPL (Europhysics Letters)**, IOP Publishing, v. 118, n. 6, p. 60007, 2017.
- SZAFRAN, B. Paired electron motion in interacting chains of quantum dots. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 101, p. 075306, Feb 2020.
- TAN, K. C. et al. Unified view of quantum correlations and quantum coherence. **Phys. Rev. A**, American Physical Society, v. 94, p. 022329, Aug 2016.
- UHLMANN, A. Fidelity and concurrence of conjugated states. **Phys. Rev. A**, American Physical Society, v. 62, p. 032307, Aug 2000.
- VAZQUEZ, H. et al. Probing the conductance superposition law in single-molecule circuits with parallel paths. **Nature Nanotechnology**, Nature Publishing Group, v. 7, n. 10, p. 663–667, 2012.
- VEDRAL, V. et al. Quantifying entanglement. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 78, p. 2275–2279, Mar 1997.
- VELDHORST, M. et al. An addressable quantum dot qubit with fault-tolerant control-fidelity. **Nature nanotechnology**, Nature Publishing Group, v. 9, n. 12, p. 981–985, 2014.
- VOJTA, M. Quantum phase transitions. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, v. 66, n. 12, p. 2069–2110, nov 2003.
- WANG, J.-Y. et al. Anisotropic pauli spin-blockade effect and spin–orbit interaction field in an inas nanowire double quantum dot. **Nano Letters**, ACS Publications, v. 18, n. 8, p. 4741–4747, 2018.
- WANG, K. et al. Spin manipulation in semiconductor quantum dots qubit. **Chinese Physics B**, IOP Publishing, v. 27, n. 9, p. 090308, Sep 2018.
- WILDE, M. M. **Quantum information theory**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2013.
- WOOTTERS, W. K. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 80, p. 2245–2248, Mar 1998.
- WOOTTERS, W. K. Entanglement of formation and concurrence. **Quantum Inf. Comput.**, v. 1, n. 1, p. 27–44, 2001.

YANG, Y.-C.; COPPERSMITH, S. N.; FRIESEN, M. High-fidelity entangling gates for quantum-dot hybrid qubits based on exchange interactions. **Phys. Rev. A**, American Physical Society, v. 101, p. 012338, Jan 2020.

YONG, K.-T. et al. Quantum rod bioconjugates as targeted probes for confocal and two-photon fluorescence imaging of cancer cells. **Nano Letters**, v. 7, n. 3, p. 761–765, 2007. PMID: 17288490.

APÊNDICE A – Elementos da Matriz Densidade no Banho Térmico

Apresentamos o cálculo dos elementos da matriz densidade $\hat{\rho}_{(T)}$ (eq. (5.20)) na base $\{|L0\rangle, |L1\rangle, |R0\rangle, |R1\rangle\}$. Para o nosso modelo térmico de apenas um único elétron confinado em um ponto quântico duplo, o operador densidade no equilíbrio térmico (5.18), é dado por

$$\hat{\rho}_{(T)} = \frac{e^{-\beta\epsilon_1}}{Z} |\varphi_1\rangle\langle\varphi_1| + \frac{e^{-\beta\epsilon_2}}{Z} |\varphi_2\rangle\langle\varphi_2| + \frac{e^{-\beta\epsilon_3}}{Z} |\varphi_3\rangle\langle\varphi_3| + \frac{e^{-\beta\epsilon_4}}{Z} |\varphi_4\rangle\langle\varphi_4|, \quad (1)$$

substituindo os vetores de estado do Hamiltoniano (eq. (5.1))

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{(T)} = & \frac{e^{-\beta\epsilon_1}}{Z} A_+^2 [ia_+ (|L0\rangle + |R0\rangle) - |L1\rangle + |R1\rangle] [-ia_+ (\langle L0| + \langle R0|) - \langle L1| + \langle R1|] + \\ & \frac{e^{-\beta\epsilon_2}}{Z} A_-^2 [ia_- (|L0\rangle + |R0\rangle) - |L1\rangle + |R1\rangle] [-ia_- (\langle L0| + \langle R0|) - \langle L1| + \langle R1|] + \\ & \frac{e^{-\beta\epsilon_3}}{Z} B_+^2 [ib_+ (|L0\rangle - |R0\rangle) + |L1\rangle + |R1\rangle] [-ib_+ (\langle L0| - \langle R0|) + \langle L1| + \langle R1|] + \\ & \frac{e^{-\beta\epsilon_4}}{Z} B_-^2 [ib_- (|L0\rangle - |R0\rangle) + |L1\rangle + |R1\rangle] [-ib_- (\langle L0| - \langle R0|) + \langle L1| + \langle R1|] \end{aligned}, \quad (2)$$

desenvolvendo a eq. (2), teremos o operador densidade $\hat{\rho}_{(T)}$

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{(T)} = & \frac{A_+^2 e^{-\beta\epsilon_1}}{Z} \left[a_+^2 (|L0\rangle\langle L0| + |L0\rangle\langle R0| + |R0\rangle\langle L0| + |R0\rangle\langle R0|) \right. \\ & + ia_+ (|L1\rangle\langle L0| + |L0\rangle\langle R1| + |L1\rangle\langle R0| + |R0\rangle\langle R1|) \\ & - ia_+ (|L0\rangle\langle L1| + |R0\rangle\langle L1| + |R1\rangle\langle L0| + |R1\rangle\langle R0|) \\ & + |L1\rangle\langle L1| - |L1\rangle\langle R1| - |R1\rangle\langle L1| + |R1\rangle\langle R1| \left. + \right. \\ & \frac{A_-^2 e^{-\beta\epsilon_2}}{Z} \left[a_-^2 (|L0\rangle\langle L0| + |L0\rangle\langle R0| + |R0\rangle\langle L0| + |R0\rangle\langle R0|) \right. \\ & + ia_- (|L1\rangle\langle L0| + |L0\rangle\langle R1| + |L1\rangle\langle R0| + |R0\rangle\langle R1|) \\ & - ia_- (|L0\rangle\langle L1| + |R0\rangle\langle L1| + |R1\rangle\langle L0| + |R1\rangle\langle R0|) \\ & + |L1\rangle\langle L1| - |L1\rangle\langle R1| - |R1\rangle\langle L1| + |R1\rangle\langle R1| \left. + \right. \\ & \frac{B_+^2 e^{-\beta\epsilon_3}}{Z} \left[b_+^2 (|L0\rangle\langle L0| - |L0\rangle\langle R0| - |R0\rangle\langle L0| + |R0\rangle\langle R0|) \right. \\ & + ib_+ (|L0\rangle\langle L1| + |L0\rangle\langle R1| + |L1\rangle\langle R0| + |R1\rangle\langle R0|) \\ & - ib_+ (|L1\rangle\langle L0| + |R0\rangle\langle L1| + |R1\rangle\langle L0| + |R0\rangle\langle R1|) \\ & + |L1\rangle\langle L1| + |L1\rangle\langle R1| + |R1\rangle\langle L1| + |R1\rangle\langle R1| \left. + \right. \\ & \frac{B_-^2 e^{-\beta\epsilon_4}}{Z} \left[b_-^2 (|L0\rangle\langle L0| - |L0\rangle\langle R0| - |R0\rangle\langle L0| + |R0\rangle\langle R0|) \right. \\ & + ib_- (|L0\rangle\langle L1| + |L0\rangle\langle R1| + |L1\rangle\langle R0| + |R1\rangle\langle R0|) \\ & - ib_- (|L1\rangle\langle L0| + |R0\rangle\langle L1| + |R1\rangle\langle L0| + |R0\rangle\langle R1|) \\ & \left. + |L1\rangle\langle L1| + |L1\rangle\langle R1| + |R1\rangle\langle L1| + |R1\rangle\langle R1| \right]. \end{aligned} \quad (3)$$

Podemos calcular os elementos da matriz densidade através da definição (5.19)

$$\rho_{ij} = \langle \varphi_i | \hat{\rho}(t) | \varphi_j \rangle,$$

na base $\{|L0\rangle, |L1\rangle, |R0\rangle, |R1\rangle\}$, assim teremos

$$\hat{\rho}_{(AB)} = \begin{bmatrix} \langle L0 | \hat{\rho}_{(T)} | L0 \rangle & \langle L0 | \hat{\rho}_{(T)} | L1 \rangle & \langle L0 | \hat{\rho}_{(T)} | R0 \rangle & \langle L0 | \hat{\rho}_{(T)} | R1 \rangle \\ \langle L1 | \hat{\rho}_{(T)} | L0 \rangle & \langle L1 | \hat{\rho}_{(T)} | L1 \rangle & \langle L1 | \hat{\rho}_{(T)} | R0 \rangle & \langle L1 | \hat{\rho}_{(T)} | R1 \rangle \\ \langle R0 | \hat{\rho}_{(T)} | L0 \rangle & \langle R0 | \hat{\rho}_{(T)} | L1 \rangle & \langle R0 | \hat{\rho}_{(T)} | R0 \rangle & \langle R0 | \hat{\rho}_{(T)} | R1 \rangle \\ \langle R1 | \hat{\rho}_{(T)} | L0 \rangle & \langle R1 | \hat{\rho}_{(T)} | L1 \rangle & \langle R1 | \hat{\rho}_{(T)} | R0 \rangle & \langle R1 | \hat{\rho}_{(T)} | R1 \rangle \end{bmatrix}, \quad (4)$$

desenvolvendo a álgebra de cada elemento da equação acima, teremos a matriz densidade dada na equação (5.20)

$$\hat{\rho}_{(AB)} = \begin{bmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \rho_{14} \\ \rho_{12}^* & \rho_{22} & \rho_{14} & \rho_{24} \\ \rho_{13} & \rho_{14}^* & \rho_{11} & -\rho_{12} \\ \rho_{14}^* & \rho_{24} & -\rho_{12}^* & \rho_{22} \end{bmatrix},$$

que descreve o estado do sistema no banho térmico.

APÊNDICE B – Concorrência para $T = 0$

O operador densidade que descreve o sistema quântico no estado fundamental, $|\varphi_2\rangle = A_- [ia_- (|L0\rangle + |R0\rangle) - |L1\rangle + |R1\rangle]$, é dado por

$$\hat{\rho}_{(T=0)} = |\varphi_2\rangle\langle\varphi_2|. \quad (5)$$

A representação matricial de $\hat{\rho}_{(T=0)}$, na base $\{|L0\rangle, |L1\rangle, |R0\rangle, |R1\rangle\}$ será

$$\hat{\rho}_{(T=0)} = \begin{bmatrix} \rho_{11} & -\rho_{14} & \rho_{11} & \rho_{14} \\ \rho_{14} & \rho_{22} & \rho_{14} & -\rho_{22} \\ \rho_{11} & -\rho_{14} & \rho_{11} & \rho_{14} \\ -\rho_{14} & -\rho_{22} & -\rho_{14} & \rho_{22} \end{bmatrix}. \quad (6)$$

Os elementos da matriz de $\hat{\rho}_{(T=0)}$ são dados da seguinte forma

$$\rho_{11} = A_-^2 a_-^2, \quad (7)$$

$$\rho_{14} = A_-^2 ia_-, \quad (8)$$

$$\rho_{22} = A_-^2, \quad (9)$$

onde

$$A_- = \frac{1}{\sqrt{2} \sqrt{a_-^2 + 1}},$$

$$a_- = \frac{\Omega_+ - \sqrt{\Omega_+^2 + 4\alpha^2}}{2\alpha},$$

$$\Omega_+ = \Delta + 2t.$$

A partir da matriz densidade $\hat{\rho}_{(T=0)}$, eq. (6), podemos quantificar o emaranhamento do sistema através da concorrência \mathcal{C} de Wootters (WOOTTERS, 2001), discutida no capítulo 4. Em nosso modelo, substituindo a eq. (6) na eq. (4.59)

$$R = \hat{\rho} \cdot (\sigma^y \otimes \sigma^y) \cdot \hat{\rho}^* \cdot (\sigma^y \otimes \sigma^y),$$

obtemos a seguinte matriz R dada por

$$R = 2 \begin{bmatrix} |\rho_{14}|^2 + \rho_{11}\rho_{22} & -2\rho_{11}\rho_{14} & |\rho_{14}|^2 + \rho_{11}\rho_{22} & 2\rho_{11}\rho_{14} \\ 2\rho_{22}\rho_{14} & |\rho_{14}|^2 + \rho_{11}\rho_{22} & 2\rho_{22}\rho_{14} & -(|\rho_{14}|^2 + \rho_{11}\rho_{22}) \\ |\rho_{14}|^2 + \rho_{11}\rho_{22} & -2\rho_{11}\rho_{14} & |\rho_{14}|^2 + \rho_{11}\rho_{22} & 2\rho_{11}\rho_{14} \\ 2\rho_{22}\rho_{14} & -(|\rho_{14}|^2 + \rho_{11}\rho_{22}) & -2\rho_{22}\rho_{14} & |\rho_{14}|^2 + \rho_{11}\rho_{22} \end{bmatrix}. \quad (10)$$

Diagonalizando a matriz da eq. (10), obtemos quatro autovalores λ_i , onde, dois são nulos $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$, e dois são não nulos

$$\lambda_3 = 4\left(|\rho_{14}|^2 + \rho_{11}\rho_{22}\right) + 8\sqrt{|\rho_{11}\rho_{14}||\rho_{14}\rho_{22}|}, \quad (11)$$

$$\lambda_4 = 4\left(|\rho_{14}|^2 + \rho_{11}\rho_{22}\right) - 8\sqrt{|\rho_{11}\rho_{14}||\rho_{14}\rho_{22}|}, \quad (12)$$

logo, a expressão para a concorrência \mathcal{C} (eq. 4.60)

$$\mathcal{C}(\hat{\rho}) = \max\left(0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4}\right),$$

é da seguinte forma

$$\mathcal{C}_{(T=0)} = \max\left\{Re\left|\sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4}\right|, 0\right\}, \quad (13)$$

$$\mathcal{C}_{(T=0)} = 2 \max\left\{Re\left|\sqrt{V + 2\sqrt{|W|}} - \sqrt{V - 2\sqrt{|W|}}\right|, 0\right\}, \quad (14)$$

onde $V = |\rho_{14}|^2 + \rho_{11}\rho_{22}$ e $W = \rho_{14}^2\rho_{11}\rho_{22}$.