

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

*Aplicações da dinâmica de portadores de cargas em
semicondutores como sistemas quânticos abertos*

Jefferson Lira Santos

Uberlândia - MG

2021

JEFFERSON LIRA SANTOS

*Aplicações da dinâmica de portadores de cargas em
semicondutores como sistemas quânticos abertos*

Tese de Doutorado apresentada ao
Programa de Pós-graduação em
Física conforme Norma Regula-
mentar No.002/PPFIS/2020, necessária para
obtenção do título de Doutor em Física.

Orientadora: Profa. Dra. Liliana Sanz De La Torre

Coorientador: Prof. Dr. Augusto Miguel Alcalde Milla

Uberlândia - MG

2021

Ficha Catalográfica Online do Sistema de Bibliotecas da UFU
com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).

S237 Santos, Jefferson Lira, 1993-
2021 Aplicações da dinâmica de portadores de cargas em
semicondutores como sistemas quânticos abertos [recurso
eletrônico] / Jefferson Lira Santos. - 2021.

Orientadora: Liliana Sanz De La Torre.
Coorientador: Augusto Miguel Alcalde Milla.
Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Uberlândia,
Pós-graduação em Física.
Modo de acesso: Internet.
Disponível em: <http://doi.org/10.14393/ufu.te.2021.523>
Inclui bibliografia.
Inclui ilustrações.

1. Física. I. Torre, Liliana Sanz De La, 1974-,
(Orient.). II. Milla, Augusto Miguel Alcalde, 1964-,
(Coorient.). III. Universidade Federal de Uberlândia.
Pós-graduação em Física. IV. Título.

CDU: 53

Bibliotecários responsáveis pela estrutura de acordo com o AACR2:



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
 Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Física
 Av. João Naves de Ávila, 2121, Bloco 1A, Sala 213 - Bairro Santa Mônica, Uberlândia-MG, CEP 38400-902
 Telefone: (34) 3239-4309 - www.infis.ufu.br - cpqfisica@ufu.br



ATA DE DEFESA - PÓS-GRADUAÇÃO

Programa de Pós-Graduação em:	Física				
Defesa de:	Tese de Doutorado				
Data:	Trinta de agosto de 2021	Hora de início:	14:09	Hora de encerramento:	18:16
Matrícula do Discente:	11713FIS004				
Nome do Discente:	Jefferson Lira Santos				
Título do Trabalho:	<i>Aplicações da dinâmica de portadores de cargas em semicondutores como sistemas quânticos abertos.</i>				
Área de concentração:	Física				
Linha de pesquisa:	<i>Informação Quântica</i>				
Projeto de Pesquisa de vinculação:	INCT de Informação Quântica				

Reuniu-se por meio de Vídeo conferência a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Física, assim composta: Professores Doutores: Acácio Aparecido de Castro Andrade- INFIS/UFU, Fabrício Macedo de Souza - INFIS/UFU, Celso Jorge Villas-Bôas - UFSCAR, Felipe Fernandes Fanchini - UNESP/Baurú e Liliana Sanz de la Torre - INFIS/UFU orientadora do candidato. Participou como convidado o prof. Dr. Augusto Miguel Alcalde Milla, coorientador do candidato.

Iniciando os trabalhos a presidente da mesa, Dra. Liliana Sanz de la Torre, apresentou a Comissão Examinadora e o candidato, agradeceu a presença do público, e concedeu ao Discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação do Discente e o tempo de arguição e resposta foram conforme as normas do Programa.

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

Aprovado.

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

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

Nada mais havendo a tratar foram encerrados os trabalhos. Foi lavrada a presente ata que após lida e achada conforme foi assinada pela Banca Examinadora.



Documento assinado eletronicamente por **Celso Jorge Villas-Boas, Usuário Externo**, em 30/08/2021, às 20:46, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Felipe Fernandes Fanchini, Usuário Externo**, em 31/08/2021, às 07:48, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Liliana Sanz de La Torre, Professor(a) do Magistério Superior**, em 31/08/2021, às 07:50, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Acacio Aparecido de Castro Andrade, Professor(a) do Magistério Superior**, em 01/09/2021, às 09:13, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Fabrcio Macedo de Souza, Professor(a) do Magistério Superior**, em 02/09/2021, às 11:51, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **3010728** e o código CRC **08379DC1**.

*Para tirar meu Brasil dessa baderna
Só quando o morcego doar sangue
E o saci cruzar as pernas...*

(Bezerra da Silva)

Os passos que damos não precisam ser grandes, só precisam nos levar na direção certa.

(Agentes da S.H.I.E.L.D)

Aos que virão, vulgos “irmãos mais novos”.

Agradecimentos

O que é uma Tese de Doutorado? Pergunta difícil de responder! Segundo o Google, é o trabalho acadêmico que apresenta o resultado de uma pesquisa científica original. Isso é uma resposta precisa, mas quase vazia. Para mim, uma tese é um livro em branco que ao longo de “quatro” anos vai se escrevendo, e apesar de fazermos um planejamento inicial, não sabemos ao certo onde irá chegar. Aqui chego ao fim da minha! Mas como não percorri este caminho sozinho, gostaria de prestar alguns agradecimentos.

Primeiramente, gostaria de agradecer aos professores que contribuíram de alguma forma para minha formação: graduação, mestrado e doutorado. Em especial nestes últimos quatro anos a Liliana e o Augusto pela orientação, conselhos, preocupação e confiança em meu trabalho. Ao Villas por ter sido grande colaborador durante toda pesquisa e tirar todas minhas dúvidas. Ao José de los Santos, mais conhecido como Pepi, e Mariana Odashima por terem me acolhido logo que eu cheguei na cidade e sempre se preocuparem com o bem estar meu e da minha família. E por último ao Zé, que de ex-orientador se tornou um grande amigo, onde sempre que as contas apertavam surgia com uma sacada genial.

Agradeço também aos meus familiares, em especial minha esposa Felicia a qual tenho imensurável admiração, não tenho palavras para expressar tamanha gratidão, principalmente pelo melhor presente do mundo que você me deu, nossa pequena Isis. Também agradeço a mãeinha Gedalva, meus irmãos Jadilson, Gessika e Giselle, meus cunhados Gilmar, Thalita e Beatriz, minha sogrinha Sônia (que nem é parente), etc. vocês que mesmo distantes fisicamente sempre me apoiaram a cada passo tomado, deixo meus mais profundos agradecimentos que muitas vezes não deixei transparecer e peço desculpas pelo convívio familiar sacrificado nos últimos anos em prol desta Tese.

Aos meus amigos de longas datas e aos que a vida me agraciou aqui em Uberlândia, não

irei citar nomes para não ser injusto, deixo à todos aquele abraço que expressa uma profunda gratidão. Ao programa de Pós-Graduação em Física, agradeço pela oportunidade. Ao Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Informação Quântica, INCT-IQ, e a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, CAPES, pelo apoio financeiro.

Resumo

O comportamento dinâmico dos sistemas quânticos abertos desempenha um papel fundamental em muitas aplicações da mecânica quântica. Exemplos de aplicações incluem problemas como a perda de coerência quântica induzida pelo meio, a relaxação em sistemas de muitos corpos, o transporte quântico, a química quântica, a informação quântica, dentre outros. Em estreita analogia com um processo estocástico markoviano clássico, a interação de um sistema quântico aberto com um ambiente ruidoso é muitas vezes modelada, fenomenologicamente, por meio de um superoperador gerador independente do tempo na forma de Lindblad, que descreve tipicamente uma dinâmica de perda irreversível de características quânticas. Aqui, particularmente, estamos interessados em sistemas onde portadores de carga em dispositivos semicondutores estão acoplados a um ambiente térmico ruidoso. Neste contexto, apresentamos nossos estudos de dois problemas: as características da conversão fotovoltaica de uma molécula de pontos quânticos acoplada com um reservatório fonônico, sob a ação de radiação térmica, e a formação de estados quânticos de luz em nanocavidades acopladas com pontos quânticos. No segundo problema investigamos a transição quântico-clássico em estados de superposição mesoscópicas do campo no interior da nanocavidade e posteriormente exploramos a ação de uma engenharia de ambiente sobre tais estados.

Palavras chaves: Sistemas quânticos abertos, nanoestruturas semicondutoras, fotocélulas, transição quântico-clássico, reservatórios.

Abstract

The dynamic behavior of open quantum systems plays a fundamental role in many quantum mechanical applications. Examples of applications include problems such as medium-induced loss of quantum coherence, relaxation in many-body systems, quantum transport, quantum chemistry, quantum information, among others. In close analogy to a classical Markovian stochastic process, the interaction of an open quantum system with a noisy environment is often phenomenologically modeled by means of a time-independent generator superoperator in the form of Lindblad, which typically describes an irreversible loss dynamics of quantum features. Here, particularly, we are interested in systems where charge carriers in semiconductor devices are coupled to a noisy thermal environment. In this context, we present our studies of two problems: the characteristics of the photovoltaic conversion of a quantum dot molecule coupled to a phononic reservoir, under the action of thermal radiation, and the formation of quantum states of light in nanocavities coupled with quantum dots. In the second problem we investigate the quantum-classical transition in mesoscopic superposition states of the field inside the nanocavity and further explore the action of an environmental engineering on such states.

Keywords: Open quantum systems, semiconductor nanostructures, photocells, quantum-classical transition, reservoirs .

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Sistemas físicos e conceitos fundamentais	6
2.1	Nanoestruturas semicondutoras	6
2.1.1	Pontos quânticos auto-organizados	8
2.1.2	Pontos quânticos duplos	11
2.2	Cristais Fotônicos	12
2.2.1	Nanocavidades	15
2.3	Estados quânticos da luz	17
2.3.1	Estados de Fock	17
2.3.2	Estado coerente	18
2.3.3	Estado coerente comprimido	19
2.4	Propriedades estatísticas do campo	20
2.5	Função de Wigner	22
2.6	Correlações quânticas	23
2.7	Sistemas quânticos abertos	25
2.7.1	Abordagem axiomática: mapas quânticos	26
2.7.2	Abordagem microscópica	27
2.7.3	Equação mestra para um oscilador na aproximação de onda girante	30
3	Características Fotovoltaicas de Molécula de Ponto Quântico	34
3.1	Fotocélula	34
3.2	Modelo	36

3.3	Alinhamento de bandas	47
3.4	Conclusões	53
4	Construção de Estados de Luz Quânticos e Estudo da Interface Clássico-Quântico	55
4.1	Sistema físico e modelo	55
4.2	Evolução unitária	59
4.3	Perdas na cavidade	64
4.4	Construção de um estado do tipo gato de Schrödinger em cavidades fotônicas	69
4.5	Reservatório finito	75
4.6	Reservatório estruturado	82
4.7	Conclusões	88
5	Considerações Finais	91
A	Fotocélula de ponto único	93
B	Superoperador Bosônico	96
B.1	Solução equação mestra	96
C	Ortonormalização de um estado coerente	100

Lista de Figuras

2.1	Representação da densidade de estados em função da energia para estruturas <i>bulks</i> , poços quânticos, fios quânticos e pontos quânticos, respectivamente. Adaptada de [32].	8
2.2	Em (a) temos a representação esquemática do processo de formação de PQs por meio de crescimento epitaxial, camada por camada. Nota-se a formação de uma espécie de ilha (ponto quântico) a qual posteriormente será recoberta pelo mesmo material do qual foi feito o substrato [35], formando o ponto quântico. Já em (b) temos uma visão mais realística de um PQ auto-organizado, imagem STM (<i>Scanning Tunneling Microscopy</i>) [36].	9
2.3	Desenho esquemático mostrando a formação do estado de éxciton, em que E_{gap} corresponde a diferença de energia entre a última banda (camada de valência), e a primeira banda (camada de condução). Aqui, E_{exc} corresponde a energia de formação do estado de éxciton [35].	10
2.4	Esquema da estrutura de bandas e configuração de níveis de um ponto quântico duplo, nas seguintes condições: (a) sem voltagem externa, com níveis da banda de condução e valência fora da ressonância; (b) com voltagem externa, que sintoniza os níveis da banda de condução em ressonância, maximizando o tunelamento de elétrons T_e , enquanto os níveis da banda de valência estão fora de ressonância; (c) com voltagem externa, que sintoniza os níveis da banda de valência em ressonância, maximizando o tunelamento de buracos T_h , enquanto os níveis da banda de condução estão fora de ressonância; (d) esquema dos níveis de energia, com $\omega_{ij} = \omega_i - \omega_j$	13

2.5	Esquema de um cristal fotônico unidimensional que consiste em uma pilha periódica de camadas de dois materiais dielétricos [51].	14
2.6	Em (a) e (b) podemos observar o esquema de um cristal fotônico bidimensional formado por lacunas cilíndricas e por cilindros dielétricos, com suas respectivas imagens realísticas obtidas por meio de um microscópio eletrônico de varredura (SEM) [55, 56].	15
2.7	Em (a) temos a representação de um cristal fotônico unidimensional formado por camadas alternadas de materiais com constante dielétrica diferente. Em (b) temos um cristal fotônico bidimensional, contendo uma cavidade formada pela ausência de 3 buracos [35].	16
3.1	(a) Esquema genérico de uma fotocélula de seis níveis. As barras azuis representam os níveis de energia da MPQ e as barras pretas (c e v) são os estados de condução e valência dos contatos. Radiação solar excita continuamente as transições de elétrons $ 2\rangle \leftrightarrow 1\rangle$ e $ 4\rangle \leftrightarrow 3\rangle$, com respectivas taxas de recombinação elétron-buraco γ_1 e γ_2 . Dois ambientes de fônons térmicos mediam as transições de baixa energia $ 3\rangle \leftrightarrow c\rangle$ e $ 2\rangle \leftrightarrow v\rangle$ com taxas $\tilde{\gamma}$ e $\tilde{\Gamma}$, respectivamente. Os níveis dos contatos $ c\rangle$ e $ v\rangle$ são conectados a uma carga (circuito externo), representado por uma taxa de decaimento Γ . Já em (b) $\Delta_{e,h}$ são os deslocamentos de energia das bandas de condução e de valência da MPQ. . .	37
3.2	Potência e corrente da fotocélula como função da voltagem para $d = 2$ nm, indicando as propriedades fotovoltaicas, tais como: potência máxima, corrente máxima, voltagem máxima, corrente de curto-circuito e voltagem de circuito aberto.	42
3.3	Potência e corrente entregue como função da voltagem para diferentes valores de barreira d . Em (a) e (b) considerando os valores $\tilde{\gamma} = 100\gamma$ e $\tilde{\Gamma} = 0.05\gamma$. já em (c) e (d) é considerado $\tilde{\gamma} = 50\gamma$ e $\tilde{\Gamma} = 5\gamma$. A linha azul tracejada mostra o resultado para o PQ simples.	43

3.4	Corrente relativa δj como função das taxas de relaxação $\tilde{\gamma}$ e $\tilde{\Gamma}$. Em (a) tomamos um tamanho de barreira $d = 2 \text{ nm}$. Por outro lado, em (b) tomamos $d = 10 \text{ nm}$	45
3.5	Raio entre corrente máxima e a magnitude da coerência, $\frac{j}{ \rho_{13} }$, como função da taxa de tunelamento, T_e , para diferentes taxas de decaimento: em vermelho para $\tilde{\gamma} = 100\gamma$ e $\tilde{\Gamma} = 0.05\gamma$, já em azul tomamos $\tilde{\gamma} = 50\gamma$ e $\tilde{\Gamma} = 5\gamma$	46
3.6	Máximo valor da coerência entre os níveis (a) de condução e (b) de valência, como função da separação d entre os PQs e conseqüentemente a taxa de tunelamento $T_{e,h}$ para diferentes taxas de decaimento: em vermelho para $\tilde{\gamma} = 100\gamma$ e $\tilde{\Gamma} = 0.05\gamma$, já em azul tomamos $\tilde{\gamma} = 50\gamma$ e $\tilde{\Gamma} = 5\gamma$	47
3.7	Representação do alinhamento de energia da fotocélula. Os parâmetros com subscrito “0” representam os valores usados até o momento, $\Delta_e^0 = \Delta_h^0 = 3 \text{ meV}$, e $\Delta_c = \Delta_v = 2 \text{ meV}$	48
3.8	Potência máxima alcançada pela fotocélula para taxas de relaxação (a) $\tilde{\gamma} = 100\gamma$; $\tilde{\Gamma} = 0.05\gamma$ e (b) $\tilde{\gamma} = 50\gamma$; $\tilde{\Gamma} = 5\gamma$, como função da separação entre os PQs d e do deslocamento de energia δ	49
3.9	Coerência no ponto de potência máxima entre os níveis de valência ($ 2\rangle$ e $ 4\rangle$) como função do deslocamento de energia δ , em (a) é apresentado o comportamento da parte real, já em (b) é apresentado o comportamento da parte imaginária e em (c) é apresentado o valor absoluto. Por outro lado, em (d) é apresentado o comportamento das populações, que representa a ocupação de cada nível. Em todos os casos, consideramos $d = 2$ e 10 nm	50
3.10	Em (a) e (b) são apresentadas as coerências no ponto de potência máxima entre os níveis de condução ($ 1\rangle$ e $ 3\rangle$) e valência ($ 2\rangle$ e $ 4\rangle$) como função das taxas de tunelamento $T_{e,h}$ para as configurações $\delta = 0 \text{ meV}$ e $\delta = 3 \text{ meV}$, respectivamente.	51

3.11	(a) Tem-se a eficiência da MPQ como função da separação d entre os PQs para diferentes configurações de energia δ , com taxas de relaxação $\tilde{\Gamma} = 100\gamma$ e $\tilde{\gamma} = 0.05\gamma$. Já em (b) é apresentado a eficiência η versus o raio de temperatura τ da fotocélula para deslocamento de energia $\delta = 3$ meV com tamanhos de barreiras $d = 2$ nm em linha triangular e $d = 10$ nm em linha tracejada. Os limites são mostrados em linha preta, referindo-se à eficiência de Carnot η_C e em linha vermelha com marcadores quadrados representando a eficiência de Chambadal-Novikov η_{CN}	53
4.1	Simulação do número médio de fótons $\langle \hat{n}(t) \rangle$ como função do tempo para o resultado analítico (4.16), o hamiltoniano do MJC (\hat{H}) e para o hamiltoniano efetivo (\hat{H}_{ef}). Utilizamos diferentes valores de dessintonia δ , fótons adicionais m e número médio de fótons $ \alpha ^2$: em (a) $\delta = 10g$, $m = 3$ e $ \alpha ^2 \rightarrow 0$; já em (b) $\delta = 10g$, $m = 0$ e $ \alpha ^2 = 10$; por outro lado em (c) $\delta = 100g$, $m = 3$ e $ \alpha ^2 \rightarrow 0$; e em (d) $\delta = 100g$, $m = 0$ e $ \alpha ^2 = 10$	61
4.2	Simulação do defeito de idempotência $S(t)$ como função do tempo para o hamiltoniano do MJC (\hat{H}), para o hamiltoniano efetivo (\hat{H}_{ef}) e para nosso resultado analítico (4.20). Tomamos diferentes valores de dessintonia δ , fótons adicionais m e número médio de fótons $ \alpha ^2$: em (a) $\delta = 10g$, $m = 3$ e $ \alpha ^2 \rightarrow 0$; já em (b) $\delta = 10g$, $m = 0$ e $ \alpha ^2 = 10$; por outro lado em (c) $\delta = 100g$, $m = 3$ e $ \alpha ^2 \rightarrow 0$; e em (d) $\delta = 100g$, $m = 0$ e $ \alpha ^2 = 10$	62
4.3	Dependência da função de correlação $g^{(2)}(0)$ com o tempo gt para dois casos: (a) $\delta = 100g$, $m = 3$, $ \alpha ^2 \rightarrow 0$ e (b) $\delta = 100g$, $m = 0$, $ \alpha ^2 = 10$. Em azul para o hamiltoniano do MJC (\hat{H}) e em laranja para o hamiltoniano efetivo (\hat{H}_{ef}).	64
4.4	Função de correlação $g^{(2)}(0)$ para diferentes valores de m como função do número médio de fótons $ \alpha ^2$. Os círculos cheios azuis mostram o comportamento do hamiltoniano MJC (\hat{H}) e a linha sólida laranja o caso do hamiltoniano efetivo (\hat{H}_{ef}).	65

4.5	Número médio de fótons $\langle \hat{n}(t) \rangle$ como função do tempo para o hamiltoniano do MJC (\hat{H}), o hamiltoniano efetivo (\hat{H}_{ef}) e nosso resultado analítico. Analisado nos limites (a) $\delta = 30g$, $m = 3$, $ \alpha ^2 \rightarrow 0$ e (b) $\delta = 30g$, $m = 0$, $ \alpha ^2 = 10$. Todos para uma taxa de decaimento da cavidade $\kappa = 0.01g$	67
4.6	Defeito de idempotência $S(t)$ para o sistema total como função do tempo para o hamiltoniano do MJC (\hat{H}) e para o hamiltoniano efetivo (\hat{H}_{ef}). Consideramos os valores: (a) $\delta = 30g$, $m = 3$, $ \alpha ^2 \rightarrow 0$ e (b) $\delta = 30g$, $m = 0$, $ \alpha ^2 = 10$. Para uma taxa de decaimento da cavidade $\kappa = 0.01g$	68
4.7	Defeito de idempotência $S_c(t)$ do campo no interior da cavidade como função do tempo para o hamiltoniano do MJC (\hat{H}) e para o hamiltoniano efetivo (\hat{H}_{ef}). Consideramos os valores: (a) $\delta = 30g$, $m = 3$, $ \alpha ^2 \rightarrow 0$ e (b) $\delta = 30g$, $m = 0$, $ \alpha ^2 = 10$. Para uma taxa de decaimento da cavidade $\kappa = 0.01g$	69
4.8	Dependência da função de correlação $g^{(2)}(0)$ com o tempo gt para dois casos: (a) $\delta = 100g$, $m = 3$ e $ \alpha ^2 \rightarrow 0$, já em (b) $\delta = 100g$, $m = 0$ e $ \alpha ^2 = 10$. Em azul para o hamiltoniano do MJC (\hat{H}) e em laranja para o hamiltoniano efetivo (\hat{H}_{ef}). Ambos para uma taxa de decaimento da cavidade $\kappa = 0.01g$	70
4.9	Evolução da superposição dos pacotes de onda no espaço posição $ \langle x \alpha(t), m\rangle_1 ^2$ e no espaço de fase $W_{(\gamma)}^{[\rho]}$. Ambos com $ \alpha ^2 = 10$ para diferentes instantes de tempo t	72
4.10	Função de Wigner $W_{(\gamma)}^{[\rho]}$ nos instante de tempo $t = 0.25\pi/\omega$, com número médio de fótons $ \alpha ^2 = 10$ e $ \alpha ^2 \rightarrow 0$ para diferentes valores de m	72
4.11	Incerteza na quadratura do campo S_Y em (a) como função do tempo t e da fase $\theta = \phi + \zeta$. Em (b) como função do número médio de fótons $ \alpha ^2$ para diferentes valores de m	74
4.12	Função de Wigner $W_{(\gamma)}^{[\rho]}$ em diferentes instantes de tempo t , com número médio de fótons $ \alpha ^2 = 10$, $m = 0$ e taxa de decaimento $\kappa = 0.01g$	75
4.13	Função de Wigner $W_{(\gamma)}^{[\rho]}$ para os instantes de tempo $t = 0.25\pi/\omega$ e $t = 0.5\pi/\omega$, em (a) e (c) com $ \alpha ^2 = 10$ e $m = 3$. Já em (b) e (d) $ \alpha ^2 \rightarrow 0$ e $m = 3$. É assumido uma taxa de decaimento $\kappa = 0.01g$	76

4.14	Comparativo entre o comportamento da função de Wigner, $W_{(\gamma)}^{[\rho]}$, com a informação mútua média normalizada, $\bar{I}(f)/2H(A)$, para diferentes instantes de tempo t , com número médio de fótons $ \alpha ^2 = 10$	82
4.15	(a) número médio de fótons $\langle \hat{n}(t) \rangle$ e (b) defeito de idempotência $S(t)$, como função do tempo γt . Para números médios de fótons $ \alpha ^2 = \beta ^2 = 10$. São tomados para análise os limites: $\Lambda = 0.01\gamma$ em linha azul tracejada, equivalente ao limite de acoplamento forte e $\Lambda = 3\gamma$ em linha verde contínua, modelando o limite de acoplamento fraco. Para fins de comparação em linha laranja é apresentado o limite de Markov.	86
4.16	Dinâmica da concorrência $C(\rho)$ do estado de superposição mesoscópica (4.49), no limite de acoplamento forte $\Lambda = 0.01\gamma$. Em (a) para diferentes pesos entre os pacotes de onda, discriminado pela fase inicial φ , com número médio de fótons inicial $ \alpha ^2 = \beta ^2 = 10$. Em contrapartida, no gráfico (b) observamos o comportamento da concorrência para diferentes números médios de fótons iniciais $ \alpha ^2 = \beta ^2$, com fase inicial $\varphi = \pi/4$	87
4.17	Medida de não-markovianidade do sistema \mathcal{N} como função de Λ/γ , para diferentes números médios de fótons iniciais $ \alpha ^2 = \beta ^2$	88
A.1	(a) Esquema genérico de uma fotocélula de quatro níveis. As barras azuis representam os níveis de energia do PQ e as barras c e v são os estados de condução e valência dos contatos. Radiação solar continuamente excita a transição de elétrons $ 2\rangle \leftrightarrow 1\rangle$, com taxa de recombinação elétron-buraco γ_1 . Fônons térmicos ambiente mediam a transição de baixa energia $ 1\rangle \leftrightarrow c\rangle$ e $ 2\rangle \leftrightarrow v\rangle$ com taxas $\tilde{\gamma}$ e $\tilde{\Gamma}$, respectivamente. Os níveis dos contatos $ c\rangle$ e $ v\rangle$ são conectados a uma carga (circuito externo), representado por uma taxa de decaimento Γ . Já em (b) $\Delta_{c,v}$ são os deslocamentos de energia das bandas de condução e de valência dos contatos.	94

Capítulo 1

Introdução

Numa reunião da Sociedade Alemã de Física, no dia 14 de dezembro de 1900, Max Planck apresentou seu trabalho, onde pela primeira vez a noção de “quantum” de energia era utilizada [1, 2], noção esta que deu início de uma revolução na física. A data de sua apresentação é considerada como sendo a do nascimento da física quântica, embora só por volta de 1925 a mecânica quântica moderna, base de nossa concepção atual da natureza, tenha sido desenvolvida por Schrödinger e outros. Seria pretensioso esperar que na época de Max Planck o grau de sofisticação associado com a explicação dos fenômenos fosse a mesma que dos dias atuais, uma vez que, em uma linha temporal a física quântica é uma criança comparada a física clássica. Todas as ideias, os conceitos e definições evoluem com o tempo até chegar no que conhecemos hoje. Tais evoluções ou avanços do entendimento da natureza, possibilitam imensos desenvolvimentos tecnológicos. Por exemplo: as partes físicas de um computador (*hardware*) teve grande impulso ao final dos anos 40, após o desenvolvimento de um semicondutor feito de silício, chamado de transistor, desenvolvido por Bardeen, Brattain e Shockley que receberam Prêmio Nobel de Física em 1956 [3]. Todavia, somente em 1969 os primeiros dados foram transmitidos de uma forma similar ao que possuímos hoje, pela *Arpanet* [4], a precursora da Internet, de um computador da Universidade da Califórnia, em Los Angeles, para um do Stanford Research Institute, em Palo Alto.

Atualmente vivemos uma outra revolução proveniente da criança que vem crescendo, chamada física quântica. A melhor compreensão da física quântica possibilitou o desenvolvimento da computação quântica nos anos 1980 [5, 6], que se apoia em um dos princípios

fundamentais da mecânica quântica, o da superposição. Deste modo, precisamos de uma revolução computacional para implementar esse novo sistema, com novas máquinas, novas linguagens de computação e novos algoritmos. Embora os estudos tenham avançado muito, ainda estamos longe de ter um computador quântico. Todos os desenvolvimentos de tecnologia requerem muito investimento e muita pesquisa. Todavia, os primeiros passos já vem sendo dado por grandes empresas e entidades governamentais. Nos Estados Unidos, a lei nacional da iniciativa quântica aprovada em 2018 destina cerca de 1,2 bilhão de dólares para o desenvolvimento da computação quântica no país [7]. Empresas como a IBM e Microsoft também têm atuado neste segmento. A IBM por exemplo, abriu seu primeiro centro de computação quântica nos Estados Unidos, onde desenvolve o *IBM Q System One* [8] o primeiro computador quântico comercial baseado em circuitos supercondutores. Já a Microsoft criou a linguagem *Q#* [9], um simulador de computação quântica e outros recursos para pessoas que desejam começar a programar aplicativos para um computador quântico. O Google em parceria com a NASA, por sua vez, não ficou para trás, criando o processador *Sycamore*, um sistema que eles afirmam ser capaz de realizar em menos de 4 minutos um cálculo que levaria cerca de 10 mil anos se fosse executado por um supercomputador clássico [10]. Neste trabalho que causou, e ainda causa, grandes debates no meio científico, os autores anunciaram que havia sido alcançada a “supremacia quântica”. A frase se refere ao ponto onde os computadores quânticos podem realizar tarefas de uma maneira mais eficiente que os melhores computadores clássicos, independentemente dessas tarefas serem úteis. Todavia, nem todo mundo concorda que o feito do Google tenha sido tão marcante assim. A IBM afirmou em um estudo que o problema proposto pelo Google não demoraria 10 mil anos para ser resolvido em uma máquina comum, mas apenas 2 dias e meio se uma técnica diferente fosse utilizada [11]. Ainda neste contexto, pesquisadores chineses relataram em [12] a criação de um computador quântico fotônico, denominado *Jiuzhang*, segundo os autores, tal computador leva aproximadamente 3 minutos e meio para realizar uma tarefa específica que levaria, segundo estimativa, em um dos melhores supercomputadores clássicos do mundo, o *Sunway TaihuLight*, cerca de 2,5 bilhões de anos. Alcançando assim a supremacia quântica. Apesar de não possuir nenhuma prova matemática definitiva, apontando que os computadores quânticos vão se sobrepor aos clássicos, existem muitos trabalhos que apontam nesta direção

[13, 14, 15].

Até recentemente, pensava-se que essas tarefas tinham pouco uso no mundo real, uma vez que os computadores quânticos não tem como função primordial substituir os “clássicos”. Eles não executam navegadores da web, ou reproduzem vídeos. O que eles farão é oferecer uma maneira fundamentalmente diferente de realizar certos cálculos, sendo capazes de resolver problemas que levariam bilhões de anos para serem resolvidas no melhor computador clássico. Então podemos indagar: por que ainda não estamos abordando tais problemas? A principal causa é o fato dessas versões preliminares de computadores quânticos trabalharem com um pequeno número de *qubit*¹, sendo que, para realizar tarefas uteis é preciso um número muito maior. Um outro questionamento que surge naturalmente é: quais sistemas dentro da informação quântica são bons portadores de *qubit* e candidatos para computação quântica? Dado que os computadores quânticos não se parecem nada com os computadores clássicos, fortes candidatos para criação deste novo sistema não são convencionais. Diversos grupos se destacam nesta linha trabalhando com cavidades do tipo Fabry-Perot [16]; com armadilhas de íons [14]; com circuitos supercondutores [17]; com junções Josephson [18] e com cavidade de cristal fotônico [19].

Nesta tese, focaremos nossa atenção à este último, onde no capítulo 2 buscamos fazer uma sucinta revisão das nanoestruturas semicondutoras e cristais fotônicos. Todavia, independentemente de qual seja o sistema, surge um problema, o seu controle. Controlar um computador quântico é notoriamente difícil, pois o simples fato de olhar para um sistema quântico o perturba inevitavelmente, uma manifestação do bem conhecido problema da medição [20]. Se quisermos usar esse sistema para armazenar e processar informações de maneira confiável, precisamos mantê-lo quase perfeitamente isolado do mundo exterior. Por outro lado, é necessário interagir de alguma forma com o sistema para poder realizar as operações. A observação e o controle experimental das características quânticas de um sistema físico, são às vezes impedidas pelo acoplamento do sistema com um meio a sua volta. O meio consiste em um segundo sistema com um número de graus de liberdade significativamente maior, se comparado com o sistema quântico de interesse. Se houver interação entre

¹É a menor unidade de informação de um computador quântico, podendo ser representado por qualquer sistema de dois níveis.

sistema e meio, as correlações entre eles podem levar a uma perda irreparável de coerência quântica em um processo conhecido como decoerência.

Estudar os chamados sistemas quânticos abertos, governados por um desenvolvimento não-unitário no tempo que descreve todo futuro de dinâmicas irreversíveis, é um desafio da Física Moderna que também abordamos no capítulo 2. Ao contrastá-la a um sistema quântico isolado, cuja dinâmica é governada pela equação de Schrödinger, a evolução dinâmica de um sistema quântico aberto pode ser tratada por mais de uma metodologia. Entretanto, existe um bem estabelecido tratamento, onde a evolução no tempo do sistema é descrita por meio de uma equação mestra, uma equação diferencial de primeira ordem para a matriz densidade reduzida do sistema aberto. Tal equação mestra deve ter uma estrutura muito específica conhecida como estrutura de Lindblad [21]. Se for adotada uma abordagem microscópica sistema-ambiente para a dinâmica do sistema aberto, a equação mestra desta estrutura pode ser derivada por exemplo com a ajuda da aproximação de Born-Markov [22, 23]. Usaremos tal formalismo de equação mestra para desenvolver grande parte de nosso trabalho. No capítulo 3 fizemos uso da física dos pontos quânticos semicondutores acoplados por tunelamento e deste formalismo de sistemas quânticos abertos, para tratar a interação de uma molécula de pontos quânticos acoplada com um reservatório fonônico, sobre a ação de um campo de radiação térmica. Em tal sistema, exploramos suas características fotovoltaicas usando dados realísticos, procurando obter regimes onde a molécula de pontos quânticos possui propriedades fotovoltaicas superiores as de um ponto quântico simples. Além disso, procuramos estabelecer ligações entre tais ganhos com suas propriedades genuinamente quânticas como tunelamento e coerência.

No entanto, verifica-se que, para muitos processos em sistemas quânticos abertos, as aproximações subjacentes a esta abordagem não são satisfeitas. Tipicamente, isto é devido ao fato que a aproximação de Markov é útil somente quando o tempo de correlação do ambiente é pequeno comparado ao tempo de relaxação ou decoerência do sistema. Quando a escala de tempo da dinâmica quântica é comparável à do banho, o banho não é suficientemente rápido para voltar ao equilíbrio e alguns efeitos de memória se acumulam, tornando a aproximação padrão de Markov insuficiente para descrever o comportamento do sistema. A violação desta separação de escalas de tempo pode ocorrer, por exemplo, nos casos de acoplamento forte

entre sistema-ambiente, reservatórios estruturados ou finitos, processos ultra-rápidos, baixas temperaturas ou grandes correlações iniciais do sistema-ambiente, dentre outros. Deste modo, partimos da exploração do formalismo existente para o tratamento de sistemas abertos, considerando inicialmente a aproximação de Markov, para depois explorar os efeitos da remoção desta aproximação sobre a dinâmica quântica de um sistema de interesse. Este problema é conhecido na literatura como dinâmica não-markoviana [24]. E é disso que se trata o capítulo 4. Partiremos do estudo teórico das características básicas da dinâmica quântica, focado em problemas como a formação de estados de luz quânticos em nanocavidades acopladas com pontos quânticos [25], que descreveremos de forma teórica usando a aproximação de Markov [26]. Como a mera interação do sistema com o reservatório modifica a dinâmica drasticamente e irreversivelmente, estudamos a emergência da classicalidade do campo intracavidade e como isso afeta os estados de luz quânticos na mesma. Por fim, direcionamos nossa atenção ao reservatório, analisando dois casos que consideramos interessantes: primeiro a interação do sistema com um reservatório finito e posteriormente com um reservatório estruturado abrindo mão da aproximação de Markov. Fazendo assim, um tratamento não-markoviano da dinâmica.

Por fim, este trabalho encerra-se com as considerações finais e três apêndices. Nas considerações finais enfatizamos dois conjuntos de tarefas, aquelas já realizadas e aquelas por realizar. Destacamos o que há de original e os passos seguintes que devem ser tomados. O apêndice A trata da descrição de uma fotocélula constituída por um único ponto quântico, usada como base de comparação de nossos resultados apresentados ao decorrer do capítulo 3. O apêndice B trata brevemente sobre o método dos superoperadores bosônicos que geram uma álgebra de Lie fechada, utilizada para solução da equação mestra apresentada no capítulo 4. Por último, no apêndice C apresentamos o método de ortonormalização de um estado coerente, utilizado também no capítulo 4.

Capítulo 2

Sistemas físicos e conceitos fundamentais

Este capítulo é dedicado a uma revisão sucinta sobre os principais conceitos e características de algumas nanoestruturas semicondutoras e cristais fotônicos, tais como, pontos quânticos, moléculas de pontos quânticos e nanocavidades fotônicas. Estes sistemas físicos merecem a revisão apresentada aqui, uma vez que constituem os cenários experimentais onde as propostas teóricas abordadas nos próximos capítulos se baseiam. Ademais, uma noção sobre sistemas quânticos abertos também é apresentada e discutida. Aos leitores que não possuam familiaridade com estes conceitos e desejem maiores detalhes, informações complementares podem ser encontradas nas referências citadas no decorrer do texto.

2.1 Nanoestruturas semicondutoras

Após a revolução do transistor, desenvolvido por Bardeen, Brattain e Shockley que receberam Prêmio Nobel de Física em 1956 [3], os materiais semicondutores têm sido responsáveis por inúmeros avanços, seja no campo tecnológico ou na área de pesquisa em ciência básica. Em um material semicondutor os elétrons são agrupados em bandas de energia, das quais se destacam as bandas de valência e condução. Os elétrons que ocupam a última ficam sujeitos as interações com os íons do material. Por meio desta interação, os níveis de energia dos átomos interagentes se interpolam, formando assim as bandas de energia do material.

Durante a formação dessas bandas, surgem espaçamentos (*gaps*) de energia entre bandas adjacentes, nas quais não há estados acessíveis para ocupação eletrônica [27, 28], tornando-se assim regiões proibidas. O valor do gap define então a energia mínima necessária para as transições entre a banda inferior (valência) à banda superior (condução).

Nas últimas décadas, um grande desenvolvimento no campo da física de semicondutores foi alcançado devido, principalmente, ao rápido progresso das técnicas de crescimento de materiais semicondutores. Grande parte deste progresso se deve à técnica de crescimento epitaxial por feixe molecular (*Molecular Beam Epitaxy* - MBE), que se destaca dentre as mais modernas técnicas de crescimento de amostras. Suas principais características são as baixas taxas de deposição (que permitem o controle preciso, em escala atômica, da espessura das camadas) e a possibilidade de monitorar o crescimento em tempo real (através da difração de elétrons). Isto confere à técnica MBE uma grande confiabilidade no que se refere a espessura, composição e morfologia das camadas crescidas. A técnica MBE aplicada aos semicondutores, possibilitou a construção de sistemas denominados heteroestruturas [29], estruturas nas quais as propriedades eletrônicas são modificadas principalmente devido à redução da dimensionalidade. Essas heteroestruturas são formadas por dois ou mais materiais semicondutores com *gaps* de energia distintos, e podem ser crescidas na escala nanométrica com determinadas características ópticas e eletrônicas desejadas. Dependendo da técnica ou processos de crescimento é possível criar nanoestruturas semicondutoras de dimensão reduzida, que permite confinar portadores de cargas¹ em diferentes dimensões.

Buscando melhor compreensão, na Fig. 2.1 representamos os quatro tipos de confinamentos e os efeitos desta redução da dimensionalidade sobre a densidade de estados. Materiais semicondutores do tipo *bulk*, isto é, uma porção de material em que os portadores de cargas estão livres para se mover nas três dimensões (3D), apresentam uma densidade de estados contínua com relação a energia. Já quando os portadores de cargas estão livres para se mover apenas em duas dimensões (2D), cria-se então o poço quântico, onde ocorre uma quebra na continuidade da densidade de estados com relação a energia. Progredindo nas restrições espaciais, quando os portadores de cargas estão livres para se mover em uma dimensão (1D),

¹Portadores de cargas refere-se a uma partícula portadora de uma carga elétrica, em nosso caso aqui são os elétrons e buracos (ausência de elétrons).

temos o fio quântico. Neste regime a densidade de estados com relação a energia passa a ter um comportamento peculiar, com picos logaritmicamente infinitos. E finalmente, considerando o confinamento dos portadores de cargas nas três dimensões chegamos ao regime dos pontos quânticos, onde a densidade de estados é dada por uma série de funções delta, apresentando assim, estados de energia quantizados de forma totalmente análoga aos sistemas atômicos, sendo por isso muitas vezes chamados de átomos artificiais [30, 31]. A quantização da energia depende diretamente do potencial de confinamento, o qual pode ser controlado através de campos estáticos externos ou por parâmetros estruturais como forma e topologia do ponto quântico [29]. Esta flexibilidade na manipulação de propriedades eletrônicas é o que faz esses sistemas atraírem tanto interesse pela comunidade científica e tecnológica.

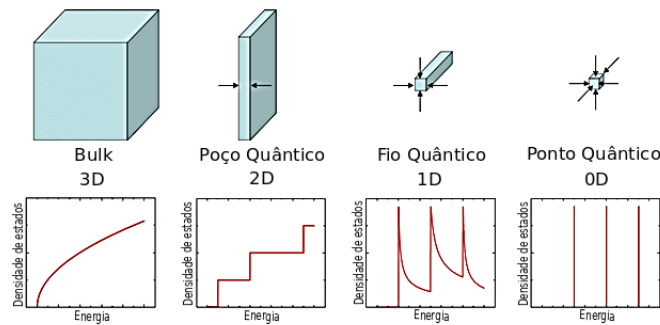


Figura 2.1: Representação da densidade de estados em função da energia para estruturas *bulks*, poços quânticos, fios quânticos e pontos quânticos, respectivamente. Adaptada de [32].

2.1.1 Pontos quânticos auto-organizados

Pontos quânticos semicondutores (PQs) podem ser obtidos de diversas maneiras, desde nanocristais que são sintetizados quimicamente, a PQs que são construídos litograficamente sobre um gás de elétrons [33, 34]. Os diferentes tipos de pontos quânticos e suas diferentes propriedades são definidas por seus processos de formação. Aqui, focaremos nossa atenção nos PQs obtidos por meio da técnica de crescimento epitaxial auto-organizado (como mostrado na Fig. 2.2), conhecida como Stranski-Krastanow. Esta técnica consiste no crescimento, camada por camada, de um tipo de material semiconductor com um determinado parâmetro de rede em outro material semiconductor com parâmetros de rede diferente, como no caso do Arsenieto

de Gálio (GaAs) e Arsenieto de Índio (InAs), onde a diferença é de aproximadamente 7% [31]. Isso gera uma tensão superficial na amostra e quando a espessura do material crescido ultrapassa o valor crítico, a tensão é aliviada por meio da criação espontânea de pequenas ilhas de forma regular e tamanhos similares.

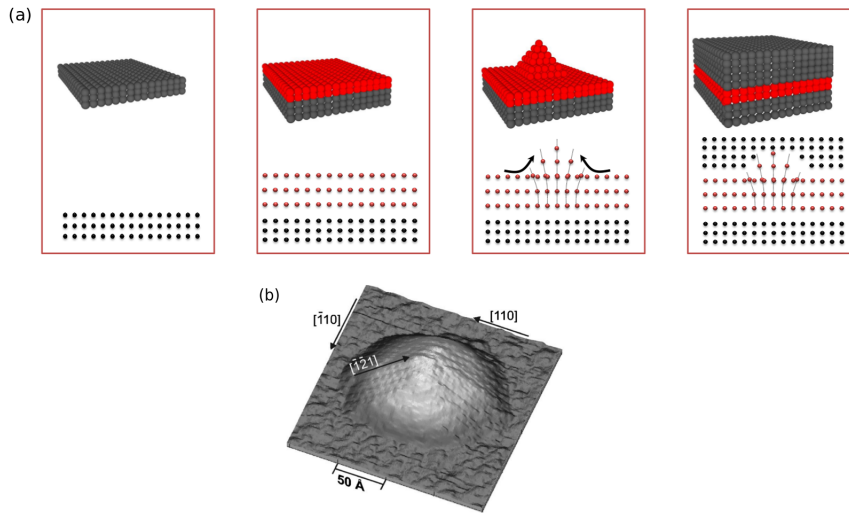


Figura 2.2: Em (a) temos a representação esquemática do processo de formação de PQs por meio de crescimento epitaxial, camada por camada. Nota-se a formação de uma espécie de ilha (ponto quântico) a qual posteriormente será recoberta pelo mesmo material do qual foi feito o substrato [35], formando o ponto quântico. Já em (b) temos uma visão mais realística de um PQ auto-organizado, imagem STM (*Scanning Tunneling Microscopy*) [36].

Portadores de cargas confinados em PQs podem ocupar um conjunto de estados de energia discretos, equivalentes aos estados atômicos. Tal propriedade permite-nos, em princípio, tratar a evolução dinâmica em PQs com métodos similares aos utilizados na física atômica. A partir da absorção de um fóton, um elétron pode ser excitado da banda de valência para a banda de condução, deixando um buraco na banda de valência. A proximidade espacial entre estes dois portadores de carga resulta na interação coulombiana entre eles, ocasionando a formação de um par elétron-buraco correlacionados chamado éxciton [37], conforme representado na Fig. 2.3.

Pontos quânticos podem ser aproximados para sistemas de dois níveis, de tal forma que seu

estado fundamental corresponda ao estado de vácuo, ou seja, ausência de excitações e o estado excitado, por outro lado, corresponde a presença de um éxciton. O estado de éxciton pode ser alcançado mediante a interação do sistema com um laser que possua energia suficiente para remover um elétron da banda de valência e promovê-lo para a banda de condução. Note que, respeitando o princípio de exclusão de Pauli é possível excitar mais de um par elétron-buraco para o mesmo nível da banda de condução, criando assim um estado biéxciton. Entretanto, devido as interações coulombianas entre as partículas, a energia necessária para criar um par adicional de elétron-buraco é ligeiramente distinta [38]. Esta diferença de energia é na maioria das vezes suficiente para se ignorar a presença destes estados.

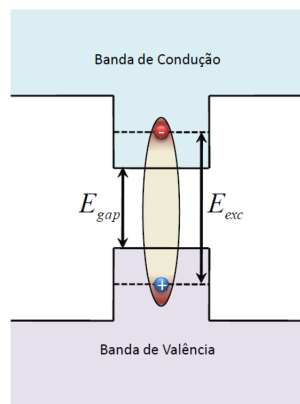


Figura 2.3: Desenho esquemático mostrando a formação do estado de éxciton, em que E_{gap} corresponde a diferença de energia entre a última banda (camada de valência), e a primeira banda (camada de condução). Aqui, E_{exc} corresponde a energia de formação do estado de éxciton [35].

Estados excitônicos permanecem confinados no sistema por um período definido como tempo de vida, que pode variar de centenas de picosegundos a nanosegundos, dependendo da sobreposição entre as funções de onda do par elétron-buraco [39]. Por meio de campos eletromagnéticos externos ou devido ao processo de customização é possível criar heteroestruturas com gaps específicos, alterando desta forma a energia do éxciton.

Em muitos casos pode-se considerar o PQ como um sistema de dois níveis, onde $|1\rangle$ e $|0\rangle$ representam os autoestados excitados e desexcitados do hamiltoniano do ponto quântico \hat{H}_{PQ} com autovalores $\hbar\omega_1$ e $\hbar\omega_0$, respectivamente. Esta é uma das razões pela qual os PQs

são fortes candidatos a qubits. Usando a relação de completudeza $|1\rangle\langle 1| + |0\rangle\langle 0| = \mathbf{1}$, podemos escrever \hat{H}_{PQ} como

$$\hat{H}_{PQ} = \mathbf{1}\hat{H}_{PQ}\mathbf{1} = \hbar\omega_1 |1\rangle\langle 1| + \hbar\omega_0 |0\rangle\langle 0| \quad (2.1)$$

$$= \frac{\hbar(\omega_1 - \omega_0)}{2}\sigma_z + \frac{\hbar(\omega_1 + \omega_0)}{2}\mathbf{1} , \quad (2.2)$$

em que $\hbar(\omega_1 - \omega_0) = \hbar\omega_x$ é a energia necessária para se criar um éxciton, e $\sigma_z = |1\rangle\langle 1| - |0\rangle\langle 0|$. Sem perda de generalidade, podemos desprezar o último termo da equação acima por ser proporcional à identidade, obtendo

$$\hat{H}_{PQ} = \frac{\hbar\omega_x}{2}\sigma_z . \quad (2.3)$$

2.1.2 Pontos quânticos duplos

Devido ao avanço experimental na fabricação e crescimento de nanoestruturas semicondutoras, pontos quânticos duplos verticalmente empilhados têm despertado um crescente interesse da comunidade científica. Diversos trabalhos já demonstraram experimentalmente o controle eficiente da interação entre os pontos por intermédio de campos elétricos externos [40, 41]. O acoplamento entre pontos quânticos produz novos mecanismos de interação, que fornecem por sua vez, diferentes maneiras para manipular estados quânticos. As principais interações entre pontos quânticos são o tunelamento de elétrons ou buracos [42] e a transferência de energia por ressonância de Föster (*Föster resonance energy transfer* - FRET) [43]. A interação de Föster corresponde a uma transferência de energia não radioativa, que pode induzir a transferência de um éxciton entre dois pontos. Aqui, não focaremos na interação de Föster, todavia mais informações podem ser encontradas em [44].

Em sistemas formados por pontos quânticos acoplados por tunelamento é possível criar diversas configurações de níveis excitônicos. Sob certas condições, o tunelamento de portadores entre os pontos acopla estados de éxcitons em cada ponto quântico, resultando na formação de orbitais moleculares delocalizados sobre ambos os pontos. Devido a esta característica, pontos quânticos duplos acoplados por tunelamento são chamados de Molécula de Pontos Quânticos - MPQ (ou do inglês, *quantum dots molecule* - QMD) [40, 45]. O tunelamento seletivo de portadores entre os pontos quânticos pode ser estruturalmente controlado, seja

através da incidência de um campo elétrico externo F , que modifica a energia de transição excitônica nos níveis eletrônicos via efeito Stark, ou dopando nosso material, de modo que aplica-se uma diferença de potencial na amostra e a energia do ponto quântico correspondente à transição excitônica é deslocada [46, 47].

A possibilidade de controle da energia de transição excitônica, permite que os níveis da banda de valência e/ou condução entrem em ressonância, permitindo o tunelamento de elétrons (T_e) e/ou de buracos (T_h) entre os pontos, como exemplificado na Fig. 2.4. Desta forma, podemos modelar este sistema da seguinte forma: o estado fundamental $|0\rangle$ representa a ausência de excitação; $|1\rangle$ é o sistema com uma excitação no ponto da esquerda; $|2\rangle$ por sua vez, representa o sistema com uma excitação indireta, após o elétron ter tunelado; enquanto $|3\rangle$ é o sistema com uma excitação indireta, após o buraco ter tunelado. Podemos também ter uma configuração $|4\rangle$, onde o éxciton é transferido para o ponto da direita, essa transferência de energia está diretamente ligada a interação de Föster, que por simplicidade não será tratado aqui.

O hamiltoniano para este modelo pode ser expresso da seguinte forma [46, 48, 49]

$$\hat{H}_{MPQ} = \sum_{j=0}^3 \hbar\omega_j |j\rangle \langle j| + T_e(|1\rangle \langle 2| + |2\rangle \langle 1|) + T_h(|1\rangle \langle 3| + |3\rangle \langle 1|), \quad (2.4)$$

onde ω_j são as frequências dos respectivos estados $|j\rangle$ ($j = 0, 1, 2, 3$). Uma das grandes vantagens destes PQs é que os mesmos são óticamente ativos, permitindo seu acoplamento de forma natural com a luz. Desta forma, surge a possibilidade de criar nanocavidades e inserir estes PQs, de modo a ter o equivalente da interação átomo-campo em cavidades.

2.2 Cristais Fotônicos

As propriedades ópticas das estruturas periódicas podem ser observadas em diversas partes do mundo natural, isto é, a natureza tem explorado a propagação de luz em estruturas periódicas por milhões de anos. No entanto, somente por volta do final dos anos 80 começou-se a perceber seu potencial por meio de um trabalho proposto por Yablonovitch [50], em que o mesmo propõe que estruturas dielétricas periódicas tridimensionais podem exibir um gap de banda eletromagnética numa faixa de frequência na qual a luz não possa propagar. Gaps de

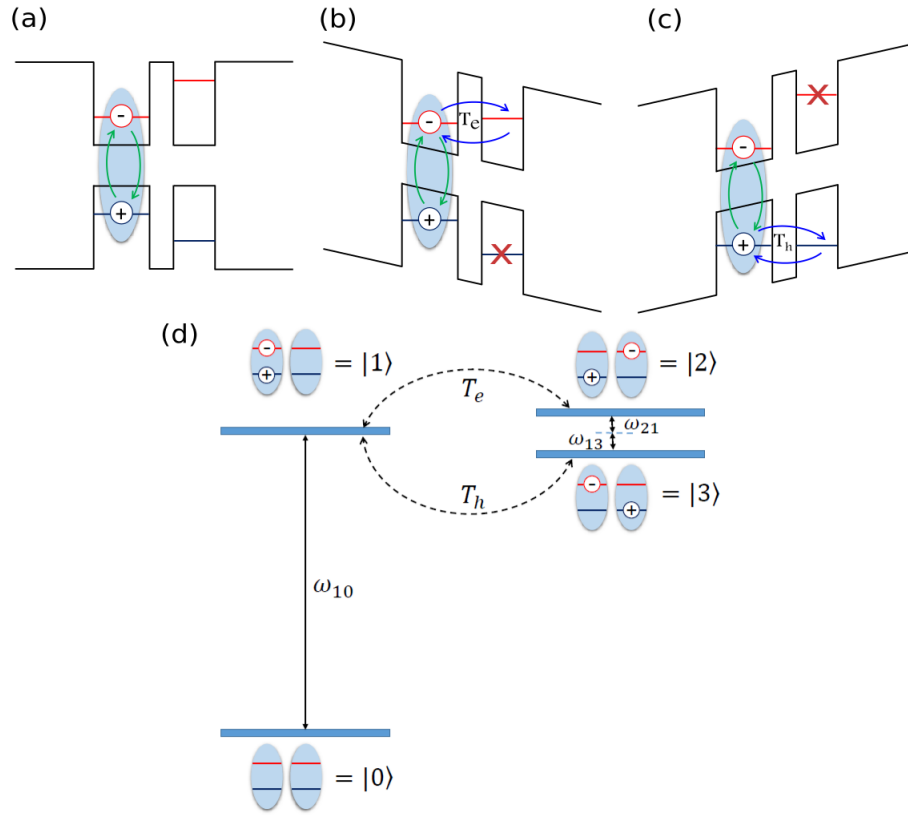


Figura 2.4: Esquema da estrutura de bandas e configuração de níveis de um ponto quântico duplo, nas seguintes condições: (a) sem voltagem externa, com níveis da banda de condução e valência fora da ressonância; (b) com voltagem externa, que sintoniza os níveis da banda de condução em ressonância, maximizando o tunelamento de elétrons T_e , enquanto os níveis da banda de valência estão fora de ressonância; (c) com voltagem externa, que sintoniza os níveis da banda de valência em ressonância, maximizando o tunelamento de buracos T_h , enquanto os níveis da banda de condução estão fora de ressonância; (d) esquema dos níveis de energia, com $\omega_{ij} = \omega_i - \omega_j$.

bandas em materiais periódicos já eram bem compreendidos dentro do formalismo da física da matéria condensada, onde a presença de gaps eletrônicos em semicondutores revolucionou a eletrônica. Deste modo, muitos dos conceitos da pesquisa em estado sólido foram transferidos para cristais fotônicos², fazendo a área crescer rapidamente. O mais simples cristal fotônico

²Tonou-se habitual para os pesquisadores no campo da propagação óptica através de estruturas periódicas referirem-se às mesmas pelo nome de Cristais Fotônicos.

é uma pilha alternada de dois materiais dielétricos diferentes (vide Fig. 2.5). Quando a luz incide em tal pilha, cada interface reflete parte do campo. Se a espessura de cada camada for escolhida apropriadamente, os campos refletidos podem combinar em fase, resultando em uma interferência construtiva e forte refletância, também conhecida como reflexão de Bragg [19]. Como a absorção em materiais ópticos dielétricos é muito baixa, espelhos feitos de pilhas dielétricas são extremamente eficientes e podem ser projetados para refletir quase 100% da luz incidente dentro de uma pequena faixa de frequências.

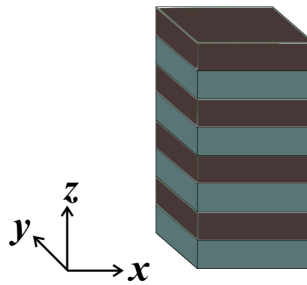


Figura 2.5: Esquema de um cristal fotônico unidimensional que consiste em uma pilha periódica de camadas de dois materiais dielétricos [51].

Cristais fotônicos bidimensionais (2D) e tridimensionais (3D) podem ser considerados como generalizações para o caso 1D, onde um gap de banda 2D ou 3D aparece apenas se a condição de reflexão de Bragg 1D for satisfeita simultaneamente para todas as direções de propagação nas quais a estrutura for periódica. Quando falamos de cristais fotônicos bidimensionais, há duas geometrias bem conhecidas. Uma delas consiste em cilindros dielétricos não superpostos, enquanto a outra, consiste de perfurações (cilindros de ar) criados em um material dielétrico, como mostrado na Fig. 2.6. A ideia é utilizar a diferença dielétrica entre os cilindros, ou buracos de ar para gerar a estrutura periódica e fazer surgir um gap de banda 2D para propagação no plano de periodicidade, onde a luz com determinada frequência dentro do gap de banda experimenta a reflexão de Bragg. No entanto, como no caso 1D, onde a luz ainda pode se propagar em duas dimensões, em uma propagação 2D ainda pode ocorrer propagação na direção não periódica, paralela aos cilindros. Assim, fez-se necessário a elaboração de um cristal fotônico tridimensional (3D). Uma ampla variedade de geometrias de cristais fotônicos 3D exibindo gaps de banda foram demonstradas [52, 53, 54].

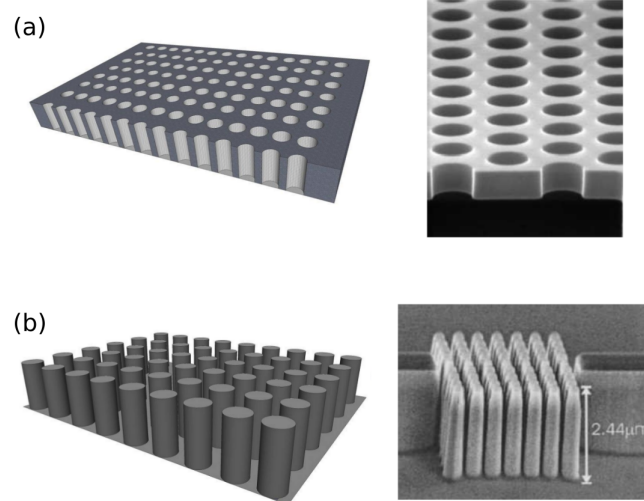


Figura 2.6: Em (a) e (b) podemos observar o esquema de um cristal fotônico bidimensional formado por lacunas cilíndricas e por cilindros dielétricos, com suas respectivas imagens realísticas obtidas por meio de um microscópio eletrônico de varredura (SEM) [55, 56].

Como nos dispositivos semicondutores, grande parte do interesse em cristais fotônicos surge não apenas da presença de gaps de banda, mas da capacidade de criar estados de defeitos localizados dentro do gap de banda, introduzindo um defeito estrutural em uma rede regular. Por exemplo, a remoção de um único cilindro de um cristal fotônico 2D cria um defeito pontual, isto é, uma nanocavidade ressonante, e a remoção de uma linha de cilindros pode criar um guia de ondas que suporta os modos de propagação [55, 56].

2.2.1 Nanocavidades

Em termos gerais, nanocavidades são estruturas que confinam o campo eletromagnético em uma região de dimensões nanométricas. A introdução proposital de um defeito ou ausência de buracos durante o processo de fabricação define a região de confinamento, que por sua vez não é perfeita. Assim, fótons que foram introduzidos na cavidade podem ser perdidos à uma certa taxa, conhecida como taxa de perda da cavidade. Quanto melhor a cavidade, menor é a taxa de perda. Isto é caracterizado pelo fator de qualidade da cavidade Q . Quando um PQ é inserido na cavidade, os modos fotônicos podem se acoplar ao éxciton do PQ. Se a intensidade do acoplamento do éxciton com os modos da cavidade for menor que a taxa de

perda de fótons da cavidade, o sistema se encontra em um regime conhecido como regime de acoplamento fraco. Já quando a qualidade da cavidade é boa o suficiente para que a probabilidade de reabsorção de fótons seja maior do que a dele escapar, o sistema encontra-se no regime de acoplamento forte. Este regime é caracterizado pela troca reversível de excitações entre o emissor e a cavidade. Do ponto de vista experimental, a implementação do acoplamento entre PQs e cavidades fotônicas é um desafio, de modo que, alguns modelos de cavidades foram implementadas, tais como cavidades de micropilares, em forma de micro disco, cavidades de cristais fotônicos, entre outras [57, 58].

Nos cristais fotônicos unidimensionais, o defeito pode ser criado modificando a dimensão de uma das camadas, gerando portanto, uma quebra da periodicidade local. Na presença de um campo elétrico, o mesmo perceberá a quebra de simetria, alterando sua amplitude, processo evidenciado na Fig. 2.7 (a). Já tratando de cristais fotônicos bidimensionais, existem várias formas de criar este defeito. No exemplo da Fig. 2.7 (b) o defeito é criado removendo-se três dos buracos de ar da estrutura periódica. Neste defeito, a luz pode existir com frequência dentro do *gap* do cristal fotônico, mas não pode sair, já que com esta frequência a luz não pode se propagar no cristal, criando assim uma região de confinamento da luz, ou seja, uma cavidade.

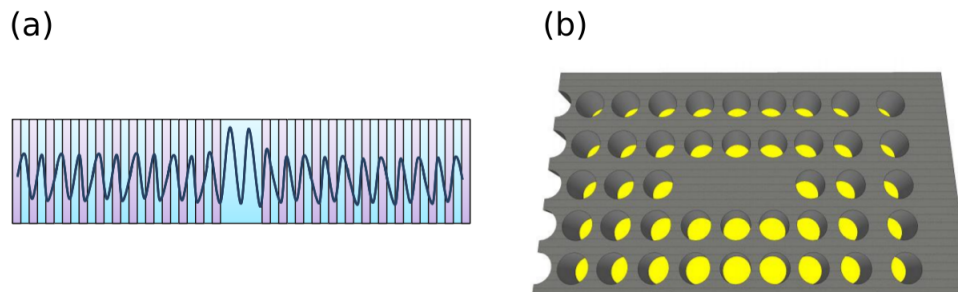


Figura 2.7: Em (a) temos a representação de um cristal fotônico unidimensional formado por camadas alternadas de materiais com constante dielétrica diferente. Em (b) temos um cristal fotônico bidimensional, contendo uma cavidade formada pela ausência de 3 buracos [35].

2.3 Estados quânticos da luz

A engenharia de estados quânticos da luz possibilita a geração de uma grande variedade de possíveis estados para o campo eletromagnético quantizado. Um exemplo é o estado de Fock (ou de número), o estado coerente e o coerente comprimido. Estes estados são de extremo interesse, tanto por suas aplicações tecnológicas em processos de informação quântica, como para a investigação de fenômenos fundamentais, tais como a não localidade e a decoerência. Apresentaremos aqui algumas características destes estados, que serão úteis no decorrer do nosso trabalho.

2.3.1 Estados de Fock

O estados de números de fótons $|n\rangle$, conhecidos como estados de Fock, são autoestados de energia do oscilador harmônico associados com o campo eletromagnético [59]

$$\hat{H} |n\rangle = \hbar\nu \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = E_n |n\rangle , \quad (2.5)$$

onde \hat{H} é o hamiltoniano de um modo do campo eletromagnético, com frequência ν , que possui um correspondente autovalor de energia E_n . Tal autoestado é caracterizado por possuir um número bem definido de fótons, sendo também um autoestado do operador número $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$, isto é,

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle = n |n\rangle . \quad (2.6)$$

Estes estados podem ser obtidos pela atuação do operador de criação no estado de vácuo repetidas vezes

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.7)$$

Os estados números são ortogonais

$$\langle n|m\rangle = \delta_{n,m} , \quad (2.8)$$

e completos

$$\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| = 1 . \quad (2.9)$$

Como consequência, a norma desses autovetores é finita, formando um conjunto completo de vetores da base para um espaço de Hilbert.

2.3.2 Estado coerente

Os estados coerentes foram introduzidos por Glauber [60], tornando-se populares por serem úteis na descrição do campo de radiação. Isto porque eles podem representar o campo gerado por um laser, e além disso, são os que mais se aproximam do campo clássico. Classicamente, as equações de Maxwell do campo eletromagnético admitem como soluções ondas planas, cuja fase e amplitude estão bem definidas. Entretanto, este não é o caso quando tratamos o fenômeno do eletromagnetismo usando as regras da mecânica quântica, passará à existir flutuações associadas com ambas, a amplitude e a fase, do campo [59]. Os estados coerentes $|\alpha\rangle$ são superposições que envolvem a base completa (e infinita) dos estados de Fock, o que permite que eles tenham uma fase mais precisamente definida do que um estado $|n\rangle$, em que a fase é completamente aleatória. O produto da incerteza em amplitude e fase para um estado coerente é o mínimo permitido pelo princípio da incerteza [61] e, nesse sentido, eles são os estados da mecânica quântica mais próximos de uma descrição clássica do campo [62]. O estado coerente pode ser definido como o autoestado do operador aniquilação \hat{a} , isto é,

$$\hat{a} |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle . \quad (2.10)$$

Como \hat{a} não é hermitiano, o autovalor α é um número complexo, $\alpha \equiv |\alpha|e^{i\theta}$. Este estado é obtido atuando-se o operador deslocamento $D(\alpha)$ no estado de vácuo

$$|\alpha\rangle = D(\alpha) |0\rangle = e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}} |0\rangle , \quad (2.11)$$

que consiste em deslocar o estado fundamental até o centro deste coincidir com o ponto definido no espaço de fase.

Em termos da base de estados de Fock, o estado coerente é definido pela seguinte expansão:

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle . \quad (2.12)$$

O conjunto de todos os estados coerentes é supercompleto. A relação de completeza neste caso é dada por

$$\frac{1}{\pi} \int |\alpha\rangle \langle\alpha| d^2\alpha = \hat{\mathbf{1}} , \quad (2.13)$$

onde $d^2\alpha = d\text{Re}(\alpha)d\text{Im}(\alpha)$. Por outro lado, estados com amplitudes diferentes, $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$, não são ortogonais, a saber,

$$\langle\alpha|\beta\rangle = e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2)+\beta\alpha^*}, \quad (2.14)$$

de magnitude absoluta $|\langle\alpha|\beta\rangle|^2 = e^{-|\alpha-\beta|^2}$. Estes estados vão se tornando ortogonais no limite $|\alpha - \beta| \gg 1$.

O conceito de espaço de fase na mecânica quântica é algo complicado devido ao fato de que as variáveis canônicas \hat{x} e \hat{p} não comutam, isto é, $[\hat{x}, \hat{p}] \neq 0$. Assim, o estado de um sistema não está bem localizado como um ponto no espaço de fase igual na mecânica clássica. No entanto, definindo dois operadores de quadratura do campo adimensionais [62, 63]

$$X_1 = \frac{1}{2}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \quad \text{e} \quad X_2 = \frac{1}{2i}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger). \quad (2.15)$$

Seus valores esperados na base dos estados coerentes são: $\langle X_1 \rangle = \Re(\alpha)$ e $\langle X_2 \rangle = \Im(\alpha)$. Assim, o plano complexo α desempenha o papel de espaço de fase, onde as partes real e imaginária de α representam as variáveis posição e momento, respectivamente. Verifica-se que o estado coerente apresenta iguais variâncias nessas quadraturas, cujo produto apresenta o menor valor permitido pelo princípio da incerteza de Heisenberg, ou seja, assumindo $\hbar = 1$, temos

$$\Delta X_1 \Delta X_2 = \frac{1}{4}. \quad (2.16)$$

Um estado coerente $|\alpha\rangle$ com $\alpha = |\alpha|e^{i\theta}$, pode ser pictoricamente representado por um círculo indicando a área de incerteza do estado coerente, isto é, com iguais flutuações em todas as direções do espaço de fase, o centro do círculo localizado a uma distância $|\alpha|^2 = \langle n \rangle$ da origem de coordenadas e ângulo θ acima do eixo posição.

2.3.3 Estado coerente comprimido

Além dos estados de Fock e os estados coerentes, há também uma classe de estados caracterizados por ter menos ruído em uma quadratura do que um estado coerente. Para satisfazer os requisitos de um estado de incerteza mínima, o ruído na outra quadratura é maior do que o de um estado coerente. Deste modo, os estados coerentes são um membro

particular desta classe mais geral de estados de incerteza mínima com ruído igual em ambas as quadraturas. Tais estados são chamados de estados coerentes comprimidos, ou simplesmente, estados comprimidos. Estes estados são gerados através de processos não-lineares, envolvendo termos quadráticos dos operadores de criação (\hat{a}^\dagger) e aniquilação (\hat{a}).

Particularmente, o estado coerente comprimido é obtido quando primeiro se atua o operador compressão $S(\xi)$ sobre o estado de vácuo, seguido pelo operador deslocamento $D(\alpha)$ [62], isto é,

$$|\alpha, \xi\rangle = D(\alpha)S(\xi)|0\rangle, \quad (2.17)$$

onde o operador compressão é definido por $S(\xi) = e^{\frac{1}{2}(\xi^* \hat{a}^2 - \xi \hat{a}^{\dagger 2})}$, com $\xi = re^{2i\phi}$, sendo r o fator de compressão e ϕ o ângulo de rotação no espaço de fase. Definindo novas quadraturas, Y_1 e Y_2 , num espaço de fase obtido através de uma rotação de $\theta/2$ em relação ao espaço definido por X_1 e X_2 . Logo

$$Y_1 + iY_2 = (X_1 + iX_2)e^{-i\frac{\theta}{2}}, \quad (2.18)$$

onde pode ser verificado que as variâncias das quadraturas Y_1 e Y_2 do estado coerente comprimido satisfazem as relações

$$\Delta Y_1 = \frac{e^{-r}}{2} \quad \text{e} \quad \Delta Y_2 = \frac{e^r}{2}, \quad (2.19)$$

e o produto entre elas continua sendo uma relação de mínima incerteza.

2.4 Propriedades estatísticas do campo

Diferentes estados de luz são definidos por suas estatísticas de fótons, função de distribuição de probabilidade de fótons e flutuações dos números de fótons [59]. Abordar as propriedades estatísticas de um campo de radiação eletromagnética, como as funções de correlação, coerências, ou fenômenos de agrupamento (do inglês *bunching*) e antiagrupamento (do inglês *antibunching*) de fótons, é uma maneira de determinar quando um campo possui um comportamento não clássico, do ponto de vista da sua estatística. Uma maneira de fazermos isso é olhar para as funções de correlações do campo. A função de correlação de

primeira ordem $g^{(1)}(\tau)$ está relacionada com a visibilidade das franjas de interferência associada ao grau de coerência do campo. Entretanto, ao considerar campos com propriedades espectrais idênticas, não é possível distinguir a natureza da fonte de luz a partir da função de correlação de primeira ordem somente. Por exemplo, um feixe laser e a luz gerada por uma fonte térmica convencional podem ambas ter as mesmas propriedades de coerência de primeira ordem. Desta forma, a função de correlação de primeira ordem não é capaz de distinguir luz quântica de luz clássica, sendo necessário considerar coerência de ordem mais altas para distinguir entre propriedades estatísticas clássicas das quânticas [62, 64].

A função de correlação de segunda ordem é definida através da equação [62]

$$g^{(2)}(\tau) = \frac{\langle \hat{a}^\dagger(t)\hat{a}^\dagger(t+\tau)\hat{a}(t+\tau)\hat{a}(t) \rangle}{\langle \hat{a}^\dagger(t)\hat{a}(t) \rangle^2}, \quad (2.20)$$

e permite calcular a probabilidade de detecção de um segundo fóton após um tempo τ em que o primeiro foi detectado em t . Se $g^{(2)}(\tau) > 1$ diz-se que os fótons do feixe luminoso estão agrupados; se $g^{(2)}(\tau) < 1$ eles estão anti-agrupados. Para a luz de um laser ideal (luz coerente) resulta $g^{(2)}(\tau) = 1$. Um caso de grande interesse é $g^{(2)}(0)$ que representa a probabilidade condicional de detectar um segundo fóton ao mesmo tempo que um já foi detectado. Portanto, é uma medida das coincidências temporais dos fótons, necessária para distinguir entre diferentes estados de luz [63]. Para $\tau \rightarrow 0$

$$g^{(2)}(0) = 1 + \frac{(\Delta\hat{n})^2 - \langle\hat{n}\rangle}{\langle\hat{n}\rangle^2}, \quad (2.21)$$

onde $\langle\hat{n}\rangle$ é o número médio de fótons e $(\Delta\hat{n})^2 = \langle\hat{n}^2\rangle - \langle\hat{n}\rangle^2$ é a variância do número de fótons (flutuações do campo). $g^{(2)}(0)$ nos fornece a seguinte estatística:

- $g^{(2)}(0) > 1$ temos uma estatística super-poissoniana que é caracterizada pela incerteza no número de fótons ser maior que a média do número de fótons ($(\Delta\hat{n})^2 > \langle\hat{n}\rangle$);
- $g^{(2)}(0) = 1$ exhibe uma estatística poissoniana, onde a variância do número de fótons é igual a média do número de fótons ($(\Delta\hat{n})^2 = \langle\hat{n}\rangle$);
- $g^{(2)}(0) < 1$ o campo apresenta uma estatística sub-poissoniana em que a incerteza no número de fótons é menor que a média do número de fótons ($(\Delta\hat{n})^2 < \langle\hat{n}\rangle$).

Quando o campo possui uma estatística super-poissoniana ou poissoniana não é possível distinguir se o campo se comporta com características quânticas ou clássicas, uma vez que, tanto a teoria quântica quanto a clássica preveem este resultado ($g^{(2)}(0) \geq 1$). Por outro lado, se $g^{(2)}(0) < 1$ há uma evidência de não-classicalidade, uma vez que está associada a funções de quase-probabilidade que assume valores negativos.

2.5 Função de Wigner

As funções de distribuição no espaço de fase são ferramentas fundamentais na física estatística clássica [65]. Para uma partícula em movimento unidimensional, o espaço de fase é um plano, com a posição x e o momento conjugado p como coordenadas. Um ponto neste plano define o estado mecânico da partícula. No caso de um modo de cavidade, equivalente a um oscilador unidimensional, duas quadraturas de campo ortogonal desempenham o papel de “pseudos” posição e momento. A extensão desta representação do espaço de fase para estados quânticos foi discutida pela primeira vez por Wigner (1932) [62]. Uma dificuldade surgiu imediatamente porque as relações de incerteza de Heisenberg proíbem, mesmo na ausência de qualquer indeterminação estatística, a determinação precisa e simultânea de variáveis conjugadas [61]. Apesar deste problema, ainda é possível definir uma função de espaço de fase real para uma partícula quântica, que retém algumas das características essenciais da distribuição de probabilidade clássica. Essa distribuição quântica é chamada de função Wigner W [16].

A função de Wigner é uma distribuição de quase probabilidade, que descreve totalmente o estado de um sistema quântico no espaço de fase (seja o espaço das posições-momentos para um oscilador harmônico ou, equivalentemente, o espaço composto por duas quadraturas ortogonais do campo eletromagnético para um estado de modo único da luz) da mesma maneira que uma distribuição de probabilidade (não negativa por definição) caracteriza um sistema clássico. A negatividade da função de Wigner é de fato uma boa indicação do caráter altamente não clássico do estado. A função de Wigner é obtida como [16, 59]

$$W_{(\gamma)}^{[\rho]} = \frac{1}{\pi^2} \int d^2\lambda C_s^{[\rho]}(\lambda) e^{\gamma\lambda^* - \gamma^*\lambda}, \quad (2.22)$$

onde $C_s^{[\rho]}(\lambda) = \langle D(\lambda) \rangle$ representa a função característica, que corresponde ao valor esperado

do operador deslocamento $D(\lambda) = e^{\lambda\hat{a}^\dagger - \lambda^*\hat{a}}$. Já $\gamma = x + ip$ enfatiza a analogia entre as quadraturas do campo com os pseudos posição e momento.

2.6 Correlações quânticas

Por razões de estruturação, abdicaremos da sequência natural e introduziremos a entropia de von Neumann sem antes discutir a entropia de Shannon da teoria da informação clássica. Para aqueles que não possuam familiaridade com o tema, sugere-se a leitura das Ref. [64, 66]. Em 1931, von Neumann encontrou uma conexão entre dois ramos da física, mecânica quântica e termodinâmica, que é definida da seguinte forma: Para um operador de densidade ρ a entropia de von Neumann é definida como segue

$$S(\rho) = -\text{tr}(\rho \log_2 \rho) . \quad (2.23)$$

A entropia de von Neumann quantifica a quantidade de informações presentes em um sistema e a quantidade de correlações entre os sistemas quânticos. Esta entropia é uma generalização quântica da entropia clássica de Shannon. Se $\{p_i\}$ são os autovalores de um operador densidade ρ , então a entropia de von Neumann é igual à entropia de Shannon de uma variável aleatória X_p com distribuição de probabilidade $\{p_i\}$, isto é,

$$S(\rho) = H(X_p) = -\sum_i p_i \log_2 p_i , \quad (2.24)$$

onde $H(X_p)$ representa a entropia de Shannon, com $0 \leq p_i \leq 1$.

Consideremos um sistema quântico bipartido AB descrito pelo operador densidade ρ_{AB} , a subaditividade da entropia, $S(\rho_{AB}) \leq S(\rho_A) + S(\rho_B)$, possibilita a definição de uma medida de correlações totais entre A e B chamada de Informação Mútua Quântica (IMQ) definida como

$$I(A : B) \equiv S(\rho_A) + S(\rho_B) - S(\rho_{AB}) . \quad (2.25)$$

As entropias dos subsistemas A e B são calculadas a partir dos operadores densidade reduzidos de cada subsistema, $\rho_A = \text{tr}_B(\rho_{AB})$ e $\rho_B = \text{tr}_A(\rho_{AB})$, respectivamente. Quando os subsistemas forem descorrelacionados, $\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B$, a informação mútua quântica

$I(A : B) = 0$, isto é, quando não existir nenhum tipo de correlação, quântica nem clássica, entre os subsistemas.

Um tipo especial de correlação quântica é o emaranhamento. Não é simples conceituar/descrever o emaranhamento em poucas palavras. Deste modo, aqui nos restringiremos aos conceitos de emaranhamento necessários para o entendimento de nosso problema. Para uma agradável revisão sobre o assunto, recomenda-se a leitura da referência [20]. É conhecido que quando dois (ou mais) sistemas quânticos interagem, o estado final de um dos sistemas pode depender do estado final do(s) outro(s). As correlações estatísticas entre os subsistemas têm, todavia, um caráter não-local, isto é, as propriedades individuais de cada subsistema não permitem determinar o estado do sistema global. Este fenômeno, sem análogo na Física Clássica, é o que conhecemos como emaranhamento de estados quânticos [67]. Assim, pode haver emaranhamento entre dois átomos, entre dois spins, entre a polarização de dois fótons, etc. mais do que isso, podemos falar em emaranhamento para um único átomo, onde pode ocorrer o emaranhamento entre diferentes graus de liberdade do mesmo sistema (por exemplo: o momentum de um átomo pode se emaranhar com seu spin pela interação com um campo magnético; de fato é essa a essência do experimento de Stern-Gerlach [61]). A quantificação do emaranhamento não é uma tarefa trivial e, a depender do sistema, torna-se um trabalho mesmo que impossível. Logo, existem alguns quantificadores de emaranhamento propostos na literatura. Quando tratamos de sistemas com dois *qubits*, o emaranhamento de formação $E_F(\rho)$ em função da concorrência $C(\rho)$, formulada por Wootters [68] demonstrou ser um bom quantificador de emaranhamento tanto para estados puros, quanto para estados mistos, sendo recentemente estendida para atuar em dimensões maiores [69]. Defini-se o emaranhamento de formação de um estado ρ como

$$E_F(\rho) = h\left(\frac{1 + \sqrt{1 - C(\rho)^2}}{2}\right), \quad (2.26)$$

onde $h(x) = -x \log_2(x) - (1 - x) \log_2(1 - x)$ e $C(\rho) = \max\{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\}$, sendo λ_i as raízes quadradas dos autovalores, em ordem decrescente, da matriz não hermitiana $R = \rho \tilde{\rho}$. Assim, a concorrência está diretamente ligada à semelhança entre um estado ρ e seu “*spin-flip*” $\tilde{\rho} = (\sigma_y^A \otimes \sigma_y^B) \rho^* (\sigma_y^A \otimes \sigma_y^B)$. A concorrência $C(\rho)$ e, conseqüentemente, o emaranhamento de formação $E_F(\rho)$ variam de 0 a 1, assumindo os extremos 0 para estados descorrelacionados

e 1 para estados maximamente emaranhados.

2.7 Sistemas quânticos abertos

Com a crescente pesquisa voltada à área de computação e informação quântica, surgiu o interesse no estudo e controle de sistemas quânticos abertos, aqueles nos quais o objeto de interesse não se encontra isolado do ambiente. Em particular, o interesse é descrever a evolução dinâmica de um número pequeno de partículas sujeitas a algum tipo de ruído ou interferência causados pelo meio que as rodeiam. Ao contrário do que acontece com um sistema fechado, também conhecido como sistema quântico isolado, a dinâmica quântica de um sistema aberto não pode ser representada em termos de uma evolução unitária. Nestas circunstâncias, dependendo de como se dá a interação do sistema com o ambiente, fraca ou forte, características do ambiente, estruturado ou correlacionado, e se existem correlações iniciais entre o sistema e o ambiente, essa dinâmica poderá ser descrita de diferentes formas. Como então descrever a dinâmica de sistemas quânticos abertos?

A princípio não assumiremos nada sobre o ambiente. Apenas que sistema e ambiente são descritos por operadores que atuam em espaços de Hilbert diferentes. Logo, o hamiltoniano do sistema global é [70]

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_A \otimes \hat{\mathbf{1}}_R + \hat{\mathbf{1}}_A \otimes \hat{H}_R + \hat{H}_I , \quad (2.27)$$

onde \hat{H}_A é o hamiltoniano do sistema de interesse, \hat{H}_R o hamiltoniano do reservatório, o termo \hat{H}_I é quem carrega toda informação a respeito da interação entre o sistema e o reservatório, $\hat{\mathbf{1}}_A$ e $\hat{\mathbf{1}}_R$ são os respectivos operadores identidade do sistema e do reservatório. Para um sistema quântico aberto, o estado do sistema de interesse em um dado instante de tempo t , pode ser representado pelo operador densidade como

$$\hat{\rho}_A(t) = \text{tr}_R \left[\hat{U}(t) (\hat{\rho}_A(t_0) \otimes \hat{\rho}_R) \hat{U}^\dagger(t) \right] , \quad (2.28)$$

onde $\hat{U}(t) = \overleftarrow{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}(\tau) \right)$ é o operador evolução temporal, em que \overleftarrow{T} representa o operador ordenamento temporal [71]. $\hat{\rho}_A$ e $\hat{\rho}_R$ são os respectivos operadores densidade reduzido do sistema e ambiente. Já tr_R é a operação traço sobre as variáveis do reservatório. Existem diferentes abordagens para descrição da dinâmica dos sistemas abertos sendo estas

a abordagem axiomática e a abordagem microscópica, cujos conceitos fundamentais serão discutidas a seguir.

2.7.1 Abordagem axiomática: mapas quânticos

A transformação dinâmica mais geral no sistema é representada por um mapeamento linear do conjunto de operadores densidade em si mesmos, isto é, levam o espaço de estados do sistema nele próprio [72, 73]. Tal mapa é conhecido como mapa dinâmico Λ , que transforma a matriz densidade do sistema inicial $\hat{\rho}(t_0)$ em uma matriz densidade final $\hat{\rho}(t)$. É desejável que o mapa Λ preserve as condições do estado:

(i) Λ seja positivo: se $\hat{\rho} \geq 0$, então $\Lambda\hat{\rho} \geq 0$, isto é, leva operadores densidade positivos em operadores densidade positivos;

(ii) Λ preserva o traço: $\text{tr}[\Lambda\hat{\rho}] = \text{tr}[\hat{\rho}]$.

Além destas condições, os mapas seguem as seguintes definições, se o mapa Λ atua sobre \hat{H}_A , ele pode ser facilmente estendido para atuar sobre $\hat{H}_A \otimes \hat{H}_k$

$$\Lambda_k = \Lambda \otimes \hat{\mathbf{1}}_k , \quad (2.29)$$

onde k representa a dimensão de \hat{H}_k . Um mapa Λ é k -positivo se sua extensão Λ_k é positiva. Por outro lado, se for k -positivo para todo k , dizemos que o mapa Λ é completamente positivo (CP). Assim

$$\begin{aligned} \Lambda\hat{\rho}_A(t_0) &= \text{tr}_R \left[\hat{U}(t) (\hat{\rho}_A(t_0) \otimes \hat{\rho}_R) \hat{U}^\dagger(t) \right] \\ &= \sum_{i,j}^d \sqrt{\lambda_j} \langle \phi_i | \hat{U} | u_j \rangle \hat{\rho}_A(t_0) \sqrt{\lambda_j} \langle u_j | \hat{U} | \phi_i \rangle \\ &= \sum_l K_l \hat{\rho}_A(t_0) K_l^\dagger . \end{aligned} \quad (2.30)$$

Portanto, um mapa Λ é completamente positivo se, e somente se, existir um operador K_l que permita escrever $\Lambda\hat{\rho}_A(t_0)$ como a Eq. (2.30). Este operador é denominado operador de Kraus. Note que, o operador de Kraus K_l depende de $|\phi_i\rangle$. Logo, K_l não possui uma representação única. Mapas CP que preservam traço (do inglês *Completely Positive Trace Preserving* - CPTP) devem satisfazer a seguinte relação

$$\sum_l K_l K_l^\dagger = \hat{\mathbf{1}} . \quad (2.31)$$

Um resultado importante, demonstrado por G. Lindblad [21] é que toda dinâmica markoviana pode ser equivalentemente representada por uma equação diferencial para matriz densidade, denominada equação mestra. Partindo da eq. (2.30), podemos escrever

$$\hat{\rho}_A(t) = \Lambda \hat{\rho}_A(t_0) \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} \hat{\rho}_A(t) = \dot{\Lambda} \hat{\rho}_A(t_0). \quad (2.32)$$

Assumindo que o mapa seja inversível $\hat{\rho}_A(t) = \Lambda \hat{\rho}_A(t_0) \Rightarrow \hat{\rho}_A(t_0) = \Lambda^{-1} \hat{\rho}_A(t)$. Logo

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_A(t) = \dot{\Lambda} \Lambda^{-1} \hat{\rho}_A(t) = \mathcal{L} \hat{\rho}_A(t), \quad (2.33)$$

onde \mathcal{L} é o superoperador lidbladiano ou gerador. O teorema de Lindblad afirma que uma dinâmica é markoviana se, e somente se, existirem operadores lineares L_k e um operador hermitiano \hat{H}_A , tais que o operador densidade no instante t , $\hat{\rho}_A(t)$, é dado pela solução da equação diferencial

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_A(t) = \mathcal{L} \hat{\rho}_A(t) = -i \left[\hat{H}_A, \hat{\rho}_A(t) \right] + \sum_k \gamma_k \left[L_k \hat{\rho}_A(t) L_k^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ L_k^\dagger L_k, \hat{\rho}_A(t) \right\} \right], \quad (2.34)$$

em que \hat{H}_A é o operador hamiltoniano do sistema de interesse e $\gamma_k \geq 0$, denominada equação mestra. A equação de Lindblad pode ser também derivada assumindo certas características para o ambiente e interação, como veremos a seguir.

2.7.2 Abordagem microscópica

Aqui descreveremos a interação de um sistema de interesse A com um reservatório R, invocando suas características microscópicas. Para tal fim, partiremos dos seguintes pressupostos [23, 74]:

- (i) O sistema de interesse A interage com o ambiente R que possui um número muito grande de graus de liberdade;
- (ii) A capacidade térmica de R é tal que não há modificação macroscópica do estado de R sob a influência do acoplamento com A (R pode ser considerado um reservatório);
- (iii) Temos uma escala de tempo muito curta τ_c , caracterizando as flutuações da perturbação exercida por R sobre A ;

- (iv) Também há uma escala de tempo muito longa T_R , caracterizando a taxa de variação de A, *i.e.*, o tempo de evolução;
- (v) Considera-se o acoplamento entre A e R de efeito fraco durante o tempo de correlação τ_c das flutuações de R.

Por simplicidade vamos ignorar o símbolo \otimes na eq. (2.27). A evolução temporal do estado do sistema global $\hat{\rho}_g(t)$ é dada pela equação de Liouville-von Neumann

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_g(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H}_A + \hat{H}_R + \hat{H}_I, \hat{\rho}_g(t)] , \quad (2.35)$$

que por conveniência vamos passar para a representação de interação. Assim

$$\frac{d}{dt}\bar{\rho}_g(t) = \frac{1}{i\hbar}[\bar{H}_I(t), \bar{\rho}_g(t)] , \quad (2.36)$$

onde $\bar{\rho}_g(t) = e^{i(\hat{H}_A + \hat{H}_R)t/\hbar}\hat{\rho}_g(t)e^{-i(\hat{H}_A + \hat{H}_R)t/\hbar}$ e $\bar{H}_I(t) = e^{i(\hat{H}_A + \hat{H}_R)t/\hbar}\hat{H}_I(t)e^{-i(\hat{H}_A + \hat{H}_R)t/\hbar}$.

Integrando (2.36) de t_0 até t teremos

$$\bar{\rho}_g(t) = \bar{\rho}_g(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' [\bar{H}_I(t'), \bar{\rho}_g(t')] \quad (2.37)$$

que, por sua vez, pode ser substituída na própria equação (2.36) nos fornecendo

$$\frac{d}{dt}\bar{\rho}_g(t) = \frac{1}{i\hbar}[\bar{H}_I(t), \bar{\rho}_g(t_0)] + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' [\bar{H}_I(t), [\bar{H}_I(t'), \bar{\rho}_g(t')]] . \quad (2.38)$$

A equação acima pode ser integrada novamente para um intervalo de tempo posterior, ou seja, de um tempo inicial t_0 a um tempo final t_1 , com $t_1 > t$. Repetindo esta operação n vezes para tempos posteriores, e fazendo algumas trocas de variáveis iremos encontrar

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\bar{\rho}_g(t) &= \frac{1}{i\hbar}[\bar{H}_I(t), \bar{\rho}_g(t_0)] + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^{n+1} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \\ &\dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \left[\bar{H}_I(t), \left[\bar{H}_I(t_1), \dots, \left[\bar{H}_I(t_n), \bar{\rho}_g(t_n) \right] \dots \right] \right] , \end{aligned} \quad (2.39)$$

obedecendo a desigualdade $t > t_1 > t_2 > \dots > t_n > t_0$. No entanto, estamos interessados na evolução do sistema A e, assim, devemos fazer a operação traço sobre as variáveis do reservatório encontrando a expressão

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\bar{\rho}_A(t) &= \frac{1}{i\hbar} \text{tr}_R [\bar{H}_I(t), \bar{\rho}_g(t_0)] + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^{n+1} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \\ &\dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \text{tr}_R \left[\bar{H}_I(t), \left[\bar{H}_I(t_1), \dots, \left[\bar{H}_I(t_n), \bar{\rho}_g(t_n) \right] \dots \right] \right] . \end{aligned} \quad (2.40)$$

Podemos fazer algumas considerações relativas ao reservatório [23]:

- i Em $t = 0$ a interação foi ligada, logo inicialmente não existe correlação entre A e R , *i.e.*, podemos escrever $\bar{\rho}_g(0) = \bar{\rho}_A(0) \otimes \bar{\rho}_R(0)$;
- ii A variação de R com o acoplamento é desprezível, de modo que o banho R pode ser considerado como um reservatório em um estado estacionário $\bar{\rho}_R(t) \simeq \bar{\rho}_R(0) = \rho_R$. Isto é $[\hat{\rho}_R, \hat{H}_R] = 0$. Em outras palavras, $\hat{\rho}_R$ só possui elementos na diagonal principal;
- iii Podemos supor que $\bar{H}_I(t)$ não tem elementos na diagonal principal na representação em que \bar{H}_R é diagonal. Logo $\text{tr}_R[\bar{H}_I(t), \bar{\rho}_g(t_0)] = 0$.

Estas considerações permitem reescrever a equação (2.40) da seguinte forma

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \bar{\rho}_A(t) = & \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^{n+1} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \\ & \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \text{tr}_R \left[\bar{H}_I(t), \left[\bar{H}_I(t_1), \dots, \left[\bar{H}_I(t_n), \bar{\rho}_A(t_n) \otimes \rho_R \right] \dots \right] \right]. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Esta é uma equação diferencial exata para a evolução do sistema A, porém de difícil solução, que nos conduz a necessidade de algumas aproximações [22, 23, 75, 76]:

I Aproximação de Born: Esta aproximação considera o acoplamento entre o sistema A e o reservatório R, fraco o suficiente para que a dinâmica de interesse seja descrita pelo primeiro termo da equação (2.41);

$$\frac{d}{dt} \bar{\rho}_A(t) = \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt' \text{tr}_R \left[\bar{H}_I(t), \left[\bar{H}_I(t'), \bar{\rho}_A(t') \otimes \rho_R \right] \right]; \quad (2.42)$$

II Aproximação de Markov: A equação (2.42) ainda possui uma solução complicada, em particular por não ser Markoviana, ou seja, a evolução futura de $\hat{\rho}_A(t)$ depende da sua história passada $\hat{\rho}_A(t')$. Em outras palavras, como corolário, isso define um sistema Markoviano onde o comportamento futuro de um sistema depende apenas do seu estado atual. No intuito de tornar a equação (2.42) Markoviana, faremos a seguinte substituição $\bar{\rho}_A(t') \rightarrow \bar{\rho}_A(t)$, que tem como justificativa o seguinte fato: o tempo de memória do reservatório (*i.e.* a escala de tempo sobre à qual o reservatório preserva a informação acerca do estado passado do sistema) é extremamente pequeno em comparação a típica escala de tempo para evolução do sistema de interesse. Assim podemos

reescrever a equação acima como

$$\frac{d}{dt}\bar{\rho}_A(t) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \text{tr}_R \left[\bar{H}_I(t), [\bar{H}_I(t'), \bar{\rho}_A(t) \otimes \rho_R] \right]. \quad (2.43)$$

Esta equação ainda não é verdadeiramente Markoviana, uma vez que a evolução no tempo de $\bar{\rho}_A(t)$ ainda depende de uma escolha explícita na preparação inicial no tempo t_0 . No intuito de contornar isto, faremos as seguintes mudanças de variáveis i) $t' \rightarrow t - t'$; ii) $t_0 = 0$ na equação (2.43) e deixar o limite superior de integração tender a infinito. Isto é permitido desde que o integrando desapareça suficientemente rápida para $t' \gg \tau_c$, onde τ_c é o tempo de correlação das flutuações do reservatório. Logo

$$\frac{d}{dt}\bar{\rho}_A(t) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^\infty dt' \text{tr}_R \left[\bar{H}_I(t), [\bar{H}_I(t - t'), \bar{\rho}_A(t) \otimes \rho_R] \right]. \quad (2.44)$$

A aproximação Markoviana é portanto justificável, se a escala de tempo T_R sobre à qual o estado do sistema varia é apreciavelmente grande quando comparada ao tempo de escala τ_c sobre à qual a função de correlação do reservatório decai.

2.7.3 Equação mestra para um oscilador na aproximação de onda girante

Vamos agora restringir a equação (2.44) para nosso sistema de interesse e a forma que ele está interagindo com o reservatório. O decaimento de um átomo, inicialmente preparado no estado excitado, pode ser compreendido a partir de um modelo em que o átomo está acoplado a um reservatório de osciladores harmônicos simples a temperatura nula. De um modo muito semelhante, a troca de excitações do campo de radiação no interior de uma cavidade pode ser descrita por um modelo, no qual o modo do campo de interesse está acoplado a um conjunto de modos do reservatório [76, 59]. A evolução de tais sistemas pode ser representada por meio de uma equação mestra para um oscilador na aproximação de onda girante (*Rotating Wave Approximation* - RWA). O hamiltoniano total do sistema na RWA é

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_R + \hat{H}_I, \quad (2.45)$$

com

$$\hat{H}_A = \hbar\omega_0(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \mathbf{1}/2) \quad (2.46)$$

$$\hat{H}_R = \hbar \sum_k \omega_k (\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \mathbf{1}/2) \quad (2.47)$$

$$\hat{H}_I = \hbar \sum_k (g_k^* \hat{a}^\dagger \hat{b}_k + \text{c.h.}) , \quad (2.48)$$

sendo ω_0 a frequência do nosso sistema de interesse, ω_k a frequência do n-ésimo oscilador pertencente ao reservatório, os operadores $\hat{a}^\dagger(\hat{a})$ e $\hat{b}^\dagger(\hat{b})$ são os conhecidos operadores criação e (destruição) referentes ao sistema de interesse e ao reservatório respectivamente, e g_k é uma constante de acoplamento entre o oscilador de interesse e o n-ésimo oscilador do reservatório.

Escrevendo o hamiltoniano (2.48) na representação de interação, temos

$$\bar{H}_I = \hbar \sum_k (g_k^* e^{i\omega_0 t} \hat{a}^\dagger \hat{b}_k e^{-i\omega_k t} + \text{c.h.}) . \quad (2.49)$$

Fazendo as seguintes substituições $\hat{A}(t) = e^{-i\omega_0 t} \hat{a}$ e $\hat{B}(t) = \sum_k g_k^* \hat{b}_k e^{-i\omega_k t}$, podemos reescrever a equação acima como

$$\bar{H}_I = \hbar (\hat{A}^\dagger(t) \hat{B}(t) + \text{c.h.}) . \quad (2.50)$$

Substituindo este nosso hamiltoniano (2.50) na equação de movimento (2.44) para o sistema de interesse, obtemos

$$\frac{d}{dt} \bar{\rho}_A(t) = \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_0^\infty dt' \text{tr}_R \left[\hbar (\hat{A}^\dagger(t) \hat{B}(t) + \text{c.h.}), [\hbar (\hat{A}^\dagger(\tau) \hat{B}(\tau) + \text{c.h.}), \bar{\rho}_A(t) \otimes \rho_R] \right] , \quad (2.51)$$

onde por simplicidade fizemos $t - t' = \tau$. Expandindo os comutadores da equação acima e usando as propriedades da operação do traço, teremos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \bar{\rho}_A(t) = & - \int_0^\infty dt' \left\{ \left[\hat{A}^\dagger(t), \hat{A}^\dagger(\tau) \bar{\rho}_A(t) \right] \left\langle \hat{B}(t) \hat{B}(\tau) \right\rangle_R + \left[\hat{A}^\dagger(t), \hat{A}(\tau) \bar{\rho}_A(t) \right] \left\langle \hat{B}(t) \hat{B}^\dagger(\tau) \right\rangle_R \right. \\ & \left. + \left[\bar{\rho}_A(t) \hat{A}^\dagger(\tau), \hat{A}^\dagger(t) \right] \left\langle \hat{B}(\tau) \hat{B}(t) \right\rangle_R + \left[\bar{\rho}_A(t) \hat{A}^\dagger(\tau), \hat{A}(t) \right] \left\langle \hat{B}(\tau) \hat{B}^\dagger(t) \right\rangle_R + \text{c.h.} \right\} , \end{aligned}$$

onde $\left\langle \hat{O}(t) \hat{O}(\tau) \right\rangle_R = \text{tr}_R [\hat{O}(t) \hat{O}(\tau) \rho_R] = \text{tr}_R [\hat{O}(\tau) \hat{O}(t) \rho_R]$, desde que $\hat{O}(t)$, $\hat{O}(\tau)$ e ρ_R sejam operadores pertencentes ao reservatório.

Assumimos que o reservatório é um estado de mistura estatística em equilíbrio térmico para multimodos, cujo operador densidade reduzida é representado por [59]

$$\rho_R = \prod_k \left[1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega_k}{k_B T}\right) \right] \exp\left(-\frac{\hbar\omega_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k}{k_B T}\right) , \quad (2.52)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura. Para o estado de equilíbrio térmico acima, o valor médio dos operadores do reservatório são $\langle \hat{b}_k \hat{b}_{k'} \rangle_R = \langle \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{k'}^\dagger \rangle_R = 0$, $\langle \hat{b}_k \hat{b}_{k'}^\dagger \rangle_R = (\bar{n}_k + 1)\delta_{kk'}$ e $\langle \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{k'} \rangle_R = \bar{n}_k \delta_{kk'}$, onde $\bar{n}_k = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_k}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1}$ é o número médio de excitações do n -ésimo oscilador. Levando em consideração estes resultados, a equação de evolução para $\hat{\rho}_A(t)$ na representação de Schrödinger torna-se

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\hat{\rho}_A(t) &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_A, \hat{\rho}_A(t)] - \int_0^\infty dt' \left\{ \left[\hat{a} \hat{\rho}_A(t), \hat{a}^\dagger \right] \sum_k |g_k|^2 e^{i(\omega_0 - \omega_k)t'} (\bar{n}_k + 1) \right. \\ &+ \left[\hat{a}^\dagger \hat{\rho}_A(t), \hat{a} \right] \sum_k |g_k|^2 e^{-i(\omega_0 - \omega_k)t'} \bar{n}_k + \left[\hat{a}, \hat{\rho}_A(t) \hat{a}^\dagger \right] \sum_k |g_k|^2 e^{-i(\omega_0 - \omega_k)t'} (\bar{n}_k + 1) \\ &\left. + \left[\hat{a}^\dagger, \hat{\rho}_A(t) \hat{a} \right] \sum_k |g_k|^2 e^{i(\omega_0 - \omega_k)t'} \bar{n}_k \right\}. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Uma vez que o reservatório possui um número muito grande de graus de liberdade, podemos considerá-lo infinito e fazer as seguintes mudanças [75, 76]

$$\begin{aligned} \sum_k &\longrightarrow \int_0^\infty D(\omega) d\omega \\ g_k &\longrightarrow g(\omega) \\ \bar{n}_k &\longrightarrow \bar{n}(\omega), \end{aligned}$$

onde $D(\omega)$ é a densidade dos modos no reservatório, isto é, $D(\omega) d\omega$ fornece o número de modos no intervalo compreendido entre ω e $\omega + d\omega$.

Ao levarmos em conta essas observações, podemos reescrever (2.53) da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\hat{\rho}_A(t) &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_A, \hat{\rho}_A(t)] + \left\{ \left[\hat{a} \hat{\rho}_A(t), \hat{a}^\dagger \right] \int_0^\infty dt' \int_0^\infty d\omega D(\omega) |g(\omega)|^2 e^{i(\omega_0 - \omega_k)t'} (\bar{n}(\omega) + 1) \right. \\ &+ \left[\hat{a}^\dagger \hat{\rho}_A(t), \hat{a} \right] \int_0^\infty dt' \int_0^\infty d\omega D(\omega) |g(\omega)|^2 e^{-i(\omega_0 - \omega_k)t'} \bar{n}(\omega) \\ &+ \left[\hat{a}, \hat{\rho}_A(t) \hat{a}^\dagger \right] \int_0^\infty dt' \int_0^\infty d\omega D(\omega) |g(\omega)|^2 e^{-i(\omega_0 - \omega_k)t'} (\bar{n}(\omega) + 1) \\ &\left. + \left[\hat{a}^\dagger, \hat{\rho}_A(t) \hat{a} \right] \int_0^\infty dt' \int_0^\infty d\omega D(\omega) |g(\omega)|^2 e^{i(\omega_0 - \omega_k)t'} \bar{n}(\omega) \right\}. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Sabemos que, o tempo de correlação das flutuações do reservatório, τ_c , mantém um estreito vínculo com o tempo de memória. De fato, τ_c é proporcional ao intervalo de tempo em que as funções de correlação são significativas, ou seja, quanto mais rapidamente o banho perde correlações, menor será o tempo de memória. Uma vez que as funções de correlação nas

integrais estão expressas em termos das transformadas de Fourier em ω , a hipótese de tempo de memória desprezível (Markov) implica em

$$D(\omega)\bar{n}(\omega) |g(\omega)|^2 \approx \text{const.} \quad (2.55)$$

Por outro lado, uma consequência da hipótese de acoplamento fraco é a existência de uma pequena taxa de dissipação, o que em um tempo de relaxação grande, se comparado com τ_c , elabora a hipótese do ruído branco [77].

Resolvendo as integrais, finalmente encontramos a bem conhecida forma da equação mestra para um oscilador interagindo com um banho de osciladores na RWA [75, 22].

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) = & \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] + \kappa(1 + \bar{n}) \left\{ [\hat{a}\hat{\rho}(t), \hat{a}^\dagger] + [\hat{a}, \hat{\rho}(t)\hat{a}^\dagger] \right\} + \kappa\bar{n} \left\{ [\hat{a}^\dagger\hat{\rho}(t), \hat{a}] \right. \\ & \left. + [\hat{a}^\dagger, \hat{\rho}(t)\hat{a}] \right\}, \end{aligned} \quad (2.56)$$

em que fizemos $\kappa = \pi D(\omega_0) |g(\omega_0)|^2$ que é conhecida como constante de amortecimento, $\bar{n} = \bar{n}(\omega_0)$ que é o número de fótons térmicos e $\hat{\rho}_A(t) = \hat{\rho}(t)$. Vale a pena ressaltar que (2.56) é uma equação mestra markoviana, sendo muito importante para o tratamento de processos irreversíveis e não-unitários de dissipação e decoerência, de modo que a positividade e o traço são preservados.

Capítulo 3

Características Fotovoltaicas de Molécula de Ponto Quântico

Aqui aplicamos a física dos PQs semicondutores acoplados por tunelamento para estudar um sistema fotovoltaico, ou seja, um sistema que opera como motor de calor quântico (*Quantum Heat Engine* - QHE) que converte a energia de fótons solares em trabalho útil (corrente elétrica).

3.1 Fotocélula

Em 1954, Chapin *et al.* [78] com uma junção p - n ¹ de silício cristalino obteve uma conversão de 6% de energia solar em potência elétrica. Seis anos depois, em 1960, Shockley e Queisser obtiveram o limite superior de eficiência de uma única célula solar de junção p - n , com base na suposição de que pares de elétrons-buracos recombinam-se somente através do processo radiativo, ou seja, o princípio do balanço detalhado [79]. A partir de então, essa nova tecnologia de obtenção de energia desponta para obtenção de materiais com uma maior eficiência, a maioria dos painéis solares comerciais atualmente atinge uma qualidade inferior à 25% [80, 81]. Todavia, alguns grupos de pesquisa vem se despontando mostrando que tal

¹Semicondutores tipo n são átomos que cedem elétrons à rede cristalina, estes são chamados de doadores. Já semicondutores tipo p , aceitam elétrons da banda de valência para completar as ligações covalentes com os átomos vizinhos, deixando assim buracos na banda. Esses são chamados de aceitadores.

eficiência pode ser superada, um deles é o *National Renewable Energy Laboratory*, nos Estados Unidos da América, que desenvolveu uma célula fotovoltaica composta por seis camadas fotoativas, cada uma formada por material semicondutor diferente, com o objetivo de captar energia de diferentes partes do espectro luminoso [82]. Sob a ação de luz concentrada de 143 sóis, foi alcançada uma eficiência de 47,1% em tal célula. Entretanto, mesmo com luz equivalente a “um Sol”, a eficiência alcançada foi de 39,2%, que é maior que das células convencionais. PQs por sua vez, apresentam uma tecnologia promissora e têm sido utilizados na construção de dispositivos optoeletrônicos, como células fotovoltaicas [83, 84, 85].

Células solares e fotossíntese podem ser consideradas como motores de calor quântico (*Quantum Heat Engine* - QHE), pois em suas essências produzem trabalho útil, extraíndo energia de uma fonte de fótons térmicos de alta temperatura, por exemplo o Sol, e rejeitando calor para um coletor de calor de baixa temperatura [86, 87]. A eficiência máxima de um motor térmico operando entre reservatório quente e frio é conhecida como eficiência de Carnot [88], derivada da segunda lei da termodinâmica. Estudos recentes mostraram que os efeitos quânticos podem desempenhar um papel fundamental na fotossíntese e nas células solares. Scully e seus colegas mostraram teoricamente que a coerência quântica pode aumentar a eficiência de uma célula solar e um centro de reação fotossintética [89, 90]. Nestes trabalhos os autores argumentam que a coerência quântica pode quebrar o balanço detalhado e, portanto, quebrar também o limite Shockley-Queisser da eficiência das células solares. Além disso, a existência de um campo de acionamento externo (que induz a coerência entre os níveis) serve como uma fonte de energia adicional, o que produz um aumento de tensão [91]. Outrossim, Scully demonstrou que é possível gerar coerência sem o uso de um campo externo. Em [92] é mostrado que a coerência quântica induzida por ruído pode parar o balanço detalhado e produzir lasers sem inversão de população e/ou com maior eficiência. Embora estes resultados tenham gerado muito debate [93], várias tentativas foram feitas para melhorar o desempenho de dispositivos fotovoltaicos, dando origem a algumas variantes deste modelo [94, 95, 96, 97]. Aqui, utilizamos a física dos PQs semicondutores para estudar as propriedades fotovoltaicas de uma fotocélula constituída por uma MPQ.

3.2 Modelo

Os principais interesses na utilização de PQs em dispositivos fotovoltaicos surgem do seu espectro de energia discreto, alta absorção e por seus avanços experimentais na manipulação coerente de estados [46, 98]. Portanto, a capacidade de montar coleções de PQs com geometrias projetadas abre uma série de possibilidades interessantes. Consideremos uma típica Molécula de Pontos Quânticos - MPQ semicondutora de InAs/GaAs, composto por dois PQs alinhados verticalmente separados por uma barreira de tunelamento de largura d interagindo com a luz, representada por um banho de osciladores harmônicos. Os níveis de energia são mostrados na Fig. 3.1, consistindo de dois PQs de níveis $|1\rangle$ e $|2\rangle$, $|3\rangle$ e $|4\rangle$, respectivamente, intercalados entre semicondutores dopados representados pelos níveis $|c\rangle$ e $|v\rangle$ do reservatório. A radiação solar monocromática bombeia fótons quentes a temperatura T_S . Estes fótons promovem elétrons da banda de valência ($|2\rangle$ e $|4\rangle$ na Fig. 3.1) para a banda de condução ($|1\rangle$ e $|3\rangle$). Os parâmetros γ_1 e γ_2 descrevem as taxas de decaimento associadas ao processo de recombinação elétron-buraco ligadas às transições $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$ e $|3\rangle \leftrightarrow |4\rangle$, respectivamente. Os estados da MPQ são acoplados aos estados do reservatório (contatos) através do acoplamento fonônico a temperatura T_a , mediante às taxas $\tilde{\gamma}$ e $\tilde{\Gamma}$ das bandas de condução e de valência do reservatório, respectivamente. Para fechar o circuito, os elétrons no estado $|c\rangle$ passam para a banda de valência do estado do reservatório $|v\rangle$ por meio de um circuito externo, que contém a carga Γ .

O hamiltoniano total do sistema na aproximação de dipolo² é dada por

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_B + \hat{H}_I, \quad (3.1)$$

onde o hamiltoniano \hat{H}_S do sistema pode ser expresso similarmente a (2.4). Já o hamiltoniano \hat{H}_B descreve um banho de osciladores harmônicos

$$\hat{H}_B = \sum_k \hbar\nu_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \sum_l \hbar\nu_l \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_l + \sum_m \hbar\nu_m \hat{d}_m^\dagger \hat{d}_m. \quad (3.2)$$

²É uma aproximação amplamente utilizada quando nos referimos a interação radiação matéria, pois o comprimento de onda do campo é muito maior que as dimensões atômica. Logo o campo irá ver o átomo como um ponto, como o átomo é neutro, irá ver somente o dipolo atômico. De modo que, a interação de um campo externo com um dipolo, sabemos tratar via eletromagnetismo [74].

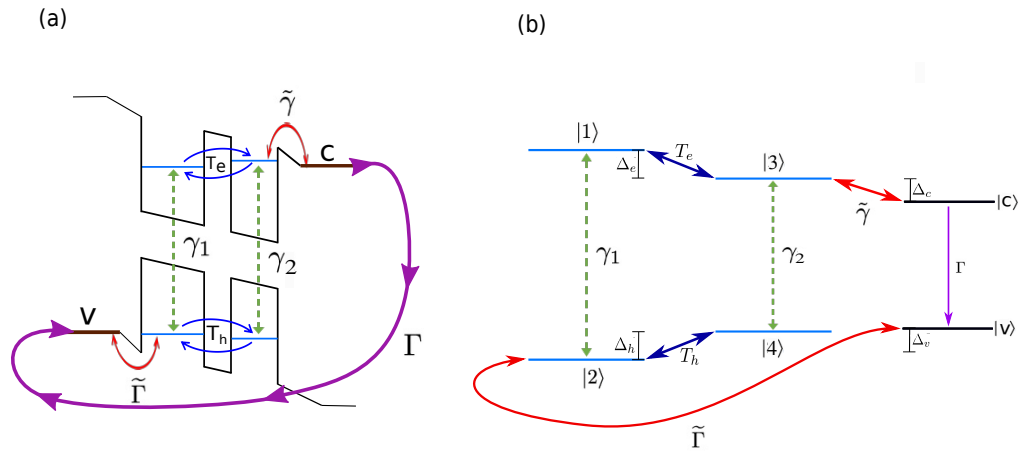


Figura 3.1: (a) Esquema genérico de uma fotocélula de seis níveis. As barras azuis representam os níveis de energia da MPQ e as barras pretas (c e v) são os estados de condução e valência dos contatos. Radiação solar excita continuamente as transições de elétrons $|2\rangle \leftrightarrow |1\rangle$ e $|4\rangle \leftrightarrow |3\rangle$, com respectivas taxas de recombinação elétron-buraco γ_1 e γ_2 . Dois ambientes de fônons térmicos mediam as transições de baixa energia $|3\rangle \leftrightarrow |c\rangle$ e $|2\rangle \leftrightarrow |v\rangle$ com taxas $\tilde{\gamma}$ e $\tilde{\Gamma}$, respectivamente. Os níveis dos contatos $|c\rangle$ e $|v\rangle$ são conectados a uma carga (circuito externo), representado por uma taxa de decaimento Γ . Já em (b) $\Delta_{e,h}$ são os deslocamentos de energia das bandas de condução e de valência da MPQ.

Aqui \hat{a}_k (\hat{a}_k^\dagger) são os operadores de aniquilação (criação) do campo de radiação com frequência ν_k , já \hat{b}_l e \hat{d}_m (\hat{b}_l^\dagger e \hat{d}_m^\dagger) são os operadores aniquilação (criação) dos reservatórios fonônicos com frequências ν_j , com $j = l, m$ referente às bandas de condução e valência, respectivamente. O hamiltoniano de interação sistema-banho será expresso na aproximação de dipolo $\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{E}$, onde $\hat{\mathbf{p}}$ representa o operador momento de dipolo e \mathbf{E} o campo elétrico externo, como supracitado, e posteriormente iremos fazer a aproximação RWA [74]. Por simplicidade, o hamiltoniano de interação pode ser separado em três partes:

$$\hat{H}_I = \hat{H}_T + \hat{H}_{th}^h + \hat{H}_{th}^c ,$$

onde

$$\hat{H}_T = T_e(|1\rangle \langle 3| + \text{H.c.}) + T_h(|2\rangle \langle 4| + \text{H.c.}) , \quad (3.3)$$

$$\hat{H}_{th}^h = \hbar \sum_k (g_k |1\rangle \langle 2| \hat{a}_k + \text{H.c.}) + \hbar \sum_k (g_k |3\rangle \langle 4| \hat{a}_k + \text{H.c.}) , \quad (3.4)$$

$$\hat{H}_{th}^c = \hbar \sum_l (g_l |3\rangle \langle c| \hat{b}_l + \text{H.c.}) + \hbar \sum_m (g_m |v\rangle \langle 2| \hat{d}_m + \text{H.c.}) . \quad (3.5)$$

O primeiro termo \hat{H}_T é referente ao tunelamento de elétron e buraco. O segundo termo \hat{H}_{th}^h representa a interação do sistema com o reservatório quente, isto é, o campo de radiação térmica. Já o terceiro \hat{H}_{th}^c , representa a interação do sistema com o reservatório frio, ou seja, a interação com os fônons. A constante g_i com $i = k, l, m$ representa o acoplamento sistema-banho, para cada transição. É conveniente trabalhar na representação de interação, onde o hamiltoniano assume a forma

$$\begin{aligned} \hat{V}(t) &= e^{i(\hat{H}_S + \hat{H}_B)t/\hbar} \hat{H}_I e^{-i(\hat{H}_S + \hat{H}_B)t/\hbar} \\ &= \hat{V}_T(t) + \hat{V}_{th}^h(t) + \hat{V}_{th}^c(t) , \end{aligned} \quad (3.6)$$

com

$$\hat{V}_T(t) = T_e(e^{i\omega_{13}t} |1\rangle \langle 3| + \text{H.c.}) + T_h(e^{i\omega_{24}t} |2\rangle \langle 4| + \text{H.c.}) , \quad (3.7)$$

$$\hat{V}_{th}^h(t) = \hbar \sum_k (g_k e^{i(\omega_{12} - \nu_k)t} |1\rangle \langle 2| \hat{a}_k + \text{H.c.}) + \hbar \sum_k (g_k e^{i(\omega_{34} - \nu_k)t} |3\rangle \langle 4| \hat{a}_k + \text{H.c.}) , \quad (3.8)$$

$$\hat{V}_{th}^c(t) = \hbar \sum_l (g_l e^{i(\omega_{1c} - \nu_l)t} |3\rangle \langle c| \hat{b}_l + \text{H.c.}) + \hbar \sum_m (g_m e^{i(\omega_{v2} - \nu_m)t} |v\rangle \langle 2| \hat{d}_m + \text{H.c.}) \quad (3.9)$$

e $\omega_{ij} = \omega_i - \omega_j$ representando a frequência de transição. Os PQs interagem com os reservatórios térmicos de radiação e fonônico descritos pelo operador densidade $\hat{\rho}_R$. A equação de movimento para o operador densidade $\hat{\rho}$ do sistema é [59]

$$\dot{\hat{\rho}}(t) = -\frac{i}{\hbar} \text{tr}_R[\hat{V}(t), \hat{\rho}(t_0) \otimes \hat{\rho}_R(t_0)] - \frac{1}{\hbar^2} \text{tr}_R \int_{t_0}^t dt' [\hat{V}(t), [\hat{V}(t'), \hat{\rho}(t') \otimes \hat{\rho}_R(t_0)]] . \quad (3.10)$$

Inserindo o hamiltoniano do sistema $\hat{V}(t)$ na equação de movimento acima (3.10), podemos utilizar a propriedade da ciclicidade e obter as quantidades

$$\langle \hat{c}_i \hat{c}_{i'} \rangle = \langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i'}^\dagger \rangle = 0 \quad (3.11)$$

$$\langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i'} \rangle = \bar{n}_i \delta_{ii'} \quad (3.12)$$

$$\langle \hat{c}_i \hat{c}_{i'}^\dagger \rangle = (\bar{n}_i + 1) \delta_{ii'} , \quad (3.13)$$

onde os operadores \hat{c}_i representam os operadores do banho com $\langle \hat{c}_i \rangle = \text{tr}_R[\hat{\rho}_R(t_0) \hat{c}_i]$, e \bar{n}_i o número médio de ocupação. As somatórias podem ser substituídas por integrais através da prescrição

$$\sum_k \longrightarrow \int_0^\infty D(k) k^2 dk , \quad (3.14)$$

onde $D(k)$ representa a densidade de estados e $k = \nu_k/c$. Logo iremos obter integrais do tipo

$$\int_{t_0}^t dt' \int_0^\infty D(\nu_k) \frac{\nu_k^2}{c^3} g_{\nu_k}^2 e^{i(\omega - \nu_k)(t-t')} [\dots] d\nu_k . \quad (3.15)$$

Para resolver tais integrais, assumimos a aproximação de Markov [23, 26, 74]. Assumindo que $\hat{\rho}(t')$ é uma função que varia lentamente no tempo, podemos substituir $\hat{\rho}(t')$ por $\hat{\rho}(t)$ e estender o limite de integração para infinito. As considerações permitem utilizar a relação

$$\int_0^\infty dt' e^{i(\omega - \nu_k)(t-t')} = \pi \delta(\omega - \nu_k) \pm i PP \left[\frac{1}{\omega - \nu_k} \right] \approx \pi \delta(\omega - \nu_k) . \quad (3.16)$$

Aqui $i PP \left[\frac{1}{\omega - \nu_k} \right]$ é a parte principal de $1/(\omega - \nu_k)$, que provoca um leve desvio na frequência natural do sistema, podendo ser desprezado. Como resultado, obtém-se a equação de movimento para nosso sistema de interesse $\hat{\rho}(t)$ que nos fornece o seguinte conjunto de equações

de movimento $\hat{\rho}_{xy} = \langle x | \hat{\rho}(t) | y \rangle$:

$$\dot{\hat{\rho}}_{11} = -\frac{i}{\hbar} T_e (e^{i\omega_{13}t} \hat{\rho}_{31} - e^{-i\omega_{13}t} \hat{\rho}_{13}) - \gamma_1 [(n_1 + 1) \hat{\rho}_{11} - n_1 \hat{\rho}_{22}] , \quad (3.17)$$

$$\dot{\hat{\rho}}_{22} = -\frac{i}{\hbar} T_h (e^{i\omega_{24}t} \hat{\rho}_{42} - e^{-i\omega_{24}t} \hat{\rho}_{24}) - \gamma_1 [-(n_1 + 1) \hat{\rho}_{11} + n_1 \hat{\rho}_{22}] - \tilde{\Gamma} [-(n_v + 1) \hat{\rho}_{vv} + n_v \hat{\rho}_{22}] , \quad (3.18)$$

$$\dot{\hat{\rho}}_{33} = -\frac{i}{\hbar} T_e (-e^{i\omega_{13}t} \hat{\rho}_{31} + e^{-i\omega_{13}t} \hat{\rho}_{13}) - \gamma_2 [(n_2 + 1) \hat{\rho}_{33} - n_2 \hat{\rho}_{44}] - \tilde{\gamma} [(n_c + 1) \hat{\rho}_{33} - n_c \hat{\rho}_{cc}] , \quad (3.19)$$

$$\dot{\hat{\rho}}_{44} = -\frac{i}{\hbar} T_h (-e^{i\omega_{24}t} \hat{\rho}_{42} + e^{-i\omega_{24}t} \hat{\rho}_{24}) - \gamma_2 [-(n_2 + 1) \hat{\rho}_{33} + n_2 \hat{\rho}_{44}] , \quad (3.20)$$

$$\dot{\hat{\rho}}_{13} = -\frac{i}{\hbar} T_e e^{i\omega_{13}t} (\hat{\rho}_{33} - \hat{\rho}_{11}) - \frac{1}{2} [\gamma_1 (n_1 + 1) \hat{\rho}_{13} + \gamma_2 (n_2 + 1) \hat{\rho}_{13} - \gamma_{12} e^{i(\omega_{12} - \omega_{34})t} (n_2 + n_1) \hat{\rho}_{24} + \tilde{\gamma} (n_c + 1) \hat{\rho}_{13}] , \quad (3.21)$$

$$\dot{\hat{\rho}}_{24} = -\frac{i}{\hbar} T_h e^{i\omega_{24}t} (\hat{\rho}_{44} - \hat{\rho}_{33}) - \frac{1}{2} [\gamma_1 n_1 \hat{\rho}_{24} + \gamma_2 n_2 \hat{\rho}_{24} - \gamma_{12} e^{-i(\omega_{12} - \omega_{34})t} [(n_1 + 1) + (n_2 + 1)] \hat{\rho}_{13} + \tilde{\Gamma} n_v \hat{\rho}_{24}] , \quad (3.22)$$

$$\dot{\hat{\rho}}_{cc} = -\tilde{\gamma} [-(n_c + 1) \hat{\rho}_{33} + n_c \hat{\rho}_{cc}] - \Gamma \hat{\rho}_{cc} , \quad (3.23)$$

$$\dot{\hat{\rho}}_{vv} = -\tilde{\Gamma} [(n_v + 1) \hat{\rho}_{vv} - n_v \hat{\rho}_{22}] + \Gamma \hat{\rho}_{cc} , \quad (3.24)$$

onde n_1 e n_2 são os números médios de fótons que impulsionam as respectivas transições $1 \leftrightarrow 2$ e $3 \leftrightarrow 4$, a uma temperatura T_S dado por $n_1 = [\exp(E_{12}/k_B T_S) - 1]^{-1}$ e $n_2 = [\exp(E_{34}/k_B T_S) - 1]^{-1}$, com taxas de decaimento espontâneo

$$\gamma_1 = 2\pi D(\omega_{12}) \omega_{12}^2 g_{\omega_{12}}^2 / c^3 \quad \text{e} \quad \gamma_2 = 2\pi D(\omega_{34}) \omega_{34}^2 g_{\omega_{34}}^2 / c^3 . \quad (3.25)$$

Já, n_c e n_v são os correspondentes números de ocupação fonônica a temperatura T_a que impulsionam as transições de baixa energia $3 \leftrightarrow c$ e $v \leftrightarrow 2$ dados por

$$n_c = [\exp(E_{3c}/k_B T_a) - 1]^{-1} \quad \text{e} \quad n_v = [\exp(E_{v2}/k_B T_a) - 1]^{-1} , \quad (3.26)$$

com respectivas taxas de decaimento

$$\tilde{\gamma} = 2\pi D(\omega_{3c}) \omega_{3c}^2 g_{\omega_{3c}}^2 / v^3 \quad \text{e} \quad \tilde{\Gamma} = 2\pi D(\omega_{v2}) \omega_{v2}^2 g_{\omega_{v2}}^2 / v^3 . \quad (3.27)$$

Aqui subscrevemos $E_{mn} = E_m - E_n$ e $\gamma_{12} = p\sqrt{\gamma_1 \gamma_2}$ é o termo de acoplamento Agarwal-Fano [99], que é resultado de emissões de reabsorções virtuais de radiação.

Nos concentramos na operação em regime estacionário, fazendo os termos $\dot{\hat{\rho}}_{ij} = 0$ nas equações de movimento. Neste regime, pode-se resolver as Eqs.(3.17)-(3.24), para $\hat{\rho}_{11} + \hat{\rho}_{22} + \rho_{33} + \rho_{44} + \hat{\rho}_{cc} + \hat{\rho}_{vv} = 1$ e obter os níveis populacionais, isto é, a probabilidade de ocupação, de cada estado. Deste modo, definindo a corrente que atravessa a fotocélula de c para v , como a probabilidade de ocupação do nível c multiplicado pela carga Γ (que é equivalente à uma taxa de fluxo), podemos escrever

$$j \equiv e\Gamma\hat{\rho}_{cc}. \quad (3.28)$$

A voltagem que atravessa a célula solar é definida como a diferença de potencial químico entre os níveis de condução c e de valência v dos contatos ou como a diferença na energia livre ΔF , isto é, $eV \equiv \Delta F = \mu_c - \mu_v$ [89, 90, 100]. Usando a distribuição de Boltzmann para os níveis c e v , é possível escrever os potenciais químicos $\mu_c = E_c + k_B T_a \ln(\hat{\rho}_{cc})$ e $\mu_v = E_v + k_B T_a \ln(\hat{\rho}_{vv})$, respectivamente, como função das populações $\hat{\rho}_{cc}$ e $\hat{\rho}_{vv}$ dos contatos. Logo, a voltagem da célula solar pode ser expressa em termos dos níveis de energia e populações da seguinte maneira

$$eV = E_c - E_v + k_B T_a \ln \left(\frac{\hat{\rho}_{cc}}{\hat{\rho}_{vv}} \right). \quad (3.29)$$

A potência entregue à carga é $P = jV$. Para calcular a corrente e a voltagem característica da célula, variamos Γ com outros parâmetros fixos, onde $\Gamma = 0$ corresponde ao circuito aberto. Assim, aumentando Γ pode-se ir do circuito aberto para o regime de curto-circuito.

Uma vez que sabemos das referências [89, 101], que a coerência quântica pode aumentar a eficiência de uma célula solar, podemos investigar o efeito do tunelamento coerente sob as propriedades fotovoltaicas do sistema. Variar a separação entre os PQs, d , implica em redefinir as taxas de tunelamento T_e e T_h . Essa conexão para nosso sistema foi realizada, ajustando os dados experimentais de [47] para uma molécula de InAa/Gas com PQs de tamanhos 2.5 nm e 4 nm, que possui funções decrescentes exponencialmente do tipo $T_e = \frac{11.67}{2} e^{-d/d_e}$ e $T_h = \frac{2.20}{2} e^{-d/d_h}$ onde $d_e = 7.14$ nm e $d_h = 3.37$ nm. Consideramos uma molécula de InAa/Gas tipicamente caracterizada pelos parâmetros $\Delta_e = \Delta_h = 3$ meV, $\Delta_c = \Delta_v = 2$ meV. Os gaps de energia são dados por $E_{12} = 1115$ meV e $E_{34} = E_{12} - \Delta_e - \Delta_h$. Na Fig. 3.2 podemos observar o comportamento da corrente (j) e potência (P) para uma barreira de tunelamento $d = 2$ nm, com taxas de relaxação $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$, $\tilde{\gamma} = 100\gamma$ e $\tilde{\Gamma} = 0.05\gamma$ [101],

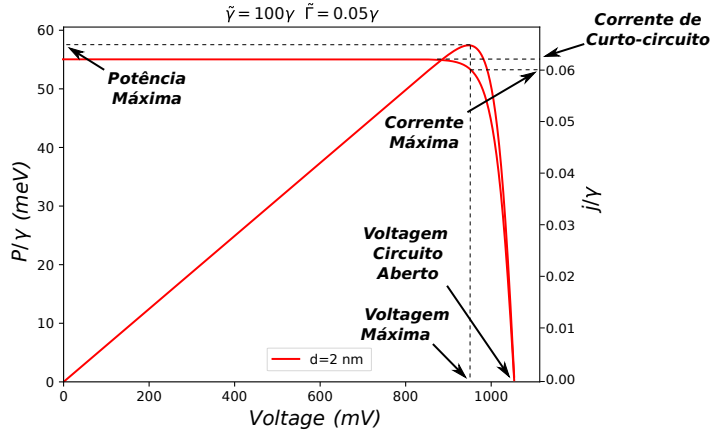


Figura 3.2: Potência e corrente da fotocélula como função da voltagem para $d = 2$ nm, indicando as propriedades fotovoltaicas, tais como: potência máxima, corrente máxima, voltagem máxima, corrente de curto-circuito e voltagem de circuito aberto.

isto é, a taxa de recombinação elétron buraco é menor que a taxa dos elétrons transicionarem para o contato e maior que a taxa dos elétrons transicionarem do contato para o estado fundamental. Figuras como essas nos fornece todas as principais características de uma fotocélula, tais como: a voltagem de circuito aberto; a corrente de curto-circuito; a voltagem máxima; a corrente máxima e a potência máxima.

Consideremos agora dois casos específicos: no primeiro, em (a) e (b) apresentamos, respectivamente, o comportamento da corrente e potência em função da voltagem para diferentes tamanhos de barreira d , consoante às taxas de decaimento assumidas anteriormente ($\tilde{\gamma} = 100\gamma$ e $\tilde{\Gamma} = 0.05\gamma$). Já em (c) e (d) analisamos um segundo caso, onde as taxas de decaimento $\tilde{\gamma} = 50\gamma$ e $\tilde{\Gamma} = 5\gamma$ [99], ou seja, a taxa de recombinação elétron buraco é menor que a taxa dos elétrons transicionarem para o contato e proporcional a taxa dos elétrons transicionarem do contato para o estado fundamental. A dinâmica de ambos os casos podem ser observadas na Fig. 3.3. Foi incluído em linha azul tracejada o resultado de um PQ simples - PQS (para maiores detalhes vide Apêndice A), para fins de comparação. Também escolhemos as temperaturas $k_B T_S = 500$ meV e $k_B T_a = 25.9$ meV.

Note que, em ambos os casos apresentados na Fig 3.3, podemos observar que dependendo do modo como os PQs acoplam com o reservatório fonônico (contatos) é possível obter um

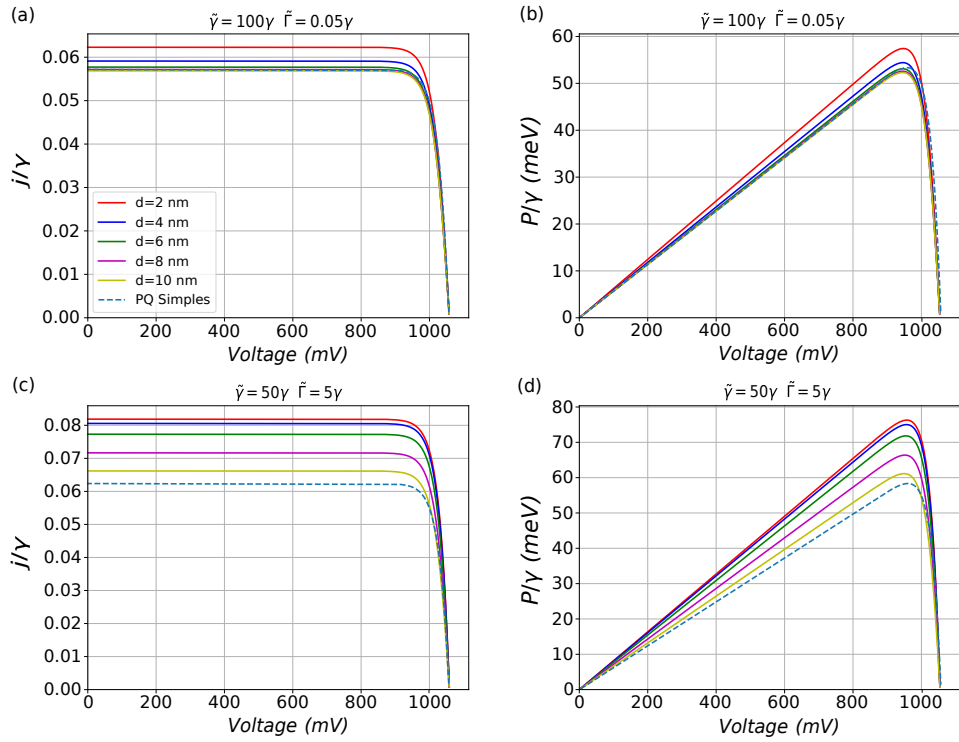


Figura 3.3: Potência e corrente entregue como função da voltagem para diferentes valores de barreira d . Em (a) e (b) considerando os valores $\tilde{\gamma} = 100\gamma$ e $\tilde{\Gamma} = 0.05\gamma$. já em (c) e (d) é considerado $\tilde{\gamma} = 50\gamma$ e $\tilde{\Gamma} = 5\gamma$. A linha azul tracejada mostra o resultado para o PQ simples.

aumento da fotocorrente e, conseqüentemente, da potência da fotocélula passivamente, por controle do tamanho da barreira d . Outrossim, note que a corrente e potência entregues são maiores no sistema da MPQ comparado ao sistema de um PQ simples, sendo somente no limite $d \approx 10$ nm que os resultados da MPQ e do PQ simples se aproximam. Uma maneira de interpretarmos este resultado é que, ao mesmo tempo que o valor d da barreira aumenta, o tunelamento proporcionalmente se torna desprezível e o sistema passa a se comportar como dois PQs desacoplados.

Como discutido, é natural que tais sistemas possuam uma forte dependência com suas taxas de decaimento $\tilde{\gamma}$ e $\tilde{\Gamma}$. Para analisar tal influência podemos calcular a corrente relativa

$$\delta j = \frac{j^{(MPQ)}_{max} - j^{(PQ)}}{j^{(PQ)}} . \quad (3.30)$$

Tal grandeza nos fornece o aumento da resposta fotovoltaica da MPQ comparada com o PQ simples. Na Fig. 3.4 é mostrado o comportamento da corrente relativa em função das taxas de relaxação $\tilde{\gamma}$ e $\tilde{\Gamma}$. Como referência destacamos regiões tracejadas, na qual consegue-se observar $\delta j > 0$ (MPQ supera o PQ simples) e $\delta j < 0$ (PQ Simples supera a MPQ). Em (a) para $d = 2$ nm podemos observar que, quando $\tilde{\Gamma} > 0.001\gamma$ e $\tilde{\gamma} \gg \tilde{\Gamma}$ a fotocorrente produzida pela MPQ supera a produzida pelo PQ simples. No limite de altas taxas de relaxação, a fotocorrente é bem comportada e não aumenta indefinitivamente, isto é, se mantermos a condição $\tilde{\gamma} \gg \tilde{\Gamma}$ e a partir do ponto $\tilde{\Gamma} \geq 5$ o ganho máximo de fotocorrente tida é da ordem de $\delta j \approx 30\%$. Por outro lado, em (b) observamos a corrente relativa para $d = 10$ nm, neste limite a região onde as taxas de relaxação favorecem a MPQ comparado ao PQ simples são para $\tilde{\Gamma} > \gamma$ e $\tilde{\gamma} \gg \tilde{\Gamma}$.

Uma vez que os resultados anteriores mostram que a MPQ possui um ganho substancial sobre o PQ simples em determinados regimes de parâmetros, e sabemos que na MPQ o tunelamento acopla coerentemente os níveis dos PQs é natural nos perguntarmos, qual o efeito da coerência sob a geração de corrente? Da equação (3.28) pode-se obter a fotocorrente variando Γ de 0 (circuito aberto) até valores grandes (curto-circuíto). Portanto, no limite $\Gamma \gg \gamma$ em uma aproximação de primeira ordem obtemos

$$j^{(MPQ)} = \frac{(n_1 + n_2)(1 + n_v)}{(2 + 3n_v)}\gamma + O[(\gamma/\Gamma)^2] . \quad (3.31)$$

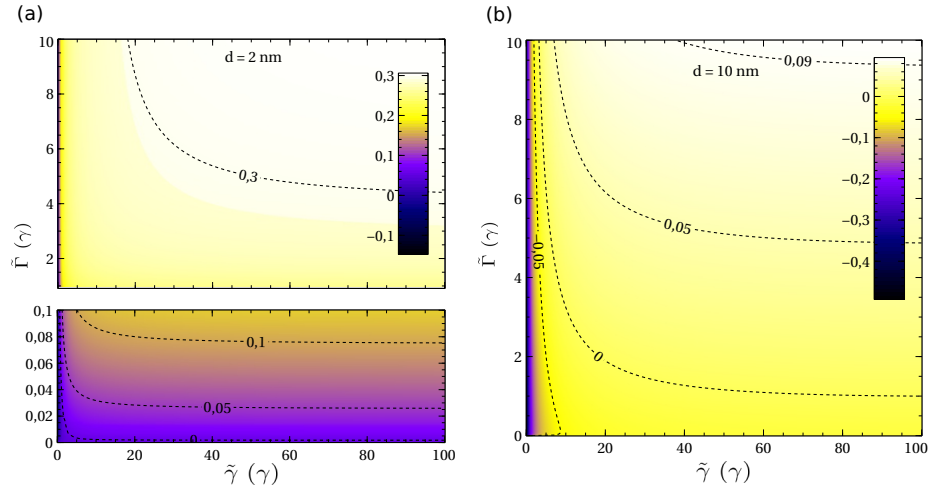


Figura 3.4: Corrente relativa δj como função das taxas de relaxação $\tilde{\gamma}$ e $\tilde{\Gamma}$. Em (a) tomamos um tamanho de barreira $d = 2 \text{ nm}$. Por outro lado, em (b) tomamos $d = 10 \text{ nm}$.

Este primeiro termo representa a corrente no limite de grandes taxas de tunelamento: a medida que o acoplamento do tunelamento diminuí, a corrente de curto-circuíto diminui, tal decréscimo está contido nos demais termos da expansão. Fazendo procedimento similar para o termo de coerência (3.21) obtemos

$$\hat{\rho}_{13} = \frac{in_1\gamma(1+n_v)(\tilde{\gamma} + \tilde{\gamma}n_c + 2i\omega_{13})}{2\tilde{\gamma}T_e(1+n_c)(2+3n_v)} + O[(\gamma/\Gamma)^2]. \quad (3.32)$$

Portanto a corrente e a potência se relacionam da seguinte maneira

$$j^{(MPQ)} \propto \frac{2\tilde{\gamma}(1+n_c)}{n_1(n_1+n_2)\sqrt{(1+n_c)^2\tilde{\gamma}^2 + 4\omega_{13}^2}} |\hat{\rho}_{13}|T_e \approx C |\hat{\rho}_{13}|T_e, \quad (3.33)$$

onde C é uma constante. Esta expressão mostra que a corrente é diretamente proporcional ao produto entre a magnitude da coerência e a taxa de tunelamento. Para mais, ela nos mostra também uma relação de disputa entre a taxa de tunelamento e a coerência. Portanto, para aumentar a corrente de uma fotocélula devemos aumentar a magnitude da coerência ou a taxa de tunelamento. Todavia, controlar a taxa de tunelamento se mostra fisicamente mais plausível que controlar a magnitude da coerência. Este resultado pode ser verificado na Fig. 3.5 onde plotamos o raio entre a corrente máxima e a magnitude da coerência, $\frac{j}{|\hat{\rho}_{13}|}$, que é proporcional a taxa de tunelamento T_e .

Os resultados da Fig. 3.5 para um valor de corrente fixa, apontam a existência implícita de uma relação de inversamente proporcionalidade entre as coerências e as taxas de tune-

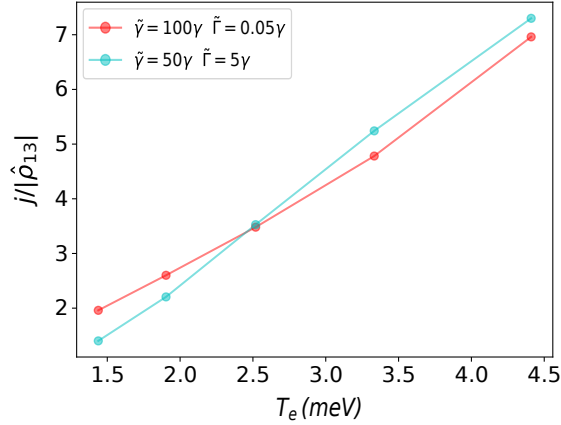


Figura 3.5: Raio entre corrente máxima e a magnitude da coerência, $\frac{j}{|\hat{\rho}_{13}|}$, como função da taxa de tunelamento, T_e , para diferentes taxas de decaimento: em vermelho para $\tilde{\gamma} = 100\gamma$ e $\tilde{\Gamma} = 0.05\gamma$, já em azul tomamos $\tilde{\gamma} = 50\gamma$ e $\tilde{\Gamma} = 5\gamma$.

lamento. Para investigar esta relação, calculamos numericamente as coerências $|\hat{\rho}_{13}|$ e $|\hat{\rho}_{24}|$ para diferentes tamanhos de barreira d . Na Fig. 3.6 (a) podemos observar, como esperado, que quanto maior for as taxas de decaimento $\tilde{\gamma}$ menor será a coerência $|\hat{\rho}_{13}|$, e a mesma decresce com o aumento da taxa de tunelamento T_e . Por outro lado, em (b) a coerência $|\hat{\rho}_{24}|$ cresce com o aumento da taxa de tunelamento T_h para uma dada taxa de decaimento $\tilde{\Gamma}$. Uma maneira de interpretarmos estes resultados é lembrando que o tunelamento acopla os dois estados de condução (valência), de modo que transfere coerentemente a população entre eles à uma certa taxa T_e (T_h), promovendo uma inversão de população (oscilações de Rabi). É imprescindível a existência da coerência ao longo de pelo menos uma oscilação de Rabi, pois se a coerência for destruída rápido o suficiente, se torna impossível ocorrer inversão de população. Devido a interação com o reservatório térmico, as populações mudam em razão dos processos de emissão induzida e espontânea, e aos processos de absorção, até alcançar o estado estacionário. Se as populações são afetadas, a coerência também é. Desta forma, ao se alcançar o estado estacionário não ocorre mais a inversão de população, então um aumento da taxa de tunelamento T_e (T_h) implica em uma redução da coerência $|\hat{\rho}_{13}|$ ($|\hat{\rho}_{24}|$). Em contrapartida, os estados de valência estão fracamente acoplados pelo tunelamento comparado aos estados de condução, isto é, $T_e > T_h$. E ao passo que a taxa de relaxação $\tilde{\Gamma}$ é muito menor, comparada a $\tilde{\gamma}$, a coerência $|\hat{\rho}_{13}|$ é por volta duas ordens de grandeza menor que $|\hat{\rho}_{24}|$.

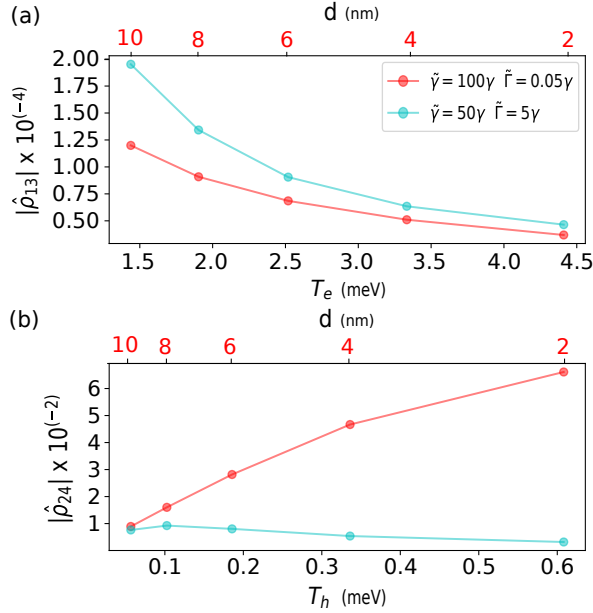


Figura 3.6: Maximo valor da coerencia entre os niveis (a) de conducao e (b) de valencia, como funcao da separaao d entre os PQs e consequentemente a taxa de tunelamento $T_{e,h}$ para diferentes taxas de decaimento: em vermelho para $\tilde{\gamma} = 100\gamma$ e $\tilde{\Gamma} = 0.05\gamma$, ja em azul tomamos $\tilde{\gamma} = 50\gamma$ e $\tilde{\Gamma} = 5\gamma$.

Alem disso, para uma taxa de decaimento pequena, $\tilde{\Gamma} = 0.05\gamma$, a coerencia $|\hat{\rho}_{24}|$ precisa de um acoplamento forte entre os niveis para ser afetada danosamente, como T_h e pequeno, a coerencia sera uma funcao crescente com o tunelamento neste intervalo $d = 2 - 10$ nm. Uma vez que as tecnicas de crescimento atuais permitem uma engenharia precisa dos alinhamentos de banda da MPQ, torna-se importante abordar o efeito das mudancas nas configuracoes energeticas nas propriedades fotovoltaicas da MPQ, e e sobre isso que tratamos na proxima secao.

3.3 Alinhamento de bandas

A manipulaao coerente do sistema eletronico em PQs e a compreensao clara da de-coerencia em estruturas praticas sao cruciais para futuras aplicacoes. Sejam elas em computaao e informaao quantica [102, 103], ou em sistemas fotovoltaicos [89, 104]. Observacoes espectroscopicas diretas do acoplamento quantico em MPQs individuais e suas manipulacoes

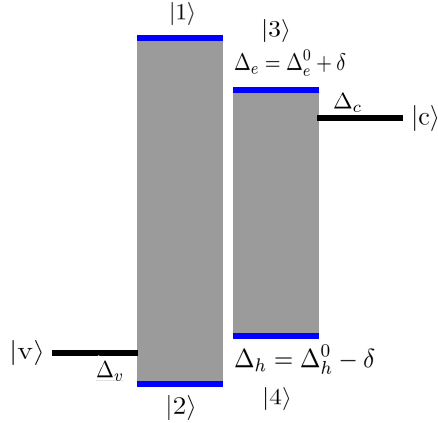


Figura 3.7: Representação do alinhamento de energia da fotocélula. Os parâmetros com subscrito “0” representam os valores usados até o momento, $\Delta_e^0 = \Delta_h^0 = 3$ meV, e $\Delta_c = \Delta_v = 2$ meV.

usando campos eletrostáticos podem ser realizadas [40]. As perturbações do campo elétrico foram sugeridas como um mecanismo de ajuste do espectro por meio do efeito de Stark [46], fornecendo um método útil para controlar a força do acoplamento PQ-PQ. Um claro anticruzamento de dois estados é observado quando a magnitude de um campo elétrico externo (F) ao longo do eixo da MPQ é ajustado. Essas observações podem ser feitas para mais MPQs, fornecendo uma impressão digital geral e clara de tal acoplamento quântico controlado.

Os parâmetros de alinhamento de banda usados nos cálculos mostrados até agora serão tomados como referência, com o subscrito “0”. Para avaliar o impacto nas características fotovoltaicas, os valores de alinhamento da condução e valência da MPQ com os contatos, $\Delta_c = \Delta_v = 2$ meV, permanecem fixos. Já os alinhamentos de banda da condução e valência entre os pontos quânticos que formam a MPQ serão deslocados proporcionalmente por um quantidade δ , tal que, $\Delta_e = \Delta_e^0 + \delta$ e $\Delta_h = \Delta_h^0 - \delta$ como representado na Fig. 3.7.

Na Fig. 3.8 podemos observar o efeito deste alinhamento de banda sobre a potência máxima entregue pela fotocélula, para diferentes valores de tamanho da barreira de tunelamento d . Nesta nossa análise dois conjuntos de parâmetros de relaxação ($\tilde{\gamma}, \tilde{\Gamma}$) foram considerados. Observe que, a configuração $\delta = 3$ meV, que equivale a $\Delta_e = 6$ meV e $\Delta_h = 0$, é a que entrega maior potência comparado as outras configurações tanto em (a) quanto em (b). Além disso, a potência máxima entregue é praticamente independente do tamanho da

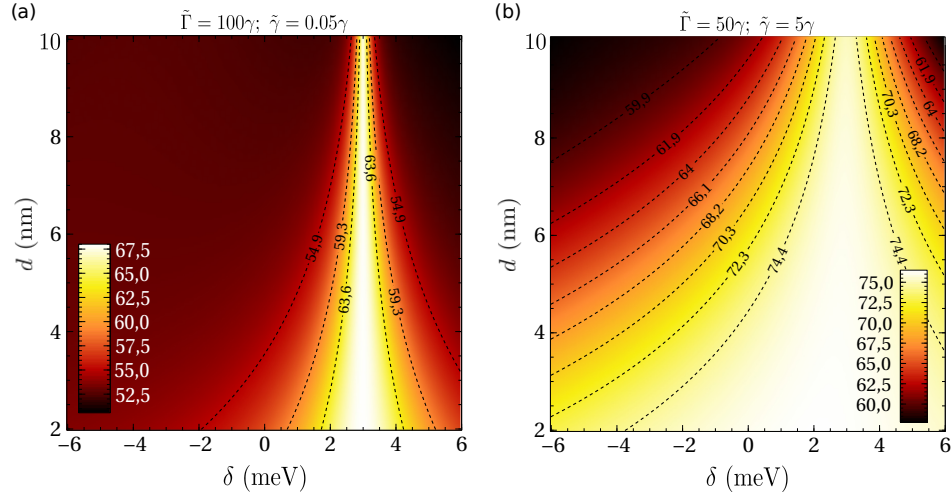


Figura 3.8: Potência máxima alcançada pela fotocélula para taxas de relaxação (a) $\tilde{\gamma} = 100\gamma$; $\tilde{\Gamma} = 0.05\gamma$ e (b) $\tilde{\gamma} = 50\gamma$; $\tilde{\Gamma} = 5\gamma$, como função da separação entre os PQs d e do deslocamento de energia δ .

barreira d . Porém, o regime de valores de alta potência é mais amplo quanto menor for d , ou seja, maiores as taxas de tunelamento $T_{e,h}$.

Como discutimos na seção anterior, existe uma ligação entre as propriedades fotovoltaicas entregues pela fotocélula com a coerência e a taxa de tunelamento. Desta maneira, vamos agora analisar como as coerências são afetadas pelo alinhamento de banda. Na Fig. 3.9 observamos o comportamento em (a) da parte real e em (b) da parte imaginária, da coerência dos estados de valência $\hat{\rho}_{24}$ no ponto de potência máxima para diferentes configurações de níveis δ . O comportamento observado é bastante característico, de modo que, em $\delta = 3$ meV a parte real vai à zero enquanto a parte imaginária tende ao seu valor máximo, resguardado pela taxa de decaimento $\tilde{\Gamma}$ e pelo tamanho da barreira de tunelamento d . Note que, para grandes barreiras, isto é, pequenas taxas de tunelamento a coerência possui um comportamento mais abrupto, sendo na maior parte do tempo aproximadamente nula. Por outro lado, a medida que o tamanho da barreira diminui, ou seja, aumenta-se a taxa de tunelamento as componentes da coerência passam a ter um comportamento mais suave. A interpretação para este comportamento das partes da coerência pode ser obtido por meio da susceptibilidade óptica linear $\chi = \chi' + i\chi''$ [44, 59], que é uma função complexa o qual possui comportamento

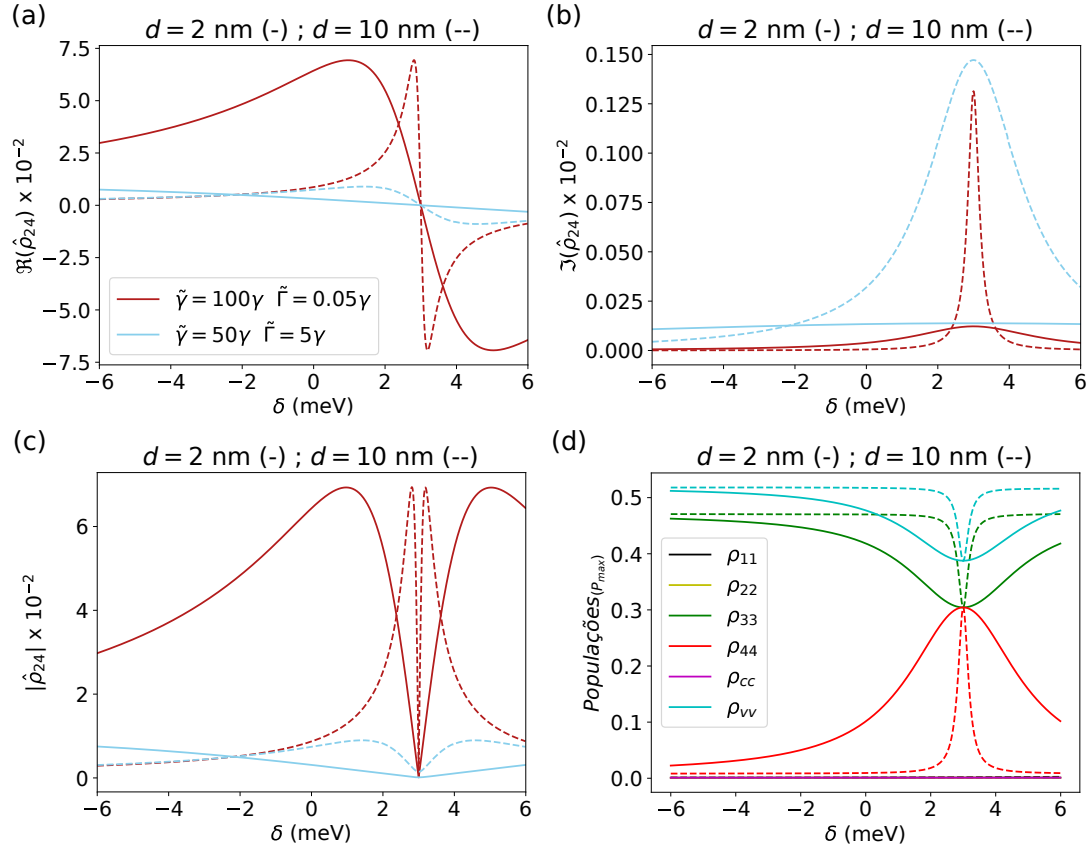


Figura 3.9: Coerência no ponto de potência máxima entre os níveis de valência ($|2\rangle$ e $|4\rangle$) como função do deslocamento de energia δ , em (a) é apresentado o comportamento da parte real, já em (b) é apresentado o comportamento da parte imaginária e em (c) é apresentado o valor absoluto. Por outro lado, em (d) é apresentado o comportamento das populações, que representa a ocupação de cada nível. Em todos os casos, consideramos $d = 2$ e 10 nm.

proporcional ao apresentado pela coerência e contém todas as informações sobre as excitações ópticas coerentes. As partes real χ' e imaginária χ'' estão relacionadas à dispersão e absorção, respectivamente. Nós concluímos deste ponto que, a configuração $\delta = 3$ meV é a que possui máxima absorção entre os estados de valência da MPQ com dispersão nula, tal que, o nível $\hat{\rho}_{44}$ é maximamente populado como podemos observar em (d).

Na Fig. 3.10 em (a) e (b) é apresentado o comportamento da coerência dos estados de condução e valência como função das taxas de tunelamento $T_{e,h}$ para as configurações $\delta = 0$ e $\delta = 3$ meV, respectivamente. Podemos observar em ambos os casos que a magnitude

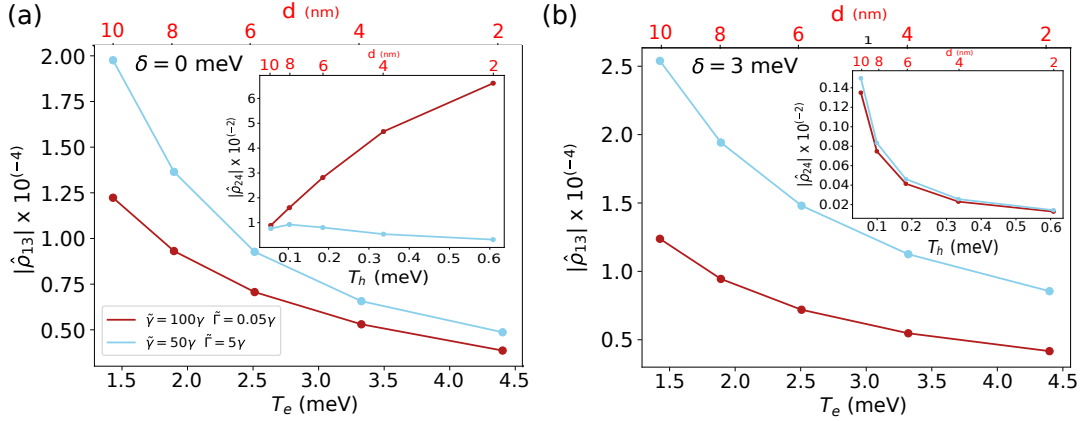


Figura 3.10: Em (a) e (b) são apresentadas as coerências no ponto de potência máxima entre os níveis de condução ($|1\rangle$ e $|3\rangle$) e valência ($|2\rangle$ e $|4\rangle$) como função das taxas de tunelamento $T_{e,h}$ para as configurações $\delta = 0$ meV e $\delta = 3$ meV, respectivamente.

da coerência dos estados de condução da MPQ, $|\hat{\rho}_{13}|$, decresce com o aumento da taxa de tunelamento T_e , uma vez que, $T_e > T_h$ a magnitude da coerência entre os estados de condução é suficientemente pequeno, resguardado pela taxa de decaimento $\tilde{\gamma}$. Por outro lado, o comportamento da coerência entre as bandas de valência da MPQ, $|\hat{\rho}_{24}|$, varia de acordo com a configuração δ , onde em $\delta = 3$ meV a magnitude da coerência entre os estados de valência passa a decrescer aproximadamente à mesma taxa, independentemente do valor da taxa de decaimento $\tilde{\Gamma}$. Isso mostra que as propriedades fotovoltaicas do sistema não aumentam indefinidamente, e sim que em tal configuração alcança um ponto de estabilidade, onde nem a coerência ou o tunelamento conseguem aumentar a corrente ou potência entregue pela fotocélula. É natural neste ponto em que chegamos nos perguntarmos: Qual destas configurações é a que possui maior eficiência? Uma vez que, pontos de alta potência não implicam necessariamente em pontos de alta eficiência. Além disso, podemos nos perguntar: Esses resultados desta configuração estão de acordo com as leis da termodinâmica?

A tendência para a miniaturização não pulou o reino das máquinas de calor, levando a dispositivos em escala nanométrica ou mesmo atômica chegando ao reino quântico. De acordo com a segunda lei, a eficiência dos motores térmicos cíclicos é limitada pelo limite de Carnot [105]. Tal limite é atingido por motores térmicos (idealizados) que operam reversivelmente entre dois banhos térmicos (frio e quente), de modo que a entropia total do motor e dos dois

banhos combinados é inalterada ao longo de um ciclo. Isso corresponde à quantidade mínima de calor sendo despejada no banho frio, de modo a fechar o ciclo e, portanto, ao calor de entrada máxima sendo transformado em trabalho. Por outro lado, em um ciclo irreversível, uma quantidade maior de calor deve ser despejada no banho frio, de modo que menos calor de entrada esteja disponível para conversão em trabalho, fazendo com que a eficiência do motor diminua [105, 106].

Os motores térmicos reais são otimizados para potências que sacrificam a eficiência. Essa compensação entre eficiência e potência é o que procuraremos analisar aqui. Para este fim, calculamos a eficiência em potência máxima

$$\eta = \frac{P_m}{P_S}, \quad (3.34)$$

onde P_m é a potência máxima entregue pela MPQ, e $P_S = jE_{12}/e$ é a potência fornecida pela radiação solar incidente [?]. Para todos os casos considerados, P_S é sempre maior do que a potência máxima entregue e a eficiência é limitada pela eficiência de Carnot $P_m/P_S \leq \eta_C = 1 + T_a/T_S$. No entanto, a termodinâmica endoreversível faz suposições mais realistas sobre a transferência de calor e fornece um novo limite superior para eficiências térmicas. Essa meta mais pragmática é a eficiência de um motor térmico semi-ideal operando na potência máxima [107, 108], ou também conhecido como eficiência de Chambadal-Novikov, $\eta_{CN} = 1 - \sqrt{T_a/T_S} < \eta_C$. Fica evidente na Fig. 3.11 (a) que a configuração $\delta = 3$ meV possui uma alta eficiência, em contraste com a Fig. 3.8, é possível observar também, que esta configuração é mesma que entrega maior potência. Logo, obtemos uma configuração de alta potência que não sacrifica eficiência. Mantendo as propriedades fotovoltaicas praticamente constante para diferentes valores de d . Além disso, o regime de valores de alta potência e eficiência é mais amplo quanto menor for d , ou seja, quanto maiores forem as taxas de tunelamento $T_{e,h}$. Este resultado é interessante, pois mostra que de alguma maneira a eficiência da fotocélula está relacionada com o comportamento da magnitude da coerência entre os níveis da MPQ. Em (b) é apresentado o resultado da eficiência em potência máxima como função do raio de temperatura $\tau = T_a/T_S$ para a configuração $\delta = 3$ meV, com barreiras de tamanhos $d = 2$ nm e $d = 10$ nm representados pelos diagramas de linha triangular e tracejada, respectivamente. Nossos resultados estão de acordo com trabalhos presentes na literatura [107, 109], onde o

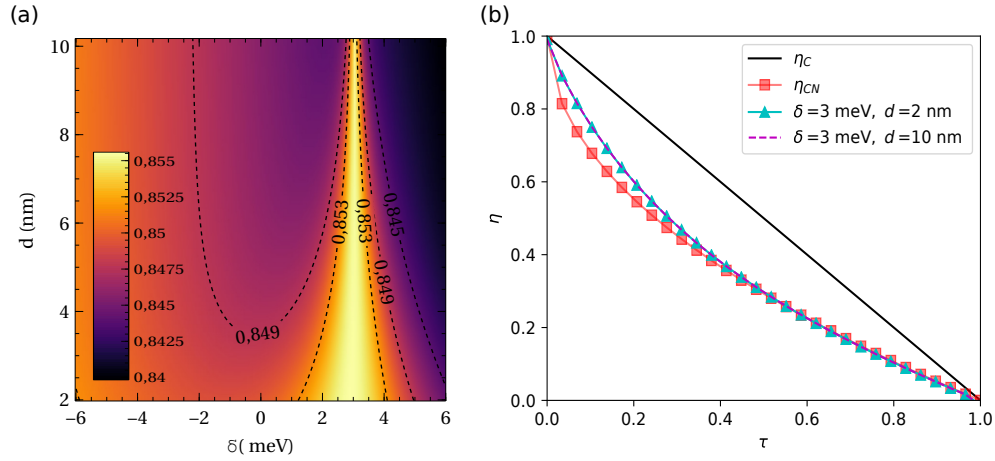


Figura 3.11: (a) Tem-se a eficiência da MPQ como função da separação d entre os PQs para diferentes configurações de energia δ , com taxas de relaxação $\tilde{\Gamma} = 100\gamma$ e $\tilde{\gamma} = 0.05\gamma$. Já em (b) é apresentado a eficiência η versus o raio de temperatura τ da fotocélula para deslocamento de energia $\delta = 3$ meV com tamanhos de barreiras $d = 2$ nm em linha triangular e $d = 10$ nm em linha tracejada. Os limites são mostrados em linha preta, referindo-se à eficiência de Carnot η_C e em linha vermelha com marcadores quadrados representando a eficiência de Chambadal-Novikov η_{CN} .

limite de Chambadal-Novikov, η_{CN} , é ultrapassado quando o raio de temperatura $\tau < 0.5$, mas ainda encontra-se abaixo do limite de Carnot, η_C , estando de acordo com a segunda lei da termodinâmica.

3.4 Conclusões

Aplicamos a física dos PQs semicondutores acoplados por tunelamento para estudar um sistema fotovoltaico. Para tal fim, utilizamos taxas de tunelamento obtidas de um bem estabelecido resultado experimental [47]. Nossos resultados apresentados na Fig. 3.3 mostram que o tunelamento pode ser utilizado em determinados casos como uma ótima ferramenta para aumentar passivamente as propriedades fotovoltaicas (corrente e potência) de uma fotocélula. Nossos resultados mostram que o sistema constituído por MPQ exibe uma vantagem comparada ao sistema de um PQ simples. Ao calcular a corrente relativa, Eq. (3.30), verifica-se que em determinados regimes de parâmetros das taxas de acoplamento fonônica é possível al-

cançando um ganho de até 30% sobre corrente entregue pela fotocélula. Verificamos também, que existe uma estreita relação de concorrência entre a magnitude da coerência e a taxa de tunelamento: para se manter ou aumentar a produção de corrente na fotocélula devemos controlar o balanceamento entre essas duas grandezas como observamos na Fig. 3.5. Propomos várias configurações de alinhamento de banda da MPQ e contatos, e foi observado na configuração em que $\delta = 3$ meV, que equivale a $\Delta_e = 6$ meV e $\Delta_h = 0$, a fotocélula entrega maior potência praticamente independente do tamanho da barreira d . Porém, o regime de valores de alta potência é mais amplo quanto menor for d . Logo, neste ponto os estados de valência da MPQ possui alta absorção com dispersão nula. Além disso, as características fotovoltaicas são praticamente insensíveis ao acoplamento com o tunelamento e possui menor coerência entre os níveis. Ao comparar as Figuras 3.9 com 3.11 nota-se que a eficiência de alguma maneira é afetada pela coerência para diferentes configurações de nível. Em que, quando a coerência é pequena, a eficiência atinge seu valor máximo praticamente constante e consistente com a segunda lei da termodinâmica, sendo menor que a eficiência de Carnot.

Capítulo 4

Construção de Estados de Luz Quânticos e Estudo da Interface Clássico-Quântico

Aqui continuamos explorando a física dos PQs como sistemas quânticos abertos, mas agora acoplados a uma nanocavidade, usamos tal sistema como laboratório para estudo da interação entre estados excitônicos e o modo de uma nanocavidade no regime dispersivo. Este sistema nos permitiu compreender a construção de estados de luz quânticos em nanocavidades fotônicas, os efeitos do reservatório sobre o mesmo e a interface clássico-quântico. Para simulações numéricas usamos um software de código aberto conhecido como QuTiP [110].

4.1 Sistema físico e modelo

A questão de como as regras da mecânica quântica se transformam nas regras aparentemente muito diferentes da mecânica clássica intrigou os cientistas desde que a teoria quântica foi desenvolvida pela primeira vez no início do século XX, e colocou em debate o seguinte questionamento: existe alguma diferença fundamental entre grandes objetos clássicos e pequenos objetos quânticos? Esse enigma da chamada transição quântica-clássica foi destacado de forma icônica pelo experimento mental do gato de Schrödinger. Produto da correspondência entre Schrödinger e Albert Einstein, após Einstein ter criticado a interpretação da mecânica

quântica defendida pelo físico dinamarquês Niels Bohr e seus colegas, o gato de Schrödinger surgiu das reflexões sobre as peculiaridades do emaranhamento¹. Ele queria mostrar como a noção de Bohr de que nada é fixo até que seja medido poderia levar ao absurdo lógico se imaginássemos aumentar o emaranhamento até o tamanho macroscópico. O argumento de Schrödinger não era simplesmente que as regras quânticas levam a um aparente absurdo quando aplicadas na escala do dia-a-dia. Em vez disso, ele queria encontrar uma demonstração extrema de como adiar qualquer atribuição de um estado definido (vivo ou morto) até que a medição tenha sido feita (abrindo a caixa para olhar) poderia levar a implicações que parecem não apenas estranhas, mas logicamente proibidas [2, 16, 111, 112].

Podemos pensar então, em vez de discutir exaustivamente, por que não apenas fazer o experimento? O problema é que, embora tenha sido muito bom para Schrödinger imaginar um gato e acoplá-lo a algum evento de escala atômica, não está claro como, ou mesmo se, podemos fazer essa ampliação na prática, ou, de fato, o que uma superposição de vivos e mortos poderia significar em termos de estados quânticos. Entretanto com as técnicas modernas, podemos imaginar a criação de superposições quânticas bem definidas de objetos relativamente grandes (não tão grandes quanto gatos, mas muito maiores do que átomos isolados) e sondar suas propriedades. A questão é: Quão grande os objetos podem ser enquanto ainda preservam essas propriedades quânticas? A julgar pelos resultados mais recentes, a resposta é: muito maior que um único átomo [113, 114]. É importante lembrar que a radiação eletromagnética, dependendo do número de fótons envolvidos, se comporta seguindo as regras da descrição quântica (poucos fótons) ou clássica [59, 63].

Com intuito de investigar a transição quântico-clássica as propriedades de diferentes tipos de estados não clássicos da luz foram estudados durante as últimas décadas. Dentre tais estados, focaremos nossa atenção aqui no estado coerente adicionado de fótons (do inglês *Photon-added coherent states* - PACS) $|\alpha, m\rangle$, um estado proposto teoricamente por Agarwal e Tara em [115] e gerado experimentalmente por Alessandro Zavatta e colegas em 2004 na Itália [116] usando conversão paramétrica descendente em um cristal não linear. Tal estado é definido por

$$|\alpha, m\rangle = \frac{\hat{a}^{\dagger m} |\alpha\rangle}{N}, \quad (4.1)$$

¹Este foi o nome dado por Schrödinger para as correlação quânticas entre partículas.

onde $N = |\langle \alpha | \hat{a}^m \hat{a}^{\dagger m} | \alpha \rangle|^{1/2}$ é o fator de normalização, $|\alpha\rangle$ é um estado coerente e m é um inteiro. No limite $\alpha \rightarrow 0$, o estado $|\alpha, m\rangle$ se reduz ao estado de Fock $|m\rangle$, um estado estritamente quântico (sem análogo clássico) que contém um número bem definido m de excitações, ao mesmo tempo que sua fase é completamente indefinida. Por outro lado, no limite $m \rightarrow 0$, o estado $|\alpha, m\rangle$ se reduz ao estado coerente, $|\alpha\rangle$, que é o análogo mais próximo de um campo de luz clássico e exibe uma distribuição do número de fótons poissoniana, com um número médio de fótons $|\alpha|^2$. Estados coerentes possuem amplitude e fase bem definidas, com flutuações mínimas permitidas pelo princípio de incerteza de Heisenberg. Portanto, tal estado se torna uma boa ferramenta de observação da interface dos comportamentos quântico e clássico.

Usaremos como laboratório a dinâmica de interação entre o estado excitônico de um PQ e um modo de uma nanocavidade, sendo a interação descrita pelo modelo de Jaynes-Cummings - MJC [117] na aproximação dispersiva. O MJC foi originalmente usado para estudar a interação entre um sistema genérico de dois níveis e um modo de um campo eletromagnético, completamente quantizada. Embora conceitualmente simples, o MJC apresenta uma dinâmica extremamente rica e, na aproximação de onda girante (*rotating wave approximation* - RWA), possui solução analítica. Em nosso caso, o PQ se torna o sistema de dois níveis, um *qubit*, e o modo eletromagnético corresponde ao modo único de uma nanocavidade fotônica. Representando o sistema de dois níveis, definimos $|0\rangle$ como o estado sem éxciton e $|1\rangle$ sendo reservado ao estado de éxciton direto. Por outro lado, para criar e manter um estado coerente dentro da cavidade é possível fazer uso de um laser contínuo aplicado em ressonância com o modo da cavidade [25]. Inicialmente para fins qualitativos, vamos desconsiderar esta fonte bombeando a cavidade.

O hamiltoniano do sistema é escrito como ($\hbar = 1$)

$$\hat{H} = \omega_x \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- + \omega_c \hat{a}^\dagger \hat{a} + g(\hat{\sigma}_+ \hat{a} + \hat{\sigma}_- \hat{a}^\dagger), \quad (4.2)$$

onde $\hat{\sigma}_\pm$ são os operadores de pseudospin que descrevem o éxciton \hat{a}^\dagger e \hat{a} são os operadores criação e aniquilação de fótons dentro da cavidade, ω_x e ω_c são as frequências do éxciton e do modo da cavidade, respectivamente, e g corresponde ao acoplamento entre o éxciton e o modo da cavidade.

O hamiltoniano (4.2) pode ser diagonalizado na base $\{|1, n\rangle, |0, n+1\rangle\}$, fornecendo os seguintes autoestados

$$|+, n\rangle = \frac{\Omega_n}{\sqrt{(\Delta_n - \delta)^2 + \Omega_n^2}} |1, n\rangle + \frac{\Delta_n - \delta}{\sqrt{(\Delta_n - \delta)^2 + \Omega_n^2}} |0, n+1\rangle , \quad (4.3)$$

$$|-, n\rangle = \frac{\Delta_n - \delta}{\sqrt{(\Delta_n - \delta)^2 + \Omega_n^2}} |1, n\rangle - \frac{\Omega_n}{\sqrt{(\Delta_n - \delta)^2 + \Omega_n^2}} |0, n+1\rangle , \quad (4.4)$$

conhecidos como *estados vestidos*, onde $\delta = \omega_x - \omega_c$ é a dessintonia entre o éxciton e a cavidade, $\Omega_n = 2g\sqrt{n+1}$ a frequência de Rabi generalizada e $\Delta_n = \sqrt{\delta^2 + \Omega_n^2}$. Os autovalores são dados por

$$E_{\pm} = \frac{\omega_x}{2} + \omega_c(n + \frac{1}{2}) \pm \frac{\Delta_n}{2} . \quad (4.5)$$

Se a frequência do éxciton for diferente da frequência do modo da cavidade, estaremos no regime de interação dispersiva. Neste regime, quanto maior for o valor absoluto da dessintonia, menor será a probabilidade de ocorrer troca de energia entre o átomo e o campo, pois $\delta \gg \Omega_n$, de modo que $\Delta_n \approx |\delta| + \frac{1}{2} \frac{\Omega_n^2}{|\delta|}$. Assim, os autoestados das equações (4.3) e (4.4) são:

i) se $\delta > 0$

$$|+, n\rangle \approx |1, n\rangle \quad e \quad |-, n\rangle \approx -|0, n+1\rangle , \quad (4.6)$$

ii) se $\delta < 0$

$$|+, n\rangle \approx |0, n+1\rangle \quad e \quad |-, n\rangle \approx |1, n\rangle , \quad (4.7)$$

com os correspondente autovalores

$$E_{\pm n} = \frac{\omega_x}{2} + \omega_c(n + \frac{1}{2}) \pm \frac{1}{2} \left(|\delta| + \frac{1}{2} \frac{\Omega_n^2}{|\delta|} \right) . \quad (4.8)$$

A par disto, podemos nos fazer a seguinte pergunta: que hamiltoniano efetivamente irá nos gerar esta interação? A resposta é o Hamiltoniano efetivo escrito como

$$\hat{H}_{ef} = \omega_x |1\rangle \langle 1| + \omega_c \hat{a}^\dagger \hat{a} + \omega \left[(\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1) |1\rangle \langle 1| - \hat{a}^\dagger \hat{a} |0\rangle \langle 0| \right] , \quad (4.9)$$

onde $\omega = g^2/\delta$ é a constante de acoplamento efetiva. Sem perda de generalidade, podemos desprezar o termo proporcional à identidade, pois ele representa mesmo na ausência de fótons um tipo de efeito Kerr no sistema de dois níveis induzido pela cavidade, que dá origem a uma mudança de energia no estado de um éxciton ($|1\rangle \langle 1|$) não afetando significativamente a

dinâmica de interação. Deste modo, podemos reescrever o Hamiltoniano efetivo da seguinte maneira

$$\hat{H}_{ef} = \omega_x |1\rangle \langle 1| + \omega_c \hat{a}^\dagger \hat{a} + \omega \hat{a}^\dagger \hat{a} \sigma_z . \quad (4.10)$$

Para uma melhor compreensão apresentaremos inicialmente os nossos resultados para um caso sem perdas, isto é, uma evolução unitária.

4.2 Evolução unitária

O estado excitônico de um PQ interagindo com um estado $|\alpha, m\rangle$ do campo no interior da cavidade. Na representação de interação, o operador de evolução para o sistema no limite dispersivo é

$$\hat{U}(t) = e^{-i\omega t (\hat{a}^\dagger \hat{a} |1\rangle \langle 1| - \hat{a}^\dagger \hat{a} |0\rangle \langle 0|)} , \quad (4.11)$$

que podemos reescrever como

$$\hat{U}(t) = e^{-i\omega t \hat{a}^\dagger \hat{a}} \otimes |1\rangle \langle 1| + e^{i\omega t \hat{a}^\dagger \hat{a}} \otimes |0\rangle \langle 0| . \quad (4.12)$$

Para um estado inicial do tipo

$$|\psi(0)\rangle = (\sin \varphi |1\rangle + \cos \varphi |0\rangle) \otimes |\alpha, m\rangle , \quad (4.13)$$

obtemos a expressão à seguir

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t)(\sin \varphi |1\rangle + \cos \varphi |0\rangle) \otimes |\alpha, m\rangle \\ &= \sin \varphi |1\rangle \otimes e^{-i\omega t \hat{a}^\dagger \hat{a}} |\alpha, m\rangle + \cos \varphi |0\rangle \otimes e^{i\omega t \hat{a}^\dagger \hat{a}} |\alpha, m\rangle \\ &= \sin \varphi |1\rangle \otimes |\alpha e^{-i\omega t}, m\rangle + \cos \varphi |0\rangle \otimes |\alpha e^{i\omega t}, m\rangle . \end{aligned} \quad (4.14)$$

Para fins de comparação entre o hamiltoniano do MJC (4.2) e o hamiltoniano do modelo efetivo (4.10), resolvemos a equação de Schrödinger numericamente e comparamos com nosso resultado analítico da evolução temporal do número médio de fótons $\langle \hat{n}(t) \rangle$ para diferentes valores de dessintonia δ . O operador densidade reduzido do campo no interior da cavidade é

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_c(t) &= \text{tr}_E(\hat{\rho}(t)) \\ &= \sin^2 \varphi |\alpha e^{-i\omega t}, m\rangle \langle \alpha e^{-i\omega t}, m| + \cos^2 \varphi |\alpha e^{i\omega t}, m\rangle \langle \alpha e^{i\omega t}, m| . \end{aligned} \quad (4.15)$$

Portanto

$$\begin{aligned}\langle \hat{n}(t) \rangle &= \text{tr} [\hat{n} \hat{\rho}_c(t)] \\ &= \frac{(m+1)! L_{m+1}(-|\alpha|^2)}{m! L_m(-|\alpha|^2)} - 1 ,\end{aligned}\quad (4.16)$$

onde $L_m(x)$ é o polinômio de Laguerre² de ordem m . Na Fig. 4.1, em (a) e (c) podemos observar a evolução de $\langle \hat{n}(t) \rangle$ para o número médio de fótons inicialmente $|\alpha|^2 \rightarrow 0$, $m = 3$, com dessintonias $\delta = 10g$ e $\delta = 100g$, respectivamente. Neste limite o estado do campo no interior da nanocavidade possui as características de um estado de Fock. Já em (b) e (d) o número médio de fótons inicialmente $|\alpha|^2 = 10$, $m \rightarrow 0$, com dessintonias $\delta = 10g$ e $\delta = 100g$, respectivamente, onde se observa que o estado do campo no interior da nanocavidade pode ser descrito como um estado coerente. Em todos os casos tomamos $\varphi = \pi/4$. Note que, em nosso hamiltoniano efetivo perdemos o efeito de morte e ressurgimento associado à inversão de população de um estado coerente $|\alpha\rangle$ [59], já os m fótons adicionados deslocam $\langle \hat{n}(t) \rangle$. Observe que, quanto maior for a dessintonia δ , mais próxima a dinâmica do hamiltoniano efetivo se aproxima do hamiltoniano do MJC.

Para explorar se há algum grau de entrelaçamento (emaranhamento) entre os estados no ponto quântico e o campo da cavidades, calculamos a pureza dos subsistemas usando o defeito de idempotência ou entropia linear [67]. Se o estado de um sistema é representado pelo operador densidade $\hat{\rho}$, o defeito de idempotência $S = 1 - \text{tr}(\hat{\rho}^2)$ fornece uma medida apropriada de sua pureza. Caso o sistema esteja em um estado puro, então $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ e $S = 0$, caso contrário, teremos $0 < S < 1$. Calculando a matriz reduzida do subsistema da cavidade, concluímos que o defeito de idempotência para o campo no interior da cavidade é

$$\begin{aligned}S_c &= 1 - \text{tr}(\hat{\rho}_c^2) \\ &= 1 - \left[\sin^4 \varphi + \cos^4 \varphi + 2 \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi \langle \alpha e^{-i\omega t}, m | \alpha e^{i\omega t}, m \rangle \langle \alpha e^{i\omega t}, m | \alpha e^{-i\omega t}, m \rangle \right] ,\end{aligned}\quad (4.17)$$

fazendo $\alpha e^{-i\omega t} = \gamma$ e $\alpha e^{i\omega t} = \beta$, temos

$$\langle \gamma, m | \beta, m \rangle = \frac{L_m(-\beta\gamma^*)}{[L_m(-|\gamma|^2)L_m(-|\beta|^2)]^{1/2}} \langle \gamma | \beta \rangle . \quad (4.18)$$

²definido por $L_m(x) = \sum_{n=0}^m \frac{(-1)^n x^n m!}{(n!)^2 (m-n)!}$.

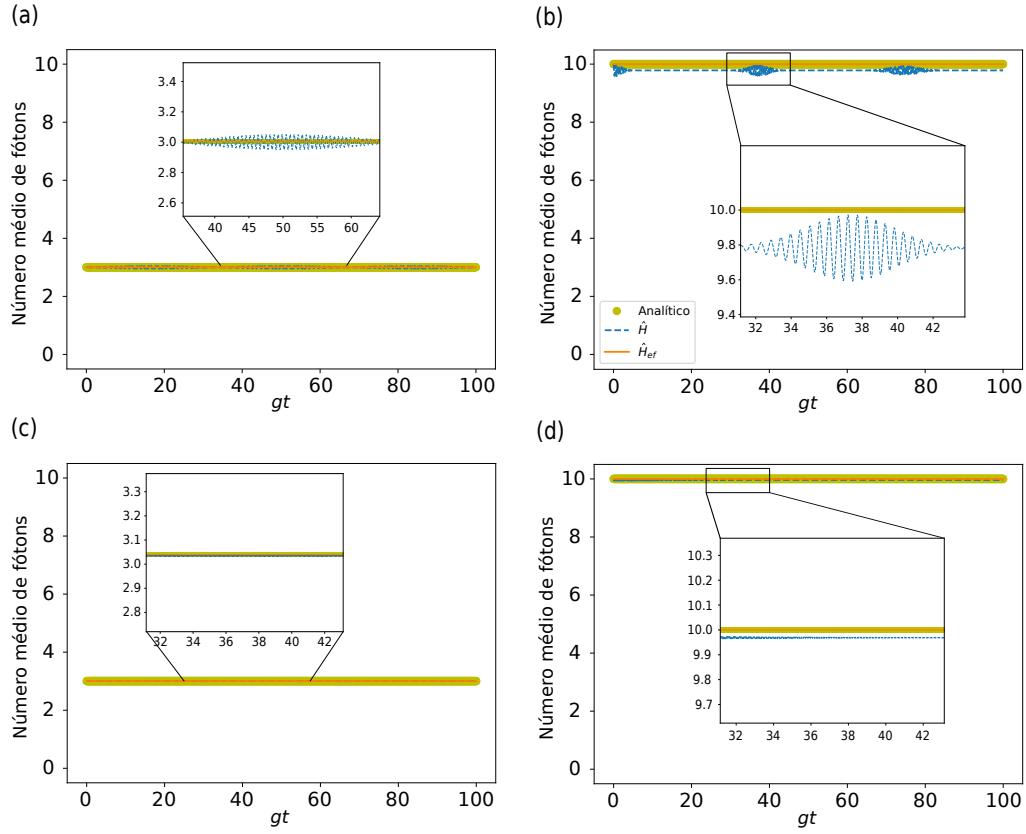


Figura 4.1: Simulação do número médio de fótons $\langle \hat{n}(t) \rangle$ como função do tempo para o resultado analítico (4.16), o hamiltoniano do MJC (\hat{H}) e para o hamiltoniano efetivo (\hat{H}_{ef}). Utilizamos diferentes valores de dessintonia δ , fótons adicionados m e número médio de fótons $|\alpha|^2$: em (a) $\delta = 10g$, $m = 3$ e $|\alpha|^2 \rightarrow 0$; já em (b) $\delta = 10g$, $m = 0$ e $|\alpha|^2 = 10$; por outro lado em (c) $\delta = 100g$, $m = 3$ e $|\alpha|^2 \rightarrow 0$; e em (d) $\delta = 100g$, $m = 0$ e $|\alpha|^2 = 10$.

Portanto

$$S_c = 1 - \sin^4 \varphi - \cos^4 \varphi - 2 \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi \left[\frac{L_m(-\beta\gamma^*)L_m(-\beta^*\gamma)}{L_m(-|\gamma|^2)L_m(-|\beta|^2)} |\langle \gamma|\beta \rangle|^2 \right], \quad (4.19)$$

como $\langle \gamma|\beta \rangle = e^{-\frac{1}{2}(|\gamma|^2+|\beta|^2)+\gamma^*\beta} \Rightarrow |\langle \gamma|\beta \rangle|^2 = (\langle \gamma|\beta \rangle)(\langle \gamma|\beta \rangle)^* = e^{-|\beta-\gamma|^2}$, permite-nos reescrever

$$S_c = 2 \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi \left[1 - \frac{L_m(-\beta\gamma^*)L_m(-\beta^*\gamma)}{L_m(-|\gamma|^2)L_m(-|\beta|^2)} e^{-|\beta-\gamma|^2} \right]. \quad (4.20)$$

Pode-se notar que o grau de pureza depende da distinguibilidade entre os estados $|\beta\rangle$ e $|\gamma\rangle$, que varia com a intensidade do campo coerente $|\alpha|^2$. Na Fig. 4.2, mostramos o compor-

tamento do defeito de idempotência S para o campo no interior da cavidade como função do tempo para o hamiltoniano do MJC (\hat{H}), para o hamiltoniano efetivo (\hat{H}_{ef}) e para nosso resultado analítico S_c .

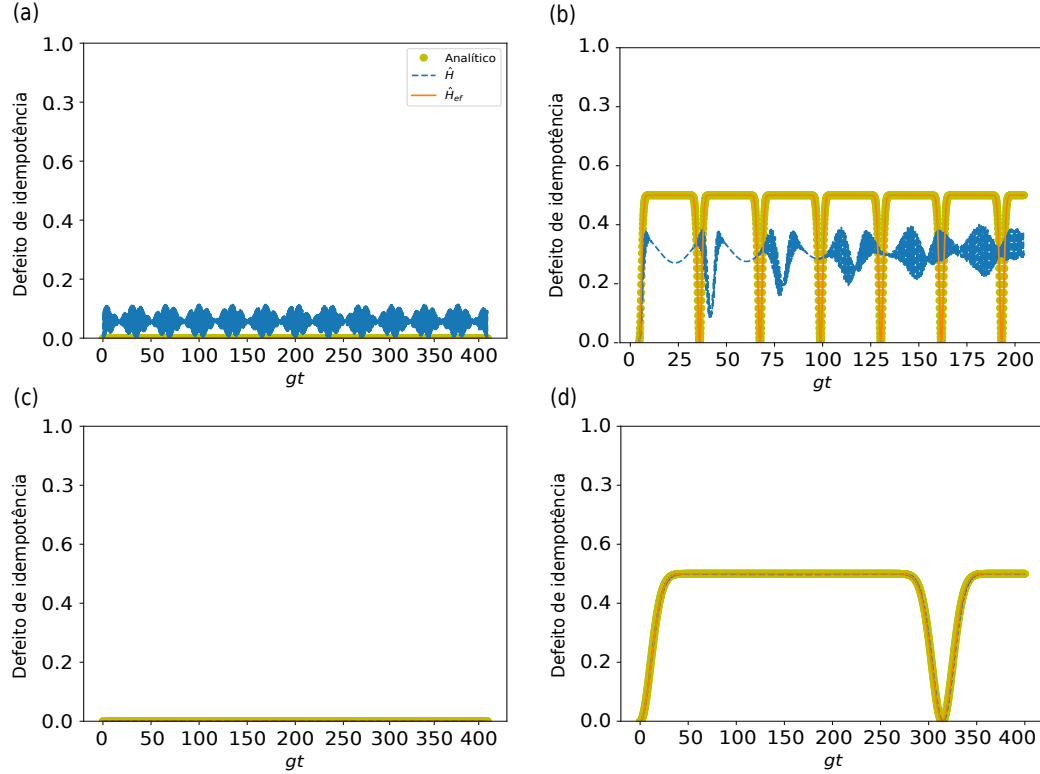


Figura 4.2: Simulação do defeito de idempotência $S(t)$ como função do tempo para o hamiltoniano do MJC (\hat{H}), para o hamiltoniano efetivo (\hat{H}_{ef}) e para nosso resultado analítico (4.20). Tomamos diferentes valores de dessintonia δ , fótons adicionados m e número médio de fótons $|\alpha|^2$: em (a) $\delta = 10g$, $m = 3$ e $|\alpha|^2 \rightarrow 0$; já em (b) $\delta = 10g$, $m = 0$ e $|\alpha|^2 = 10$; por outro lado em (c) $\delta = 100g$, $m = 3$ e $|\alpha|^2 \rightarrow 0$; e em (d) $\delta = 100g$, $m = 0$ e $|\alpha|^2 = 10$.

Podemos observar na Fig. 4.2 que para baixas dessintonias, a dinâmica do hamiltoniano efetivo não recria a do MJC, mas quando a dessintonia é apreciável, os resultados da dinâmica coincidem com ótima precisão. Note que, em (a) e (c) no limite em que $|\alpha|^2 \rightarrow 0$ e $m = 3$, o estado do campo no interior da cavidade é totalmente puro, de modo que o sistema composto pelo PQ e o campo eletromagnético encontra-se separados (descorrelacionados). Por outro lado, em (b) e (d) onde $|\alpha|^2 = 10$ e $m \rightarrow 0$ cada estado do PQ produz um deslocamento de fase distinto sobre o estado coerente $|\alpha\rangle$. O estado resultante $|\psi(t)\rangle$ é, na maior parte do

tempo, um estado entrelaçado, pois os subsistemas tornam-se estatisticamente dependentes (correlacionados) e suas propriedades individuais não permitem obter as propriedades do sistema global. Apenas nos instantes de tempo $t = n\pi/\omega$, n inteiro, quando a fase entre os estados coerentes $|\alpha e^{-i\omega t}\rangle$ e $|\alpha e^{i\omega t}\rangle$ vale $2n\pi$, o estado do sistema bipartite (PQ e campo) é um estado fatorável. Devido a esta característica de um dado momento o estado do campo estar correlacionado com o PQ, já em outro não, é natural nos perguntarmos como se comporta a estatística do campo intracavidade.

Se em um dado instante de tempo t o estado do sistema é dado por (4.14) a função de correlação de segunda ordem será

$$g^{(2)}(0) = \frac{\frac{(m+2)!L_{m+2}(-|\alpha|^2)}{m!L_m(-|\alpha|^2)} - \frac{4(m+1)!L_{m+1}(-|\alpha|^2)}{m!L_m(-|\alpha|^2)} + 2}{\left[\frac{(m+1)!L_{m+1}(-|\alpha|^2)}{m!L_m(-|\alpha|^2)} - 1\right]^2}. \quad (4.21)$$

Estamos interessados em saber o comportamento estatístico do campo no interior da cavidade durante a evolução do sistema. Para isso, analisamos os casos com $\delta = 100g$, e comparamos com os resultados apresentados na Fig. 4.2 (c) e (d). Como esperado, podemos observar na Fig. 4.3 (a) que o campo do interior da cavidade possui uma estatística sub-poissoniana, evidenciando suas características não-clássicas, por se tratar de um estado de Fock com número de fótons m . Em contrapartida, na Fig. 4.3 (b) o campo demonstra uma estatística poissoniana, por se tratar de um estado coerente no interior da cavidade, mas nos instantes de tempo em que temos uma variação do defeito de idempotência, isto é, em que as correlações entre o PQ e a cavidade somem e aparecem, a estatística do campo no interior da cavidade torna-se ligeiramente indefinida.

Na Fig. 4.4 é ilustrado o comportamento de $g^{(2)}(0)$ para diferentes valores de m como função do número médio de fótons $|\alpha|^2$ no instante de tempo $gt = 400$ e com $\delta = 100g$. Quando $m = 0$ para pequenos valores de $|\alpha|^2$ a dinâmica do hamiltoniano efetivo não coincide com MJC, mostrando pequeno desvio. Todavia, a medida que o número médio de fótons vai aumentando a dinâmica de ambos modelos passam a exibir uma estatística poissoniana, que caracteriza uma luz coerente. Já para $m = 1, 2$ e 3 ambos modelos preveem o mesmo resultado, exibindo uma estatística sub-poissoniana para pequenos números médios de fótons ($|\alpha|^2$) e a medida que vai aumentando a estatística vai se tornando poissoniana, isto é, observa-se uma transição de um estatística não-clássica para uma que pode exibir efeitos clássicos.

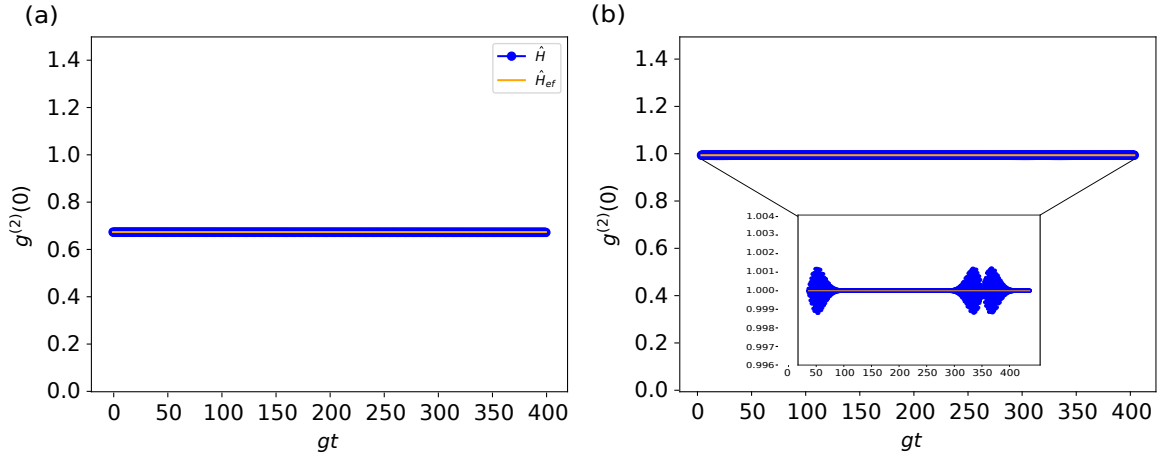


Figura 4.3: Dependência da função de correlação $g^{(2)}(0)$ com o tempo gt para dois casos: (a) $\delta = 100g$, $m = 3$, $|\alpha|^2 \rightarrow 0$ e (b) $\delta = 100g$, $m = 0$, $|\alpha|^2 = 10$. Em azul para o hamiltoniano do MJC (\hat{H}) e em laranja para o hamiltoniano efetivo (\hat{H}_{ef}).

Todas as cavidades, incluindo a versão fotônica, não possuem um fator de qualidade infinito, o que significa a existência de perdas, as quais destroem as propriedades quânticas do sistema rapidamente. Deste modo, para um tratamento mais realístico é de suma importância levar em consideração tais efeitos sobre a dinâmica do sistema, e é sobre isso que iremos falar agora.

4.3 Perdas na cavidade

O processo de perda das propriedades quânticas que ficou conhecido como decoerência [118] é quem da origem ao tipo de comportamento visto classicamente [119]. Este processo parece fornecer a parte que faltava do quebra-cabeça da medição, que ficou vago nas discussões entre Bohr, Einstein e Schrödinger. O fenômeno de decoerência, então, é central para a compreensão atual da transição quântica-clássica. Podemos modelar este processo de perdas por meio de uma equação mestra, onde o reservatório representa a perda de excitações dos modos da cavidade. Sendo assim, vamos tratar agora o caso onde o sistema está sofrendo um amortecimento de amplitude, isto é, a cavidade está sofrendo uma perda de fótons. Para

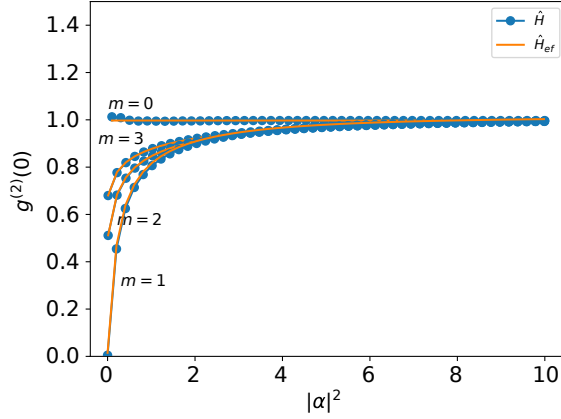


Figura 4.4: Função de correlação $g^{(2)}(0)$ para diferentes valores de m como função do número médio de fótons $|\alpha|^2$. Os círculos cheios azuis mostram o comportamento do hamiltoniano MJC (\hat{H}) e a linha sólida laranja o caso do hamiltoniano efetivo (\hat{H}_{ef}).

isto usaremos a equação mestra apresentada em (2.56) para $\bar{n} = 0$,

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) = -i[\hat{H}, \hat{\rho}(t)] + \kappa\mathcal{D}[\hat{a}] , \quad (4.22)$$

onde $\mathcal{D}[\hat{a}] = \frac{1}{2}\{[\hat{a}\hat{\rho}(t), \hat{a}^\dagger] + [\hat{a}, \hat{\rho}(t)\hat{a}^\dagger]\}$ é o superoperador que representa fenomenologicamente as perdas na cavidade. Na representação de interação, a equação mestra assume a forma

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) = -i\omega[(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \mathbf{1})|1\rangle\langle 1| - \hat{a}^\dagger\hat{a}|0\rangle\langle 0|, \hat{\rho}(t)] + \frac{\kappa}{2}\{[\hat{a}\hat{\rho}(t), \hat{a}^\dagger] + [\hat{a}, \hat{\rho}(t)\hat{a}^\dagger]\} . \quad (4.23)$$

O operador densidade $\hat{\rho}(t)$ pertence ao conjunto de operadores do tipo $\mathcal{H}_E \otimes \mathcal{H}_B$. De modo, que $\hat{\rho}(t)$ possa ser representado da seguinte maneira:

$$\hat{\rho}(t) = \begin{pmatrix} \hat{\rho}_{00}(t) & \hat{\rho}_{01}(t) \\ \hat{\rho}_{10}(t) & \hat{\rho}_{11}(t) \end{pmatrix} ,$$

onde $\hat{\rho}_{ij}(t) = \langle i|\hat{\rho}(t)|j\rangle$ são os elementos de matriz. Da equação mestra (4.23) deduzimos as

equações de movimento para cada um dos elementos de matriz acima

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{\rho}_{00}(t) &= i\omega[\hat{a}^\dagger\hat{a},\hat{\rho}_{00}(t)] + \kappa'[2\hat{a}\hat{\rho}_{00}(t)\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{\rho}_{00}(t) - \hat{\rho}_{00}(t)\hat{a}^\dagger\hat{a}] \\ &= \mathcal{L}_{00}\hat{\rho}_{00}(t),\end{aligned}\tag{4.24}$$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{\rho}_{11}(t) &= -i\omega[\hat{a}^\dagger\hat{a},\hat{\rho}_{11}(t)] + \kappa'[2\hat{a}\hat{\rho}_{11}(t)\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{\rho}_{11}(t) - \hat{\rho}_{11}(t)\hat{a}^\dagger\hat{a}] \\ &= \mathcal{L}_{11}\hat{\rho}_{11}(t),\end{aligned}\tag{4.25}$$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{\rho}_{10}(t) &= -i\omega[\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{\rho}_{10}(t) + \hat{\rho}_{10}(t)\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{\rho}_{10}(t)] + \kappa'[2\hat{a}\hat{\rho}_{10}(t)\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{\rho}_{10}(t) - \hat{\rho}_{10}(t)\hat{a}^\dagger\hat{a}] \\ &= \mathcal{L}_{10}\hat{\rho}_{10}(t),\end{aligned}\tag{4.26}$$

onde, por simplicidade escrevemos $\kappa/2 = \kappa'$. A solução geral destas equações é formalmente determinada pelo método de superoperadores que possuem uma álgebra de Lie fechada [67, 71] (veja mais detalhes no apêndice B).

Podemos observar na Fig. 4.5 (a) e (b) a evolução no tempo do número médio de fótons $\langle\hat{n}(t)\rangle = \text{tr}[\hat{\rho}_c(t)\hat{n}]$ como função do tempo, para o hamiltoniano do MJC (\hat{H}), o hamiltoniano efetivo (\hat{H}_{ef}) e nosso resultado analítico, todos com dessintonia $\delta = 30g$, nos limites $m = 3$ com $|\alpha|^2 \rightarrow 0$ e $m \rightarrow 0$ com $|\alpha|^2 = 10$, respectivamente. Note que, os resultados da simulação numérica do hamiltoniano efetivo estão de comum acordo com nossos resultados analíticos, descrevem muito bem a dinâmica do MJC, mesmo para uma baixa dessintonia. Ao mesmo tempo conseguimos perceber de (a) e (b) que com o decorrer do tempo o número médio de fótons dentro da cavidade tende à zero, evidenciando as perdas da cavidade.

A dinâmica irreversível do sistema aberto não é somente caracterizada pela dissipação de energia, mas também pela perda de pureza em virtude do entrelaçamento. Podemos ver isto por meio do defeito de idempotência, para um estado global do tipo

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_{11}(t) \otimes |1\rangle\langle 1| + \hat{\rho}_{00}(t) \otimes |0\rangle\langle 0| + \left[\hat{\rho}_{10}(t) \otimes |1\rangle\langle 0| + \text{c.h.} \right].\tag{4.27}$$

Diagonalizando o operador densidade do sistema global, obtem-se uma expressão da forma $\hat{\rho}(t) = \lambda'(t) |\lambda_1\rangle\langle \lambda_1| + \lambda''(t) |\lambda_2\rangle\langle \lambda_2|$, onde $\lambda'(t)$ e $\lambda''(t)$ são os autovalores de $\hat{\rho}(t)$ com respectivos autovetores $|\lambda_1\rangle$ e $|\lambda_2\rangle$. Assim, o defeito de idempotência do sistema bipartite do PQ e a cavidade pode ser expresso como $S = 1 - \text{tr}(\hat{\rho}^2) = 1 - \lambda'^2(t) - \lambda''^2(t)$. Para uma melhor compreensão, na Fig. 4.6 analisamos o comportamento do defeito de idempotência do sistema

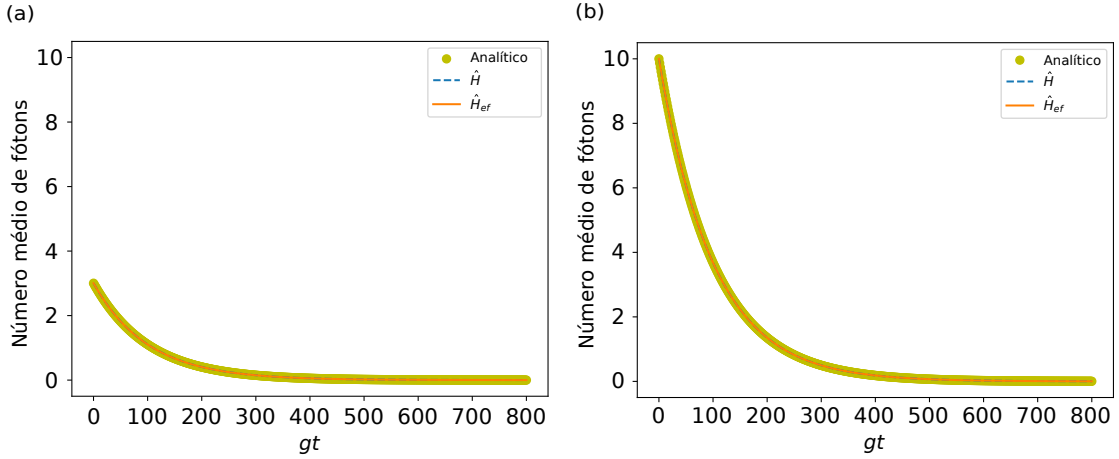


Figura 4.5: Número médio de fótons $\langle \hat{n}(t) \rangle$ como função do tempo para o hamiltoniano do MJC (\hat{H}), o hamiltoniano efetivo (\hat{H}_{ef}) e nosso resultado analítico. Analisado nos limites (a) $\delta = 30g$, $m = 3$, $|\alpha|^2 \rightarrow 0$ e (b) $\delta = 30g$, $m = 0$, $|\alpha|^2 = 10$. Todos para uma taxa de decaimento da cavidade $\kappa = 0.01g$.

total S como função do tempo para a simulação numérica do MJC (\hat{H}), do hamiltoniano efetivo (\hat{H}_{ef}), nos limites (a) $m = 0$ com $|\alpha|^2 = 10$ e (b) $m = 3$ com $|\alpha|^2 \rightarrow 0$. Note que, nosso resultado analítico e as simulações estão de comum acordo. Apesar da dinâmica em (a) e (b) apresentarem comportamento diferentes, ambos apontam à mesma interpretação, uma perda de pureza irreparável do sistema bipartite do PQ e a cavidade.

Todavia, o grau de pureza do sistema completo não pode ser estendido para os subsistemas que o compõem, deste modo, vamos analisar o defeito de idempotência do campo no interior da cavidade C . Tomando o traço parcial de $\hat{\rho}(t)$ sobre as variáveis de PQ, temos $\hat{\rho}_c(t) = \hat{\rho}_{11}(t) + \hat{\rho}_{00}(t)$. Portanto, o defeito de idempotência do campo da cavidade C é $S_c = 1 - \text{tr}(\hat{\rho}_c^2(t))$. Na Fig. 4.7 podemos observar a dinâmica de S_c . É interessante notar que, para o caso com $m = 0$ e $|\alpha|^2 = 10$, Fig. 4.7(b), o estado do campo continua apresentando as oscilações com momentos em que os subsistemas se desentrelaçam, associadas ao deslocamento de fase dos estados do PQ sobre o estado coerente intracavidade. Entretanto, com o passar do tempo as perdas da cavidade passam a assumir um papel danoso, conduzindo o estado do campo no interior da cavidade a um estado puro. Ao contrastar este resultado com o da Fig. 4.6, verifica-se que o subsistema PQ carrega toda a impureza da dinâmica

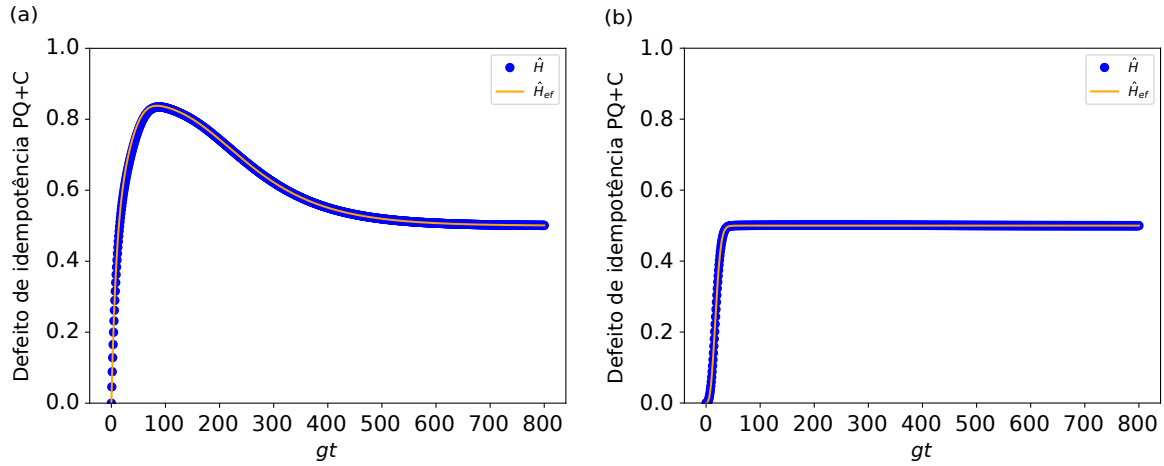


Figura 4.6: Defeito de idempotência $S(t)$ para o sistema total como função do tempo para o hamiltoniano do MJC (\hat{H}) e para o hamiltoniano efetivo (\hat{H}_{ef}). Consideramos os valores: (a) $\delta = 30g$, $m = 3$, $|\alpha|^2 \rightarrow 0$ e (b) $\delta = 30g$, $m = 0$, $|\alpha|^2 = 10$. Para uma taxa de decaimento da cavidade $\kappa = 0.01g$.

do sistema total (bipartite do PQ e a cavidade). Por outro lado, para o caso com $m = 0$ e $|\alpha|^2 \rightarrow 0$, Fig. 4.7(a) não temos as oscilações, todavia obtemos a mesma interpretação de (b), em que o campo no interior da cavidade tende a um estado puro com o passar do tempo.

Dado que as perdas da cavidade desempenham um papel crucial na dinâmica do sistema, provocando danos irreparáveis no estado do campo dentro da cavidade, é natural nos perguntarmos como estas perdas podem afetar a estatística do campo no interior da cavidade. Para tal fim, analisamos a função de correlação de segunda ordem $g^{(2)}(0)$ como função do tempo, apresentada na Fig. 4.8. Podemos observar que, em (a) onde o campo no interior da cavidade encontra-se inicialmente em um estado de Fock, o comportamento estatístico do campo intracavidade, assim como no caso unitário, preserva sua característica sub-poissoniana para pequenos intervalos de tempo. Já no painel (b), enquanto no caso unitário observa-se pontos de oscilação relacionados com o defeito de idempotência (pureza do campo), no caso com perdas essas oscilações somem, aparecendo somente a oscilação inicial em $gt = 0$.

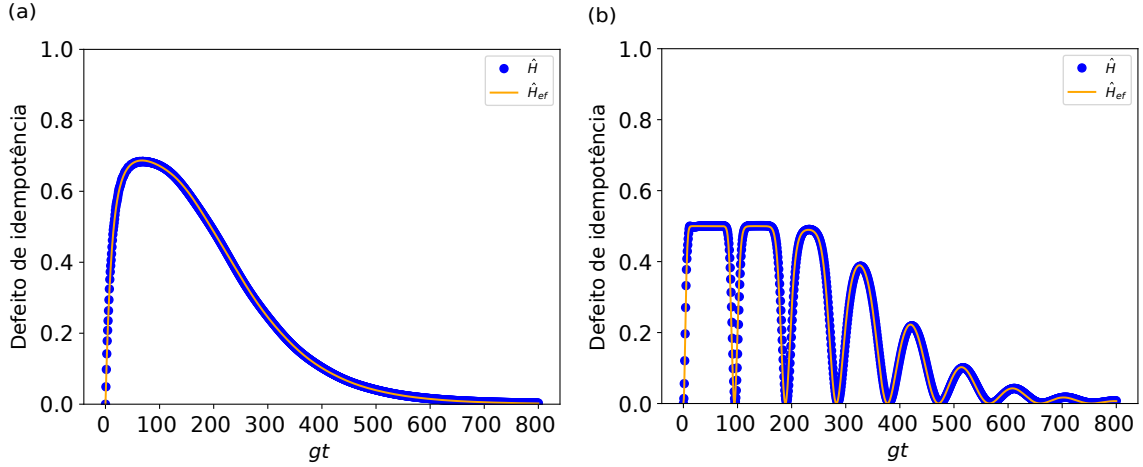


Figura 4.7: Defeito de idempotência $S_c(t)$ do campo no interior da cavidade como função do tempo para o hamiltoniano do MJC (\hat{H}) e para o hamiltoniano efetivo (\hat{H}_{ef}). Consideramos os valores: (a) $\delta = 30g$, $m = 3$, $|\alpha|^2 \rightarrow 0$ e (b) $\delta = 30g$, $m = 0$, $|\alpha|^2 = 10$. Para uma taxa de decaimento da cavidade $\kappa = 0.01g$.

4.4 Construção de um estado do tipo gato de Schrödinger em cavidades fotônicas

Sabemos que “os gatinhos de Schrödinger³”, tem sido apontados como um dos pontos de investigação da interface clássico-quântico [16, 121]. Mas como gerar tais gatos experimentalmente? É bem conhecido que o campo de radiação em um estado coerente $|\alpha\rangle$ possui o produto da incerteza em amplitude e fase, a mínima permitida pelo princípio da incerteza [62, 63]. Nesse sentido, eles são os estados da mecânica quântica mais próximos de uma descrição clássica do campo. Portanto, em termos genéricos, ao colocar tais estados em um estado de superposição quântica, obtêm-se um estado tipo gato de Schrödinger entendido como uma superposição de dois estados mesoscópicos. Implementações experimentais bem sucedidas destes estados incluem vários trabalhos sobre eletrodinâmica quântica de cavidades com átomos de Rydberg passando por cavidades supercondutoras [16] e íons aprisionados [122]. Embora a produção de luz quântica usando pontos quânticos dentro da nanocavidade tenha sido discutida recentemente [123, 124], o problema específico da produção de um es-

³Forma informal de se referir ao bem conhecido paradoxo do gato de Schrödinger [120].

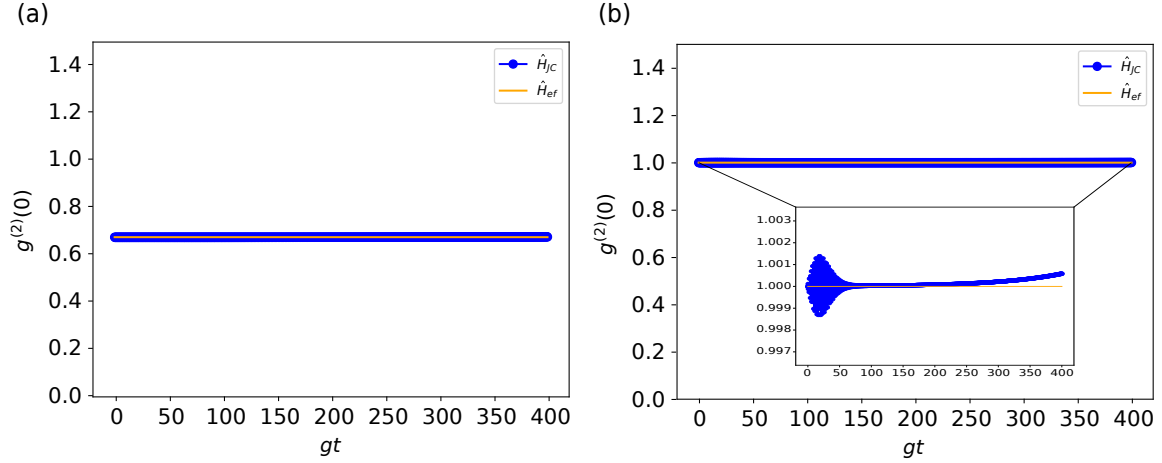


Figura 4.8: Dependência da função de correlação $g^{(2)}(0)$ com o tempo gt para dois casos: (a) $\delta = 100g$, $m = 3$ e $|\alpha|^2 \rightarrow 0$, já em (b) $\delta = 100g$, $m = 0$ e $|\alpha|^2 = 10$. Em azul para o hamiltoniano do MJC (\hat{H}) e em laranja para o hamiltoniano efetivo (\hat{H}_{ef}). Ambos para uma taxa de decaimento da cavidade $\kappa = 0.01g$.

tado tipo gato de Schrödinger com o sistema específico não foi discutido. O estado (4.14) é um ótimo ponto de partida para obtenção de tais estados, uma vez que mostra dois estados coerentes distinguíveis por uma diferença de fase.

Para este fim, é acoplado uma fonte laser externa ao PQ com intuito de controlar as rotações do *qubit*, onde a manipulação coerente do sistema é feita pela aplicação de pulsos [25]. Na representação de interação, o hamiltoniano gerador desta evolução pode ser escrita como

$$\hat{H}_I = \frac{\Omega}{2} [e^{-i(\omega_p - \omega_x)t} \hat{\sigma}_+ + e^{i(\omega_p - \omega_x)t} \hat{\sigma}_-] , \quad (4.28)$$

onde Ω representa a frequência de Rabi que descreve a interação do laser com o *qubit* e ω_p é a frequência do laser pulsado. Com intuito de eliminar a dependência temporal do hamiltoniano, consideraremos $\omega_p = \omega_x$, isto é, uma ressonância entre a fonte externa e o

qubit. Logo, o estado (4.14) evolui da seguinte forma

$$\begin{aligned}
|\psi(t + \tau)\rangle &= \hat{U}(\tau) |\psi(t)\rangle \\
&= e^{-i\frac{\Omega}{2}(\hat{\sigma}_+ + \hat{\sigma}_-)\tau} [\sin \varphi |1\rangle \otimes |\alpha e^{-i\omega t}, m\rangle + \cos \varphi |0\rangle \otimes |\alpha e^{i\omega t}, m\rangle] \\
&= \sin \varphi \left[\cos \left(\frac{\Omega}{2}\tau \right) |1\rangle - i \sin \left(\frac{\Omega}{2}\tau \right) |0\rangle \right] |\alpha e^{-i\omega t}, m\rangle \\
&\quad + \cos \varphi \left[\cos \left(\frac{\Omega}{2}\tau \right) |0\rangle - i \sin \left(\frac{\Omega}{2}\tau \right) |1\rangle \right] |\alpha e^{i\omega t}, m\rangle . \tag{4.29}
\end{aligned}$$

Para um pulso de duração $\tau = \pi/2\Omega$ e fase inicial $\varphi = \pi/4$, obtemos

$$\begin{aligned}
|\psi(t + \pi/2\Omega)\rangle &= \left(\frac{|\alpha e^{-i\omega t}, m\rangle - i |\alpha e^{i\omega t}, m\rangle}{2} \right) |1\rangle + \left(\frac{-i |\alpha e^{-i\omega t}, m\rangle + |\alpha e^{i\omega t}, m\rangle}{2} \right) |0\rangle \\
&= |\alpha(t), m\rangle_1 |1\rangle + |\alpha(t), m\rangle_0 |0\rangle . \tag{4.30}
\end{aligned}$$

As populações de $|0\rangle$ e $|1\rangle$ dependem sob a diferença de fase relativa ωt entre os dois pacotes de onda coerentes, por conta da interferência quântica entre os dois estados coerentes. Podemos medir esta interferência, por exemplo, detectando a probabilidade $P_1(t)$ que o *qubit* encontra-se no estado $|1\rangle$ para um dado instante de tempo t . Na Fig. 4.9 ilustramos o pacote de onda na base posição $|\langle x|\alpha(t), m\rangle_1|^2$ associado com $|1\rangle$ para diferentes instantes de tempo t

$$\begin{aligned}
\langle x|\alpha(t), m\rangle_1 &= \frac{1}{2\sqrt{\sqrt{\pi}x_0}} \frac{1}{N} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \right]^m \left[e^{-i\omega t} e^{\sqrt{2}i\Im(\alpha e^{-i\omega t})\xi - \sqrt{2}\Re(\alpha e^{-i\omega t})\frac{d}{d\xi} - \frac{\xi^2}{2}} \right. \\
&\quad \left. - i e^{\sqrt{2}i\Im(\alpha e^{i\omega t})\xi - \sqrt{2}\Re(\alpha e^{i\omega t})\frac{d}{d\xi} - \frac{\xi^2}{2}} \right] , \tag{4.31}
\end{aligned}$$

onde $\xi = x/x_0$. Além disso, mapeamos o estado $|\alpha(t), m\rangle_1$ no espaço de fase por meio da função de Wigner. Pode-se observar na figura a formação e evolução de dois pacotes de onda bem definidos no espaço posição, e quando olhamos para o espaço de fase, observa-se na função de Wigner para diferentes instantes de tempo regiões em vermelho que evidenciam a negatividade da mesma, indicando assim, o caráter não clássico do estado, isto é, a existência de coerência entre os dois pacotes de onda.

O efeito de m sob o estado do campo no interior da cavidade pode ser observado na Fig. 4.10. Para um número médio de fótons $|\alpha|^2 = 10$ no instante de tempo $t = 0.25\pi/\omega$, ao aumentarmos m observa-se que o estado tipo gato não é destruído. Entretanto, ocorre um aparente achatamento dos pacotes de onda, isto é, a incerteza em uma das quadraturas

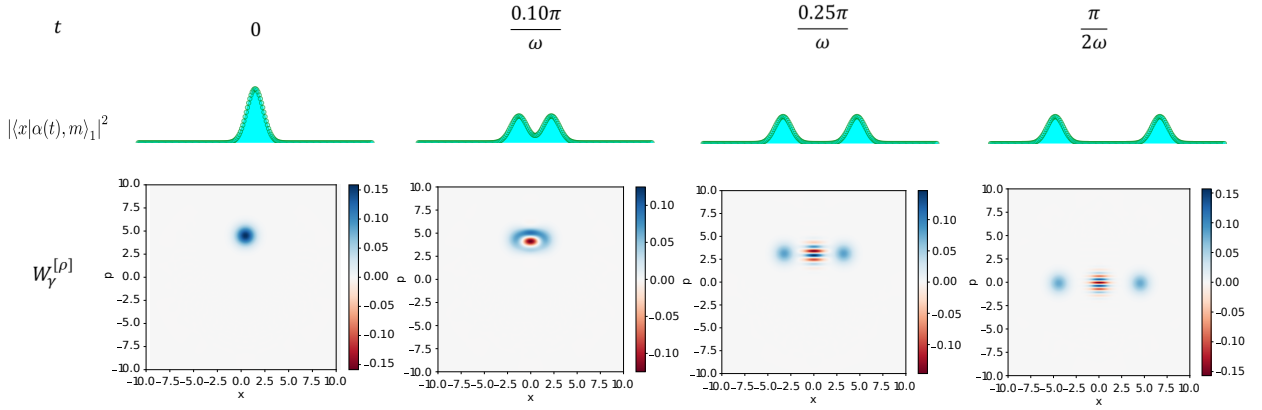


Figura 4.9: Evolução da superposição dos pacotes de onda no espaço posição $|\langle x|\alpha(t), m\rangle_1|^2$ e no espaço de fase $W_{(\gamma)}^{[\rho]}$. Ambos com $|\alpha|^2 = 10$ para diferentes instantes de tempo t .

do campo (pseudos posição e momento) é reduzida enquanto a outra aumenta. Este fato evidencia a transição de uma superposição de dois estados coerentes para uma classe mais geral de estados de incerteza mínima, conhecidos como estados coerentes comprimidos, ou simplesmente, estados comprimidos (do inglês *squeezed state*). Por outro lado, quando $|\alpha|^2 \rightarrow 0$ temos com o aumento de m , como esperado, a criação de um estado de Fock com 1, 2 e 3 excitações, respectivamente, no campo do interior da cavidade.

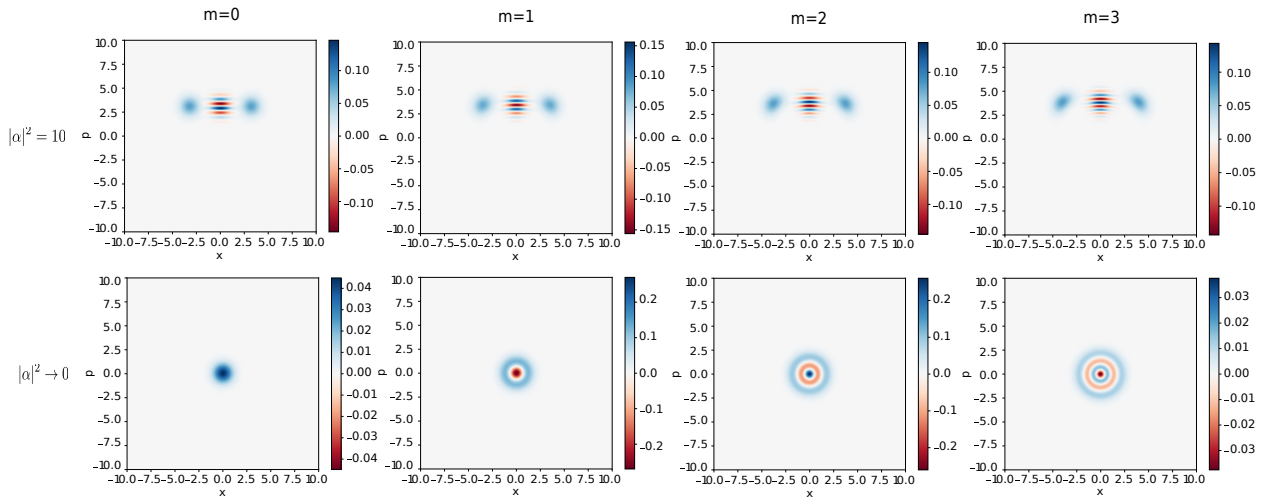


Figura 4.10: Função de Wigner $W_{(\gamma)}^{[\rho]}$ nos instante de tempo $t = 0.25\pi/\omega$, com número médio de fótons $|\alpha|^2 = 10$ e $|\alpha|^2 \rightarrow 0$ para diferentes valores de m .

Conforme vimos no capítulo 2, podemos confirmar a existência do achatamento dos pacotes de onda, formando um estado comprimido, analisando a variância em suas quadraturas. Da eq. (2.18) podemos considerar a quadratura Y_1 do campo, definida por

$$Y_1 = \frac{\hat{a}e^{i\phi} + \hat{a}^\dagger e^{-i\phi}}{2}. \quad (4.32)$$

Os valores esperados dos operadores na base $|\alpha e^{-i\omega t}, m\rangle$ são:

$$\langle \hat{a} \rangle = \frac{1}{N^2} |\alpha| e^{i(\zeta - \omega t)} \mathcal{L}_m^{(1)}(-|\alpha|^2) m!, \quad (4.33)$$

$$\langle \hat{a}^2 \rangle = \frac{1}{N^2} |\alpha| e^{i2(\zeta - \omega t)} \mathcal{L}_m^{(2)}(-|\alpha|^2) m!, \quad (4.34)$$

$$\langle \hat{a}\hat{a}^\dagger \rangle = \frac{1}{N^2} \mathcal{L}_{m+1}(-|\alpha|^2) (m+1)!, \quad (4.35)$$

onde $\mathcal{L}_m^{(k)}(x)$ é o polinômio de Laguerre⁴ que nos permite calcular a variância da quadratura $(\Delta Y_1)^2 = \langle Y_1^2 \rangle - \langle Y_1 \rangle^2$. Na Fig. 4.11 a quantidade $S_Y = 4(\Delta Y_1)^2$ que representa a incerteza na quadratura do campo é calculada em (a) como função do tempo t e da fase $\theta = \phi + \zeta$, em que ζ é a fase associada ao estado coerente $\alpha = |\alpha|e^{i\zeta}$, com número médio de fótons $|\alpha|^2 = 10$ e $m = 3$. Já em (b) S_Y é calculada como função do número médio de fótons $|\alpha|^2$ para diferentes valores de m , isso para um instante de tempo $t = \pi/2\omega$ e fase $\theta = 3\pi/2$. Podemos observar em (a) que o sistema oscila entre valores de máximos e mínimos, tanto com função do tempo, quanto como função da fase. Além disso, em (b) pode-se concluir que, para tais estados, quando $m = 0$, isto é, a formação de um estado coerente a quantidade $S_Y = 1$ evidenciando a formação de um estado de mínima incerteza nas quadraturas, com mesma variância. Entretanto, a medida que m aumenta S_y torna-se menor que 1, comprovando a compressão em uma das quadraturas do campo, ou seja, a existência de estados comprimidos.

Como já discutido, a decoerência desempenha um papel central para a compreensão da transição quântica-clássica. Quando um gato de Schrödinger consistindo em dois estados coerentes separados é acoplado a um reservatório térmico, a superposição decai exponencialmente para uma mistura estatística com uma taxa inicialmente proporcional ao número médio de fótons, ou o quadrado da separação dos estados coerentes no espaço de fase [125, 126, 127].

⁴Definido por $L_m^{(k)}(x) = \sum_{n=0}^m \frac{(-1)^n x^n (m+k)!}{(m-n)! n! (k+n)!}$.

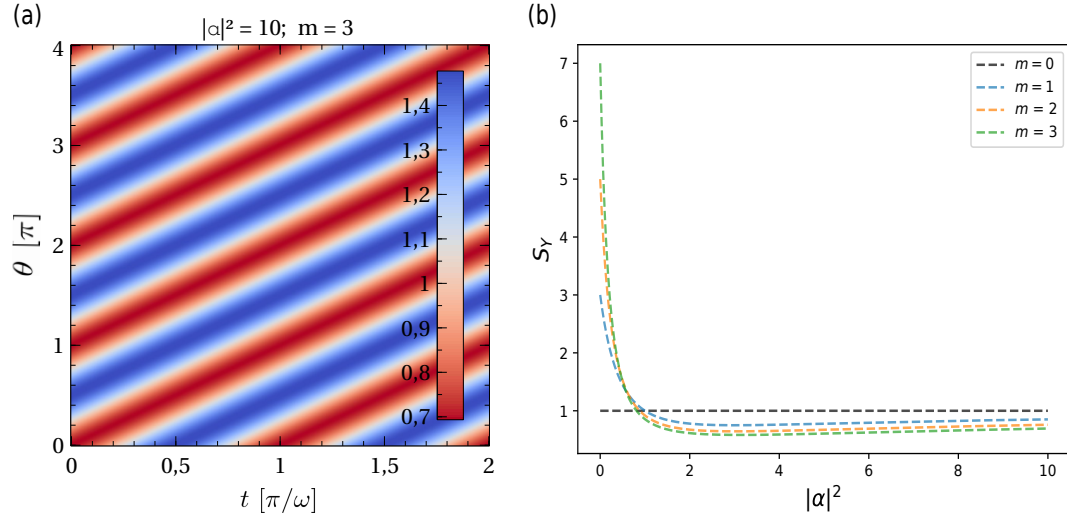


Figura 4.11: Incerteza na quadratura do campo S_Y em (a) como função do tempo t e da fase $\theta = \phi + \zeta$. Em (b) como função do número médio de fótons $|\alpha|^2$ para diferentes valores de m .

Levando em consideração as perdas da cavidade por meio da equação mestra (4.22), calculamos a função de Wigner para o sistema acoplado a um reservatório térmico. Na Fig. 4.12 observamos a evolução dos pacotes de onda no espaço de fase com $|\alpha|^2 = 10$, acoplado a um reservatório térmico modelado por uma taxa de decaimento $\kappa = 0.01g$. Em contraste com a evolução unitária da Fig. 4.9, pode-se observar até o instante de tempo $t = 0.25\pi/\omega$, a criação de estado tipo gato de Schrödinger com regiões em vermelho entre os dois pacotes de onda evidenciando os efeitos quânticos de interferência. Entretanto, para o instante de tempo $t = 0.5\pi/\omega$, no sistema aberto (acoplado ao reservatório térmico), o estado tipo gato perde sua coerência tendendo a uma mistura estatística.

Na Fig. 4.13 é observado o comportamento da função de Wigner para os instantes de tempo $t = 0.25\pi/\omega$ e $t = 0.5\pi/\omega$. Em contraste com o caso unitário da Fig. 4.10, podemos observar que o estado de Fock, criado em (b) e (d) no limite $|\alpha|^2 \rightarrow 0$ e $m = 3$, mostra-se mais robusto contra decoerência em comparação ao estado de incerteza mínima (coerente ou comprimido). Note também, que as perdas atuam sobre o estado comprimido não só destruindo a coerência, mas também provocando uma aparente diminuição da compressão sobre os pacotes de onda.

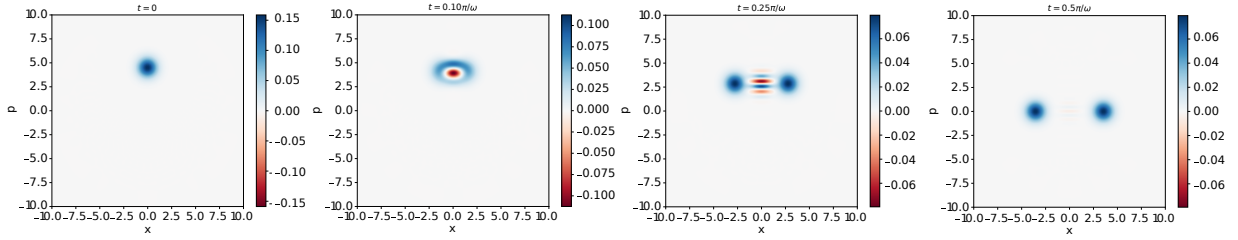


Figura 4.12: Função de Wigner $W_{(\gamma)}^{[\rho]}$ em diferentes instantes de tempo t , com número médio de fótons $|\alpha|^2 = 10$, $m = 0$ e taxa de decaimento $\kappa = 0.01g$.

Nós vimos até aqui, que o processo de decoerência provocado pela inevitável interação do sistema com o meio que o cerca afeta drasticamente a dinâmica do sistema. Mas podemos nos perguntar, a teoria da decoerência é suficiente para explicar como o mundo quântico se torna no tão diferente mundo clássico?

4.5 Reservatório finito

Zurek, pesquisador do Laboratório Nacional de Los Alamos, no Novo México, argumenta que, para explicar o surgimento da realidade clássica e objetiva, não é suficiente dizer que a decoerência leva o comportamento quântico e, portanto, o faz parecer clássico para um observador [128, 129]. De alguma forma, vários observadores devem concordar sobre as propriedades dos sistemas quânticos. Portanto, duas coisas devem ser verdade: Primeiro, os sistemas quânticos devem ter estados que são especialmente robustos em face da decoerência dissipativa do ambiente. Zurek chama esses “estados ponteiro”, porque eles podem ser codificados nos estados possíveis de um ponteiro no mostrador de um instrumento de medição. Além disso, há uma segunda condição que uma propriedade quântica deve atender para ser observada. Embora a imunidade à interação com o ambiente assegure a estabilidade de um estado ponteiro, ainda temos que obter as informações sobre ele de alguma forma. Podemos fazer isso apenas se ficar impresso no ambiente do objeto. Muitas réplicas são necessárias para que muitos observadores concordem sobre um valor medido, uma característica da classicidade. Dez observadores podem medir a posição de um grão de poeira e descobrir que ele está no mesmo local, pois cada um pode acessar uma réplica distinta da informação [118].

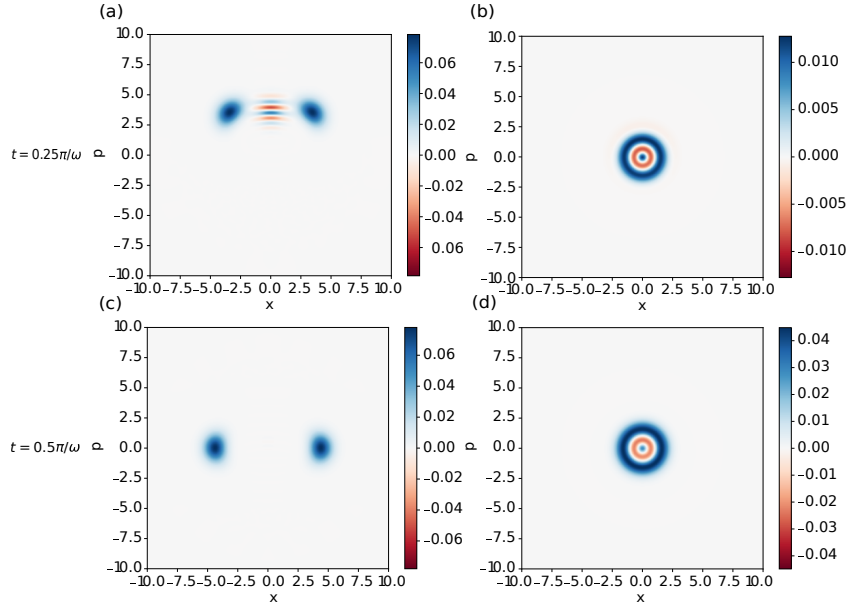


Figura 4.13: Função de Wigner $W_{(\gamma)}^{[\rho]}$ para os instantes de tempo $t = 0.25\pi/\omega$ e $t = 0.5\pi/\omega$, em (a) e (c) com $|\alpha|^2 = 10$ e $m = 3$. Já em (b) e (d) $|\alpha|^2 \rightarrow 0$ e $m = 3$. É assumido uma taxa de decaimento $\kappa = 0.01g$.

Nesta visão, você não precisa monitorar muito do ambiente para reunir a maior parte das informações disponíveis e não ganha muito mais monitorando mais do que uma fração do ambiente.

Para Zurek, uma das ideias mais notáveis neste quadro teórico é que as propriedades definidas de objetos que associamos com a física clássica são selecionadas a partir de um menu de possibilidades quânticas em um processo vagamente análogo à seleção natural na evolução: propriedades que sobrevivem são, em certo sentido, as “mais adequadas”. Como na seleção natural, os sobreviventes são aqueles que fazem mais cópias de si mesmos. Isso significa que muitos observadores independentes podem fazer medições de um sistema quântico e concordar sobre o resultado, uma marca registrada do comportamento clássico. Essa ideia é chamada de Darwinismo Quântico (DQ) [118, 130]. Enquanto parte da comunidade de especialistas defendem que a decoerência e o DQ fornecem uma descrição completa da transição entre o mundo clássico e o quântico, outra parte acredita que a última é mais uma interpretação filosófica da Mecânica Quântica [131, 132].

Aqui, analisaremos detalhadamente a conexão entre o DQ com o surgimento e morte de

superposições mesoscópicas de estados tipo gato de Schrödinger. A teoria da decoerência tem como foco o sistema A , com o objetivo de determinar quais estados sobrevivem ao vazamento de informações para o ambiente R . Entretanto, podemos indagar: quais informações sobre sistema A podem ser encontradas nos fragmentos do reservatório R ? Durante o processo de decoerência, a questão de como as informações sobre os estados ponteiro são comunicadas ao observador externo geralmente é esquecida, desprezando e ignorando a função ativa de R . Portanto, R pode ser visto não apenas como um sumidouro de informações perdidas, mas também como uma testemunha da qual as informações sobre A podem ser obtidas. Partindo deste pressuposto, reavemos o problema da interação do estado excitônico de um PQ com um modo de uma nanocavidade que sofre dissipação de energia. A interação entre PQ-nanocavidade é descrita pelo Hamiltoniano efetivo (4.10) que modela a interação Jaymes-Cummings na aproximação dispersiva. Nesta releitura do sistema, o modo da cavidade que sofre dissipação é representado por um oscilador harmônico linearmente acoplado a N outros osciladores [133, 134]. O Hamiltoniano total do sistema na RWA, pode ser expressa como

$$H_t = \omega_x |1\rangle \langle 1| + \omega_c \hat{a}^\dagger \hat{a} + \omega \hat{a}^\dagger \hat{a} \sigma_z + \sum_k \omega_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \sum_k \gamma_k (\hat{a}^\dagger \hat{b}_k + \hat{a} \hat{b}_k^\dagger) , \quad (4.36)$$

sendo \hat{b}_k o operador bosônico referente ao k -ésimo oscilador do banho com respectiva frequência ω_k . Já γ_k corresponde a constante de acoplamento entre o modo da nanocavidade e o k -ésimo oscilador do banho. Note que os osciladores do banho são independentes, embora possam ter uma interação efetiva mediada pela nanocavidade.

Para um estado inicial

$$|\psi(0)\rangle = (\sin \varphi |1\rangle + \cos \varphi |0\rangle) \otimes |\alpha\rangle \otimes \prod_k |0_k\rangle , \quad (4.37)$$

onde o estado inicial do campo no interior da cavidade é $|\alpha\rangle$ e cada oscilador do banho está no estado de vácuo $|0_k\rangle$. Considerando o hamiltoniano (4.36), o estado inicial evolui para [133]

$$|\psi(t)\rangle = \sin \varphi |1\rangle \otimes |\alpha(t)\rangle \otimes |\lambda(t)\rangle + \cos \varphi |0\rangle \otimes |\beta(t)\rangle \otimes |\chi(t)\rangle , \quad (4.38)$$

onde $|\lambda(t)\rangle = \prod_k |\lambda_k(t)\rangle$ e $|\chi(t)\rangle = \prod_k |\chi_k(t)\rangle$, sendo $\alpha(t)$ ($\beta(t)$) e $\lambda(t)$ ($\chi(t)$) os estados coerentes do modo da nanocavidade e do banho, respectivamente.

A dinâmica das amplitudes dos estados coerentes são dadas pela equação de Schrödinger

$$H |\psi(t)\rangle = i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle . \quad (4.39)$$

Por simplicidade, pegando somente o primeiro termo da soma (4.38). Logo

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_1 = \frac{d}{dt} (\sin \varphi |1\rangle \otimes |\alpha(t)\rangle \otimes |\lambda(t)\rangle) . \quad (4.40)$$

Tendo em mente que a derivada temporal de um estado coerente genérico $|\xi\rangle$ é

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} |\xi(t)\rangle &= \frac{d}{dt} \left(e^{-|\xi(t)|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi(t)^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \right) \\ &= -\frac{1}{2} \left(\frac{d}{dt} |\xi(t)|^2 \right) |\xi(t)\rangle + \dot{\xi}(t) \hat{a}^\dagger |\xi(t)\rangle , \end{aligned} \quad (4.41)$$

podemos reescrever (4.40) da seguinte forma

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_1 = \left[-\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left(|\alpha(t)|^2 + \sum_k |\lambda_k(t)|^2 \right) + \dot{\alpha}(t) \hat{a}^\dagger + \sum_k \dot{\lambda}_k(t) \hat{b}_k^\dagger \right] |\psi(t)\rangle_1 , \quad (4.42)$$

onde o número de excitações do sistema completo, incluído o reservatório, dado por $|\alpha(t)|^2 + \sum_k |\lambda_k(t)|^2 = \text{constante}$. Assim,

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_1 = \left[\dot{\alpha}(t) \hat{a}^\dagger + \sum_k \dot{\lambda}_k(t) \hat{b}_k^\dagger \right] |\psi(t)\rangle_1 . \quad (4.43)$$

Por outro lado

$$H_t |\psi(t)\rangle_1 = \left\{ \omega_x + \left[(\omega_c + \omega) \alpha(t) + \sum_k \gamma_k \lambda_k(t) \right] \hat{a}^\dagger + \sum_k \left(\omega_k \lambda_k(t) + \gamma_k \alpha(t) \right) \hat{b}_k^\dagger \right\} |\psi(t)\rangle_1 . \quad (4.44)$$

Portanto, substituindo (4.43) e (4.44) na equação de Schrödinger, obtemos o conjunto de vetores linearmente independentes $\{\hat{a}^\dagger |\psi(t)\rangle_1, \hat{b}_k^\dagger |\psi(t)\rangle_1\}$ que fornecem o sistema de equações diferenciais

$$i \dot{\alpha}(t) = (\omega_c + \omega) \alpha(t) + \sum_k \gamma_k \lambda_k(t) , \quad (4.45)$$

$$i \dot{\lambda}_k(t) = \omega_k \lambda_k(t) + \gamma_k \alpha(t) . \quad (4.46)$$

Similarmente, para o segundo termo da soma (4.38), obtemos seguinte sistema de equações diferenciais

$$i \dot{\beta}(t) = (\omega_c - \omega) \beta(t) + \sum_k \gamma_k \chi_k(t) , \quad (4.47)$$

$$i \dot{\chi}_k(t) = \omega_k \chi_k(t) + \gamma_k \beta(t) . \quad (4.48)$$

A solução das equações (4.45)-(4.48) nos dão as amplitudes dos estados do sistema e reservatório em um dado instante de tempo. Como discutido na seção anterior, o estado evoluído (4.38) é um ótimo ponto de partida para obtenção de estados tipo gato de Schrödinger (superposições mesoscópicas). Tendo isso em mente, acoplamos novamente uma fonte laser externa ao PQ (4.28), com intuito de controlar as rotações do *qubit*. Para um pulso de duração $\tau = \pi/2\Omega$, temos

$$|\psi(t + \pi/2\Omega)\rangle = \left(\frac{\sin(\varphi) |\alpha(t)\rangle \otimes |\lambda(t)\rangle - i \cos(\varphi) |\beta(t)\rangle \otimes |\chi(t)\rangle}{\sqrt{2}} \right) |1\rangle + \left(\frac{-i \sin(\varphi) |\alpha(t)\rangle \otimes |\lambda(t)\rangle + \cos(\varphi) |\beta(t)\rangle \otimes |\chi(t)\rangle}{\sqrt{2}} \right) |0\rangle . \quad (4.49)$$

Assim como discutido na seção anterior, após a aplicação do pulso os estados do sistema de dois níveis $|1\rangle$ e $|0\rangle$ encontram-se acoplados a diferentes estados de superposições mesoscópicas envolvendo o campo da nanocavidade e o reservatório. Desta vez, vamos concentrar nossa atenção aos dois: o sistema de interesse e o reservatório, procurando identificar quais informações o mesmo carrega sobre a dinâmica do sistema.

Conforme proposto inicialmente por Blume-Kohout e Zurek [135], ao nos concentrarmos em uma região particular de interesse dentro do reservatório, que denominaremos de fragmento F . Dado que o sistema interage com os graus de liberdade de F , a Informação Mútua Quântica (IMQ), $I_{A:F}$, como definida em (2.25) pode ser usada para averiguar o que é conhecido sobre o sistema pelo fragmento do ambiente. Ao calcularmos as entropias de von-Neumann $H(A)$, $H(F)$ e $H(AF)$ do sistema A , do fragmento F e do conjunto $A+F$, respectivamente, pode obter-se $I_{A:F}$. Note que $I_{A:F} = 0$, se e somente se, $\hat{\rho}_{AF} = \hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_F$, isto é, os subsistemas estejam descorrelacionados. Já quando $\hat{\rho}_{AF}$ é um estado puro, $I_{A:F} = 2H(A)$, desde que $H(F) = H(A)$ e $H(AF) = 0$. Para identificar correlações redundantes, examinamos as informações parciais fornecidas sobre todos os fragmentos F aleatórios que contém uma fração de tamanho f de R , tal que $F = fN$, onde $0 \leq f \leq 1$ é a fração do ambiente que é tomada. Portanto, a informação mútua média sobre todo fragmento F de tamanho f pode ser escrita como [136]

$$\bar{I}(f) = \langle I_{A:F} \rangle_F = \text{avg}_{\text{todo } F \text{ de tamanho } f} (I_{A:F}) . \quad (4.50)$$

Caso o *qubit* se encontre no estado $|1\rangle$ com fase inicial $\varphi = \pi/4$, o estado evoluído do

campo e o reservatório estará no estado de superposição escrito como

$$|\psi(t)\rangle_1 = \frac{|\alpha(t)\rangle \otimes |\lambda(t)\rangle - i |\beta(t)\rangle \otimes |\chi(t)\rangle}{2}. \quad (4.51)$$

Logo, o operador densidade do sistema combinado campo e reservatório é

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_1(t) &= \frac{1}{4} \left\{ |\alpha(t)\rangle \langle \alpha(t)| \otimes |\lambda(t)\rangle \langle \lambda(t)| + |\beta(t)\rangle \langle \beta(t)| \otimes |\chi(t)\rangle \langle \chi(t)| \right. \\ &\quad \left. + [i |\alpha(t)\rangle \langle \beta(t)| \otimes |\lambda(t)\rangle \langle \chi(t)| + \text{c.h.}] \right\}. \end{aligned} \quad (4.52)$$

Agora é possível determinar o operador densidade reduzido pertencente a cada subsistema, para o campo no interior da cavidade é

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_c(t) &= \text{tr}_R[\hat{\rho}_1(t)] \\ &= \frac{1}{4} \left\{ |\alpha(t)\rangle \langle \alpha(t)| + |\beta(t)\rangle \langle \beta(t)| + [i \langle \chi(t)| \lambda(t)\rangle |\alpha(t)\rangle \langle \beta(t)| + \text{c.h.}] \right\}. \end{aligned} \quad (4.53)$$

Por outro lado, para um fragmento F do reservatório R , temos

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_F(t) &= \text{tr}_{c,R-F}[\hat{\rho}_1(t)] \\ &= \frac{1}{4} \left\{ |\lambda(t)\rangle_F \langle \lambda(t)| + |\chi(t)\rangle_F \langle \chi(t)| \right. \\ &\quad \left. + [i \langle \beta(t)| \alpha(t)\rangle_{R-F} \langle \chi(t)| \lambda(t)\rangle_{R-F} |\lambda(t)\rangle_F \langle \chi(t)| + \text{c.h.}] \right\}. \end{aligned} \quad (4.54)$$

Por fim, o operador densidade do sistema combinado cavidade e fragmento é dado por

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{cF}(t) &= \text{tr}_{R-F}[\hat{\rho}_1(t)] \\ &= \frac{1}{4} \left\{ |\alpha(t)\rangle \langle \alpha(t)| \otimes |\lambda(t)\rangle_F \langle \lambda(t)| + |\beta(t)\rangle \langle \beta(t)| \otimes |\chi(t)\rangle_F \langle \chi(t)| \right. \\ &\quad \left. + [i \langle \chi(t)| \lambda(t)\rangle_{R-F} |\alpha(t)\rangle \langle \beta(t)| \otimes |\lambda(t)\rangle_F \langle \chi(t)| + \text{c.h.}] \right\}. \end{aligned}$$

⁵ Sabemos que os estados coerentes formam um conjunto de estados supercompletos, que não obedecem a relação de ortogonalidade, o que dificulta o cálculo da informação mútua quântica (4.50). Entretanto, como a operação traço independe da base que é feita, podemos ortonormalizar o estado coerente transformando-o em uma base de dois *qubit* (veja apêndice C). Na Fig. 4.14 são ilustrados os gráficos da formação e morte de um estado tipo gato de

⁵Lembrando que, $|\lambda(t)\rangle = \prod_k |\lambda_k(t)\rangle$ e $|\chi(t)\rangle = \prod_k |\chi_k(t)\rangle$ o produto escalar $\langle \lambda(t)| \chi(t)\rangle = \prod_k \langle \lambda_k(t)| \chi_k(t)\rangle = \prod_k e^{-\frac{1}{2}(|\lambda_k|^2 + |\chi_k|^2) + \chi_k \lambda_k^*} = e^{\sum_k \{-\frac{1}{2}(|\lambda_k|^2 + |\chi_k|^2) + \chi_k \lambda_k^*\}}$.

Schrödinger no espaço de fase, comparado à Informação Mútua Parcial (IMP) normalizada, que quantifica a redundância de informação do sistema presente no ambiente. A função de Wigner do estado inicial da nanocavidade, Fig. 4.14(a), apresenta as características de um pacote gaussiano de incerteza mínima associado a um estado coerente. Após evolução, o sistema apresenta correlações quânticas, o que fica em evidência pela aparição de parte negativa na função de Wigner, como fica evidente nas Figs. 4.14(b) e 4.14(c) para tempos correspondentes à $t = 0.05\pi/\omega$ e $t = 0.25\pi/\omega$, respectivamente. Nestes mesmos instantes de tempo, se olharmos para as Figs. 4.14(f)-(h) observaremos o comportamento da IMP. Em 4.14(c) e 4.14(d) observamos a criação e desaparecimento de uma superposição coerente de dois estados mesoscópicos, isto é, vida e morte de um estado tipo gato de Schrödinger, respectivamente. A IMP nestes instantes mostram que, conforme o sistema perde coerência, um platô em torno de $\bar{I}(f)/2H(A) = 0.5$ se torna mais evidente. Tal comportamento nos indica que diferentes tamanhos de fragmentos têm acesso a mesma quantidade de informação a respeito do sistema, de modo que não é necessário monitorar muito do ambiente para reunir a maior parte das informações do sistema. Todavia, tais informações se tornam algo de difícil acesso, uma vez que se trata de um sistema grande e complexo. A existência deste platô é a assinatura do Darwinismo Quântico discutido aqui. Para simular nossos resultados utilizamos um número de osciladores $N = 900$, com frequências ω_k variando de 0 a 10 e constante de acoplamento $\gamma_k = \omega/8$. O número médio de fótons iniciais são $|\alpha|^2 = \beta|^2 = 10$ e para cada simulação tomamos a média sobre 100 realizações.

Em princípio, um número irrestrito de observadores pode descobrir o estado do sistema por meio de F . A redundância de tais informações em si, isto é, aproximadamente quantas cópias são impressas em diferentes fragmentos do ambiente, pode então ser tratada como uma medida de classicalidade. Deste modo, o ambiente pode ser visto como uma testemunha da dinâmica do sistema, onde grandes redundâncias, tipicamente definidas como $R_\delta = 1/f_\delta$ sendo f_δ o tamanho da fração que já fornece quase todas as informações clássicas do sistema, mostram que o estado do mesmo pode ser encontrado independentemente por muitos observadores (sondando, por exemplo, frações independentes de tamanhos diferentes), que concordam com o resultado, medindo partes do ambiente sem perturbar o sistema. Um ponto importante é também o fato de que um observador não precisa coletar informações sobre um

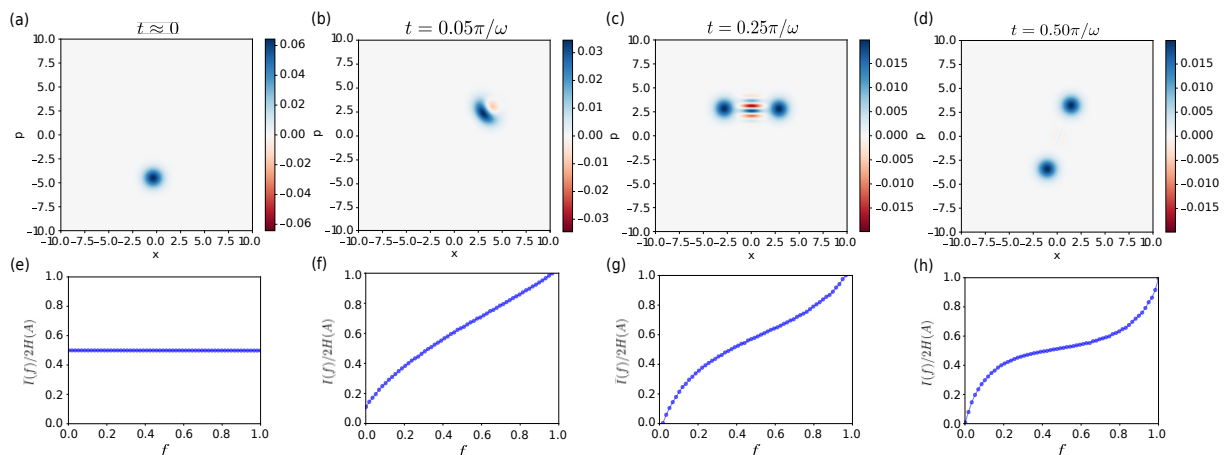


Figura 4.14: Comparativo entre o comportamento da função de Wigner, $W_{(\gamma)}^{[\rho]}$, com a informação mútua média normalizada, $\bar{I}(f)/2H(A)$, para diferentes instantes de tempo t , com número médio de fótons $|\alpha|^2 = 10$.

enorme conjunto de graus de liberdade ambientais, impossíveis em termos práticos, para ter uma ideia do estado do sistema.

4.6 Reservatório estruturado

Como vimos até aqui, ao longo das últimas décadas, os pesquisadores alcançaram uma compreensão maior de como a mecânica quântica inevitavelmente se torna a mecânica clássica por meio de uma interação entre uma partícula com seu meio circundante. Este meio no qual as partículas se encontram imersas, exatamente por ser muito complexo, a priori, absorve todas características quânticas e as dissipa de modo que não podem mais ser recuperadas. Todavia, autores durante os últimos anos vem mostrando que nem sempre a informação quântica que chega ao ambiente é perdida para sempre. Ou, ao menos, não imediatamente. A exemplo disto, um grupo da Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ realizou um experimento com partículas de luz, mostrando que, sob condições especiais, parte da informação é retida e talvez possa até ser recuperada [137]. Em concordância com este resultado, Fanchini e colaboradores em [138] estabelecem uma medida entropica como testemunha da relação entre o comportamento não-markoviano com o fluxo de informações entre o sistema e o ambiente. Para este cenário é adotado um sistema de dois níveis em processo de

relaxamento, por meio de uma implementação experimental utilizando uma abordagem ótica que permite acesso total ao estado do meio ambiente.

Para uma melhor compreensão da interação entre o sistema e o meio que o cerca, podemos fazer uma engenharia no ambiente em ordem para descrever, controlar e possivelmente minimizar os seus efeitos danosos sobre o sistema. Para tal fim, reavemos o caso discutido na seção anterior: a interação do estado excitônico de um PQ com um modo de uma nanocavidade que sofre dissipação de energia descrito pelo Hamiltoniano (4.36). Para o estado inicial (4.37) as equações que descrevem a dinâmica das amplitudes dos estados coerentes são:

$$i\dot{\alpha}(t) = (\omega_c + \omega)\alpha(t) + \sum_k \gamma_k \lambda_k(t) \quad (4.55)$$

$$i\dot{\lambda}_k(t) = \omega_k \lambda_k(t) + \gamma_k \alpha(t) . \quad (4.56)$$

Fazendo a substituição $\tilde{\alpha}(t) = \alpha(t)e^{i\Delta\omega t}$ e $\tilde{\lambda}_k(t) = \lambda_k(t)e^{i\omega_k t}$, onde $\Delta\omega = \omega_c + \omega$, temos que

$$i\dot{\tilde{\alpha}}(t) = \sum_k \gamma_k \tilde{\lambda}_k(t) e^{i(\Delta\omega - \omega_k)t} \quad (4.57)$$

$$i\dot{\tilde{\lambda}}_k(t) = \gamma_k \tilde{\alpha}(t) e^{-i(\Delta\omega - \omega_k)t} . \quad (4.58)$$

Integrando (4.58) e substituindo em (4.57), obtemos

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\alpha}}(t) &= - \sum_k \gamma_k^2 \int_0^t \tilde{\alpha}(t') e^{i(\Delta\omega - \omega_k)(t-t')} dt' \\ &= - \int_0^t dt' f(t-t') \tilde{\alpha}(t') , \end{aligned} \quad (4.59)$$

onde definimos a memória de Kernel

$$f(t-t') = \sum_k \gamma_k^2 e^{i(\Delta\omega - \omega_k)(t-t')} . \quad (4.60)$$

O caráter não-markoviano do problema fica evidente na integral não-local no tempo da equação (4.59). Caso o número de osciladores tenda ao infinito e seja assumido uma densidade espectral constante, a memória de Kernel é aproximadamente

$$f(t-t') \approx 2\kappa \delta(t-t') , \quad (4.61)$$

onde κ é uma constante. Neste caso

$$\dot{\tilde{\alpha}}(t) = - \int_0^t dt' 2\kappa \delta(t-t') \tilde{\alpha}(t') = -2\kappa \tilde{\alpha}(t) , \quad (4.62)$$

equação que tem como solução

$$\tilde{\alpha}(t) = \tilde{\alpha}(0) e^{-\kappa t} . \quad (4.63)$$

Esta é a bem conhecida solução da evolução no tempo de equação mestra na aproximação de Markov, do modo de uma cavidade que encontra-se inicialmente em um dado estado coerente $\tilde{\alpha}(0)$, como discutido com mais detalhes na seção 4.3. Em termos de limites contínuos da frequência do ambiente, a função de correlação, isto é, a memória de Kernel torna-se

$$f(t-t') = \int_0^\infty J(\omega_k) e^{i(\Delta\omega - \omega_k)(t-t')} d\omega_k , \quad (4.64)$$

Aqui, $J(\omega_k)$ representa a densidade espectral de modos do reservatório. Assumimos uma densidade espectral Lorentziana, que é típica de uma cavidade estruturada [26], cuja a forma é

$$J(\omega_k) = \frac{1}{2\pi} \frac{\gamma \Lambda^2}{(\omega_c - \omega_k)^2 + \Lambda^2} , \quad (4.65)$$

onde parâmetro γ está relacionado à constante de acoplamento sistema-reservatório microscópico, enquanto Λ define a largura espectral dos modos de cavidade. Vale ressaltar que os parâmetros γ e Λ estão relacionados, respectivamente, ao tempo de correlação do reservatório τ_r e ao tempo de relaxação do sistema τ_q , com $\tau_r = \Lambda^{-1}$ e $\tau_q \approx \gamma^{-1}$ [26]. O limite de acoplamento fraco do qubit-cavidade ocorre para $\Lambda > \gamma$ ($\tau_r < \tau_q$). Já o inverso corresponde ao limite de acoplamento forte $\Lambda < \gamma$ ($\tau_r > \tau_q$). Quanto maior o fator de qualidade da cavidade, menor a largura espectral Λ e, conseqüentemente, a taxa de decaimento de fótons. Com essa densidade espectral e aplicando o teorema do resíduo [139], a integral da memória de Kernel da Eq. (4.64) pode ser resolvida, obtendo-se

$$f(t-t') = \frac{\gamma \Lambda}{2} e^{-(\Lambda - i\omega)(t-t')} . \quad (4.66)$$

Substituindo o resultado na equação (4.59) e resolvendo usando a transformada de Laplace, obtemos

$$\tilde{\alpha}(t) = \tilde{\alpha}(0) \left[\cosh(\eta t/2) + \frac{M \sinh(\eta t/2)}{\eta} \right] e^{-\frac{1}{2} M t} , \quad (4.67)$$

onde $M = \Lambda - i\omega$ e $\eta = \sqrt{-2\Lambda\gamma + M^2}$. Assim, substituindo (4.67) em (4.58) e integrando, encontra-se a amplitude do estado pertencente ao reservatório

$$\tilde{\lambda}_k(t) = \frac{i\gamma_k\tilde{\alpha}(0)}{-\eta^3 + 4\eta x^2} \left\{ 2\eta[\cosh(xt) + \sinh(xt)](M - 2x) \cosh(\eta t/2) - 4(Mx - \eta^2/2)[\cosh(xt) + \sinh(xt)] \sinh(\eta t/2) - 2\eta(M - 2x) \right\}, \quad (4.68)$$

sendo $x = -(M/2 + i(\Delta\omega - \omega_k))$. Deste modo, fazendo as transformações inversas $\alpha(t) = \tilde{\alpha}(t)e^{-i\Delta\omega t}$ e $\lambda_k(t) = \tilde{\lambda}_k(t)e^{-i\omega_k t}$, obtemos a forma exata do estado evoluído (4.38), $|\psi(t)\rangle$.

Na Fig. 4.15 apresentamos em (a) o comportamento do número médio de fótons $\langle \hat{n}(t) \rangle$ dentro da cavidade e em (b) o defeito de idempotência $S(t)$ do mesmo, ambos como função do tempo, para um números médios de fótons $|\alpha|^2 = |\beta|^2 = 10$. Dois limites são comparados com o caso markoviano (representado com a linha laranja nas figuras): o limite de acoplamento forte considerando $\Lambda = 0.01\gamma$, linha azul tracejada em ambos painéis, e o limite de acoplamento fraco com $\Lambda = 3\gamma$, linha verde contínua. Da análise das figuras, verificamos que no regime de acoplamento forte tanto o número médio de fótons e o defeito de idempotência apresentam oscilações. As oscilações no número de fótons estão relacionadas às trocas de excitações entre o sistema e o reservatório. No caso do acoplamento fraco, uma vez que o tempo de correlação do reservatório é desprezível comparado ao tempo de relaxação do sistema, o número médio de fótons vai rapidamente para zero.

Como já conceituado, um tipo especial de correlação quântica presente no sistema é o emaranhamento, que possui duas faces: o seu lado notável, que se apresenta como um grande recurso para o desenvolvimento das tecnologias quânticas, mas possui também o seu lado vilão, motivado pelo processo de decoerência. Portanto, neste ponto se torna interessante quantificar o emaranhamento e assim calculamos a concorrência $C(\rho)$, para explorar o grau de emaranhamento do estado de superposição mesoscópica de dois pacotes de onda coerentes (4.49). Para tanto, realizamos a ortonormalização da base de estados coerentes, transformando-o em uma base de dois *qubit* (como descrito no apêndice C), nesta nova base o cálculo da concorrência pode ser realizado sem grandes problemas, seguindo os procedimentos citados no capítulo 2 em (2.26). Apresentamos nossos resultados na Fig. 4.16 para o limite de acoplamento forte $\Lambda = 0.01\gamma$, onde o painel (a) mostra a comportamento da concorrência como função do tempo para diferentes valores da fase φ considerando um número médio ini-

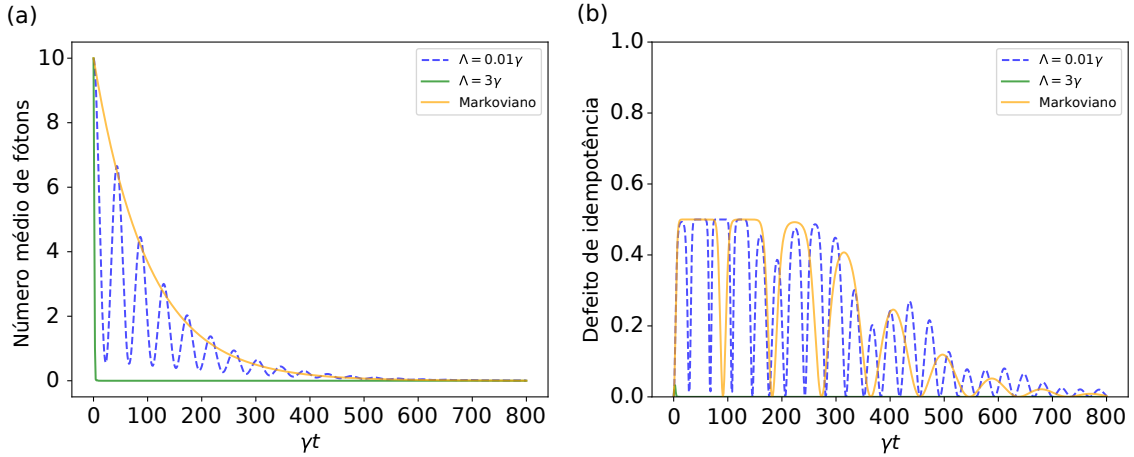


Figura 4.15: (a) número médio de fótons $\langle \hat{n}(t) \rangle$ e (b) defeito de idempotência $S(t)$, como função do tempo γt . Para números médios de fótons $|\alpha|^2 = |\beta|^2 = 10$. São tomados para análise os limites: $\Lambda = 0.01\gamma$ em linha azul tracejada, equivalente ao limite de acoplamento forte e $\Lambda = 3\gamma$ em linha verde contínua, modelando o limite de acoplamento fraco. Para fins de comparação em linha laranja é apresentado o limite de Markov.

cial de fótons fixo $|\alpha|^2 = |\beta|^2 = 10$. Já em (b) é estudado o comportamento da concorrência para diferentes números médios de fótons $|\alpha|^2 = |\beta|^2$, onde fica evidente que a capacidade do sistema em apresentar correlações do tipo emaranhamento, está diretamente relacionado com o tamanho do mesmo, onde quanto maior ele for, mais facilmente se emaranha com seu ambiente. Em contrapartida, quanto mais emaranhado o sistema estiver com seu ambiente, mais rápido ele perder coerência.

Tal como foi discutido, quando o sistema encontra-se no limite de acoplamento forte a escala de tempo do sistema é comparável à do reservatório, de modo que o reservatório não é suficientemente rápido para voltar ao equilíbrio e alguns efeitos de memória se acumulam. Tais efeitos possuem um caráter não-markoviano e são levados em conta pela integral não-local no tempo de kernel (4.60). A abordagem comumente utilizada para quantificação da não-markovianidade quântica baseia-se na ideia de que os efeitos de memória na dinâmica dos sistemas abertos estão ligados à troca de informações entre o sistema aberto e seu ambiente. De tal maneira, a não-markovianidade quântica está associada a uma noção de memória quântica, ou seja, informações que foram transferidas para o ambiente, oriundas de correlações

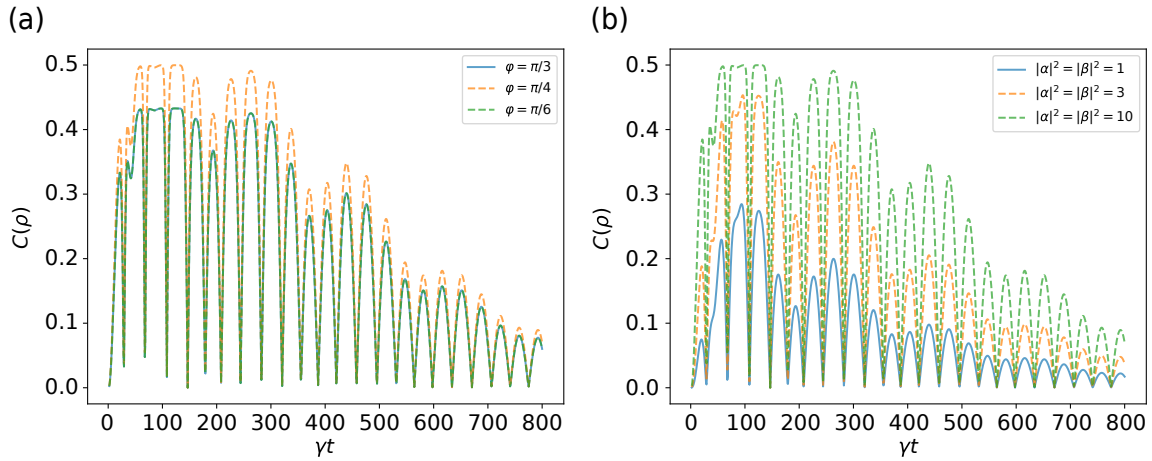


Figura 4.16: Dinâmica da concorrência $C(\rho)$ do estado de superposição mesoscópica (4.49), no limite de acoplamento forte $\Lambda = 0.01\gamma$. Em (a) para diferentes pesos entre os pacotes de onda, discriminado pela fase inicial φ , com número médio de fótons inicial $|\alpha|^2 = |\beta|^2 = 10$. Em contrapartida, no gráfico (b) observamos o comportamento da concorrência para diferentes números médios de fótons iniciais $|\alpha|^2 = |\beta|^2$, com fase inicial $\varphi = \pi/4$.

sistema-ambiente ou mudanças nos estados ambientais, e posteriormente são recuperadas pelo sistema. Baseado neste conceito, podemos introduzir uma bem estabelecida medida para o grau de efeitos de memória [140, 141]

$$\mathcal{N} = \max_{\rho_S^{1,2}} \int_{\sigma>0} dt \sigma(t) , \quad (4.69)$$

onde

$$\sigma(t) \equiv \frac{d}{dt} D[\rho^1(t), \rho^2(t)] \quad (4.70)$$

denota a derivada no tempo da distância traço⁶ do par de estados evoluídos, que pode ser interpretada como caracterizando um fluxo de informação entre o sistema e o ambiente. Por construção, a integral é feita sobre todo intervalo em que $\sigma(t) > 0$ e a maximização é feita sobre todos pares de estados iniciais possíveis. Portanto, $\mathcal{N} = 0$, se e somente se, o processo for markoviano. Foi mostrado que os pares de estados iniciais ótimos $\rho_S^{1,2}$ situam-se no limite do espaço de estados e, em particular, são sempre ortogonais [142]. Na Fig. 4.17 é

⁶É uma media da distância entre dois estados quânticos $\rho_1(t)$ e $\rho_2(t)$, isto é similaridade, definida como $D[\rho_1(t), \rho_2(t)] = (1/2)\text{tr}|\rho_1(t) - \rho_2(t)|$, onde $|X| = \sqrt{X^\dagger X}$.

apresentado a medida de \mathcal{N} do estado de superposição mesoscópica de dois pacotes de onda coerentes (4.49) como função do raio Λ/γ para diferentes número médio de fótons iniciais $|\alpha|^2 = |\beta|^2$. Observe que, diferentemente da concorrência, a medida que o número médio de fótons aumenta o grau de não-markovianidade do sistema diminui, o que é algo interessa e cabe uma investigação mais rigorosa desta dinâmica. Além disso, grandes números médios de fótons apresentam menor grau de não-markovianidade inicialmente, todavia perdem o mesmo mais lentamente comparado aos que possuem pequenos números médios de fótons. No entanto, como esperado, todos sempre tendendo a zero no limite de acoplamento fraco. Estes efeitos não-markovianos serão investigados com mais detalhes em trabalhos futuros, ressaltados nas perspectivas.

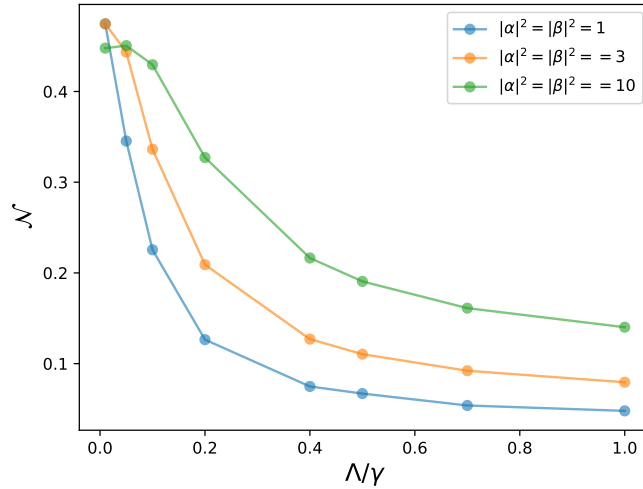


Figura 4.17: Medida de não-markovianidade do sistema \mathcal{N} como função de Λ/γ , para diferentes números médios de fótons iniciais $|\alpha|^2 = |\beta|^2$.

4.7 Conclusões

Exploramos a física dos PQs acoplados a uma nanocavidade, para estudar a interação entre estados excitônicos e o modo de uma nanocavidade no regime dispersivo. É notável que a ligeira diferença presente na dinâmica unitária do MJC com relação ao modelo efetivo tem uma direta ligação com o número de fótons intracavidade. Se o número médio de fótons

$\bar{n} \gg 1$, aumenta a probabilidade de ocorrer a inversão de população do estado coerente $|\alpha\rangle$, sendo necessária uma maior dessintonia δ para manter a evolução dispersiva. Outrossim, observa-se da equação (4.20) para o defeito de idempotência do campo no interior da cavidade, que o grau de pureza depende da distinguibilidade entre os estados coerentes $|\beta\rangle$ e $|\gamma\rangle$ que varia com a intensidade do campo coerente $|\alpha|^2$. Para altas dessintonias, quando $|\alpha|^2 \rightarrow 0$ o estado com campo no interior da cavidade tende a permanecer em um estado puro para pequenos valores de m . Por outro lado, quando $|\alpha|^2 = 10$ cada estado do PQ produz um deslocamento de fase distinto sobre o estado coerente $|\alpha\rangle$ que varia com tempo de interação. Assim, o estado do campo no interior da cavidade é na maior parte do tempo correlacionado com o PQ, somente nos instantes de tempo $t = n\pi/\omega$ o sistema torna-se fatorável. Ao olharmos para estatística do campo, podemos concluir que nos intervalos de tempo onde o defeito de idempotência varia, a estatística do campo se torna ligeiramente indefinida. Portanto, a estatística do campo possui uma sutil dependência com a taxa de variação das correlações PQ-Cavidade.

Como sabemos, sistemas quânticos isolados são uma idealização. Desta forma, analisamos também a situação em que o emaranhamento entre o sistema e o reservatório, conduz os sistemas quânticos à decoerência. Como fica em evidência na Fig. 4.5, as perdas da cavidade fazem o número médio de fótons tender a zero. Todavia, elas não trazem consigo somente uma perda de energia, mas também fazem o campo do interior da cavidade tender a um estado puro, fazendo o PQ carregar toda impureza do sistema total (PQ-cavidade), como observado nas Figs. 4.6 e 4.7.

A dinâmica dispersiva entre o PQ e a luz pode ser usada para criar estados do tipo gato de Schrödinger em cavidades fotônicas. Com esse objetivo, usamos uma fonte laser externa afim de controlar a rotação do qubit, obtendo assim um estado onde as populações $|0\rangle$ e $|1\rangle$ dependem da diferença de fase relativa ωt entre os dois pacotes de onda coerentes. Considerando um PACS da forma $|\alpha, m\rangle$ como estado inicial da cavidade, nossos resultados nos mostram que, quando são adicionados fótons e m aumenta, os pacotes gaussianos da função de Wigner sofrem um achatamento. Ao acoplarmos a um reservatório térmico, observamos na Fig. 4.13 que o estado de Fock é mais robusto contra decoerência. Nossos resultados mostram também que as perdas da cavidade não só destroem a coerência, mas também destroem

a compressão sobre os pacotes gaussianos.

Por fim, direcionamos nossa atenção ao reservatório, analisando dois casos interessantes, sendo o primeiro a interação do sistema com um reservatório finito, onde foi usado a IMQ para investigar o que é conhecido sobre o sistema por um fragmento F do ambiente. Ao compararmos a informação mútua parcial (IMP) com a formação e morte de um estado tipo gato de Schrödinger, é possível notar que conforme o sistema perde coerência um platô surge na IMP, mostrando que não se é necessário monitorar muito do ambiente para reunir a maior parte das informações do sistema. Esta é uma assinatura do que Zurek chama de Darwinismo Quântico. Posteriormente, foram estudados os efeitos de um reservatório estruturado sobre a superposição mesoscópica dos pacotes de onda coerentes, medidas de emaranhamento e não-markovianidade foram tomadas quantificando e explorando a relação entre às mesmas com a dinâmica do sistema.

Capítulo 5

Considerações Finais

Fazer ciência é valorizar e respeitar o universo de experiências do pesquisador: daquele de mais idade cujo trabalho, provavelmente, terá a intensidade da prática que corrobora as teorias, bem como do mais novo que, embora menos experiente, traz consigo a curiosidade e o ânimo para a descoberta [143]. Com esta convicção, nestas considerações finais destacarei os resultados obtidos ao longo deste trabalho, assim como as perspectivas.

Em um primeiro problema, apresentado no Capítulo 3, exploramos as propriedades fotovoltaicas de dois pontos quânticos semicondutores acoplados por tunelamento em contato com um reservatório fonônico, sobre a ação de um campo de radiação térmica. Em tal sistema, é observado que o tunelamento pode ser usado como recurso para aumentar as propriedades fotovoltaicas da fotocélula. Nossos estudos demonstram um regime de parâmetros no qual é alcançado um ganho de até 30% sobre a corrente entregue pela fotocélula. Além disso, foi estudada a estreita relação entre a magnitude da coerência e a taxa de tunelamento, verificando-se uma disputa entre essas duas grandezas no estado estacionário. Dando prosseguimento, foram propostas diversas configurações de níveis de banda para a molécula de ponto quântico e os contatos, observando que, especificamente quando as bandas de valência da molécula de ponto quântico encontram-se em ressonância a fotocélula entrega maior potência com alta eficiência.

Também foi apresentado nesta Tese, no Capítulo 4, o estudo da interação entre estados excitônicos de um ponto quântico e o modo de uma nanocavidade no regime dispersivo. O sistema foi modelado por um hamiltoniano efetivo, descrevendo a dinâmica de interação dis-

persiva entre o éxciton e a nanocavidade. Tal hamiltoniano mostrou-se satisfatório para altas dessintonias, estando de acordo com os resultados esperados. Para o campo intracavidade é assumido como estado inicial um estado coerente adicionado de fótons, o qual permite estudar a interface entre a criação de dois estados de luz no interior da cavidade, a saber o estado de Fock e o estado coerente. Ao resolver a dinâmica do sistema, é observado que o grau de pureza depende da distinguibilidade entre os estados coerentes que compõe o campo após evolução. Além disto, é observado que o estado do campo no interior da cavidade é na maior parte do tempo correlacionado com o ponto quântico, embora nos instantes bem definidos $t = n\pi/\omega$ o sistema torna-se fatorável. Adicionalmente, se olharmos para a estatística do campo no interior da cavidade nestes instantes, observa-se a existência de uma sutil dependência com a taxa de variação das correlações entre o ponto quântico e a cavidade. Além disto, ao olharmos para as Figs. 4.6 e 4.7 percebe-se que o ponto quântico carrega toda impureza do sistema total. Como aplicação, propomos a criação de estados tipo gato de Schrödinger e analisamos uma situação onde são adicionados fótons, verificando a criação de um estado de gato comprimido no interior da cavidade. Criando assim, uma superposição de estados coerentes comprimidos. Por fim, direcionamos nossa atenção ao reservatório, analisando a interação do sistema com um reservatório finito e estruturado, observando o surgimento do darwinismo quântico em nosso sistema, fazendo sua ligação com a superposição dos estados no espaço de fase. Fechando com um estudo das medidas de emaranhamento e não-markovianidade em nosso sistema.

Como perspectivas de trabalhos futuros temos o interesse de estudar o acoplamento de uma fonte de excitação à nanocavidade, de forma a analisar a alteração da dinâmica do sistema. Em um segundo momento, queremos estudar a relação entre darwinismo quântico e não-markovianidade que é um assunto que ainda não existe um consenso científico, uma vez que as medidas que relacionam estas duas grandezas não estão bem estabelecidas. Um bom caminho para se tentar estabelecer uma relação entre tais grandezas, é usar o quantificador entrópico não-markovianidade baseado em emaranhamento; Outro ponto interessante de se aprofundar é a relação entre tais grandezas com o *Quantum speed limits* em sistemas quânticos abertos.

Apêndice A

Fotocélula de ponto único

Os cálculos a seguir são baseados nos trabalhos de Dorfman e Scully [89, 90, 91], considerando um único ponto quântico - PQ interagindo com a luz. Os níveis são mostrados na Fig. A.1

O hamiltoniano total do sistema na aproximação de dipolo é dada por

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_B + \hat{H}_I , \quad (\text{A.1})$$

onde o hamiltoniano \hat{H}_S do sistema de dois níveis pode ser expresso similarmente a (2.3). Já o hamiltoniano \hat{H}_B um banho de osciladores harmônicos

$$\hat{H}_B = \sum_k \hbar \nu_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \sum_l \hbar \nu_l \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_l + \sum_m \hbar \nu_m \hat{b}_m^\dagger \hat{b}_m . \quad (\text{A.2})$$

E o hamiltoniano de interação

$$\begin{aligned} \hat{H}_I &= \hat{H}_{th}^h + \hat{H}_{th}^c \\ &= \hbar \sum_k (g_k |1\rangle \langle 2| \hat{a}_k + \text{H.c.}) + \hbar \sum_l (g_l |1\rangle \langle c| \hat{b}_l + \text{H.c.}) + \hbar \sum_m (g_m |v\rangle \langle 2| \hat{b}_m + \text{H.c.}) . \end{aligned}$$

De modo semelhante ao discutido no capítulo 3, passando para representação de interação e substituindo na equação (3.10), obtemos as seguintes equações de movimento

$$\dot{\hat{\rho}}_{11} = -\gamma_1[(n_1 + 1)\hat{\rho}_{11} - n_1\hat{\rho}_{22}] - \tilde{\gamma}[(n_c + 1)\hat{\rho}_{11} - n_c\hat{\rho}_{cc}] , \quad (\text{A.3})$$

$$\dot{\hat{\rho}}_{22} = -\gamma_1[-(n_1 + 1)\hat{\rho}_{11} + n_1\hat{\rho}_{22}] - \tilde{\Gamma}[-(n_v + 1)\hat{\rho}_{vv} + n_v\hat{\rho}_{22}] , \quad (\text{A.4})$$

$$\dot{\hat{\rho}}_{cc} = -\tilde{\gamma}[-(n_c + 1)\hat{\rho}_{11} + n_c\hat{\rho}_{cc}] - \Gamma\hat{\rho}_{cc} , \quad (\text{A.5})$$

$$\dot{\hat{\rho}}_{vv} = -\tilde{\Gamma}[(n_v + 1)\hat{\rho}_{vv} - n_v\hat{\rho}_{22}] + \Gamma\hat{\rho}_{cc} . \quad (\text{A.6})$$

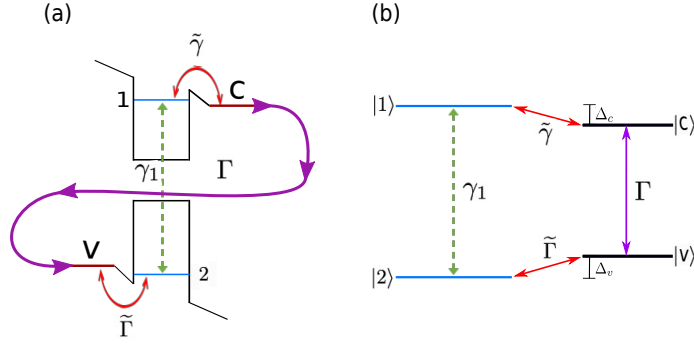


Figura A.1: (a) Esquema genérico de uma fotocélula de quatro níveis. As barras azuis representam os níveis de energia do PQ e as barras c e v são os estados de condução e valência dos contatos. Radiação solar continuamente excita a transição de elétrons $|2\rangle \leftrightarrow |1\rangle$, com taxa de recombinação elétron-buraco γ_1 . Fônons térmicos ambiente mediam a transição de baixa energia $|1\rangle \leftrightarrow |c\rangle$ e $|2\rangle \leftrightarrow |v\rangle$ com taxas $\tilde{\gamma}$ e $\tilde{\Gamma}$, respectivamente. Os níveis dos contatos $|c\rangle$ e $|v\rangle$ são conectados a uma carga (circuito externo), representado por uma taxa de decaimento Γ . Já em (b) $\Delta_{c,v}$ são os deslocamentos de energia das bandas de condução e de valência dos contatos.

No regime estacionário $\hat{\rho}_{11} + \hat{\rho}_{22} + \hat{\rho}_{cc} + \hat{\rho}_{vv} = 1$. Desta forma, o fluxo de corrente que atravessa a fotocélula de c para v é

$$j_S \equiv e\Gamma\hat{\rho}_{cc} = \frac{(n_c + 1)(n_v + 1)n_1\tilde{\Gamma}\tilde{\gamma}\gamma_1}{A\Gamma + B} , \quad (\text{A.7})$$

com

$$A = \{[(3(n_v + 2/3))n_1 + 2n_v + 1]\gamma_1 + (2(n_c + 1))\tilde{\gamma}(n_v + 1/2)\}\tilde{\Gamma} + \tilde{\gamma}n_1\gamma_1(n_c + 1) , \quad (\text{A.8})$$

$$B = \{[(4n_v + 3)n_c + n_v + 1]n_1 + n_c(2n_v + 1)\}\tilde{\gamma}\gamma_1\tilde{\Gamma} . \quad (\text{A.9})$$

Já a voltagem da célula solar é

$$eV_S = E_c - E_v + k_B T_a \ln \left(\frac{\hat{\rho}_{cc}}{\hat{\rho}_{vv}} \right) , \quad (\text{A.10})$$

o que nos conduz a equação

$$eV_S = E_c - E_v + k_B T_a \ln \left[\frac{(n_c + 1)(n_v + 1)n_1\tilde{\Gamma}\tilde{\gamma}\gamma_1}{C\Gamma + D} \right] . \quad (\text{A.11})$$

Aqui

$$C = [(n_1 + 1)\gamma_1 + \tilde{\gamma}(n_c + 1)]n_v\tilde{\Gamma} + \tilde{\gamma}n_1\gamma_1(n_c + 1) \quad (\text{A.12})$$

$$D = (n_1 + 1)\tilde{\gamma}\gamma_1n_cn_v\tilde{\Gamma} . \quad (\text{A.13})$$

A potência entregue à carga é $P_S = j_S V_S$.

Apêndice B

Superoperador Bosônico

B.1 Solução equação mestra

Os superoperadores bosônicos representam a ação dos operadores de criação e destruição, \hat{a} e \hat{a}^\dagger , sobre um operador genérico \hat{O} :

$$(\hat{a}\cdot)\hat{O} = \hat{a}\hat{O}, \quad (\hat{a}^\dagger\cdot)\hat{O} = \hat{a}^\dagger\hat{O}, \quad (\cdot\hat{a})\hat{O} = \hat{O}\hat{a}, \quad (\cdot\hat{a}^\dagger)\hat{O} = \hat{O}\hat{a}^\dagger. \quad (\text{B.1})$$

A partir da relação de comutação fundamental $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ e das definições acima, podemos obter as relações de comutação entre os superoperadores bosônicos:

$$[(\hat{a}\cdot), (\hat{a}^\dagger\cdot)] = (1\cdot) = 1 ,$$

$$[(\cdot\hat{a}), (\cdot\hat{a}^\dagger)] = -(\cdot 1) = -1 , \quad (\text{B.2})$$

$$[(\hat{a}\cdot), (\cdot\hat{a}^\dagger)] = [(\hat{a}^\dagger\cdot), (\cdot\hat{a})] = [(\hat{a}\cdot), (\cdot\hat{a})] = [(\hat{a}^\dagger\cdot), (\cdot\hat{a}^\dagger)] = 0 .$$

Estamos interessados nos produtos bilineares

$$\mathcal{M}\cdot \equiv (\hat{a}^\dagger\hat{a}\cdot) = (\hat{a}^\dagger\cdot)(\hat{a}\cdot) , \quad (\text{B.3})$$

$$\mathcal{P}\cdot \equiv (\cdot\hat{a}^\dagger\hat{a}) = (\cdot\hat{a})(\cdot\hat{a}^\dagger) , \quad (\text{B.4})$$

$$\mathcal{I}\cdot \equiv (\hat{a}\cdot\hat{a}^\dagger) = (\hat{a}\cdot)(\cdot\hat{a}^\dagger) = (\cdot\hat{a}^\dagger)(\hat{a}\cdot) . \quad (\text{B.5})$$

Podemos então, ver as relações de comutação entre o conjunto de superoperadores $\mathcal{M}, \mathcal{P}, \mathcal{I}$:

$$[\mathcal{I}, \mathcal{M}] = [\mathcal{I}, \mathcal{P}] = \mathcal{I} \quad \text{e} \quad [\mathcal{P}, \mathcal{M}] = 0 , \quad (\text{B.6})$$

o que gera uma álgebra de Lie fechada, isto é, as relações de comutação entre os elementos do conjunto não gera nenhum novo elemento. Deste modo, podemos reescrever as equações de movimento como

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_{11}(t) = \mathcal{L}_{11}\hat{\rho}_{11}(t) = [-i\omega(\mathcal{M} - \mathcal{P}) + \kappa'(2\mathcal{I} - \mathcal{M} - \mathcal{P})]\hat{\rho}_{11}(t) , \quad (\text{B.7})$$

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_{00}(t) = \mathcal{L}_{00}\hat{\rho}_{00}(t) = [i\omega(\mathcal{M} - \mathcal{P}) + \kappa'(2\mathcal{I} - \mathcal{M} - \mathcal{P})]\hat{\rho}_{00}(t) , \quad (\text{B.8})$$

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_{10}(t) = \mathcal{L}_{10}\hat{\rho}_{10}(t) = [-i\omega(\mathcal{M} + \mathcal{P} + 1) + \kappa'(2\mathcal{I} - \mathcal{M} - \mathcal{P})]\hat{\rho}_{10}(t) . \quad (\text{B.9})$$

Que são equações do tipo

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_{ij}(t) = \mathcal{L}_{ij}\hat{\rho}_{ij}(t) , \quad (\text{B.10})$$

possuindo solução formal da forma

$$\hat{\rho}_{ij}(t) = e^{\mathcal{L}_{ij}t}\hat{\rho}_{ij}(0) . \quad (\text{B.11})$$

Usando a álgebra do operador exponencial de Lie, podemos escrever a exponencial da solução formal da equação de movimento (B.7) como

$$\begin{aligned} e^{\mathcal{L}_{11}t} &= e^{[-(i\omega+\kappa')\mathcal{M}-(\kappa'-i\omega)\mathcal{P}+2\kappa'\mathcal{I}]t} \\ &= e^{f_1\mathcal{M}}e^{f_2\mathcal{P}}e^{f_3\mathcal{I}} . \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Diferenciando ambos os lados e utilizando a fórmula de Baker-Hausdorff¹ para reorganizar os termos, obtemos o seguinte conjunto de equações diferenciais:

$$\dot{f}_1 = -(\kappa' + i\omega) \quad \Rightarrow \quad f_1(t) = -(\kappa' + i\omega)t , \quad (\text{B.13})$$

$$\dot{f}_2 = -(\kappa' - i\omega) \quad \Rightarrow \quad f_2(t) = -(\kappa' - i\omega)t , \quad (\text{B.14})$$

$$\dot{f}_3 = 2\kappa'e^{f_2}e^{f_1} \quad \Rightarrow \quad f_3(t) = e^{2\kappa't} - 1 . \quad (\text{B.15})$$

Sendo assim, de B.12 podemos escrever

$$e^{[2\kappa'\mathcal{I}-(i\omega+\kappa')\mathcal{M}-(\kappa'-i\omega)\mathcal{P}]t} = e^{(e^{2\kappa't}-1)\mathcal{I}}e^{-(\kappa'+i\omega)t\mathcal{M}}e^{-(\kappa'-i\omega)t\mathcal{P}} , \quad (\text{B.16})$$

usando as definições de \mathcal{I} , \mathcal{M} e \mathcal{P} obtemos finalmente que

$$\hat{\rho}_{11}(t) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} (e^{2\kappa't} - 1)^j (\hat{a})^j e^{[-(\kappa'+i\omega)t\hat{a}^\dagger\hat{a}]} \hat{\rho}_{11}(0) e^{[-(\kappa'-i\omega)t\hat{a}^\dagger\hat{a}]} (\hat{a}^\dagger)^j . \quad (\text{B.17})$$

¹ $e^{\alpha\hat{A}}\hat{B}e^{-\alpha\hat{A}} = \hat{B} + \alpha[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{\alpha^2}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots$

De modo análogo, podemos obter

$$\hat{\rho}_{00}(t) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} (e^{2\kappa't} - 1)^j (\hat{a})^j e^{[-(\kappa' - i\omega)t \hat{a}^\dagger \hat{a}]} \hat{\rho}_{00}(0) e^{[-(\kappa' + i\omega)t \hat{a}^\dagger \hat{a}]} (\hat{a}^\dagger)^j, \quad (\text{B.18})$$

$$\hat{\rho}_{10}(t) = e^{-i\omega t} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \left[\frac{\kappa'}{\kappa' + i\omega} (e^{2(\kappa' + i\omega)t} - 1) \right]^j (\hat{a})^j e^{[-(\kappa' + i\omega)t \hat{a}^\dagger \hat{a}]} \hat{\rho}_{10}(0) e^{[-(\kappa' + i\omega)t \hat{a}^\dagger \hat{a}]} (\hat{a}^\dagger)^j. \quad (\text{B.19})$$

Assumindo o mesmo estado inicial (4.13), tendo em mente também os seguintes resultados: $\hat{a} |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle$ e $e^{x\hat{a}^\dagger \hat{a}} |\alpha\rangle = e^{\frac{|\alpha|^2 |e^x|^2}{2}} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} |\alpha e^x\rangle$. Podemos concluir que

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{11}(t) &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \left[(1 - e^{-2\kappa't}) |\alpha|^2 \right]^j e^{|\alpha|^2 (e^{-2\kappa't} - 1)} \sin^2(\varphi) \frac{1}{N} \sum_{k=0}^m \frac{j!}{(j-k)!} \binom{m}{k} \times \\ &\quad \times (\hat{a}^\dagger e^{-(\kappa' + i\omega)t})^{m-k} \alpha^{-k} \left| \alpha e^{-(\kappa' + i\omega)t} \right\rangle \left\langle \alpha e^{-(\kappa' + i\omega)t} \right| \frac{1}{N} \sum_{l=0}^m \frac{j!}{(j-l)!} \binom{m}{l} \times \\ &\quad \times (\hat{a} e^{-(\kappa' - i\omega)t})^{m-l} (\alpha^*)^{-l}, \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{00}(t) &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \left[(1 - e^{-2\kappa't}) |\alpha|^2 \right]^j e^{|\alpha|^2 (e^{-2\kappa't} - 1)} \cos^2(\varphi) \frac{1}{N} \sum_{k=0}^m \frac{j!}{(j-k)!} \binom{m}{k} \times \\ &\quad \times (\hat{a}^\dagger e^{-(\kappa' + i\omega)t})^{m-k} \alpha^{-k} \left| \alpha e^{-(\kappa' - i\omega)t} \right\rangle \left\langle \alpha e^{-(\kappa' - i\omega)t} \right| \frac{1}{N} \sum_{l=0}^m \frac{j!}{(j-l)!} \binom{m}{l} \times \\ &\quad \times (\hat{a} e^{-(\kappa' + i\omega)t})^{m-l} (\alpha^*)^{-l}, \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{10}(t) &= e^{-i\omega t} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \left[\frac{\kappa'}{\kappa' + i\omega} (1 - e^{-2(\kappa' + i\omega)t}) |\alpha|^2 \right]^j e^{|\alpha|^2 (e^{-2\kappa't} - 1)} \sin(\varphi) \cos(\varphi) \times \\ &\quad \times \frac{1}{N} \sum_{k=0}^m \frac{j!}{(j-k)!} \binom{m}{k} (\hat{a}^\dagger e^{-(\kappa' + i\omega)t})^{m-k} \alpha^{-k} \left| \alpha e^{-(\kappa' + i\omega)t} \right\rangle \left\langle \alpha e^{-(\kappa' - i\omega)t} \right| \times \\ &\quad \times \frac{1}{N} \sum_{l=0}^m \frac{j!}{(j-l)!} \binom{m}{l} (\hat{a} e^{-(\kappa' + i\omega)t})^{m-l} \alpha^{-l}. \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

Deste modo, para $m = 0$ obtém-se os estados coerentes:

$$\hat{\rho}_{11}(t) = \sin^2 \varphi \left| \alpha e^{-(\kappa' + i\omega)t} \right\rangle \left\langle \alpha e^{-(\kappa' + i\omega)t} \right|; \quad (\text{B.23})$$

$$\hat{\rho}_{00}(t) = \cos^2 \varphi \left| \alpha e^{-(\kappa' - i\omega)t} \right\rangle \left\langle \alpha e^{-(\kappa' - i\omega)t} \right|; \quad (\text{B.24})$$

$$\hat{\rho}_{10}(t) = \sin \varphi \cos \varphi e^{-i\omega t - |\alpha|^2 \frac{\kappa'}{\kappa' + i\omega} (e^{-2(\kappa' + i\omega)t} - 1) + |\alpha|^2 (e^{-2\kappa't} - 1)} \left| \alpha e^{-(\kappa' + i\omega)t} \right\rangle \left\langle \alpha e^{-(\kappa' - i\omega)t} \right|. \quad (\text{B.25})$$

Já para $m = 1$ tem-se os estados coerentes adicionados de fótons

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}_{11}(t) = & \frac{\sin^2 \varphi}{N^2} e^{-2\kappa' t} \left\{ (e^{2\kappa' t} - 1) \left[(1 - e^{-2\kappa' t}) |\alpha|^2 + 1 \right] \left| \alpha e^{-(\kappa' + i\omega)t} \right\rangle \left\langle \alpha e^{-(\kappa' + i\omega)t} \right| \right. \\
& + (\alpha e^{-(\kappa' + i\omega)t})^{-1} (1 - e^{-2\kappa' t}) |\alpha|^2 \left| \alpha e^{-(\kappa' + i\omega)t} \right\rangle \left\langle \alpha e^{-(\kappa' + i\omega)t} \right| \hat{a} \\
& + (\alpha^* e^{-(\kappa' - i\omega)t})^{-1} (1 - e^{-2\kappa' t}) |\alpha|^2 \hat{a}^\dagger \left| \alpha e^{-(\kappa' + i\omega)t} \right\rangle \left\langle \alpha e^{-(\kappa' + i\omega)t} \right| \\
& \left. + \hat{a}^\dagger \left| \alpha e^{-(\kappa' + i\omega)t} \right\rangle \left\langle \alpha e^{-(\kappa' + i\omega)t} \right| \hat{a} \right\}; \tag{B.26}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}_{00}(t) = & \frac{\cos^2 \varphi}{N^2} e^{-2\kappa' t} \left\{ (e^{2\kappa' t} - 1) \left[(1 - e^{-2\kappa' t}) |\alpha|^2 + 1 \right] \left| \alpha e^{-(\kappa' - i\omega)t} \right\rangle \left\langle \alpha e^{-(\kappa' - i\omega)t} \right| \right. \\
& + (\alpha e^{-(\kappa' - i\omega)t})^{-1} (1 - e^{-2\kappa' t}) |\alpha|^2 \left| \alpha e^{-(\kappa' - i\omega)t} \right\rangle \left\langle \alpha e^{-(\kappa' - i\omega)t} \right| \hat{a} \\
& + (\alpha^* e^{-(\kappa' + i\omega)t})^{-1} (1 - e^{-2\kappa' t}) |\alpha|^2 \hat{a}^\dagger \left| \alpha e^{-(\kappa' - i\omega)t} \right\rangle \left\langle \alpha e^{-(\kappa' - i\omega)t} \right| \\
& \left. + \hat{a}^\dagger \left| \alpha e^{-(\kappa' - i\omega)t} \right\rangle \left\langle \alpha e^{-(\kappa' - i\omega)t} \right| \hat{a} \right\}; \tag{B.27}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}_{10}(t) = & \frac{\sin \varphi \cos \varphi}{N^2} e^{-i\omega t - |\alpha|^2 \frac{\kappa'}{\kappa' + i\omega} (e^{-2(\kappa' + i\omega)t} - 1) + |\alpha|^2 (e^{-2\kappa' t} - 1)} \left\{ \frac{\kappa'}{\kappa' + i\omega} (1 - e^{-2(\kappa' + i\omega)t}) \right. \\
& \left[\frac{\kappa'}{\kappa' + i\omega} (1 - e^{-2(\kappa' + i\omega)t}) |\alpha|^2 + 1 \right] \left| \alpha e^{-(\kappa' + i\omega)t} \right\rangle \left\langle \alpha e^{-(\kappa' - i\omega)t} \right| \\
& + \alpha^{-1} e^{-(\kappa' + i\omega)t} \frac{\kappa'}{\kappa' + i\omega} (1 - e^{-2(\kappa' + i\omega)t}) |\alpha|^2 \left| \alpha e^{-(\kappa' + i\omega)t} \right\rangle \left\langle \alpha e^{-(\kappa' - i\omega)t} \right| \hat{a} \\
& + (\alpha^*)^{-1} e^{-(\kappa' + i\omega)t} \frac{\kappa'}{\kappa' + i\omega} (1 - e^{-2(\kappa' + i\omega)t}) |\alpha|^2 \hat{a}^\dagger \left| \alpha e^{-(\kappa' + i\omega)t} \right\rangle \left\langle \alpha e^{-(\kappa' - i\omega)t} \right| \\
& \left. + e^{-2(\kappa' + i\omega)t} \hat{a}^\dagger \left| \alpha e^{-(\kappa' + i\omega)t} \right\rangle \left\langle \alpha e^{-(\kappa' - i\omega)t} \right| \hat{a} \right\}. \tag{B.28}
\end{aligned}$$

Assim segue para demais valores de m . Portanto o estado do sistema PQ+C é

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_{11}(t) \otimes |1\rangle \langle 1| + \hat{\rho}_{00}(t) \otimes |0\rangle \langle 0| + \left[\hat{\rho}_{10}(t) \otimes |1\rangle \langle 0| + \text{c.h.} \right]. \tag{B.29}$$

Apêndice C

Ortonormalização de um estado coerente

consideremos um estado quântico na base de estados coerentes dado por

$$|\psi(t)\rangle = a |\alpha, \lambda\rangle + b |\beta, \chi\rangle , \quad (\text{C.1})$$

onde $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle\}$ são estados coerentes pertencentes a um subsistema A e $\{|\lambda\rangle, |\chi\rangle\}$ são estados coerentes pertencentes a um subsistema B. Considere a seguinte transformação:

$$|\alpha\rangle = S_+ |1\rangle - S_- |0\rangle \quad (\text{C.2})$$

$$|\beta\rangle = e^{-i\theta}(S_+ |1\rangle + S_- |0\rangle) \quad (\text{C.3})$$

$$|\lambda\rangle = R_+ |1\rangle - R_- |0\rangle \quad (\text{C.4})$$

$$|\chi\rangle = e^{-i\phi}(R_+ |1\rangle + R_- |0\rangle) , \quad (\text{C.5})$$

sendo,

$$S_{\pm} = \sqrt{\frac{1 \pm |\langle\alpha|\beta\rangle|}{2}} \quad ; \quad R_{\pm} = \sqrt{\frac{1 \pm |\langle\lambda|\chi\rangle|}{2}} \quad (\text{C.6})$$

$$e^{i\theta} = \frac{\langle\beta|\alpha\rangle}{|\langle\alpha|\beta\rangle|} \quad ; \quad e^{i\phi} = \frac{\langle\chi|\lambda\rangle}{|\langle\lambda|\chi\rangle|} . \quad (\text{C.7})$$

É fácil mostrar que as transformações não alteram os produtos $\langle\alpha|\beta\rangle$ e $\langle\lambda|\chi\rangle$, uma vez

que, $\langle 1|0\rangle = 0$ e $\langle 1|1\rangle = \langle 0|0\rangle = 1$. Então, podemos reescrever (4.59) da seguinte forma

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= a(S_+ |1\rangle - S_- |0\rangle) \otimes (R_+ |1\rangle - R_- |0\rangle) \\
&\quad + be^{-i\theta}(S_+ |1\rangle + S_- |0\rangle) \otimes e^{-i\phi}(R_+ |1\rangle + R_- |0\rangle) \\
&= \left[a + be^{-i(\theta+\phi)} \right] S_+ R_+ |11\rangle + \left[-a + be^{-i(\theta+\phi)} \right] S_+ R_- |10\rangle \\
&\quad + \left[-a + be^{-i(\theta+\phi)} \right] S_- R_+ |01\rangle + \left[a + be^{-i(\theta+\phi)} \right] S_- R_- |00\rangle . \quad (C.8)
\end{aligned}$$

Definindo

$$p = \left[a + be^{-i(\theta+\phi)} \right] S_+ R_+ \quad ; \quad q = \left[-a + be^{-i(\theta+\phi)} \right] S_+ R_- \quad (C.9)$$

$$r = \left[-a + be^{-i(\theta+\phi)} \right] S_- R_+ \quad ; \quad s = \left[a + be^{-i(\theta+\phi)} \right] S_- R_- . \quad (C.10)$$

Teremos

$$|\psi(t)\rangle = p |11\rangle + q |10\rangle + r |01\rangle + s |00\rangle , \quad (C.11)$$

que está em uma base ortonormal de dois *qubit*.

Bibliografia

- [1] R. Eisberg and R. Resnick, *Quantum Physics*. John Wiley & Sons, New York, 1985.
- [2] M. S. Hussein and S. R. A. Salinas, *100 Anos de Física Quântica*. Editora Livraria da Física, 2002.
- [3] S. Hasegawa and F. Grey, “Electronic transport at semiconductor surfaces from point-contact transistor to micro-four-point probes,” *Surface Science*, vol. 500, pp. 84–104, 2002. [https://doi.org/10.1016/S0039-6028\(01\)01533-3](https://doi.org/10.1016/S0039-6028(01)01533-3).
- [4] M. Hauben, “History of ARPANET,” *Site de l’Instituto Superior de Engenharia do Porto*, vol. 17, 2007. Disponível em: <https://www.jbcoco.com/Arpa-Arpanet-Internet.pdf>.
- [5] C. H. Bennett, “Quantum information and computation,” *Physics Today*, vol. 48, no. 10, pp. 24–30, 1995. <https://doi.org/10.1063/1.881452>.
- [6] C. H. Bennett and D. P. DiVincenzo, “Quantum information and computation,” *Nature*, vol. 404, pp. 247–255, 2000. <https://doi.org/10.1038/35005001>.
- [7] R. F. Mandelbaum, *Os EUA vão investir 1,2 bilhão de dólares para não ficarem atrás na corrida pela computação quântica*. Disponível em: <https://gizmodo.uol.com.br/eua-investimento-computacao-quantica/> Acesso em: 20 nov. 2020.
- [8] IBM, *Q System One é o computador quântico da IBM criado para empresas*. Disponível em: <https://www.ibm.com/blogs/ibm-comunica/ibm-anuncia-primeiro-sistema-de-computacao-quantica-integrado-para-uso-comercial-no-mundo-o-ibm-q-system-one/> Acesso em: 20 nov. 2020.

- [9] Microsoft, *Q# e Quantum Development Kit - QDK*. Disponível em: <https://docs.microsoft.com/pt-br/quantum/overview/what-is-qsharp-and-qdk> Acesso em: 20 nov. 2020.
- [10] F. Arute, K. Arya, R. Babbush, D. Bacon, J. C. Bardin, R. Barends, R. Biswas, S. Boixo, F. G. Brandao, D. A. Buell, *et al.*, “Quantum supremacy using a programmable superconducting processor,” *Nature*, vol. 574, no. 7779, pp. 505–510, 2019. <https://doi.org/10.1038/s41586-019-1666-5>.
- [11] D. M. Edwin Pednault, John Gunnels and J. Gambetta, *On Quantum Supremacy*. Disponível em: <https://www.ibm.com/blogs/research/2019/10/on-quantum-supremacy/> Acesso em: 28 dez. 2020.
- [12] H.-S. Zhong, H. Wang, Y.-H. Deng, M.-C. Chen, L.-C. Peng, Y.-H. Luo, J. Qin, D. Wu, X. Ding, Y. Hu, *et al.*, “Quantum computational advantage using photons,” *Science*, vol. 370, no. 6523, pp. 1460–1463, 2020. <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.abe8770>.
- [13] C. H. Bennett, F. Bessette, G. Brassard, L. Salvail, and J. Smolin, “Experimental quantum cryptography,” *Journal of Cryptology*, vol. 5, pp. 3–28, 1992. <https://doi.org/10.1007/BF00191318>.
- [14] H. Häffner, C. F. Roos, and R. Blatt, “Quantum computing with trapped ions,” *Physics Reports*, vol. 469, pp. 155–203, 2008. <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2008.09.003>.
- [15] A. W. Harrow and A. Montanaro, “Quantum computational supremacy,” *Nature*, vol. 549, no. 7671, pp. 203–209, 2017. <https://doi.org/10.1038/nature23458>.
- [16] S. Haroche and J. M. Raimond, *Exploring the Quantum*. Oxford University Press, New York, 2006.
- [17] A. Blais, R.-S. Huang, A. Wallraff, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, “Cavity quantum electrodynamics for superconducting electrical circuits: An architecture for quantum computation,” *Physical Review A*, vol. 69, no. 6, p. 062320, 2004. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.69.062320>.

- [18] L. Faoro, J. Siewert, and R. Fazio, “Non-abelian holonomies, charge pumping, and quantum computation with josephson junctions,” *Physical review letters*, vol. 90, no. 2, p. 028301, 2003. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.90.028301>.
- [19] C. Sibia, T. M. Benson, M. Marciniak, and T. Szoplik, *Photonic crystals: physics and technology*. Springer, 2008.
- [20] M. d. O. T. Cunha, *Emaranhamento: caracterização, manipulação e consequências*. PhD thesis, Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG/Departamento de Física, Belo Horizonte, 2005. Disponível em: <http://hdl.handle.net/1843/ESCZ-6L6GNL>.
- [21] G. Lindblad, “On the generators of quantum dynamical semigroups,” *Communications in Mathematical Physics*, vol. 48, pp. 119–130, 1976. <https://doi.org/10.1007/BF01608499>.
- [22] H. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems*. Oxford University Press, New York, 2002.
- [23] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg, and P. Thickstun, *Atom-Photon Interactions: basic processes and applications*. Wiley-VCH, New York, 1992.
- [24] H.-P. Breuer, E.-M. Laine, J. Piilo, and B. Vacchini, “Colloquium: Non-markovian dynamics in open quantum systems,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 88, p. 021002, Apr 2016. <https://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.88.021002>.
- [25] A. de Freitas, L. Sanz, and J. M. Villas-Bôas, “Coherent control of the dynamics of a single quantum-dot exciton qubit in a cavity,” *Phys. Rev. B*, vol. 95, p. 115110, Mar 2017. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.115110>.
- [26] H.-P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems*. Oxford: Oxford University Press, 1 ed., 2007.
- [27] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, 8th ed ed., 2005.
- [28] N. D. M. Neil W. Ashcroft, *Solid state physics*. Cengage Learning, 1 ed., 1976.

- [29] J. Singh, *Physics of Semiconductors and their Heterostructures*. McGraw-Hill College, 1993.
- [30] P. A. A. de Oliveira, “Emaranhamento eletrônico em moléculas de pontos quânticos semicondutores,” Master’s thesis, Universidade Federal de Uberlândia – UFU/Instituto de Física - INFIS, Uberlândia - MG, 2015. Disponível em: <https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/15671>.
- [31] A. d. F. Neto, *Controle coerente da dinâmica de excitons qubit em cavidades ressonâtes*. PhD thesis, Universidade Federal de Uberlândia – UFU/Instituto de Física - INFIS, Uberlândia - MG, 2017. Disponível em: <https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/21347>.
- [32] D. Bimberg, M. Grundmann, and N. N. Ledentsov, *Quantum dot heterostructures*. John Wiley & Sons, 1999.
- [33] A. Zrenner, “A close look on single quantum dots,” *The journal of chemical physics*, vol. 112, pp. 7790–7798, 2000. <https://doi.org/10.1063/1.481384>.
- [34] T. S. Santana, “Manipulação coerente de spins em pontos quânticos semicondutores,” Master’s thesis, Universidade Federal de Uberlândia – UFU/Instituto de Física - INFIS, Uberlândia - MG, 2011. Disponível em: <https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/15644>.
- [35] A. d. F. Neto, “Manipulação coerente de pontos quânticos em nanocavidades,” Master’s thesis, Universidade Federal de Uberlândia – UFU/Instituto de Física - INFIS, Uberlândia - MG, 2013. Disponível em: <https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/15657>.
- [36] J. Márquez, L. Geelhaar, and K. Jacobi, “Atomically resolved structure of InAs quantum dots,” *Applied Physics Letters*, vol. 78, pp. 2309–2311, 2001. <https://doi.org/10.1063/1.1365101>.
- [37] G. H. Wannier, “The structure of electronic excitation levels in insulating crystals,” *Physical Review*, vol. 52, p. 191, 1937. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.52.191>.

- [38] Y. Hu, S. Koch, M. Lindberg, N. Peyghambarian, E. Pollock, and F. F. Abraham, “Biexcitons in semiconductor quantum dots,” *Physical review letters*, vol. 64, p. 1805, 1990. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.64.1805>.
- [39] G. Moody, K. Tran, X. Lu, T. Autry, J. M. Fraser, R. P. Mirin, L. Yang, X. Li, and K. L. Silverman, “Microsecond Valley Lifetime of Defect-Bound Excitons in Monolayer WSe₂,” *arXiv preprint arXiv:1807.03901*, 2018. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.057403>.
- [40] H. J. Krenner, M. Sabathil, E. C. Clark, A. Kress, D. Schuh, M. Bichler, G. Abstreiter, and J. J. Finley, “Direct observation of controlled coupling in an individual quantum dot molecule,” *Physical Review Letters*, vol. 94, no. 5, p. 057402, 2005. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.94.057402>.
- [41] E. A. Stinaff, M. Scheibner, A. S. Bracker, I. V. Ponomarev, V. L. Korenev, M. E. Ware, M. F. Doty, T. L. Reinecke, and D. Gammon, “Optical signatures of coupled quantum dots,” *Science*, vol. 311, pp. 636–639, 2006. <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.1121189>.
- [42] K. Müller, A. Bechtold, C. Ruppert, M. Zecherle, G. Reithmaier, M. Bichler, H. Krenner, G. Abstreiter, A. Holleitner, J. Villas-Boas, *et al.*, “Electrical control of interdot electron tunneling in a double InGaAs quantum-dot nanostructure,” *Physical review letters*, vol. 108, p. 197402, 2012. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.197402>.
- [43] B. D. Gerardot, S. Strauf, M. J. de Dood, A. M. Bychkov, A. Badolato, K. Hennessy, E. L. Hu, D. Bouwmeester, and P. M. Petroff, “Photon statistics from coupled quantum dots,” *Physical review letters*, vol. 95, p. 137403, 2005. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.137403>.
- [44] H. S. Borges, *Dinâmica coerente de estados quânticos em nanoestruturas semicondutoras acopladas*. PhD thesis, Universidade Federal de Uberlândia – UFU/Instituto de Física - INFIS, Uberlândia - MG, 2014. Disponível em: <https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/15615>.

- [45] J. Wu, Z. M. Wang, *et al.*, *Quantum dot molecules*. Springer, 2008.
- [46] J. Villas-Bôas, A. Govorov, and S. E. Ulloa, “Coherent control of tunneling in a quantum dot molecule,” *Physical Review B*, vol. 69, no. 12, p. 125342, 2004. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.125342>.
- [47] A. Bracker, M. Scheibner, M. Doty, E. Stinaff, I. Ponomarev, J. Kim, L. Whitman, T. Reinecke, and D. Gammon, “Engineering electron and hole tunneling with asymmetric InAs quantum dot molecules,” *Applied physics letters*, vol. 89, p. 233110, 2006. <https://doi.org/10.1063/1.2400397>.
- [48] H. Borges, L. Sanz, J. Villas-Bôas, and A. Alcalde, “Robust states in semiconductor quantum dot molecules,” *Physical Review B*, vol. 81, p. 075322, 2010. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.075322>.
- [49] H. Borges, L. Sanz, J. Villas-Bôas, O. D. Neto, and A. Alcalde, “Tunneling induced transparency and slow light in quantum dot molecules,” *Physical Review B*, vol. 85, p. 115425, 2012. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.115425>.
- [50] E. Yablonovitch, “Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics,” *Physical review letters*, vol. 58, p. 2059, 1987. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.58.2059>.
- [51] J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn, and R. D. Meade, *Photonic Crystals: Molding the flow of light*. Princeton Univ. Press, Princeton, NJ [ua], 2008.
- [52] S. Noda, K. Tomoda, N. Yamamoto, and A. Chutinan, “Full three-dimensional photonic bandgap crystals at near-infrared wavelengths,” *Science*, vol. 289, pp. 604–606, 2000. <https://doi.org/10.1126/science.289.5479.604>.
- [53] A. Blanco, E. Chomski, S. Grabtchak, M. Ibisate, S. John, S. W. Leonard, C. Lopez, F. Meseguer, H. Miguez, J. P. Mondia, *et al.*, “Large-scale synthesis of a silicon photonic crystal with a complete three-dimensional bandgap near 1.5 micrometres,” *Nature*, vol. 405, p. 437, 2000. <https://doi.org/10.1038/35013024>.

- [54] M. O. Jensen and M. J. Brett, “Square spiral 3D photonic bandgap crystals at telecommunications frequencies,” *Optics Express*, vol. 13, pp. 3348–3354, 2005. <https://doi.org/10.1364/OPEX.13.003348>.
- [55] S. J. McNab, N. Moll, and Y. A. Vlasov, “Ultra-low loss photonic integrated circuit with membrane-type photonic crystal waveguides,” *Optics express*, vol. 11, pp. 2927–2939, 2003. <https://doi.org/10.1364/OE.11.002927>.
- [56] P. Bienstman, S. Assefa, S. G. Johnson, J. D. Joannopoulos, G. S. Petrich, and L. A. Kolodziejski, “Taper structures for coupling into photonic crystal slab waveguides,” *JOSA B*, vol. 20, pp. 1817–1821, 2003. <https://doi.org/10.1364/JOSAB.20.001817>.
- [57] K. J. Vahala, “Optical microcavities,” *nature*, vol. 424, p. 839, 2003. <https://doi.org/10.1038/nature01939>.
- [58] S. Reitzenstein and A. Forchel, “Quantum dot micropillars,” *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 43, p. 033001, 2010. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/43/3/033001>.
- [59] M. O. Scully and M. S. Zubairy, *Quantum Optics*. Cambridge University Press, 1997.
- [60] R. J. Glauber, “Coherent and incoherent states of the radiation field,” *Physical Review*, vol. 131, no. 6, p. 2766, 1963. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.131.2766>.
- [61] J. J. Sakurai and J. J. Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, Califórnia, 2011.
- [62] D. F. Walls and G. J. Milburn, *Quantum Optics*. Springer Science & Business Media, Australia, 2007.
- [63] C. Gerry, P. Knight, and P. L. Knight, *Introductory quantum optics*. Cambridge university press, 2005.
- [64] D. Z. Rossatto *et al.*, *Correlações quânticas e transição quântico-clássica em cavidades ópticas*. PhD thesis, Universidade Federal de São Carlos – UFS-

- Car/Programa de pós-graduação em Física, São Carlos, 2014. Disponível em: <https://repositorio.ufscar.br/handle/ufscar/4972>.
- [65] Y.-S. Kim and M. E. Noz, *Phase space picture of quantum mechanics: group theoretical approach*, vol. 40. World Scientific, 1991. <https://doi.org/10.1142/1197>.
- [66] T. M. Carrijo *et al.*, “Correlações quânticas e generalização da entropia de von Neumann,” Master’s thesis, Universidade Federal de Goiás – UFG, 2012. Disponível em: <http://repositorio.bc.ufg.br/tede/handle/tede/6374>.
- [67] J. P. de Faria, *Aspectos do Entrelaçamento em Sistemas Quânticos Abertos*. PhD thesis, Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG/Departamento de Física, Belo Horizonte, 2001.
- [68] W. K. Wootters, “Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits,” *Physical Review Letters*, vol. 80, no. 10, p. 2245, 1998. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.2245>.
- [69] P. Rungta, V. Bužek, C. M. Caves, M. Hillery, and G. J. Milburn, “Universal state inversion and concurrence in arbitrary dimensions,” *Physical Review A*, vol. 64, no. 4, p. 042315, 2001. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.64.042315>.
- [70] N. Bernardes, *Quantum non-Markovianity*. Disponível em: <http://www.fmt.if.usp.br/~gtlandi/courses/nonmarkovianity> Acesso em: 20 nov. 2020.
- [71] R. R. Puri, *Mathematical methods of quantum optics*, vol. 79. Springer Science & Business Media, 2001.
- [72] B. L. Amaral, “Emaranhamento em sistemas de dois qubits,” Master’s thesis, Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG/Departamento de Física, Belo Horizonte, 2010. Disponível em: <http://hdl.handle.net/1843/BUBD-A95L7C>.
- [73] J. A. Bergou and M. Hillery, *Introduction to the theory of quantum information processing*. Springer Science & Business Media, 2013.

- [74] J. L. Santos, “Estudo Analítico de uma Memória Quântica em Cavidade,” Master’s thesis, Universidade Estadual de Santa Cruz – UESC/Programa de Pós-graduação em Física, Ilhéus-BA, 2017. Disponível em: <http://nbcgib.uesc.br/profisica/docs/Jefferson-Lira.pdf>.
- [75] J. G. G. de Oliveira Júnior, “Inibindo a Decoerência de Memórias Quânticas em Cavidades Ópticas Realísticas,” Master’s thesis, Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG/Departamento de Física, Belo Horizonte, 2006. Disponível em: <http://hdl.handle.net/1843/IACO-6WFP5Z>.
- [76] A. Nazir, *Lecture Notes on Open Quantum Systems*. Disponível em: .
- [77] J. P. de Faria, “Aspectos da dinâmica browniana do oscilador harmônico quântico e cálculo de densidades reduzidas pela técnica das álgebras de lie: Aplicações ótica quântica,” Master’s thesis, Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG/Departamento de Física, Belo Horizonte, 1997.
- [78] D. M. Chapin, C. Fuller, and G. Pearson, “A new silicon p-n junction photocell for converting solar radiation into electrical power,” *Journal of Applied Physics*, vol. 25, pp. 676–677, 1954. <https://doi.org/10.1063/1.1721711>.
- [79] W. Shockley and H. J. Queisser, “Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells,” *Journal of applied physics*, vol. 32, pp. 510–519, 1961. <https://doi.org/10.1063/1.1736034>.
- [80] R. Rigues, “Dois novos tipos de células solares quebram recordes de eficiência,” *Olhar Digital*. Disponível em: <https://olhardigital.com.br/2020/04/16/noticias/dois-novos-tipos-de-celulas-solares-quebram-recordes-de-eficiencia/> Acesso em: 01 Set. 2021.
- [81] S. Energia, “Células fotovoltaicas: o que são, como escolher e como medir suas eficiências,” *SolarVolt*. Disponível em: <https://www.solarvoltenergia.com.br/blog/quais-os-recordes-de-eficiencia-para-celulas-fotovoltaicas/> Acesso em: 01 Set. 2021.

- [82] J. F. Geisz, R. M. France, K. L. Schulte, M. A. Steiner, A. G. Norman, H. L. Guthrey, M. R. Young, T. Song, and T. Moriarty, “Six-junction III–V solar cells with 47.1% conversion efficiency under 143 Suns concentration,” *Nature energy*, vol. 5, no. 4, pp. 326–335, 2020. <https://doi.org/10.1038/s41560-020-0598-5>.
- [83] P. V. Kamat, “Quantum dot solar cells. The next big thing in photovoltaics,” *The journal of physical chemistry letters*, vol. 4, no. 6, pp. 908–918, 2013. <https://doi.org/10.1021/jz400052e>.
- [84] S. Gudjonsdottir, W. Van Der Stam, C. Koopman, B. Kwakkenbos, W. H. Evers, and A. J. Houtepen, “On the Stability of Permanent Electrochemical Doping of Quantum Dot, Fullerene, and Conductive Polymer Films in Frozen Electrolytes for Use in Semiconductor Devices,” *ACS applied nano materials*, vol. 2, no. 8, pp. 4900–4909, 2019. <https://doi.org/10.1021/acsanm.9b00863>.
- [85] M. Hao, Y. Bai, S. Zeiske, L. Ren, J. Liu, Y. Yuan, N. Zarrabi, N. Cheng, M. Ghasemi, P. Chen, *et al.*, “Ligand-assisted cation-exchange engineering for high-efficiency colloidal Cs_{1-x}FA_xPbI₃ quantum dot solar cells with reduced phase segregation,” *Nature Energy*, vol. 5, no. 1, pp. 79–88, 2020. <https://doi.org/10.1038/s41560-019-0535-7>.
- [86] H. Scovil and E. Schulz-DuBois, “Three-level masers as heat engines,” *Physical Review Letters*, vol. 2, p. 262, 1959. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.2.262>.
- [87] M. O. Scully, M. S. Zubairy, G. S. Agarwal, and H. Walther, “Extracting work from a single heat bath via vanishing quantum coherence,” *Science*, vol. 299, pp. 862–864, 2003. <https://doi.org/10.1126/science.1078955>.
- [88] D. V. Schroeder, “An introduction to thermal physics,” 1999.
- [89] M. O. Scully, “Quantum photocell: Using quantum coherence to reduce radiative recombination and increase efficiency,” *Physical review letters*, vol. 104, p. 207701, 2010. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.207701>.

- [90] K. E. Dorfman, D. V. Voronine, S. Mukamel, and M. O. Scully, “Photosynthetic reaction center as a quantum heat engine,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 110, pp. 2746–2751, 2013. <https://doi.org/10.1073/pnas.1212666110>.
- [91] M. O. Scully, “Comment on “Analysis of Quantum Coherent Semiconductor Quantum Dot p-i-n Junction Photovoltaic Cells”,” *Physical review letters*, vol. 106, p. 049801, 2011. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.049801>.
- [92] M. O. Scully, K. R. Chapin, K. E. Dorfman, M. B. Kim, and A. Svidzinsky, “Quantum heat engine power can be increased by noise-induced coherence,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 108, pp. 15097–15100, 2011. <https://doi.org/10.1073/pnas.1110234108>.
- [93] A. Kirk, “Analysis of Quantum Coherent Semiconductor Quantum Dot p-i-n Junction Photovoltaic Cells,” *Physical review letters*, vol. 106, p. 048703, 2011. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.048703>.
- [94] C. Creatore, M. A. Parker, S. Emmott, and A. W. Chin, “Efficient biologically inspired photocell enhanced by delocalized quantum states,” *Physical review letters*, vol. 111, p. 253601, 2013. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.253601>.
- [95] Y. Zhang, S. Oh, F. H. Alharbi, G. S. Engel, and S. Kais, “Delocalized quantum states enhance photocell efficiency,” *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 17, pp. 5743–5750, 2015. <https://doi.org/10.1039/C4CP05310A>.
- [96] N. Killoran, S. F. Huelga, and M. B. Plenio, “Enhancing light-harvesting power with coherent vibrational interactions: A quantum heat engine picture,” *The Journal of chemical physics*, vol. 143, p. 10B614.1, 2015. <https://doi.org/10.1063/1.4932307>.
- [97] S.-C. Zhao and J.-Y. Chen, “Enhanced quantum yields and efficiency in a quantum dot photocell modeled by a multi-level system,” *New Journal of Physics*, vol. 21, no. 10, p. 103015, 2019. <https://doi.org/10.1088/1367-2630/ab473a>.
- [98] M. A. Cotta, “Quantum dots and their applications: what lies ahead?,” 2020.

- [99] A. A. Svidzinsky, K. E. Dorfman, and M. O. Scully, “Enhancing photovoltaic power by fano-induced coherence,” *Physical Review A*, vol. 84, p. 053818, 2011. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.84.053818>.
- [100] A. P. Kirk, “Can quantum coherent solar cells break detailed balance?,” *Journal of Applied Physics*, vol. 118, no. 3, p. 034506, 2015. <https://doi.org/10.1063/1.4926741>.
- [101] K. E. Dorfman, M. B. Kim, and A. A. Svidzinsky, “Increasing photocell power by quantum coherence induced by external source,” *Physical Review A*, vol. 84, no. 5, p. 053829, 2011. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.84.053829>.
- [102] S.-S. Li, G.-L. Long, F.-S. Bai, S.-L. Feng, and H.-Z. Zheng, “Quantum computing,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 98, no. 21, pp. 11847–11848, 2001. <https://doi.org/10.1073/pnas.191373698>.
- [103] C. S. Lent and P. D. Tougaw, “A device architecture for computing with quantum dots,” *Proceedings of the IEEE*, vol. 85, no. 4, pp. 541–557, 1997. <https://doi.org/10.1109/5.573740>.
- [104] A. Polman, M. Knight, E. C. Garnett, B. Ehrler, and W. C. Sinke, “Photovoltaic materials: Present efficiencies and future challenges,” *Science*, vol. 352, no. 6283, 2016. <https://doi.org/10.1126/science.aad4424>.
- [105] D. Kondepudi and I. Prigogine, *Modern thermodynamics: from heat engines to dissipative structures*. John Wiley & Sons, 2014.
- [106] R. Kubo, *Thermodynamics: an advanced course with problems and solutions*, vol. 1. North-Holland, 1968.
- [107] F. L. Curzon and B. Ahlborn, “Efficiency of a Carnot engine at maximum power output,” *American Journal of Physics*, vol. 43, no. 1, pp. 22–24, 1975. <https://doi.org/10.1119/1.10023>.
- [108] M. Esposito, R. Kawai, K. Lindenberg, and C. Van den Broeck, “Efficiency at maximum power of low-dissipation Carnot engines,” *Physical review letters*, vol. 105, no. 15, p. 150603, 2010. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.150603>.

- [109] K. E. Dorfman, D. Xu, and J. Cao, “Efficiency at maximum power of a laser quantum heat engine enhanced by noise-induced coherence,” *Physical Review E*, vol. 97, no. 4, p. 042120, 2018. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.97.042120>.
- [110] J. R. Johansson, P. D. Nation, and F. Nori, “QuTiP: An open-source Python framework for the dynamics of open quantum systems,” *Computer Physics Communications*, vol. 183, no. 8, pp. 1760–1772, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2012.02.021>.
- [111] P. Ball, “Real-Life Schrödinger’s Cats Probe the Boundary of the Quantum World,” *Quantum Magazine*. Disponível em: <https://www.quantamagazine.org/real-life-schrodingers-cats-probe-the-boundary-of-the-quantum-world-20180625/> Acesso em: 15 nov. 2020.
- [112] R. Zorzetto, “Sobre gatos, fótons e mundos estranhos,” *Pesquisa FAPESP digital*. Disponível em: <https://revistapesquisa.fapesp.br/sobre-gatos-fotons-e-mundos-estranhos/> Acesso em: 15 nov. 2020.
- [113] R. Riedinger, A. Wallucks, I. Marinković, C. Löschnauer, M. Aspelmeyer, S. Hong, and S. Gröblacher, “Remote quantum entanglement between two micromechanical oscillators,” *Nature*, vol. 556, no. 7702, pp. 473–477, 2018. <https://doi.org/10.1038/s41586-018-0036-z>.
- [114] C. Ockeloen-Korppi, E. Damskägg, J.-M. Pirkkalainen, M. Asjad, A. Clerk, F. Massel, M. Woolley, and M. Sillanpää, “Stabilized entanglement of massive mechanical oscillators,” *Nature*, vol. 556, no. 7702, pp. 478–482, 2018. <https://doi.org/10.1038/s41586-018-0038-x>.
- [115] G. Agarwal and K. Tara, “Nonclassical properties of states generated by the excitations on a coherent state,” *Physical Review A*, vol. 43, no. 1, p. 492, 1991. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.43.492>.
- [116] A. Zavatta, S. Viciani, and M. Bellini, “Quantum-to-classical transition with single-photon-added coherent states of light,” *science*, vol. 306, no. 5696, pp. 660–662, 2004. <https://doi.org/10.1126/science.1103190>.

- [117] E. T. Jaynes and F. W. Cummings, “Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser,” *Proceedings of the IEEE*, vol. 51, pp. 89–109, 1963. <https://doi.org/10.1109/PROC.1963.1664>.
- [118] W. H. Zurek, “Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical,” *Reviews of modern physics*, vol. 75, no. 3, p. 715, 2003. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.75.715>.
- [119] J.-M. Raimond, M. Brune, and S. Haroche, “Manipulating quantum entanglement with atoms and photons in a cavity,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 73, p. 565, 2001. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.73.565>.
- [120] J. A. Wheeler and W. H. Zurek, *Quantum theory and measurement*, vol. 40. Princeton University Press, 2014.
- [121] M. Brune, S. Haroche, J. Raimond, L. Davidovich, and N. Zagury, “Manipulation of photons in a cavity by dispersive atom-field coupling: Quantum-nondemolition measurements and generation of “Schrödinger cat” states,” *Physical Review A*, vol. 45, p. 5193, 1992. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.45.5193>.
- [122] C. Monroe, D. Meekhof, B. King, and D. J. Wineland, “A “Schrödinger Cat” superposition state of an atom,” *Science*, vol. 272, pp. 1131–1136, 1996. <https://doi.org/10.1126/science.272.5265.1131>.
- [123] K. Müller, A. Rundquist, K. A. Fischer, T. Sarmiento, K. G. Lagoudakis, Y. A. Kelaita, C. S. Muñoz, E. del Valle, F. P. Laussy, and J. Vučković, “Coherent generation of non-classical light on chip via detuned photon blockade,” *Physical review letters*, vol. 114, p. 233601, 2015. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.233601>.
- [124] C. S. Muñoz, E. Del Valle, A. G. Tudela, K. Müller, S. Lichtmannecker, M. Kaniber, C. Tejedor, J. Finley, and F. Laussy, “Emitters of N-photon bundles,” *Nature photonics*, vol. 8, p. 550, 2014. <https://doi.org/10.1038/nphoton.2014.114>.
- [125] D. Walls and G. Milburn, “Effect of dissipation on quantum coherence,” *Physical Review A*, vol. 31, no. 4, p. 2403, 1985. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.31.2403>.

- [126] M. Brune, E. Hagley, J. Dreyer, X. Maitre, A. Maali, C. Wunderlich, J. Raymond, and S. Haroche, “Observing the progressive decoherence of the “meter” in a quantum measurement,” *Physical Review Letters*, vol. 77, no. 24, p. 4887, 1996. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.4887>.
- [127] C. J. Myatt, B. E. King, Q. A. Turchette, C. A. Sackett, D. Kielpinski, W. M. Itano, C. Monroe, and D. J. Wineland, “Decoherence of quantum superpositions through coupling to engineered reservoirs,” *Nature*, vol. 403, no. 6767, pp. 269–273, 2000. <https://doi.org/10.1038/35002001>.
- [128] P. Ball, “Quantum Darwinism, an Idea to Explain Objective Reality, Passes First Tests,” *Quantum Magazine*. Disponível em: <https://www.quantomagazine.org/quantum-darwinism-an-idea-to-explain-objective-reality-passes-first-tests-20190722/> Acesso em: 01 Jun. 2021.
- [129] R. Zorzetto, “Sobre gatos, fótons e mundos estranhos,” *Pesquisa FAPESP*. Disponível em: <https://revistapesquisa.fapesp.br/sobre-gatos-fotons-e-mundos-estranhos/> Acesso em: 01 Jun. 2021.
- [130] W. H. Zurek, “Quantum darwinism,” *Nature physics*, vol. 5, no. 3, pp. 181–188, 2009. <https://doi.org/10.1038/nphys1202>.
- [131] M. A. Ciampini, G. Pinna, P. Mataloni, and M. Paternostro, “Experimental signature of quantum Darwinism in photonic cluster states,” *Physical Review A*, vol. 98, no. 2, p. 020101, 2018. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.98.020101>.
- [132] T. K. Uden, D. Louzon, M. Zwolak, W. H. Zurek, and F. Jelezko, “Revealing the emergence of classicality using nitrogen-vacancy centers,” *Physical review letters*, vol. 123, no. 14, p. 140402, 2019. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.123.140402>.
- [133] A. de Paula Jr, J. de Oliveira Jr, J. P. de Faria, D. S. Freitas, and M. Nemes, “Entanglement dynamics of many-body systems: Analytical results,” *Physical Review A*, vol. 89, no. 2, p. 022303, 2014. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.89.022303>.

- [134] S. Oliveira, A. de Paula Jr, and R. Drumond, “Quantum Darwinism and non-Markovianity in a model of quantum harmonic oscillators,” *Physical Review A*, vol. 100, no. 5, p. 052110, 2019. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.100.052110>.
- [135] R. Blume-Kohout and W. H. Zurek, “A simple example of “Quantum Darwinism”: Redundant information storage in many-spin environments,” *Foundations of Physics*, vol. 35, no. 11, pp. 1857–1876, 2005. <https://doi.org/10.1007/s10701-005-7352-5>.
- [136] R. Blume-Kohout and W. H. Zurek, “Quantum Darwinism in quantum Brownian motion,” *Physical review letters*, vol. 101, no. 24, p. 240405, 2008. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.240405>.
- [137] O. J. Fariás, G. Aguilar, A. Valdés-Hernández, P. S. Ribeiro, L. Davidovich, and S. P. Walborn, “Observation of the emergence of multipartite entanglement between a bipartite system and its environment,” *Physical review letters*, vol. 109, no. 15, p. 150403, 2012. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.150403>.
- [138] F. F. Fanchini, G. Karpat, B. Çakmak, L. Castelano, G. Aguilar, O. J. Fariás, S. Walborn, P. S. Ribeiro, and M. De Oliveira, “Non-Markovianity through accessible information,” *Physical Review Letters*, vol. 112, no. 21, p. 210402, 2014. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.210402>.
- [139] E. Butkov, *Física matemática*. Livros Técnicos e Científicos, 1988.
- [140] H.-P. Breuer, E.-M. Laine, and J. Piilo, “Measure for the degree of non-Markovian behavior of quantum processes in open systems,” *Physical review letters*, vol. 103, p. 210401, 2009. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.210401>.
- [141] H.-P. Breuer, E.-M. Laine, J. Piilo, and B. Vacchini, “Colloquium: Non-markovian dynamics in open quantum systems,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 88, p. 021002, 2016. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.88.021002>.
- [142] S. Wißmann, A. Karlsson, E.-M. Laine, J. Piilo, and H.-P. Breuer, “Optimal state pairs for non-Markovian quantum dynamics,” *Physical Review A*, vol. 86, p. 062108, 2012. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.86.062108>.

[143] E. SENE-COSTA, *Universo da depressao*. Editora Agora, 2006.