

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE FÍSICA - INFIS

LEONARDO ALVES SANTANA

**TRANSIÇÕES DE LANDAU-ZENER EM QUBITS
SEMICONDUCTORES**

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

UBERLÂNDIA-MG
2022

LEONARDO ALVES SANTANA

**TRANSIÇÕES DE LANDAU-ZENER EM QUBITS
SEMICONDUCTORES**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Comissão de Graduação em Física de Materiais da Universidade Federal de Uberlândia, como requisito parcial para a obtenção do título de Bacharel em Física.

Orientador: Prof. Dr. Augusto Miguel Alcalde Milla
Universidade Federal de Uberlândia

UBERLÂNDIA-MG
2022

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a Deus.

Agradeço a minha família em especial a minha mãe Vanda por todo apoio e investimento feito para que eu chegasse até aqui.

A minha eterna gratidão ao Prof. Dr. Augusto Alcalde, por toda ajuda e paciência.

E por fim, agradeço ao CNPq pelas bolsas de Iniciação Científica que realizei ao longo dos últimos 2 anos e a UFU junto ao instituto de física INFIS por ter me proporcionado uma excelente educação e excelentes professores.

RESUMO

Em nosso trabalho estudamos a dinâmica das transições entre estados quânticos em sistemas de interesse no contexto da informação quântica. Começamos estudando um sistema geral de 2 níveis, a estratégia usada nesse problema foi nossa base para que pudéssemos estudar os sistemas de interesse, o primeiro que consideramos foi a interação entre dois qubits em um sistema formado por dois pontos quânticos acoplados por tunelamento e o outro foi um sistema composto por dois sistemas gerais de dois níveis acoplados por uma interação de troca, nesse caso consideramos como exemplo os dicalcogenetos de metais de transição, que são materiais com grande aplicabilidade em matéria condensada. Nesses dois problemas físicos encontramos a hamiltoniana Landau-Zener e assim apresentamos regimes de valores que tornam a transferência de população eficiente para um estado alvo, no primeiro caso consideramos como estado alvo um estado de éxciton indireto do sistema e para o segundo caso um estado maximamente emaranhado do sistema. Além disso, analisamos a dinâmica dos sistemas ao colocá-los em interação com o ambiente.

Palavras-chave: Landau-Zener, transferência de população, qubits, emaranhado.

ABSTRACT

In our work we study the dynamics of transitions between quantum states in systems of interest in the context of quantum information. We started by studying a general 2-level system, the strategy used in this problem was our basis for us to study the systems of interest, the first one we considered was the interaction between two qubits in a system formed by two quantum dots coupled by tunneling and the other was a system composed of two general systems of two levels coupled by an exchange interaction, in this case we consider as an example the transition metal dichalcogenides, which are materials with great applicability in condensed matter. In these two physical problems we find the Hamiltonian Landau-Zener and thus we present value regimes that make the population transfer efficient for a target state, in the first case we consider as a target state an indirect exciton state of the system and for the second case a maximally system tangle. In addition, we analyze the dynamics of systems when placing them in interaction with the environment.

Keywords: Landau-Zener, population transfer, qubits, entanglement.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Probabilidade de ocupação dos estados $ 1\rangle$ e $ 2\rangle$, para dois valores da dessintonia Δ_0 . (a) $\Delta_0 = 0$ e (b) $\Delta_0 = 1$	4
Figura 2 – Probabilidade de ocupação dos estados $ 1\rangle$ e $ 2\rangle$, para dois valores da dessintonia Δ_0 . (a) $\Delta_0 = 0$ e (b) $\Delta_0 = 1$	5
Figura 3 – Comportamento da duração do pulso chirped com relação ao parâmetro ϕ para diferentes valores de τ_0	10
Figura 4 – Comportamento de E_p com relação a ϕ para diferentes valores de τ_0 . (a) $\tau_0 = 1\text{ps}$, (b) $\tau_0 = 2\text{ps}$ e (c) $\tau_0 = 5\text{ps}$	11
Figura 5 – Comportamento do coeficiente de chirp com relação a ϕ para diferentes valores de τ_0	12
Figura 6 – As linhas sólidas correspondem aos estados adiabáticos do hamiltoniano e as linhas tracejadas se aos estados diabáticos ($\Omega = 0$) como função do parâmetro $\Delta(t)$. As setas curtas mostram as transições lentas e as setas longas mostram uma passagem rápida através do anticruzamento.	14
Figura 7 – Autoenergias do hamiltoniano (51) para $\alpha > 0$. Em linhas sólidas os estados adiabáticos do hamiltoniano e em linhas tracejadas se mostram os estados diabáticos. Os pontos a e b indicam os possíveis estados iniciais e os pontos a' e b' os possíveis estados finais.	18
Figura 8 – Ocupação final do estado $ 1\rangle$ como função da área de pulso A_0 e do parâmetro ϕ , para $\tau_0 = 2\text{ ps}$ e $\Delta_0 = 0.01\text{ meV}$	19
Figura 9 – População do estado $ 1\rangle$ em função da área de pulso A_0 para $\phi = 0.5\text{ ps}^2$, $\Delta_0 = 0.01\text{ meV}$ e para diferentes valores de τ_0	19
Figura 10 – Probabilidade de ocupação do estado $ 1\rangle$ para diferentes valores da dessintonia Δ_0 e para $A_0 = 2\pi$, $\phi = 10\text{ ps}^2$ e $\tau_0 = 2\text{ ps}$	20
Figura 11 – Esquema de um sistema definido por dois pontos quânticos acoplados por tunelamento T_e sob a influencia de um pulso óptico com frequência $\hbar\omega_L$	20
Figura 12 – Comportamento das autoenergias do hamiltoniano (64), onde E_i é a autoenergia do estado $ i\rangle$ para $i = 0,1$ e 2 . As setas retratam os caminhos de interesse, partindo de um estado inicial $ 0\rangle$ para o estado alvo $ 2\rangle$, onde $\alpha > 0$	23
Figura 13 – Ocupação final do estado $ 2\rangle$ como função de A_0 e ϕ , para os valores $\delta_1^0 = 1\text{ meV}$, $\hbar\omega_{21} = 7\text{ meV}$, $T_e = 1.2\text{ meV}$, $\tau_0 = 2\text{ ps}$	23
Figura 14 – Probabilidade de ocupação final do estado $ 2\rangle$. (a) variamos a taxa de tunelamento T_e , (b) variamos a energia $\hbar\omega_{21}$, (c) variamos o <i>detuning</i> δ_1^0 e em (d) variamos a largura inicial de pulso τ_0	24

Figura 15 – Diagrama dos dois QDs semicondutores III-V acoplados por tunelamento. (a) Recombinação direta com taxa de decaimento Γ_1 e (b) Recombinação indireta com taxa de decaimento Γ_2	25
Figura 16 – Comportamento da probabilidade de ocupação do estado $ 2\rangle$ quando o sistema esta sobre influencia do ambiente externo para para diferentes taxas de decaimento Γ_1 e para $\hbar\omega_{21} = 7$ meV, $\delta_1^0 = 1$ meV, $T_e = 1.2$ meV, $\phi = 40$ ps ² , $A_0 = 12.5\pi$ e $\tau_0 = 2$ ps.	26
Figura 17 – Dois qubits acoplados por uma interação de troca δ que acopla os estados excitados dos 2 qubits pertencentes a subespaços de Hilbert diferentes.	26
Figura 18 – (a) Representação esquemática de níveis de WSe ₂ nos pontos da zona de Brillouin K_+ e K_- , as setas indicam a orientação do spin. Consideraremos unicamente a transição dada pela linha solida (excitons brilhantes) que são excitados por luz com polarização circular $\sigma_{+,-}$. (b) As linhas solidas representam os níveis dos estados sem a presença de campo magnético, note que a diferença de energia entre os estados excitado e fundamental do subsistema (1) e (2) sem campo magnético são iguais. As linhas solidas finas em azul representam as energias modificadas pelo campo magnético. Dois tipos de dessintonia entre o campo e os níveis do sistema também são mostrados, Δ_i depende do campo magnético e δ_i é independente do campo magnético.	28
Figura 19 – Comportamento das autoenergias do hamiltoniano (80) no tempo. As setas retratam os caminhos de interesse, partindo de um estado inicial $ \lambda_1\rangle$ ($ \lambda_2\rangle$) de energia λ_1 (λ_2) para o estado emaranhado $ \lambda_3\rangle$ ($ \lambda_4\rangle$) de energia λ_3 (λ_4).	31
Figura 20 – Comportamento das autoenergias do hamiltoniano (80) para dois valores do <i>detuning</i> δ , sendo o estado inicial $ \lambda_1\rangle$	32
Figura 21 – Comportamento dos estados alvos sendo o estado inicial $ \lambda_1\rangle$	32
Figura 22 – Probabilidade de transição do estado inicial $ \lambda_1\rangle$ para o estado alvo $ \lambda_4\rangle$ (letra (a)) e para o estado alvo $ \lambda_3\rangle$ (letra(b)). Sendo $\phi_1 = \phi_2 = \phi$, $A_{02} = A_{01}/2$, $\tau_0 = 3$ ps e $\delta_0 = 0$ meV.	33
Figura 23 – Comportamento das autoenergias do hamiltoniano (80) para dois valores de δ , sendo o estado inicial $ \lambda_2\rangle$	34
Figura 24 – Comportamento dos estados alvos sendo o estado inicial $ \lambda_2\rangle$	34
Figura 25 – Probabilidade de transição do estado inicial $ \lambda_2\rangle$ para o estado alvo $ \lambda_3\rangle$ (letra (a)) e para o estado alvo $ \lambda_4\rangle$ (letra(b)). Sendo $\phi_1 = \phi_2 = \phi$, $A_{02} = A_{01}/2$, $\tau_0 = 3$ ps e $\delta_0 = 0$ meV.	35
Figura 26 – Probabilidade de ocupação do estado $ \lambda_4\rangle$.(a) variando δ_1^0 , (b) variando τ_0 e (c) variando A_{02} com relação a A_{01} . Para todos os casos $\phi_1 = \phi_2 = 20$ ps ² e $A_{01} = 4$	36

- Figura 27 – Diagrama dos dois qubits acoplados por interação de troca. Mostrando as recombinações diretas com suas respectivas taxas de decaimento. Γ_1 para as situações: $|11\rangle \rightarrow |10\rangle$, $|11\rangle \rightarrow |01\rangle$, $|10\rangle \rightarrow |00\rangle$ e $|01\rangle \rightarrow |00\rangle$, e Γ_2 para $|11\rangle \rightarrow |00\rangle$ 37
- Figura 28 – Probabilidade de ocupação do estado $|\lambda_3\rangle$ para diferentes valores de Γ_1 . Sendo $\Gamma_2 = \Gamma_1/5$, $\phi_1 = \phi_2 = 50 \text{ ps}^2$, $A_{01} = 10\pi$, $A_{02} = A_{01}/2$, $\tau_0 = 3\text{ps}$ e $\delta_0 = 0\text{meV}$ 38
- Figura 29 – (a) Representação da rede hexagonal bidimensional formada pelos TMDs. (b) Espectro de fotoluminescência para monocamada (ML) e bicamada (BL) WSe_2 . (c) Representação das transições ópticas no vale $K_+(K_-)$ que são acopladas com luz de polarização $\sigma_+(\sigma_-)$.(MOODY; SCHAIBLEY; XU, 2016) 41

SUMÁRIO

1 – INTRODUÇÃO	1
2 – FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	3
2.1 Mecânica Quântica	3
2.1.1 Operador Matriz Densidade	5
2.2 Representações de Interação	7
2.3 Interação Radiação Matéria	7
2.4 Emaranhamento	8
2.5 Pulso chirped	9
2.6 Probabilidades de transição e formula de Landau Zener	13
3 – ANÁLISE E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS	15
3.1 Sistema quântico de 2 níveis	15
3.1.1 Acoplamento óptico com frequência constante	15
3.1.2 Acoplamento óptico com <i>chirped lasers</i>	16
3.2 Sistema quântico de 3 níveis	20
3.2.1 Decoerência	24
3.3 Dois qubits acoplados por interação de troca	26
3.3.1 Mudança de base	30
3.3.2 Análise para $\omega_2 = \omega_1 = \omega_L$, $\alpha_2 = \alpha_1 = \alpha$ e $B = 0$	30
3.3.2.1 Estado inicial $ \lambda_1\rangle$	31
3.3.2.2 Estado inicial $ \lambda_2\rangle$	33
3.3.3 Decoerência	37
4 – CONCLUSÃO	39
Apêndices	40
APÊNDICE A – Dicalcogenetos de metais de transição	41
APÊNDICE B – Cálculo numérico	42
Referências	45

1 INTRODUÇÃO

O controle de estados quânticos é uma área de pesquisa de grande interesse atual com um vasto potencial para aplicações em tecnologias de informação quântica (MURGIDA; WISNIACKI; TAMBORENEA, 2009). A preparação de estados quânticos está diretamente relacionada com a capacidade de transferir parcial ou completamente a população entre os estados de um qubit¹. Um dos procedimentos mais conhecidos de transferência de população é a excitação óptica com pulsos monocromáticos coerentes de área definida², que é efetiva na condição de ressonância entre frequência da radiação incidente e a frequência da transição do qubit. No entanto essa estratégia não é suficientemente robusta para uma transferência eficiente de população já que é fortemente sensível às variações da área do pulso e à homogeneidade das amostras. Isto é particularmente crítico em sistemas de múltiplos Pontos Quânticos³ (QDs), onde normalmente não é possível obter arranjos de n qubits com a mesma frequência de transição, de forma que um pulso não pode satisfazer a condição π de inversão para todos os qubits. Outro problema característico dos sistemas de estado sólido é a impossibilidade de isolar os estados de qubit de interesse, já que eles normalmente se encontram acoplados às vibrações da rede e isto leva ao deterioro da coerência da excitação (DEBNATH et al., 2013) (RAMSAY et al., 2010).

Diferentes estratégias têm sido sugeridas para superar essas dificuldades, sendo a mais eficiente baseada no fenômeno conhecido como passagem adiabática (GAUGER et al., 2008) (MALINOVSKY; KRAUSE, 2001) (SCHMIDGALL; EASTHAM; PHILLIPS, 2010). Esta técnica se fundamenta no Teorema Adiabático que podemos enunciar da seguinte forma: Considere um sistema cujo Hamiltoniano $H(t)$ varia lentamente de $H(0)$ para $H(\tau)$ em um tempo τ . Se o sistema inicia sua evolução ($t = 0$) em um estado $|n, t = 0\rangle$ de $H(0)$, e a evolução temporal ocorre numa escala de tempo menor que a escala natural do sistema (variação lenta), então em $t = \tau$, o sistema terá evoluído para o correspondente estado $|n, \tau\rangle$ de $H(\tau)$. Ou seja, o sistema evolui no tempo sem efetuar transições entre autoestados instantâneos da hamiltoniana. Por outro lado, se a variação do parâmetro for suficientemente rápida deveram ocorrer transições entre os autoestados instantâneos do sistema, as quais são chamadas transições diabáticas ou

¹Na computação quântica, um qubit ou bit quântico é uma unidade básica de informação quântica. Um qubit é um sistema quântico de dois estados (ou dois níveis). Em um sistema clássico, um bit teria que estar em um estado ou outro. No entanto, a mecânica quântica permite que o qubit esteja em uma superposição coerente de ambos os estados simultaneamente, essa que é uma propriedade fundamental para a computação quântica (NAKAHARA, 2008).

²A área de um pulso é definida como $\theta = \int_{-\infty}^{+\infty} \Omega(t)dt = \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{\mu}\vec{E}(t)dt/\hbar$, onde $\vec{\mu}$ é o momento dipolar da transição e $\vec{E}(t)$ representa a amplitude do campo elétrico associado ao laser.(DEBNATH et al., 2013)

³Pontos quânticos (QDs) semicondutores, por vezes chamados átomos artificiais, são estruturas de dimensões nanométricas que permitem o confinamento espacial de portadores de carga e possuem uma estrutura eletrônica discreta altamente manipulável através de campos externos ou modificação estrutural. Essa flexibilidade permite moldar e manipular as propriedades físicas dos QDs especialmente a interação do QD com a luz, revelando novos fenômenos quânticos de interesse tecnológico, especialmente em dispositivos eletrônicos, eletro-ópticos, células solares e como um interessante candidato para implementação de qubits (ZHANG et al., 2018).

transições de Landau-Zener (LZ). Sob certas condições as transições de LZ permitem uma eficiente inversão de população as quais são robustas às variações do acoplamento óptico e à presença de fônons (WUBS et al., 2005) (GAUGER et al., 2008).

Neste trabalho inicialmente estudaremos um sistema geral de dois níveis (dois qubits) que interage com um campo eletromagnético descrito de forma clássica. Vamos incluir a esse problema a física dos pulsos lasers com frequência dependente do tempo (*chirped lasers*) (LU, 2011). E para simplificar o problema consideraremos a interação óptica na aproximação de dipolo elétrico, escreveremos o hamiltoniano na representação de interação e estudaremos o regime de Rabi dentro da aproximação de onda girante (RWA, do inglês *rotating wave approximation*), a qual permite eliminar da dinâmica termos que oscilam rapidamente. Mostraremos que o hamiltoniano do sistema apresenta nos termos diagonais dessintonias que dependem do tempo, as quais servem como parâmetros de controle para o cálculo da transferência de população. Consideraremos como estado inicial um estado experimentalmente acessível e focaremos em estados alvos que sejam robustos, mostraremos o papel dos parâmetros do hamiltoniano na otimização da preparação dos estados alvo.

Esse estudo inicial do sistema de dois níveis servirá para nos familiarizarmos com os conceitos de RWA e tratamento de interação do sistema com a luz. Após isso vamos analisar alguns sistemas de interesse. No capítulo 3.2 vamos estudar um sistema formado por dois QDs semicondutores III-V acoplados por tunelamento, nesse sistema vamos ter a formação de estados de éxitons diretos e indiretos, aqui também aplicaremos os *chirped lasers* e vamos analisar o transicionamento para esses estados excitônicos. No capítulo 3.3 vamos estudar um sistema formado por dois qubits acoplados por interação de troca, nesse caso vamos estar interessados em estados emaranhados, esse que é um recurso fundamental para a implementação de sistemas de informação quântica, computação quântica, clonagem quântica, etc. Vamos mostrar que uma aplicação desse estudo são os Dicalcogenetos de metais de transição (TMDs) bidimensionais, na Zona de Brillouin desse tipo de material é formado excitons do tipo escuro e do tipo brilhante, nossa análise é feito sobre os excitons brilhantes, os quais podem ser usados como os estados de um qubit. Além disso colocaremos nossos sistemas de interesse para interagir com o ambiente e vamos analisar a dinâmica dissipativa do sistema usaremos para isso o formalismo de uma equação pertencente a uma classe particular de equações mestras markovianas, a equação mestra na forma de Lindblad (SCHLOSSHAUER, 2007).

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Mecânica Quântica

Na mecânica quântica o estado quântico de um sistema é descrito por uma função de onda, que na notação de Dirac, em um instante t é dado por $|\psi(t)\rangle$. Para sistemas quânticos fechados, nos quais qualquer tipo de interação com o seu meio externo é negligenciada, temos que $|\psi(t)\rangle$ é chamado de estado puro e pode ser escrito como uma superposição linear de estados $|\psi(t)\rangle = \sum_k c_k(t) |\psi_k\rangle$, onde os coeficientes $c_k(t)$ satisfazem a relação $\sum_k |c_k(t)|^2 = 1$. E a equação de Schrödinger dependente do tempo descreve como o estado quântico do sistema muda com o tempo e é dada por

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle, \quad (1)$$

onde H é a hamiltoniana do sistema.

Se considerarmos a hamiltoniana H de um sistema quântico, por exemplo, de dois níveis, como não depende do tempo, então para encontrar a evolução temporal desse sistema começamos resolvendo a equação de Schrödinger independente do tempo, dada por

$$H |\psi_k\rangle = E_k |\psi_k\rangle, \quad (2)$$

onde E_k são as autoenergias do sistema e k assume os valores 1 e 2.

Com isso diagonalizando o hamiltoniano H e obtemos os autovalores E_1 e E_2 , em seguida encontramos os autoestados $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$, que são independentes do tempo. Escrevemos o estado do sistema na base dos autovetores de H da seguinte forma $|\psi(t)\rangle = c_1(t) |\psi_1\rangle + c_2(t) |\psi_2\rangle$, de onde $c_k(t) = \langle \psi_k | \psi(t) \rangle$. Agora usamos a equação de Schrödinger dependente do tempo (1) e projetando-a sobre os autoestados $|\psi_k\rangle$, isto fornece uma equação diferencial para cada $c_k(t)$, a qual pode ser resolvida analiticamente lembrando que $|\psi_k\rangle$ não dependem do tempo. Assim, obtemos $c_k(t) = c_k(0) e^{-iE_k t/\hbar}$, onde os coeficientes $c_k(0)$ definem o estado inicial do sistema o qual é conhecido. Dessa forma o problema é resolvido dado o estado inicial do sistema.

Agora considerando um sistema de 2 níveis que interage com um campo externo, dessa forma temos uma hamiltoniana dependente do tempo, que pode ser escrito na forma

$$H = \begin{bmatrix} -\Delta(t) & \hbar\Omega(t) \\ \hbar\Omega(t) & \Delta(t) \end{bmatrix}, \quad (3)$$

onde $\Delta(t)$ representa a dessintonia entre o campo externo e a energia de transição do sistema e $\Omega(t)$ representa o acoplamento entre o sistema e o campo externo.

Nesse caso usamos diretamente a equação (1), dessa forma podemos escrever

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -\Delta(t) & \hbar\Omega(t) \\ \hbar\Omega(t) & \Delta(t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{bmatrix}. \quad (4)$$

Esta equação pode ser resolvida analiticamente em certos casos particulares, o mais conhecido é o chamado modelo de Rabi onde $\Omega(t) = \Omega_0$ e $\Delta(t) = \Delta_0$, onde obtemos

$$c_1(t) = \cos(\tilde{\Omega}t/2) + i \frac{\Delta_0}{\hbar\tilde{\Omega}} \sin(\tilde{\Omega}t/2), \quad (5)$$

$$c_2(t) = -i \frac{\Omega_0}{\tilde{\Omega}} \sin(\tilde{\Omega}t/2), \quad (6)$$

onde $\hbar\tilde{\Omega} = \sqrt{\hbar^2\Omega_0^2 + \Delta_0^2}$.

As probabilidades de encontrar o sistema no estado 1 e 2 estão dadas por

$$|c_1(t)|^2 = \cos^2(\tilde{\Omega}t/2) + \frac{\Delta_0^2}{\hbar^2\tilde{\Omega}^2} \sin^2(\tilde{\Omega}t/2), \quad (7)$$

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\Omega_0^2}{\tilde{\Omega}^2} \sin^2(\tilde{\Omega}t/2), \quad (8)$$

de onde $|c_1(t)|^2 + |c_2(t)|^2 = 1$ como pode ser visto na figura 2.

Das equações (7) e (8) notamos que as probabilidades de transição dependem do tempo e oscilam com a frequência $\tilde{\Omega}$, conhecida como frequência de Rabi. É importante mencionar que para $t = 2\pi/\tilde{\Omega}$ a população é invertida.

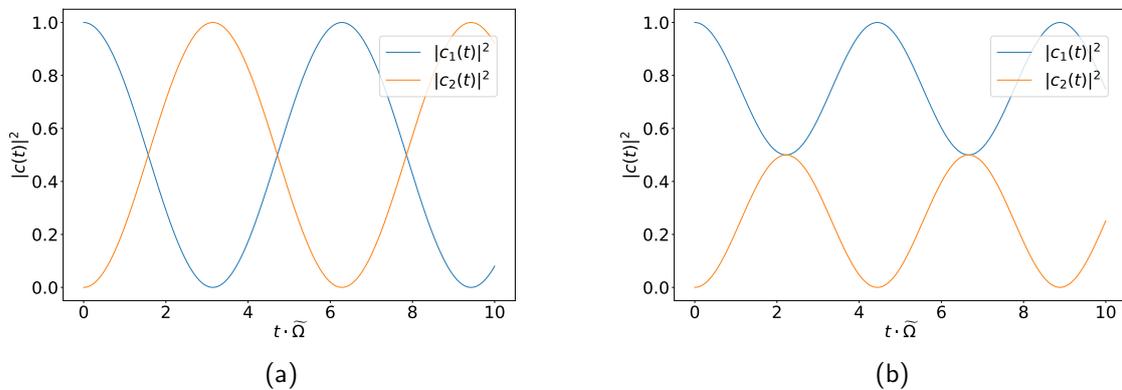


Figura 1 – Probabilidade de ocupação dos estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$, para dois valores da dessintonia Δ_0 . (a) $\Delta_0 = 0$ e (b) $\Delta_0 = 1$.

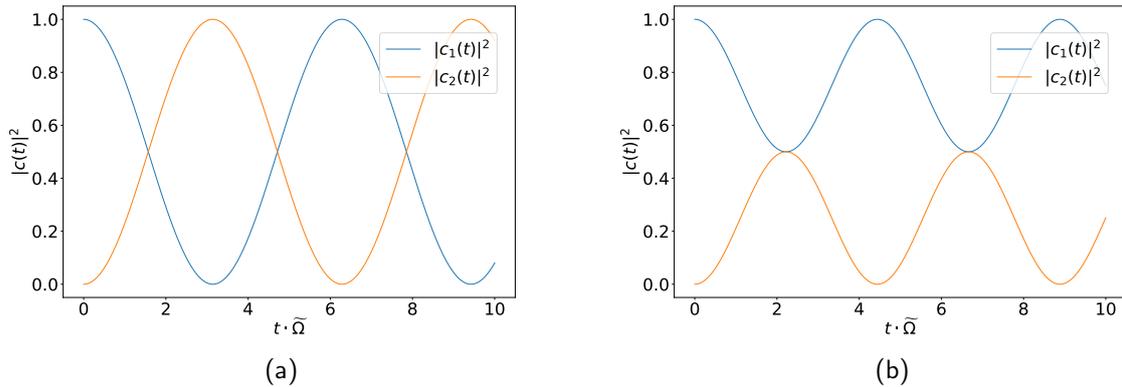


Figura 2 – Probabilidade de ocupação dos estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$, para dois valores da dessintonia Δ_0 . (a) $\Delta_0 = 0$ e (b) $\Delta_0 = 1$.

2.1.1 Operador Matriz Densidade

Se o sistema interage com o ambiente que o cerca, dizemos que este sistema é aberto. Nesse caso, o sistema se encontra em um estado de mistura estatística, onde apenas as probabilidades do sistema ocupar cada estado são bem determinadas e assim não pode mais ser descrito por um estado puro, mais sim por um *ensemble* de estados puros, ou seja, estados puros identicamente preparados, chamado de estado misto. A maneira mais apropriada para se descrever um sistema quântico cujo estado não é completamente conhecido é usar o operador densidade. Em um tempo t pode ser escrito na forma

$$\rho(t) = \sum_k p_k |\psi_k(t)\rangle \langle \psi_k(t)|, \quad (9)$$

onde $0 \leq p_k \leq 1$ é a probabilidade de estar no estado $|\psi_k(t)\rangle$ e $\sum_k p_k = 1$.

O operador densidade também pode ser usado para representar um sistema descrito por um estado puro, nesse caso $p_k = 1$ para algum estado $|\psi_k(t)\rangle$ e $p_k(t) = 0$ para todos os outros estados, ou seja $\rho(t) = |\psi_k(t)\rangle \langle \psi_k(t)|$.

Uma forma mais geral para o operador densidade é

$$\rho(t) = \sum_{ij} \rho_{ij}(t) |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_j(t)|, \quad (10)$$

onde $\rho_{ij}(t) = \rho_{ji}^*(t) = \langle \psi_i(t) | \rho(t) | \psi_j(t) \rangle$ são os elementos de matriz do operador densidade. ((BORGES, 2014))

No estado totalmente misto, somente os elementos diagonais da matriz densidade são diferentes de zero. O elemento diagonal ρ_{ii} corresponde a probabilidade de encontrar o sistema no estado ψ_i . Por esta razão, ρ_{ii} é chamado de população do estado ψ_i . Os elementos

não-diagonais ρ_{ij} , expressam os efeitos de interferência entre os estados ψ_i e ψ_j , e são chamados de coerências.

Tanto para um estado puro quanto para um misto o operador densidade cumpre a relação

$$\text{Tr}\rho(t) = \sum_i \rho_{ii}(t) = 1. \quad (11)$$

Para um estado puro $\text{Tr}\rho^2(t) = \text{Tr}\rho(t) = 1$. Já em uma mistura estatística, temos que $\text{Tr}\rho^2(t) < 1$. Isso pode ser utilizado como um critério para identificar o estado como puro ou misto.

A partir da equação de Schrödinger, é possível obter

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}[H(t),\rho(t)]. \quad (12)$$

Essa equação é conhecida como equação de Liouville-von Neumann. Ela descreve a evolução temporal de um sistema descrito por um estado puro, assim como a equação de Schrödinger (1).

Quando o sistema de interesse interage com o ambiente o hamiltoniano do sistema composto pode ser escrito como $H = H_S + H_A + H_{SA}$, onde H_S é a hamiltoniana do sistema sem interação, H_A é o termo relacionado ao ambiente e H_{SA} é o termo de interação sistema-ambiente. A presença do ambiente acarreta em perda de energia e informação de fase no sistema. A dinâmica desse sistema pode ser descrita pelo formalismo de Liouville-von Neumann-Lindblad, que é composta pela equação de Liouville-von Neumann (12) e uma outra parte não-unitária associada aos processos dissipativos decorrentes do acoplamento do sistema com o seu meio externo, dada pela equação

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar}[H_S(t),\rho_S(t)] + L[\rho_S(t)], \quad (13)$$

onde $L(\rho_S)$ descreve os processos de decoerência, é chamado de operador de Liouville.

Dentre os principais mecanismos de decoerência que afetam o tempo de coerência dos estados de éxcitons em pontos quânticos, considerando o limite de baixa temperatura, estão: recombinação radiativa e processos de *dephasing puro*. Na ausência de interações com fônons e outros portadores que induzem canais de recombinação não-radioativa, o tempo de coerência de éxcitons é limitado pelo decaimento radiativo. Dessa forma $L(\rho_S)$ pode ser escrito como (BORGES, 2014)

$$L(\rho_S) = \frac{\Gamma_{ij}}{2}(2\sigma_-\rho_S\sigma_+ - \sigma_+\sigma_-\rho_S - \rho_S\sigma_+\sigma_-), \quad (14)$$

onde os operadores $\sigma_- = |i\rangle\langle j|$ e $\sigma_+ = |j\rangle\langle i|$ representam o decaimento entre os dois níveis $|i\rangle$ e $|j\rangle$, e Γ_{ij} representa a taxa de decaimento entre os estados.

Com o auxílio deste formalismo, temos condições de estudar como nosso problema irá se comportar ao incluir o efeito do reservatório sobre ele.

2.2 Representações de Interação

Consideremos um sistema descrito pelo vetor de estado $|\psi(t)\rangle$, em que o hamiltoniano do sistema dependente do tempo $H(t) = H_0 + V(t)$, onde $V(t)$ descreve a interação com algum campo externo. Então na representação de interação o vetor de estado do sistema pode ser escrito como

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{iH_0t/\hbar}|\psi(t)\rangle. \quad (15)$$

Podemos também voltar para a representação de Schrödinger pela relação

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iH_0t/\hbar}|\psi(t)\rangle_I. \quad (16)$$

Se substituirmos $|\psi(t)\rangle = e^{-iH_0t/\hbar}|\psi(t)\rangle_I$ na equação de Schrödinger, obtemos a equação de Schrödinger na representação de interação

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_I = H_I|\psi(t)\rangle_I, \quad (17)$$

onde $H_I = e^{iH_0t/\hbar}V(t)e^{-iH_0t/\hbar}$

Um operador A na representação de Schrödinger é escrito na representação de interação como

$$A_I = e^{iH_0t/\hbar}Ae^{-iH_0t/\hbar}. \quad (18)$$

E sua equação de movimento é $\frac{dA_I}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A_I, H_0]$.

2.3 Interação Radiação Matéria

Considerando o campo de radiação eletromagnética monocromático

$$\vec{E} = \vec{e}E_p(t) \cos \omega t = \frac{\vec{e}E_p(t)}{2} [e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}], \quad (19)$$

onde \vec{e} é o vetor de polarização do campo elétrico, e $E_p(t) = E_p$ é a amplitude, que consideraremos inicialmente independente do tempo .

A interação entre o sistema de dois níveis e o campo é dada por

$$V(t) = -\vec{d} \cdot \vec{E}, \quad (20)$$

onde $\vec{d} = -e\vec{r}$ é o operador de dipolo. (STECK, 2007)

De forma matricial, podemos escrever a interação como

$$V = \sum_{i,j} |j\rangle \langle i| V |j\rangle \langle j| = V_{01} |0\rangle \langle 1| + V_{10} |1\rangle \langle 0|. \quad (21)$$

Então podemos escrever

$$V_{01} = \langle 0|V|1\rangle = -\langle 0|\vec{d} \cdot \vec{E}|1\rangle = -\langle 0|\vec{d} \cdot \vec{\epsilon}|1\rangle E_p(t) \cos \omega t = -\frac{\langle 0|\vec{d} \cdot \vec{\epsilon}|1\rangle E_p(t)}{2} [e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}]. \quad (22)$$

Definindo

$$\hbar\Omega(t) = -\langle 0|\vec{d} \cdot \vec{\epsilon}|1\rangle E_p(t), \quad (23)$$

onde $\Omega(t)$ é real e é chamado de frequência de Rabi.

$$\text{Logo, } V_{01} = \frac{\hbar\Omega(t)}{2} [e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}] \text{ e } V_{10} = V_{01}^* = \frac{\hbar\Omega(t)}{2} [e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}].$$

Então

$$V(t) = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\hbar\Omega(t)}{2} [e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}] \\ \frac{\hbar\Omega(t)}{2} [e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}] & 0 \end{bmatrix}. \quad (24)$$

Os elementos da diagonal de $V(t)$ são zero porque a interação radiação matéria acopla estados com paridade oposta.

2.4 Emaranhamento

Operacionalmente podemos definir emaranhamento através da noção de separabilidade: um estado bipartido puro $|\psi\rangle_{AB}$ é chamado emaranhado se não puder ser separado como um produto direto $|\psi\rangle_{AB} = |\phi\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B$. Da mesma forma, um estado misto bipartido é emaranhado se não puder ser representado como uma mistura de estados puros fatorizáveis, $\rho_{AB} = \sum_i p_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i| \otimes |\beta_i\rangle \langle \beta_i|$, aqui $\sum_i p_i = 1$ e $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ são os estados puros dos subsistemas A e B , respectivamente. (SAKURAI; NAPOLITANO, 2014)

Podemos supor que temos dois qubits A e B , que podemos escrever como superposições $|\phi_A\rangle = \alpha_A |0\rangle + \beta_A |1\rangle$ e $|\phi_B\rangle = \alpha_B |0\rangle + \beta_B |1\rangle$, um estado global de AB pode ser representado por um estado produto

$$|\psi\rangle_{AB} = |\phi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle = \alpha_A \alpha_B |00\rangle + \alpha_A \beta_B |01\rangle + \beta_A \alpha_B |10\rangle + \beta_A \beta_B |11\rangle. \quad (25)$$

Esse resultado parece ser uma combinação linear dos 4 estados da base $|ij\rangle_{A,B}$, no entanto não é uma combinação linear arbitrária. São necessários uma escolha de parâmetros muito particular para definir o estado global como um estado separável.

A mecânica quântica permite combinações lineares mais gerais que não necessariamente podem ser escritas como um produto. Essas superposições são os chamados estados

emaranhados. Um exemplo muito importante desses estados não separáveis como produtos são os chamados estados de Bell: $|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$, $|\Phi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle)$, $|\Psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$ e $|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$. Através de uma comparação com o estado produto é fácil mostrar que para os estados de Bell não é possível encontrar coeficientes de forma que algum dos estados de Bell possa ser escritos como um estado produto. Os estados de Bell são maximamente emaranhados. (WONG, 2022)

Existem várias abordagens que fornecem uma medida válida de emaranhamento. A escolha dessas medidas depende da natureza do sistema físico e das características da análise a ser realizada. Porém em nosso caso, não é necessário usarmos nenhuma medida de emaranhamento.

2.5 Pulso chirped

Será incluído ao problema lasers com frequência dependente do tempo (*chirped lasers*) (LU, 2011) (DEBNATH et al., 2013), para entendermos como isso é feito, consideremos um pulso gaussiano chirped que normalmente é definido por

$$E(t) = E_p(t) \cos(\theta(t)) = \frac{E_p(t)}{2} [e^{i\theta(t)} + e^{-i\theta(t)}], \quad (26)$$

onde $E_p(t) = E_p e^{-t^2/\tau_p^2}$ é o envelope gaussiano e $\theta(t) = \int_0^t \omega(t') dt'$, ou $\omega(t) = \frac{d\theta(t)}{dt}$.

Um tipo de chirped muito comum é definido por

$$\theta(t) = \omega t + \alpha t^2. \quad (27)$$

Se usamos a relação $\omega(t) = \frac{d\theta(t)}{dt}$, encontramos a frequência da fase, conhecida como *chirped linear*, dada por

$$\omega(t) = \omega + 2\alpha t, \quad (28)$$

onde α é o o coeficiente de chirp.

Os parâmetros do pulso chirped são definidos como:

- Duração do pulso chirped (também chamado de largura do pulso chirped)

Pode ser escrito como

$$\tau_p = \tau_0 \left(1 + \frac{(2\phi)^2}{\tau_0^4} \right)^{1/2}, \quad (29)$$

onde τ_0 é a largura inicial de pulso antes de ser chirpado, usualmente na ordem de *picosegundos* (ps), ϕ é o parâmetro de chirp, usualmente na ordem de ps^2 e τ_p também tem a unidade em ps.

A figura 3 mostra o comportamento da largura do pulso chirped com relação a τ_0 para diferentes valores de ϕ . Note que τ_p varia fortemente com ϕ para valores pequenos de τ_0 . Na medida que o pulso inicial se torna largo, a largura τ_p varia fracamente com ϕ , no limite de τ_0 grandes, notamos que $\tau_p \sim \tau_0$ para todos os valores ϕ .

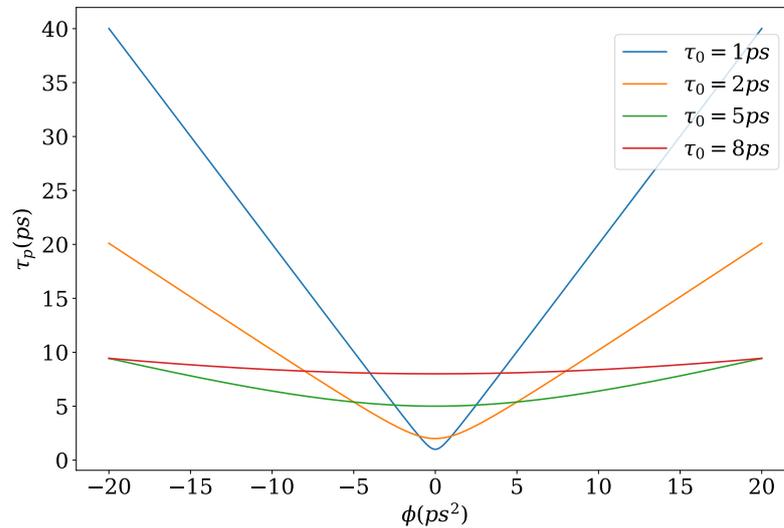


Figura 3 – Comportamento da duração do pulso chirped com relação ao parâmetro ϕ para diferentes valores de τ_0 .

- Amplitude do pulso chirped

Pode ser escrito como

$$E_p = E_0 \sqrt{\frac{\tau_0}{\tau_p}}, \quad (30)$$

onde E_0 é o módulo do campo elétrico aplicado, usualmente na ordem de meV/m , assim como E_p .

A figura 4 mostra o comportamento de E_p com relação a ϕ para diversos de E_0 e para diferentes larguras τ_0 . Em geral E_p diminui quando τ_0 aumenta. A amplitude E_p é máxima quando $\phi = 0$.

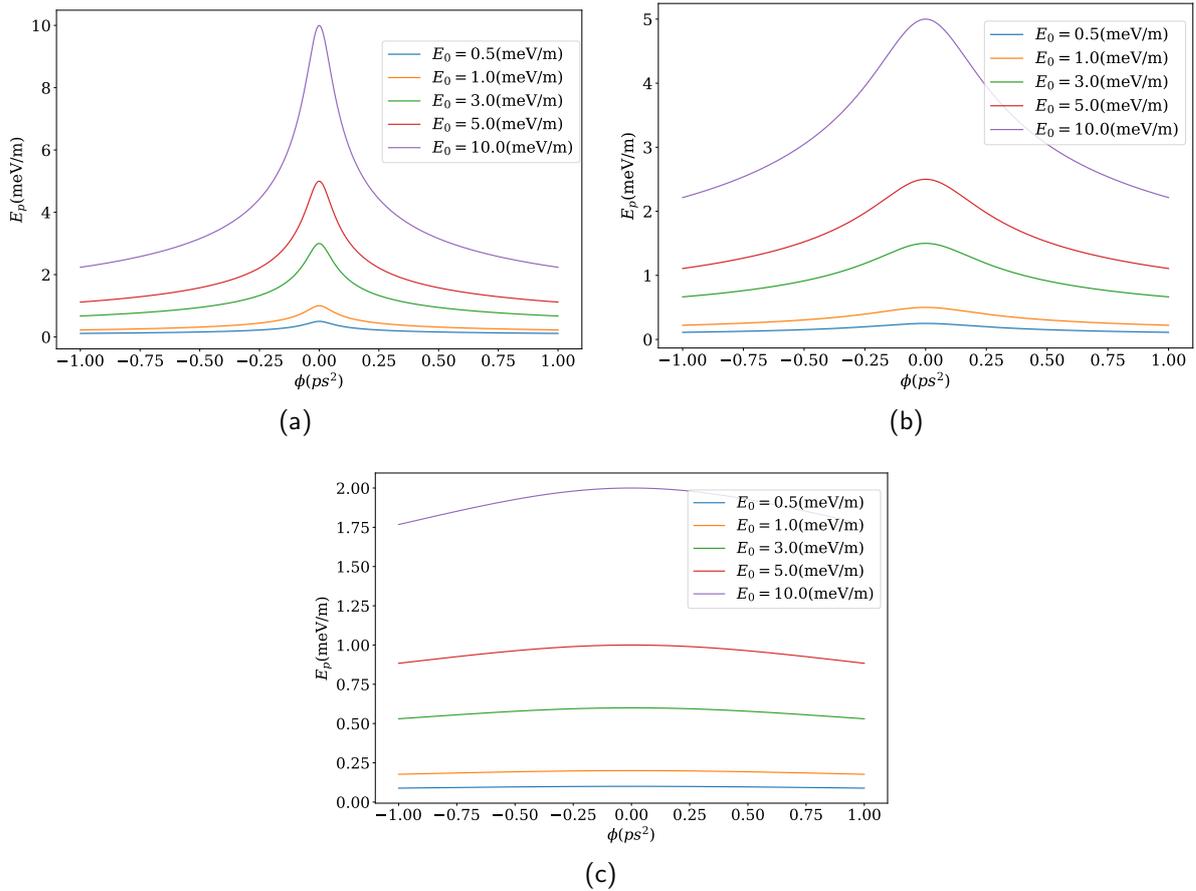


Figura 4 – Comportamento de E_p com relação a ϕ para diferentes valores de τ_0 . (a) $\tau_0 = 1$ ps, (b) $\tau_0 = 2$ ps e (c) $\tau_0 = 5$ ps.

- Coeficiente de chirp

Esse parâmetro corresponde a velocidade com que a frequência (28) muda com o tempo. Pode ser escrito como

$$\alpha = \frac{(2\phi)}{\tau_0^4 + (2\phi)^2}. \quad (31)$$

onde α fica na ordem de ps^{-2} .

A figura 5 mostra que α apresenta um pico correspondente a um máximo cuja posição depende fortemente da largura τ_0 . Também, o máximo valor de α diminui fortemente quando τ_0 aumenta. Podemos calcular o valor ϕ para o qual α é máxima, $\phi = \pm \frac{\tau_0^2}{2}$. O máximo valor de α é $\alpha_{max} = \frac{1}{2\tau_0^2}$, o que coloca em evidência a sensibilidade da velocidade com a largura τ_0 .

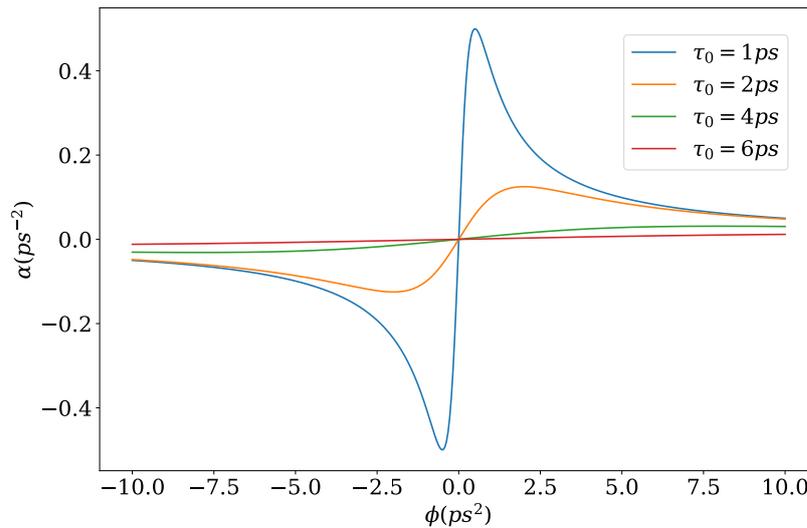


Figura 5 – Comportamento do coeficiente de chirp com relação a ϕ para diferentes valores de τ_0 .

Após definido esses parâmetros iniciais do pulso chirped, agora podemos definir a área do pulso, que é outro parâmetro do pulso muito importante. Pode ser definida como

$$A_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\hbar} \vec{\mu} \cdot \vec{E}_0(t) dt, \quad (32)$$

onde $\vec{\mu} = \langle 1 | \vec{d} | 2 \rangle$ e $E_0(t) = E_0 e^{-t^2/\tau_0^2}$ é o envelope gaussiano antes de ser chirpado.

Podemos reescreve-lo como

$$A_0 = \frac{1}{\hbar} \mu E_0 \sqrt{\pi} \tau_0 = \Omega_0 \sqrt{\pi} \tau_0, \quad (33)$$

onde é usualmente escrita em termos de π .

Finalmente podemos usar a área A_0 para escrever o pulso gaussiano, dessa forma encontramos

$$E_p(t) = E_p e^{-t^2/\tau_p^2} = E_0 \sqrt{\frac{\tau_0}{\tau_p}} e^{-t^2/\tau_p^2} = \frac{\hbar A_0}{\mu \sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{\tau_0 \tau_p}} e^{-t^2/\tau_p^2}. \quad (34)$$

Uma forma simples, mas não formal de incluir a RWA em problemas com lasers chirped consiste simplesmente em fazer a equivalência

$$e^{\pm i\omega t} \longrightarrow e^{\pm i\theta(t)}. \quad (35)$$

Veremos mais na frente, detalhes sobre a inclusão do RWA nos sistemas físicos de interesse.

2.6 Probabilidades de transição e formula de Landau Zener

A formula de Landau Zener estabelece a probabilidade de transição entre os estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$ de dois níveis de energia numa situação de cruzamento evitado. Corresponde a uma solução analítica das equações de movimento que regem a dinâmica de um sistema quântico de 2 níveis de energia, com um hamiltoniano dependente do tempo variando de tal forma que a separação de energia dos dois estados (diabáticos) é uma função linear do tempo, representado por um $\Delta(t)$, e o acoplamento entre os dois estados é constante, dado pelo Ω . (ZENER, 1932)

Na seção 2.1 vimos que a partir do hamiltoniano (3) é possível obter as oscilações de Rabi aqui vamos mostrar que a partir desse mesmo hamiltoniano também podemos estudar as transições de Landau Zener. Reescrevendo o hamiltoniano, temos

$$H = \begin{bmatrix} -\Delta(t) & \hbar\Omega(t) \\ \hbar\Omega(t) & \Delta(t) \end{bmatrix}, \quad (36)$$

onde $\Delta(t)$ representa a dessintonia entre o campo externo e a energia de transição do sistema e $\Omega(t)$ representa o acoplamento entre o sistema e o campo externo.

Consideremos $\Omega(t)$ constante. Nesta situação as autoenergias do sistema apresentam um anti-cruzamento como pode ser visto esquematicamente na Figura 6, onde o parâmetro de controle varia linearmente com o tempo, $\Delta(t) = vt$, onde v representa a taxa com que o parâmetro de controle varia. No ponto de anti-cruzamento os dois autovalores de energia (curvas adiabáticas) se aproximam um do outro e os autoestados trocam progressivamente de identidade na medida que o parâmetro de controle atravessa o anti-cruzamento, os autoestados correspondentes são conhecidos como estados adiabáticos. As assíntotas representam estados de energia quando $\Omega = 0$, são retas diabáticas. Se o anti-cruzamento é atravessado lentamente ($v \ll \Omega^2$), o sistema percorre uma curva adiabática desde um estado diabático inicial até o outro estado diabático. Se o parâmetro é variado rapidamente ($v \gg \Omega^2$), a evolução se produz seguindo uma linha diabática e o sistema permanece no mesmo estado inicial diabático.

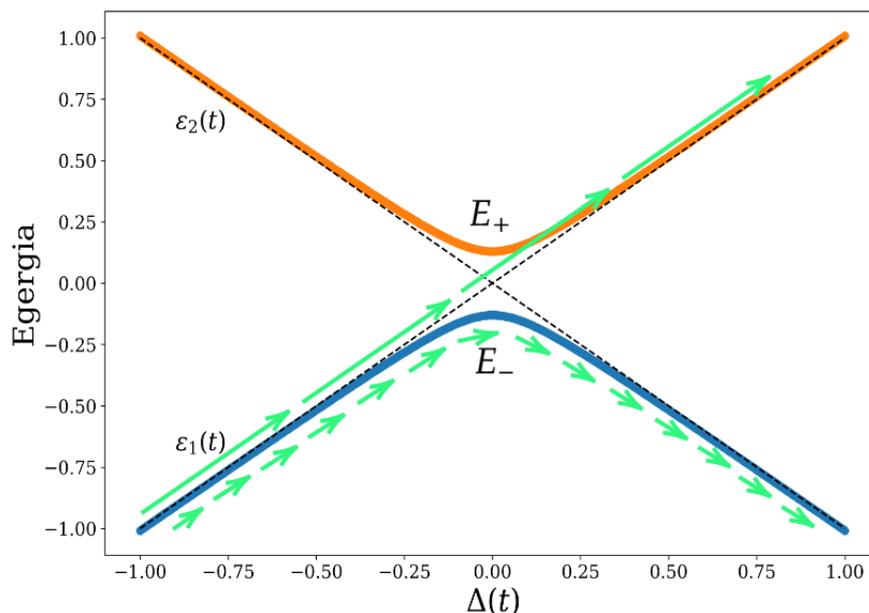


Figura 6 – As linhas sólidas correspondem aos estados adiabáticos do hamiltoniano e as linhas tracejadas se aos estados diabáticos ($\Omega = 0$) como função do parâmetro $\Delta(t)$. As setas curtas mostram as transições lentas e as setas longas mostram uma passagem rápida através do anticruzamento.

Caso o estado inicial ($t \rightarrow -\infty$) seja $|0\rangle$, a probabilidade de permanecer no mesmo estado diabático é dada por $P_0 = e^{-\pi\Omega^2/2\alpha}$, e a probabilidade de transição para o estado $|1\rangle$ é $P_1 = 1 - e^{-\pi\Omega^2/2\alpha}$. Aqui podemos distinguir dois regimes: (a) Regime rápido: $\alpha \gg \Omega^2$, nessa situação $P_1 \rightarrow 0$ ($P_0 \rightarrow 1$), ou seja o sistema atravessa rapidamente a região do anti-cruzamento e tende a permanecer no estado inicial diabático. (b) Regime lento: quando $\alpha \ll \Omega^2$, nessa situação $P_1 \rightarrow 1$ ($P_0 \rightarrow 0$), aqui o sistema evolui lentamente permanecendo no estado adiabático $|\psi_0(t)\rangle$ e quando $t \rightarrow +\infty$ temos que $|\psi_0(t)\rangle \sim |1\rangle$, ou seja o sistema evolui de $|0\rangle$ para $|1\rangle$, se produz o equivalente a uma inversão de população adiabática.

É importante enfatizar que nosso cálculo numérico oferece mais informações da formula de Landau Zener a qual é unicamente valida para acoplamentos independentes do tempo. Em nosso cálculo o acoplamento óptico depende do tempo e a população final é obtida para tempos suficientemente longos onde o regime estacionário é satisfeito. (WUBS et al., 2005)

3 ANÁLISE E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

3.1 Sistema quântico de 2 níveis

3.1.1 Acoplamento óptico com frequência constante

Seja um sistema de dois estados¹: $|0\rangle$ e $|1\rangle$, em que suas correspondentes energias são dadas por: $E_0 = -\frac{\hbar\omega_0}{2}$ e $E_1 = \frac{\hbar\omega_0}{2}$. O hamiltoniano que descreve esse sistema sem interação é

$$H_0 = \begin{bmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_1 \end{bmatrix}. \quad (37)$$

Consideramos que o sistema de dois níveis interage com um campo de radiação eletromagnética como descrito na seção 2.3. Logo, a hamiltoniana do sistema na representação de Schrödinger é

$$H(t) = H_0 + V(t) = \begin{bmatrix} E_0 & V_{01} \\ V_{10} & E_1 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} -\omega_0 & \Omega(t) [e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}] \\ \Omega(t) [e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}] & \omega_0 \end{bmatrix}. \quad (38)$$

Agora vamos passar para a representação de interação, seção 2.2. Como os autovalores de H_0 são $E_0 = -\frac{\hbar\omega_0}{2}$ e $E_1 = \frac{\hbar\omega_0}{2}$, então na representação de interação o operador tem a forma $U(t) = e^{-iH_0 t/\hbar}$ e matricialmente pode ser escrito como

$$e^{-iH_0 t/\hbar} = \begin{bmatrix} e^{-iE_0 t/\hbar} & 0 \\ 0 & e^{-iE_1 t/\hbar} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{i\omega_0 t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_0 t/2} \end{bmatrix}. \quad (39)$$

Aplicando a representação de interação $H_I = U(t)^\dagger H(t) U(t)$, temos que

$$H_I = \begin{bmatrix} -\hbar\omega_0/2 & \frac{\hbar\Omega(t)}{2} (e^{i(\omega-\omega_0)t} + e^{-i(\omega+\omega_0)t}) \\ \frac{\hbar\Omega(t)}{2} (e^{-i(\omega-\omega_0)t} + e^{i(\omega+\omega_0)t}) & \hbar\omega_0/2 \end{bmatrix}. \quad (40)$$

Agora aplicamos a aproximação de onda girante (RWA) que consiste em eliminar os termos que oscilam rapidamente, dessa forma, obtemos

$$H_I^{RWA} = \begin{bmatrix} -\hbar\omega_0/2 & \frac{\hbar\Omega(t)}{2} e^{i(\omega-\omega_0)t} \\ \frac{\hbar\Omega(t)}{2} e^{-i(\omega-\omega_0)t} & \hbar\omega_0/2 \end{bmatrix}. \quad (41)$$

Voltando para a representação de Schrödinger, para isso fazemos

$H^{RWA} = U(t) H_I^{RWA} U(t)^\dagger$, logo

$$H^{RWA} = \begin{bmatrix} -\hbar\omega_0/2 & \frac{\hbar\Omega(t)}{2} e^{i\omega t} \\ \frac{\hbar\Omega(t)}{2} e^{-i\omega t} & \hbar\omega_0/2 \end{bmatrix}. \quad (42)$$

¹pode ser um átomo com dois níveis de energia, elétron confinado por um potencial com dois níveis de energia, ou ainda os dois estados de spin de um elétron, etc

É possível remover os termos que oscilam com frequência ω com uma transformação unitária (referencial rotante)

$$S = \begin{bmatrix} e^{-i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{i\omega t/2} \end{bmatrix}. \quad (43)$$

Logo, o hamiltoniano se transforma $H \rightarrow \tilde{H} = S(t)H(t)S(t)^\dagger + i\hbar S(t)^\dagger \frac{dS(t)}{dt}$

A equação de Schrödinger (1) vale para o hamiltoniano transformado. Se $|\psi(t)\rangle$ é solução da equação de Schrödinger, então, também

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\tilde{\psi}(t)\rangle = \tilde{H} |\tilde{\psi}(t)\rangle, \quad (44)$$

onde $|\tilde{\psi}(t)\rangle = S|\psi(t)\rangle$. A solução original pode ser obtida com $|\psi(t)\rangle = S^\dagger |\tilde{\psi}(t)\rangle$.

Após aplicar a transformação unitária S na hamiltoniana H^{RWA} obtemos

$$\tilde{H} = \begin{bmatrix} \frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\hbar\omega_0}{2} & \frac{\hbar\Omega(t)}{2} \\ \frac{\hbar\Omega(t)}{2} & \frac{\hbar\omega_0}{2} - \frac{\hbar\omega}{2} \end{bmatrix}. \quad (45)$$

Definindo a dessintonia como $\hbar\Delta_0 = \hbar\omega - \hbar\omega_0$, então

$$\tilde{H} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} \Delta_0 & \Omega(t) \\ \Omega(t) & -\Delta_0 \end{bmatrix}. \quad (46)$$

3.1.2 Acoplamento óptico com *chirped lasers*

Agora incluímos ao problema uma frequência dependente do tempo, como descrito na seção 2.5. Vimos que a hamiltoniana do nosso sistema de 2 níveis que interage com um campo eletromagnético é dado pela equação (38), aqui reescrevemos ele na forma (STECK, 2007)

$$H = \begin{bmatrix} -\hbar\omega_0/2 & \frac{\hbar\Omega(t)}{2} [e^{i\theta(t)} + e^{-i\theta(t)}] \\ \frac{\hbar\Omega(t)}{2} [e^{i\theta(t)} + e^{-i\theta(t)}] & \hbar\omega_0/2 \end{bmatrix}. \quad (47)$$

Enquanto a transformação unitária (43), fica escrita como

$$S(t) = \begin{bmatrix} e^{-i\theta(t)/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta(t)/2} \end{bmatrix}. \quad (48)$$

Com isso, temos um novo hamiltoniano: $H \rightarrow \tilde{H} = S(t)H(t)S(t)^\dagger + i\hbar S(t)^\dagger \frac{dS(t)}{dt}$.

Obtemos

$$\tilde{H} = \begin{bmatrix} \frac{\hbar}{2} \frac{d\theta(t)}{dt} - \frac{\hbar\omega_0}{2} & \frac{\hbar\Omega(t)}{2} [1 + e^{-2i\theta(t)}] \\ \frac{\hbar\Omega(t)}{2} [1 + e^{2i\theta(t)}] & \frac{\hbar\omega_0}{2} - \frac{\hbar}{2} \frac{d\theta(t)}{dt} \end{bmatrix}. \quad (49)$$

Uma forma não formal de considerar a RWA consiste em desconsiderar os termos que oscilam com $2\theta(t)$ (IBÁÑEZ et al., 2011), assim

$$\tilde{H}^{RWA} = \begin{bmatrix} \frac{\hbar}{2}\omega(t) - \frac{\hbar\omega_0}{2} & \frac{\hbar\Omega(t)}{2} \\ \frac{\hbar\Omega(t)}{2} & \frac{\hbar\omega_0}{2} - \frac{\hbar}{2}\omega(t) \end{bmatrix}. \quad (50)$$

Reescrevendo a hamiltoniana (50), portanto temos

$$H = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \hbar\Delta(t) & \hbar\Omega(t) \\ \hbar\Omega(t) & -\hbar\Delta(t) \end{bmatrix}, \quad (51)$$

onde $\Delta(t) = \omega(t) - \omega_0$.

O termo $\hbar\Delta(t)$ representa a dessintonia dependente do tempo entre o campo externo e a energia de transição do qubit e pode ser escrito como

$$\hbar\Delta(t) = \hbar\omega(t) - \hbar\omega_0 = \hbar(\omega - \omega_0) + 2\hbar\alpha t = \Delta_0 + 2\hbar\alpha t. \quad (52)$$

O termo $\hbar\Omega(t)$ representa a interação entre o qubit e o campo externo. Da seção 2.3 sabemos que $V_{01} = -\langle 0|d \cdot \epsilon|1\rangle E_p(t) \cos(\theta(t)) = \hbar\Omega(t) \cos(\theta(t))$. E da seção 2.5 que $E_p(t) = \frac{\hbar A_0}{\mu\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{\tau_0\tau_p}} e^{-t^2/\tau_p^2}$, em que A_0 é a área do pulso de referencia. Dessa forma

$$\hbar\Omega(t) = \hbar \frac{A_0}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{\tau_0\tau_p}} e^{-t^2/\tau_p^2}. \quad (53)$$

Tendo em vista a hamiltoniana (51), se considerarmos o caso $\Omega(t) = \Omega_0$ real e $\alpha = 0$, assim poderíamos resolver o problema analiticamente como descrito na seção 2.1. Porém vamos resolver numericamente, assim calculamos os autovalores para $\alpha > 0$ como é mostrado na figura 7, mostrando que as autoenergias do sistema apresentam um anti-cruzamento, nessa situação os pontos a e b' representam o estado $|0\rangle$, enquanto que os pontos a' e b representam o estado $|1\rangle$, a transição de $a \rightarrow b'$ é rápida e a transição $a \rightarrow a'$ segue adiabaticamente o autoestado $E_1(t)$ para todo t .

Ao calcular os autovalores para $\alpha < 0$ a ordem dos estados diabáticos é invertida em relação ao caso $\alpha > 0$. Assim os pontos a e b' representam o estado $|1\rangle$, enquanto que os pontos a' e b representam o estado $|0\rangle$, a transição de $a \rightarrow b'$ é rápida e a transição $a \rightarrow a'$ segue o autoestado $E_1(t)$ para todo t .

Um fato interessante é a derivada dos autovalores, no limite $A_0 \rightarrow 0$ (longe da ressonância) calculamos: $\frac{dE_1(t)}{dt} = \hbar\alpha$ e $\frac{dE_2(t)}{dt} = -\hbar\alpha$, portanto $\frac{d(E_1(t) - E_2(t))}{dt} = 2\hbar\alpha$, mostrando que α mede a velocidade com que a energia muda com o tempo.

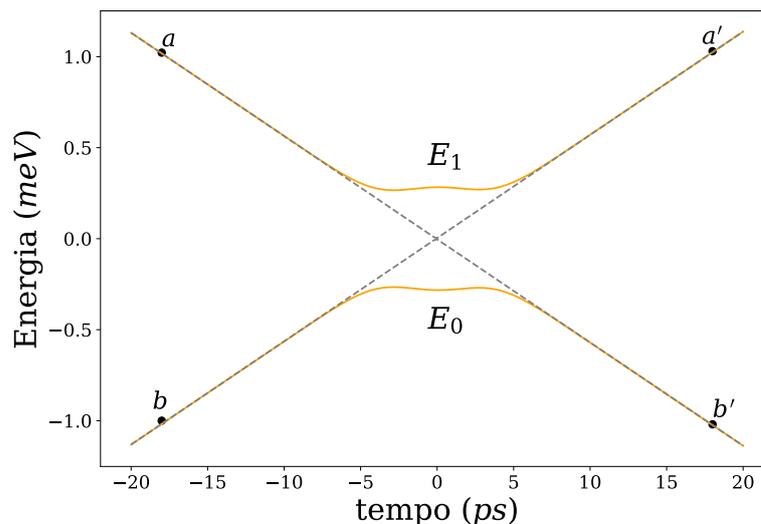


Figura 7 – Autoenergias do hamiltoniano (51) para $\alpha > 0$. Em linhas sólidas os estados adiabáticos do hamiltoniano e em linhas tracejadas se mostram os estados diabáticos. Os pontos a e b indicam os possíveis estados iniciais e os pontos a' e b' os possíveis estados finais.

Podemos fazer nosso sistema evoluir por exemplo de um estado inicial $|0\rangle$, representado por b na figura 7 para um estado final $|1\rangle$, representado por b' . Dessa forma, com o objetivo de obtermos um conjunto de parâmetros do hamiltoniano (51) que faça com que essa evolução $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$ seja a mais eficiente possível e assim obter uma população final do estado $|1\rangle$ bem robusta fizemos a figura 8. Nela observamos a população final do estado $|1\rangle$ depois de longo tempo, tal que a população já esteja estacionária como função da área de pulso inicial do chirped laser A_0 e do parâmetro de chirp ϕ . Na região $\phi \sim 0$, temos que $\tau_p \sim \tau_0$, $\alpha \sim 0$ e $E_p \sim E_0$, ou seja, o efeito chirp é fraco, logo o problema se reduz a um sistema de dois níveis excitado por um pulso gaussiano de largura τ_0 e frequência constante (independente do tempo). Esse sistema produz oscilações de Rabi, ou seja, oscilações da população como função da área do pulso, que é exatamente o que se observa na figura perto de $\phi \sim 0$. Para outros valores de ϕ encontramos uma ocupação completa do estado $|1\rangle$ assim que a área total de pulso é suficientemente alta. Para áreas de pulso muito pequenas, uma inversão completa do sistema não pode ser alcançada e neste caso a excitação não é realizado adiabaticamente. Assim concluímos que em nosso caso, o sistema permanece no regime lento (adiabático) para quase todos os valores do parâmetro de chirp ϕ com exceção da região $\phi \sim 0$ onde observamos oscilações de Rabi.

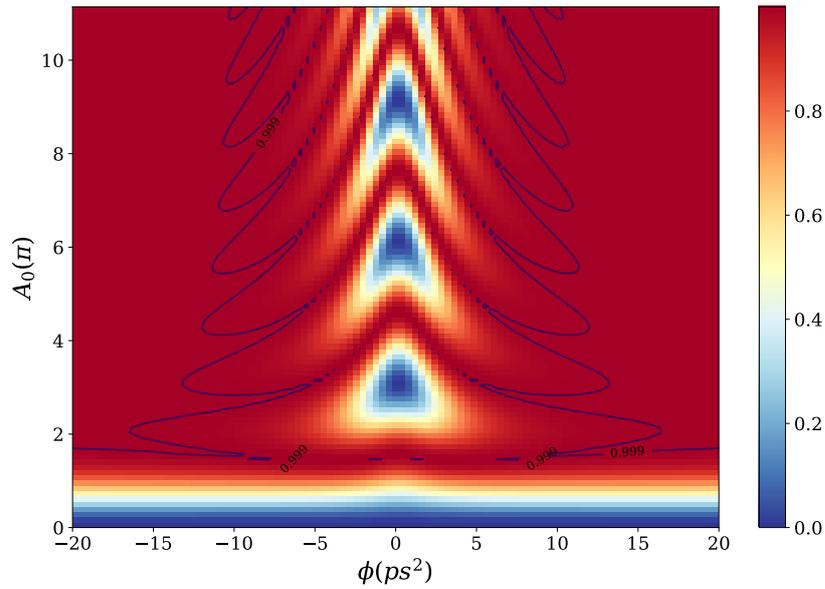


Figura 8 – Ocupação final do estado $|1\rangle$ como função da área de pulso A_0 e do parâmetro ϕ , para $\tau_0 = 2$ ps e $\Delta_0 = 0.01$ meV.

Com base na figura 8 fizemos a figura 9, nela plotamos a população final do estado $|1\rangle$ em função da área de pulso A_0 para ϕ próximo de zero, dessa forma podemos observamos com mais detalhe o comportamento das oscilações de Rabi quando variamos o parâmetro τ_0 , percebe-se pela figura que a população final do estado $|1\rangle$ é bem sensível para valores de $\tau_0 < 2$ ps, já para $\tau_0 > 2$ ps as oscilações de Rabi são completas.

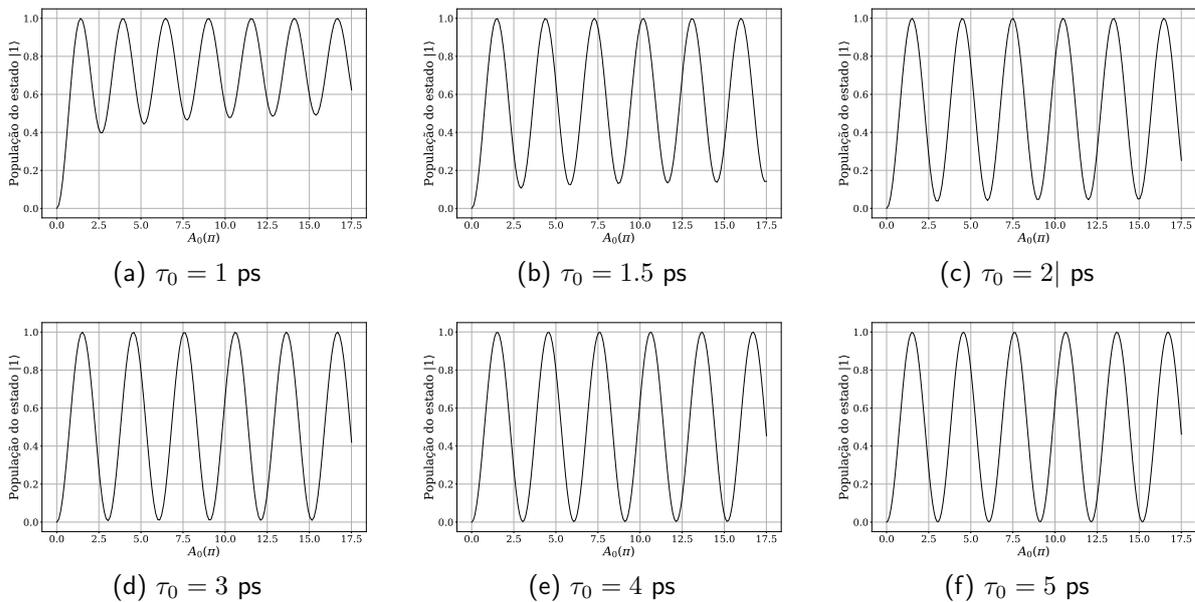


Figura 9 – População do estado $|1\rangle$ em função da área de pulso A_0 para $\phi = 0.5$ ps², $\Delta_0 = 0.01$ meV e para diferentes valores de τ_0 .

A escolha de Δ_0 também é importante, até aqui usamos $\Delta_0 = 0.01$ meV. Na figura 10, variamos Δ_0 e percebemos que para que nosso conjunto de valores que fazem com que

tenhamos uma boa probabilidade de ocupação final do estado $|1\rangle$ continue eficiente o valor de Δ_0 deve ser menor que 0.1 meV , ou seja, o laser deve estar próximo da ressonância com o sistema de 2 níveis.

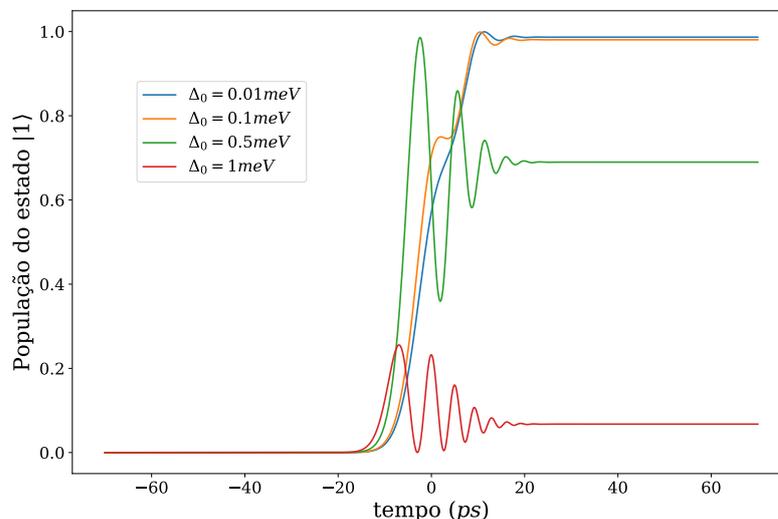


Figura 10 – Probabilidade de ocupação do estado $|1\rangle$ para diferentes valores da dessintonia Δ_0 e para $A_0 = 2\pi$, $\phi = 10 \text{ ps}^2$ e $\tau_0 = 2 \text{ ps}$.

3.2 Sistema quântico de 3 níveis

Consideremos agora um sistema formado por dois QDs semicondutores III-V acoplados por tunelamento, que interage com um campo eletromagnético (19). Ao aplicar um pulso óptico ressonante com frequência ω_L em um dos QDs, um elétron é excitado da banda de valência para banda de condução, formando um estado de éxciton direto. Se o elétron tunelar para o segundo QD, então um estado de éxciton indireto é formado. A seguir mostramos o esquema (Figura 11) dessa situação.

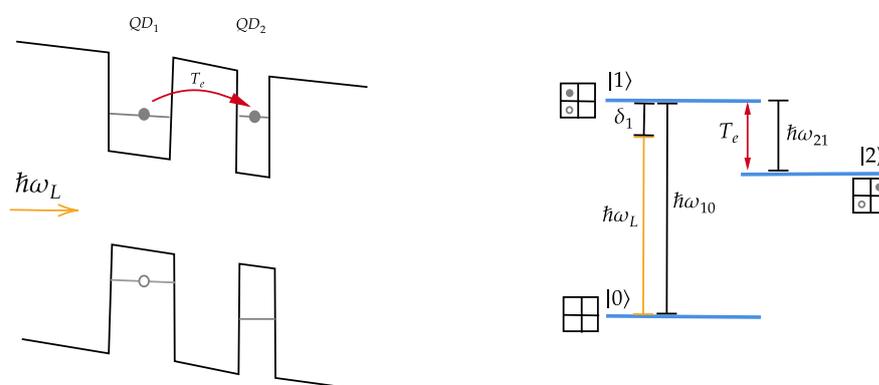


Figura 11 – Esquema de um sistema definido por dois pontos quânticos acoplados por tunelamento T_e sob a influencia de um pulso óptico com frequência $\hbar\omega_L$.

A dinâmica deste problema pode ser modelada como um sistema de 3 níveis, onde o estado fundamental $|0\rangle$ corresponde ao sistema sem excitações, o estado $|1\rangle$ ao estado de

éxciton direto e o estado $|2\rangle$ ao estado de éxciton indireto.

O hamiltoniano na representação de Schrödinger para esse problema é $H(t) = H_0 + V(t)$, onde $H_0 = \sum_{i=0,2} e_i |i\rangle \langle i|$ e $V(t) = \hbar\Omega(t) \cos(\omega_L t)(|0\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 0|) + T_e(|1\rangle \langle 2| + |2\rangle \langle 1|)$, ou seja

$$H(t) = \begin{pmatrix} E_0 & \frac{\hbar\Omega(t)}{2} (e^{iE_L t/\hbar} + e^{-iE_L t/\hbar}) & 0 \\ \frac{\hbar\Omega(t)}{2} (e^{-iE_L t/\hbar} + e^{iE_L t/\hbar}) & E_1 & T_e \\ 0 & T_e & E_2 \end{pmatrix}, \quad (54)$$

onde $E_L = \hbar\omega_L$ é a energia do laser, $E_i = \hbar\omega_i$ é a energia no nível i e T_e corresponde ao tunelamento do elétron.

Passando para a representação de interação, $V_i = UV(t)U^\dagger$, onde $U = e^{iH_0 t/\hbar}$, e negligenciando os termos que oscilam rapidamente (RWA), obtemos

$$V_i^{RWA} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar\Omega(t)}{2} e^{i(E_L - E_1 + E_0)t/\hbar} & 0 \\ \frac{\hbar\Omega(t)}{2} e^{i(-E_L + E_1 - E_0)t/\hbar} & 0 & T_e e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} \\ 0 & T_e e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar} & 0 \end{pmatrix}. \quad (55)$$

Voltando para a representação de Schrödinger, $V = U^\dagger V_i^{RWA} U$, a hamiltoniana fica escrita como

$$H_{RWA} = \begin{pmatrix} E_0 & \frac{\hbar\Omega(t)}{2} e^{iE_L t/\hbar} & 0 \\ \frac{\hbar\Omega(t)}{2} e^{-iE_L t/\hbar} & E_1 & T_e \\ 0 & T_e & E_2 \end{pmatrix}. \quad (56)$$

Agora usando a transformação unitária (referencial rotante)

$$S = \begin{pmatrix} e^{-iE_L t/\hbar} & 0 & 0 \\ 0 & e^{iE_L t/\hbar} & 0 \\ 0 & 0 & e^{iE_L t/\hbar} \end{pmatrix}. \quad (57)$$

Dessa forma o hamiltoniano se transforma: $\tilde{H} = SH_{RWA}S^\dagger - i\hbar S \frac{dS^\dagger}{dt}$, ou seja

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \frac{E_L}{2} + E_0 & \frac{\hbar\Omega(t)}{2} & 0 \\ \frac{\hbar\Omega(t)}{2} & E_1 - \frac{E_L}{2} & T_e \\ 0 & T_e & E_2 - \frac{E_L}{2} \end{pmatrix}. \quad (58)$$

Usando a notação: $E_{10} = E_1 - E_0$, $E_{21} = E_2 - E_1$, $\delta_1 = E_{10} - E_L$ e $\delta_2 = 2E_{21} + \delta_1$. Podemos reescrever o hamiltoniano como

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} -\delta_1/2 & \frac{\hbar\Omega(t)}{2} & 0 \\ \frac{\hbar\Omega(t)}{2} & \delta_1/2 & T_e \\ 0 & T_e & \delta_2/2 \end{pmatrix}. \quad (59)$$

Assim como feito na seção 3.1, para incluir *chirped laser* ao problema fazemos $e^{-i\omega_L t} \rightarrow e^{-i\theta(t)}$ na hamiltoniana (56). Com isso, temos

$$H_{\text{RWA}} = \begin{pmatrix} \hbar\omega_0 & \frac{\hbar\Omega(t)}{2}e^{i\theta(t)} & 0 \\ \frac{\hbar\Omega(t)}{2}e^{-i\theta(t)} & \hbar\omega_1 & T_e \\ 0 & T_e & \hbar\omega_2 \end{pmatrix}. \quad (60)$$

Sendo a transformação unitária

$$S = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\theta(t)}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\theta(t)}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & e^{\frac{i\theta(t)}{2}} \end{pmatrix}. \quad (61)$$

Logo, $\tilde{H} = SH_{\text{RWA}}S^\dagger - i\hbar S \frac{dS^\dagger}{dt}$ e obtemos

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \hbar\omega_0 + \frac{(\hbar \frac{d}{dt} \overline{\theta(t)})}{2} & \frac{\hbar\Omega(t)}{2} & 0 \\ \frac{\hbar\Omega(t)}{2} & \hbar\omega_1 - \frac{(\hbar \frac{d}{dt} \overline{\theta(t)})}{2} & T_e \\ 0 & T_e & \hbar\omega_2 - \frac{(\hbar \frac{d}{dt} \overline{\theta(t)})}{2} \end{pmatrix}, \quad (62)$$

onde $\overline{\theta(t)}$ representa o conjugado complexo de $\theta(t)$, no nosso caso $\theta(t)$ é real, logo $\overline{\theta(t)} = \theta(t)$ e lembrando que $\omega(t) = \frac{d\theta(t)}{dt}$.

Então,

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \hbar\omega_0 + \frac{\hbar\omega(t)}{2} & \frac{\hbar\Omega(t)}{2} & 0 \\ \frac{\hbar\Omega(t)}{2} & \hbar\omega_1 - \frac{\hbar\omega(t)}{2} & T_e \\ 0 & T_e & \hbar\omega_2 - \frac{\hbar\omega(t)}{2} \end{pmatrix}. \quad (63)$$

Assumindo que $\hbar\omega_0 = -\hbar\omega_{10}/2$, $\hbar\omega_1 = \hbar\omega_{10}/2$ e definindo $\delta_1^0 = \hbar\omega_{10} - \hbar\omega$, logo o primeiro termo da diagonal pode ser escrito como $\hbar\omega_0 + \hbar\omega(t)/2 = \frac{1}{2}(-\delta_1^0 + 2\hbar\alpha t) = -\frac{1}{2}\Delta_1(t)$, o segundo termo $\hbar\omega_1 - \hbar\omega(t)/2 = \frac{1}{2}(\delta_1^0 - 2\hbar\alpha t) = \frac{1}{2}\Delta_1(t)$ e o terceiro termo $\hbar\omega_2 - \hbar\omega(t)/2 = \frac{1}{2}(2\hbar\omega_{21} + \delta_1^0 - 2\hbar\alpha t) = \Delta_2(t)$. Portanto o hamiltoniano é

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} -\Delta_1(t)/2 & \frac{\hbar\Omega(t)}{2} & 0 \\ \frac{\hbar\Omega(t)}{2} & \Delta_1(t)/2 & T_e \\ 0 & T_e & \Delta_2(t)/2 \end{pmatrix}, \quad (64)$$

onde $\Delta_2(t) = 2\hbar\omega_{21} + \Delta_1(t)$, $\Delta_1(t) = \delta_1^0 - 2\hbar\alpha t$ e $\Omega(t)$ dado pela equação (53).

Assim como feito do sistema de 2 níveis, aqui também construímos a figura a seguir para visualizarmos o comportamento das autoenergias do hamiltoniano (64).

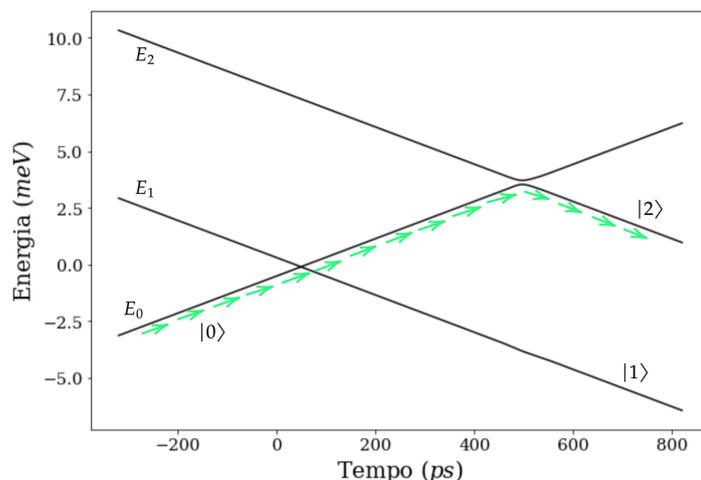


Figura 12 – Comportamento das autoenergias do hamiltoniano (64), onde E_i é a autoenergia do estado $|i\rangle$ para $i = 0, 1$ e 2 . As setas retratam os caminhos de interesse, partindo de um estado inicial $|0\rangle$ para o estado alvo $|2\rangle$, onde $\alpha > 0$.

Como pode ser visto na figura 12, é possível ir do estado fundamental $|0\rangle$ para o estado de éxciton indireto $|2\rangle$. Para que essa passagem seja possível é necessário que passe rapidamente (diabaticamente) pelo primeiro cruzamento e lentamente (adiabaticamente) pelo segundo cruzamento. Nesse sentido a escolha adequada dos parâmetros é fundamental. E para que a passagem seja a mais eficiente possível estudamos como os parâmetros se relacionam entre si. Na figura 13, é possível encontrar uma região de parâmetros que torna a passagem eficiente assim que a área total de pulso é suficientemente alta com ocupação final do estado $|2\rangle$ de até 97%. Assim como no sistema de dois níveis (figura 9), observamos que o sistema produz oscilações de Rabi perto de $\phi \sim 0$.

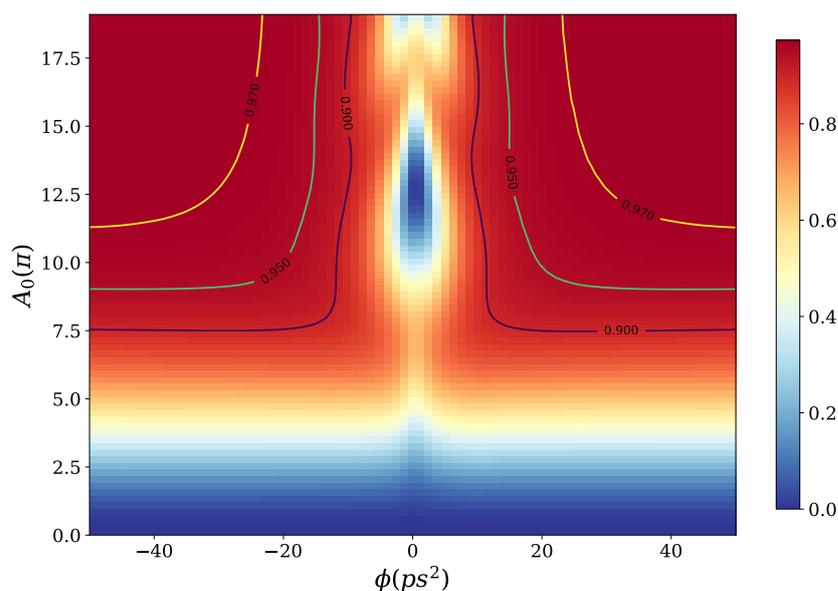


Figura 13 – Ocupação final do estado $|2\rangle$ como função de A_0 e ϕ , para os valores $\delta_1^0 = 1$ meV, $\hbar\omega_{21} = 7$ meV, $T_e = 1.2$ meV, $\tau_0 = 2$ ps.

A seguir, na figura 14, mostramos com mais detalhe como cada um dos parâmetro do hamiltoniano (53) pode influenciar na probabilidade de ocupação final do estado $|2\rangle$.

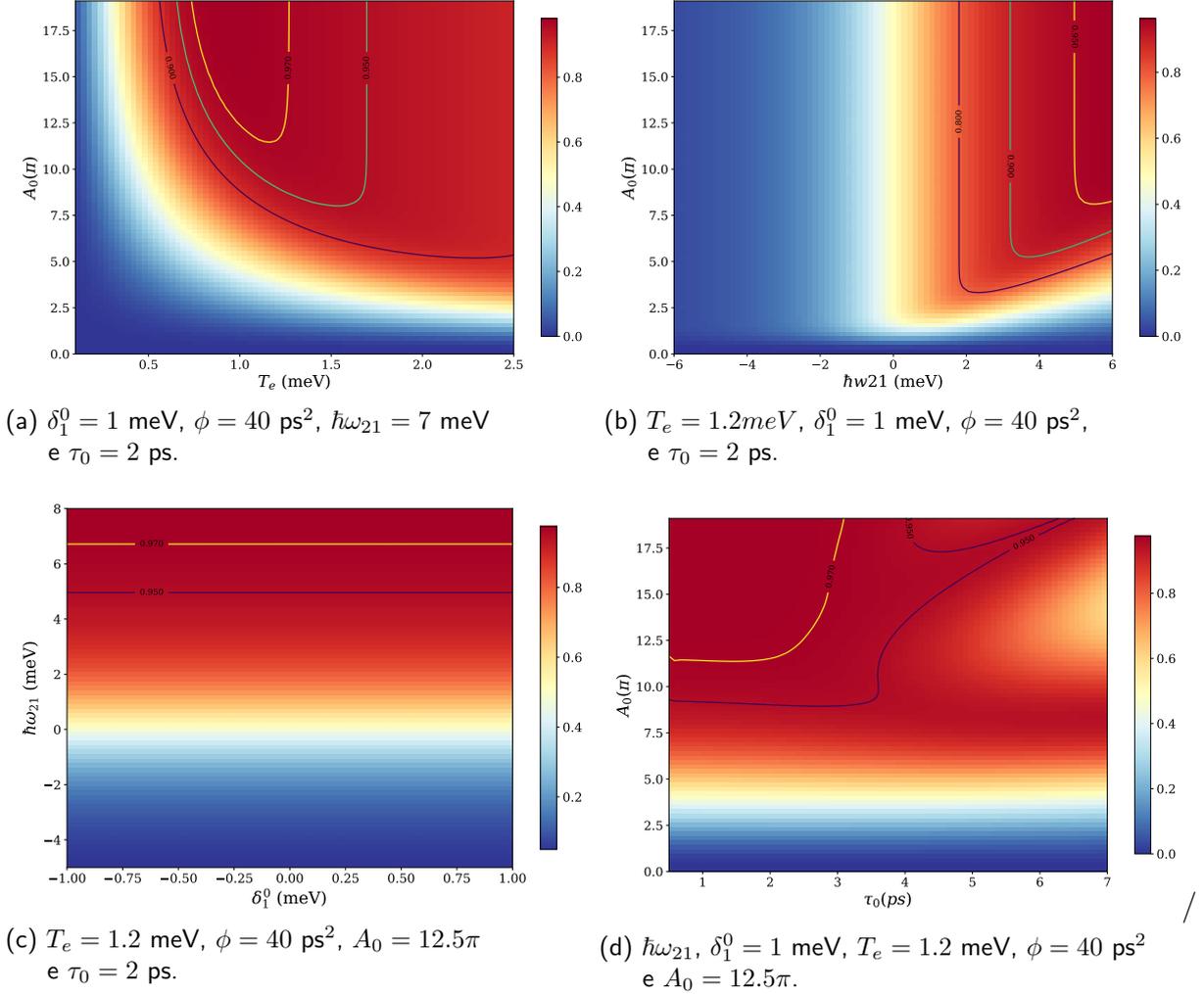


Figura 14 – Probabilidade de ocupação final do estado $|2\rangle$. (a) variamos a taxa de tunelamento T_e , (b) variamos a energia $\hbar\omega_{21}$, (c) variamos o *detuning* δ_1^0 e em (d) variamos a largura inicial de pulso τ_0 .

3.2.1 Decoerência

Aqui vamos acoplar nosso sistema com o ambiente ao seu redor. Em nosso modelo consideramos apenas como fonte de decoerência a recombinação radiativa. No capítulo 2.1 discutimos os aspectos básicos da equação mestra na forma de Lindblad, equação (13), vimos que ela é composta pela equação de Liouville-von Neumann (12) e uma outra parte não-unitária associada aos processos dissipativos, essa segunda parte é composta pelo operador de Liouville, equação (14), que aqui podemos reescrever como

$$L(\rho_S) = \frac{\Gamma_{ij}}{2} (2|i\rangle\langle j|\rho_S|j\rangle\langle i| - |j\rangle\langle j|\rho_S - \rho_S|j\rangle\langle j|), \quad (65)$$

onde Γ_{ij} representa a taxa de decaimento entre os estados, o decaimento acontece de $|i\rangle$ para $|j\rangle$.

Vimos o esquema do nosso problema na figura 11. Aqui a interação com o ambiente implicara em dois tipos de recombinações. A recombinação direta, que se da pela emissão de um fóton, quando o estado $|1\rangle$ decai para o estado $|0\rangle$, e a recombinação indireta, que se da quando o estado $|2\rangle$ decai para o estado $|0\rangle$, nesse caso a emissão de um fóton é auxiliada emissão ou absorção de uma outra partícula, tal como o fônon (uma vibração na rebe cristalina), dessa forma diminuindo a probabilidade de recombinação. (SIAS, 2006)

Como ilustração podemos considerar o seguinte diagrama:

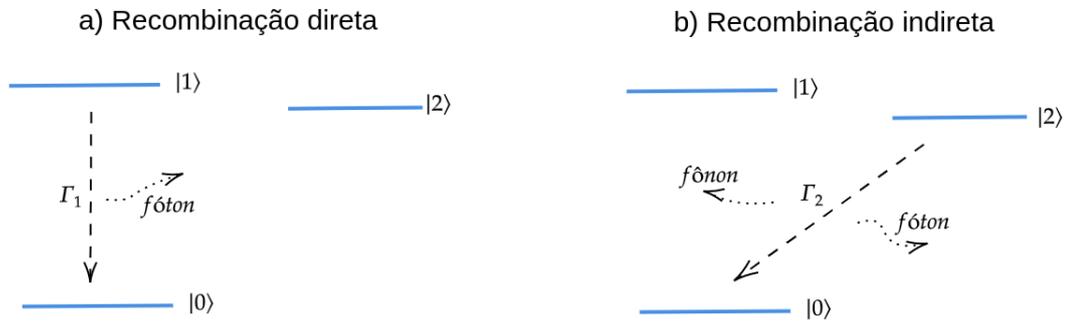


Figura 15 – Diagrama dos dois QDs semicondutores III-V acoplados por tunelamento. (a) Recombinação direta com taxa de decaimento Γ_1 e (b) Recombinação indireta com taxa de decaimento Γ_2 .

Como a probabilidade de recombinação indireta é muito menor que a probabilidade de recombinação direta, isso implica que o tempo de vida radiativo do caso indireta seja mais longo, ou seja, $\Gamma_2 \ll \Gamma_1$, dessa forma podemos considerar apenas a contribuição de Γ_1 , então reescrevendo a equação (65), temos

$$L(\rho_S) = \frac{\Gamma_1}{2} (2 |0\rangle \langle 1| \rho_S |1\rangle \langle 0| - |1\rangle \langle 1| \rho_S - \rho_S |1\rangle \langle 1|). \quad (66)$$

Dessa forma, nossa equação mestra na forma de Lindblad fica

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar} [H_S(t), \rho_S(t)] + \frac{\Gamma_1}{2} (2 |0\rangle \langle 1| \rho_S |1\rangle \langle 0| - |1\rangle \langle 1| \rho_S - \rho_S |1\rangle \langle 1|), \quad (67)$$

onde $H_S(t)$ é dado pelo hamiltoniano (64).

Para analisar a dinâmica do sistema ao interagi-lo com o ambiente externo construímos a figura 16. Notamos que quando usamos uma taxa de decaimento por volta de 10^{-3} meV o estado $|2\rangle$ continua estável para um longo tempo, esse que é um valor experimentalmente acessível. De forma ilustrativa analisamos a dinâmica para maiores valores de Γ_1 onde observamos que o estado $|2\rangle$ decai rapidamente.

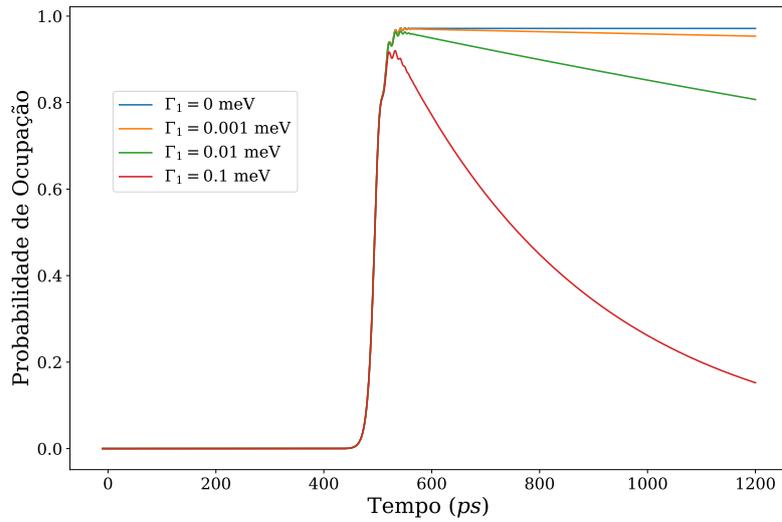


Figura 16 – Comportamento da probabilidade de ocupação do estado $|2\rangle$ quando o sistema está sobre influência do ambiente externo para diferentes taxas de decaimento Γ_1 e para $\hbar\omega_{21} = 7$ meV, $\delta_1^0 = 1$ meV, $T_e = 1.2$ meV, $\phi = 40$ ps², $A_0 = 12.5\pi$ e $\tau_0 = 2$ ps.

3.3 Dois qubits acoplados por interação de troca

Seja um sistema formado por dois qubits acoplados por uma interação de troca que acopla os estados excitados dos qubits pertencentes a subespaços de Hilbert diferentes, figura 17. Esse acoplamento é chamado de acoplamento de troca, representado por δ . Os operadores de um qubit podem ser escritos como $\sigma_i = |i\rangle\langle i|$, onde $i = e, g$ são os níveis excitado e fundamental respectivamente. O operador que produz transição do estado fundamental para o excitado é $\sigma_+ = |e\rangle\langle g|$ e do excitado para o fundamental é $\sigma_- = |g\rangle\langle e|$. Esses operadores estão relacionados com excitação óptica por um modo de campo eletromagnético de frequência ω_1 e ω_2 .

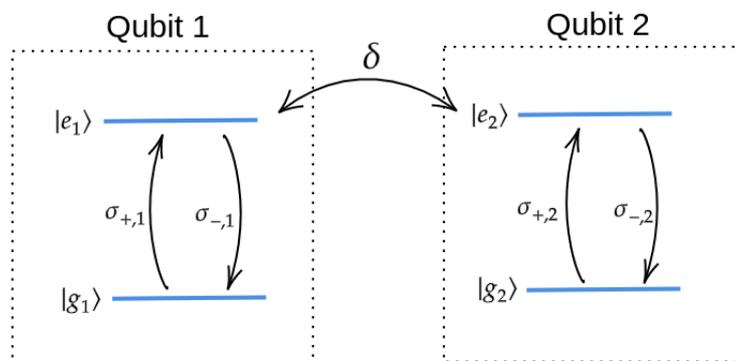


Figura 17 – Dois qubits acoplados por uma interação de troca δ que acopla os estados excitados dos 2 qubits pertencentes a subespaços de Hilbert diferentes.

Os operadores dos dois qubits podem ser escritos de forma geral como $A_1 = A \otimes \mathbb{1}$ e $A_2 = \mathbb{1} \otimes A$, assim $\sigma_{-(+),1} = \sigma_{-(+)} \otimes \mathbb{1}$ e $\sigma_{-(+),2} = \mathbb{1} \otimes \sigma_{-(+)}$. Da mesma forma $\sigma_{e(g),1} = \sigma_{e(g)} \otimes \mathbb{1}$ e $\sigma_{e(g),2} = \mathbb{1} \otimes \sigma_{e(g)}$. Os operadores da interação de troca podem ser escritos como $\sigma_{12} = \sigma_+ \otimes \sigma_-$ e $\sigma_{21} = \sigma_- \otimes \sigma_+$. Desta forma, a base para esse sistema composto é dada por 4 estados, dados por

$$(|e_1\rangle, |g_1\rangle) \otimes (|e_2\rangle, |g_2\rangle) = |e_1e_2\rangle, |g_1e_2\rangle, |e_1g_2\rangle, |g_1g_2\rangle. \quad (68)$$

O hamiltoniano do sistema formado por dois qubits não interagentes, ou seja, livre de interações é dado por

$$H_0 = \hbar\omega_{e,1}\sigma_{e,1} + \hbar\omega_{e,2}\sigma_{e,2} + \hbar\omega_{g,1}\sigma_{g,1} + \hbar\omega_{g,2}\sigma_{g,2}. \quad (69)$$

O hamiltoniano da interação entre um campo de radiação eletromagnética de dois modos com o sistema composto de dois qubits é dado na aproximação de dipolo por

$$H_i = \frac{V_1(t)}{2}(e^{i\omega_1 t} + e^{-i\omega_1 t})(\sigma_{-,1} + \sigma_{+,1}) + \frac{V_2(t)}{2}(e^{i\omega_2 t} + e^{-i\omega_2 t})(\sigma_{-,2} + \sigma_{+,2}), \quad (70)$$

onde $V_i(t)$ representa o acoplamento radiação-materia para o qubit 1 e 2.

Finalmente, a interação de troca que acopla os dois qubits é dada por

$$H_\delta = \delta(\sigma_{11} + \sigma_{21}), \quad (71)$$

onde δ representa o acoplamento de troca.

Assim, o hamiltoniano do problema é dado por

$$H = H_0 + H_i + H_\delta. \quad (72)$$

Uma aplicação para esse problema de dois qubits acoplados por interação de troca são os chamados dicalcogenetos de metais de transição (TMDs) (Apêndice A). Nesse tipo de material é possível manipular a posição dos estados eletrônicos através de um campo magnético externo B_z para aproveitar as diferentes orientações do spin em cada vale (MOLAS et al., 2019). Consideremos os pontos da zona de Brillouin K_+ e K_- de uma rede cristalina hexagonal (WS_e_2 , por exemplo). Nos pontos K_+ e K_- são formados excitons do tipo d (escuro) e b (brilhante), representados na figura 18 (a) por linhas tracejadas e solidas, respectivamente. O modelo proposto pode representar adequadamente a dinâmica dos excitons brilhantes em TMDs.

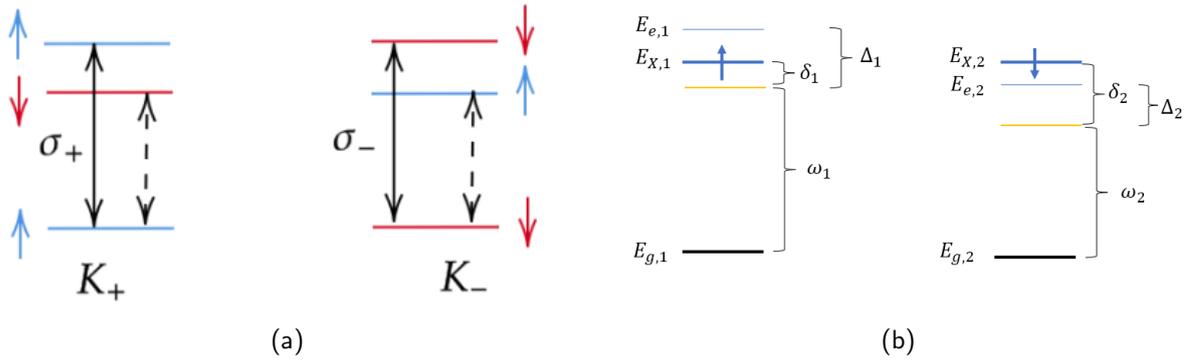


Figura 18 – (a) Representação esquemática de níveis de WSe_2 nos pontos da zona de Brillouin K_+ e K_- , as setas indicam a orientação do spin. Consideraremos unicamente a transição dada pela linha sólida (excitons brilhantes) que são excitados por luz com polarização circular $\sigma_{+,-}$. (b) As linhas sólidas representam os níveis dos estados sem a presença de campo magnético, note que a diferença de energia entre os estados excitado e fundamental do subsistema (1) e (2) sem campo magnético são iguais. As linhas sólidas finas em azul representam as energias modificadas pelo campo magnético. Dois tipos de dessintonia entre o campo e os níveis do sistema também são mostrados, Δ_i depende do campo magnético e δ_i é independente do campo magnético.

Os dois níveis dos excitons brilhantes podem ser usados como os estados de um qubit. Sendo $(|e_1\rangle, |g_1\rangle)$ os estados do qubit 1, que é formado pelo exciton no vale K_+ e $(|e_2\rangle, |g_2\rangle)$ os estados do qubit 2, que é formado pelos estados do exciton no vale K_- , vimos que a base para esse sistema composto é dada pela equação (68), ou seja $(|e_1\rangle, |g_1\rangle) \otimes (|e_2\rangle, |g_2\rangle) = |e_1e_2\rangle, |g_1e_2\rangle, |e_1g_2\rangle, |g_1g_2\rangle$. Para facilitar o problema, escrevemos $|e_1e_2\rangle = |11\rangle, |g_1e_2\rangle = |10\rangle, |e_1g_2\rangle = |01\rangle$ e $|g_1g_2\rangle = |00\rangle$.

Ao interagir esse sistema com um campo de radiação eletromagnética, o hamiltoniano é dado pela equação (72), reescrevendo o hamiltoniano na forma matricial na base $\{|11\rangle, |10\rangle, |01\rangle, |00\rangle\}$, na representação de Schrödinger temos

$$H = \begin{pmatrix} \hbar\omega_{e,1} + \hbar\omega_{e,2} & \frac{V_2}{2}(e^{i\omega_2 t} + e^{-i\omega_2 t}) & \frac{V_1}{2}(e^{i\omega_1 t} + e^{-i\omega_1 t}) & 0 \\ \frac{V_2}{2}(e^{-i\omega_2 t} + e^{i\omega_2 t}) & \hbar\omega_{e,1} & \delta & \frac{V_1}{2}(e^{i\omega_1 t} + e^{-i\omega_1 t}) \\ \frac{V_1}{2}(e^{-i\omega_1 t} + e^{i\omega_1 t}) & \delta & \hbar\omega_{e,2} & \frac{V_2}{2}(e^{i\omega_2 t} + e^{-i\omega_2 t}) \\ 0 & \frac{V_1}{2}(e^{-i\omega_1 t} + e^{i\omega_1 t}) & \frac{V_2}{2}(e^{i\omega_2 t} + e^{-i\omega_2 t}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (73)$$

onde $\hbar\omega_{e,i} = E_i$ é a energia do estado excitado do qubit i , onde $i = 1, 2$. E também $E_i = E_{X,i} + E_z$, onde $E_z = (1/2)g_b\mu B$ é a energia de Zeeman e $E_{X,i}$ são as energias livres do exciton, usualmente $E_{X1} = E_{X2}$. $\hbar\omega_i$ é a energia do laser aplicado no qubit i .

Para simplificar o problema vamos aplicar RWA, que consiste em eliminar os termos que oscilam rapidamente. Para isso primeiro vamos para a representação de interação $H_I =$

$U(t)^\dagger H(t)U(t)$, onde $U(t) = e^{-iH_0 t/\hbar}$, com isso aplicamos RWA em H_I , obtendo H_I^{RWA} , após isso voltamos para a representação de Schrödinger $H_{RWA} = U(t)H_I^{RWA}U(t)^\dagger$, onde obtemos

$$H_{RWA} = \begin{pmatrix} \hbar\omega_{e,1} + \hbar\omega_{e,2} & \frac{V_2}{2}e^{-i\omega_2 t} & \frac{V_1}{2}e^{-i\omega_1 t} & 0 \\ \frac{V_2}{2}e^{i\omega_2 t} & \hbar\omega_{e,1} & \delta & \frac{V_1}{2}e^{-i\omega_1 t} \\ \frac{V_1}{2}e^{i\omega_1 t} & \delta & \hbar\omega_{e,2} & \frac{V_2}{2}e^{-i\omega_2 t} \\ 0 & \frac{V_1}{2}e^{i\omega_1 t} & \frac{V_2}{2}e^{i\omega_2 t} & 0 \end{pmatrix}. \quad (74)$$

Agora vamos incluir ao problema dois *chirped lasers*. Como mostrado nas seções anteriores, para incluir a RWA em problemas com lasers chirped podemos fazer $e^{\pm i\omega t} \rightarrow e^{\pm i\theta(t)}$, onde $\omega(t) = \frac{d\theta(t)}{dt}$ e $\theta(t) = \omega t + \alpha t^2$. Assim, a equação (74) fica

$$H_{RWA} = \begin{pmatrix} \hbar\omega_{e,1} + \hbar\omega_{e,2} & \frac{V_2(t)}{2}e^{-i\theta_2(t)} & \frac{V_1(t)}{2}e^{-i\theta_1(t)} & 0 \\ \frac{V_2(t)}{2}e^{i\theta_2(t)} & \hbar\omega_{e,1} & \delta & \frac{V_1(t)}{2}e^{-i\theta_1(t)} \\ \frac{V_1(t)}{2}e^{i\theta_1(t)} & \delta & \hbar\omega_{e,2} & \frac{V_2(t)}{2}e^{-i\theta_2(t)} \\ 0 & \frac{V_1(t)}{2}e^{i\theta_1(t)} & \frac{V_2(t)}{2}e^{i\theta_2(t)} & 0 \end{pmatrix}. \quad (75)$$

É possível remover a dependência temporal com uma transformação unitária (referencial rotante) do tipo

$$S(t) = \begin{pmatrix} e^{i(\theta_2(t) + \frac{\theta_1(t) - \theta_2(t)}{2})} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{\frac{i(\theta_1(t) - \theta_2(t))}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\frac{i(\theta_1(t) - \theta_2(t))}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i(-\theta_2(t) - \frac{\theta_1(t) - \theta_2(t)}{2})} \end{pmatrix}. \quad (76)$$

Com isso o hamiltoniano (75) se transforma: $H_{RWA} \rightarrow \tilde{H} = S(t)H_{RWA}^\dagger + i\hbar S(t)^\dagger \frac{dS(t)}{dt}$ e obtemos

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar}{2}\dot{\theta}_2 - \frac{\hbar}{2}\dot{\theta}_1 + E_2 + E_1 & \frac{V_2(t)}{2} & \frac{V_1(t)}{2} & 0 \\ \frac{V_2(t)}{2} & \frac{\hbar}{2}\dot{\theta}_2 - \frac{\hbar}{2}\dot{\theta}_1 + E_1 & \delta e^{i(\theta_1(t) - \theta_2(t))} & \frac{V_1(t)}{2} \\ \frac{V_1(t)}{2} & \delta e^{-i(\theta_1(t) - \theta_2(t))} & -\frac{\hbar}{2}\dot{\theta}_2 + \frac{\hbar}{2}\dot{\theta}_1 + E_2 & \frac{V_2(t)}{2} \\ 0 & \frac{V_1(t)}{2} & \frac{V_2(t)}{2} & \frac{\hbar}{2}\dot{\theta}_2 + \frac{\hbar}{2}\dot{\theta}_1 \end{pmatrix}, \quad (77)$$

onde $\dot{\theta}_i = \omega_i(t) = \omega_i + 2\alpha_i t$

Definindo o *detuning* independente do tempo como $\delta_i^0 = E_{X_i} - \omega_i$. Para simplificar a hamiltoniana, também definimos $\omega_- = \omega_2 - \omega_1$, $\alpha_- = \alpha_2 - \alpha_1$ e $\alpha_+ = \alpha_2 + \alpha_1$. Com isso $\theta_1(t) - \theta_2(t) = (\omega_1 - \omega_2)t + (\alpha_1 - \alpha_2)t^2 = -(\omega_2 - \omega_1)t + (\alpha_2 - \alpha_1)t^2 = -(\omega_- t + \alpha_- t^2) = -\phi_t$. Então reescrevendo o hamiltoniano \tilde{H}

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \delta_1^0 + \delta_2^0 - \hbar\alpha_+ t & \frac{V_2(t)}{2} & \frac{V_1(t)}{2} & 0 \\ \frac{V_2(t)}{2} & \delta_1^0 + E_z + \hbar\alpha_- t & \delta e^{i(-\phi_t)} & \frac{V_1(t)}{2} \\ \frac{V_1(t)}{2} & \delta e^{-i(-\phi_t)} & \delta_2^0 - E_z - \hbar\alpha_- t & \frac{V_2(t)}{2} \\ 0 & \frac{V_1(t)}{2} & \frac{V_2(t)}{2} & \hbar\alpha_+ t \end{pmatrix}. \quad (78)$$

3.3.1 Mudança de base

Agora faremos uma mudança de base com o objetivo de transicionar para estados maximamente emaranhados, os estados de Bell, como discutido na seção 2.4. Considerando a nova base dada por $\{|11\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle), \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle), |00\rangle\}$. Dessa forma, o hamiltoniano na nova base é

$$H = \begin{pmatrix} \delta_1^0 + \delta_2^0 - \hbar\alpha_+ t & \frac{V_+(t)}{2\sqrt{2}} & \frac{V_-(t)}{2\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{V_+(t)}{2\sqrt{2}} & \frac{\delta_1^0 + \delta_2^0}{2} + \delta \cos \phi_t & \frac{\delta_1^0 - \delta_2^0}{2} + E_z + \hbar\alpha_- t + i\delta \sin \phi_t & \frac{V_+(t)}{2\sqrt{2}} \\ \frac{V_-(t)}{2\sqrt{2}} & \frac{\delta_1^0 - \delta_2^0}{2} + E_z + \hbar\alpha_- t - i\delta \sin \phi_t & \frac{\delta_1^0 + \delta_2^0}{2} - \delta \cos \phi_t & -\frac{V_-(t)}{2\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{V_+(t)}{2\sqrt{2}} & -\frac{V_-(t)}{2\sqrt{2}} & \hbar\alpha_+ t \end{pmatrix}, \quad (79)$$

onde $V_-(t) = V_2(t) - V_1(t)$ e $V_+(t) = V_2(t) + V_1(t)$, de acordo com a equação (34) temos que $V_1(t) = \frac{\hbar A_{01}}{\mu\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{\tau_{01}\tau_{p1}}} e^{-t^2/\tau_{p1}^2}$ e $V_2(t) = \frac{\hbar A_{02}}{\mu\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{\tau_{02}\tau_{p2}}} e^{-t^2/\tau_{p2}^2}$.

3.3.2 Análise para $\omega_2 = \omega_1 = \omega_L$, $\alpha_2 = \alpha_1 = \alpha$ e $B = 0$

Nesse caso, como $B = 0$, então $E_z = (1/2)g_b\mu B = 0$.

Lembrando que nosso sistema é formado por dois qubits, onde cada um é excitado por um *chirped laser* de energia $\hbar\omega_i$. Como $\omega_1 = \omega_2$, com isso os *detunings* $\delta_1^0 = E_{X1} - \omega_1$ e $\delta_2^0 = E_{X2} - \omega_2$ são iguais, ou seja $\delta_1^0 = \delta_2^0 = \delta^0$.

Então hamiltoniano (79) se torna

$$H = \begin{pmatrix} 2\delta^0 - 2\hbar\alpha t & \frac{V_+(t)}{2\sqrt{2}} & \frac{V_-(t)}{2\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{V_+(t)}{2\sqrt{2}} & \delta^0 + \delta & 0 & \frac{V_+(t)}{2\sqrt{2}} \\ \frac{V_-(t)}{2\sqrt{2}} & 0 & \delta^0 - \delta & -\frac{V_-(t)}{2\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{V_+(t)}{2\sqrt{2}} & -\frac{V_-(t)}{2\sqrt{2}} & 2\hbar\alpha t \end{pmatrix}. \quad (80)$$

Os autovalores quando $V_- = 0$ e $V_+ = 0$ são dados por

$$\lambda_1 = 2\delta^0 - 2\hbar\alpha t,$$

$$\lambda_2 = 2\hbar\alpha t,$$

$$\lambda_3 = \delta^0 - \delta,$$

$$\lambda_4 = \delta^0 + \delta,$$

com os respectivos autoestados iguais a

$$|\lambda_1\rangle = |11\rangle,$$

$$|\lambda_2\rangle = |00\rangle,$$

$$|\lambda_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle),$$

$$|\lambda_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle).$$

Construindo a figura de autovalores para o hamiltoniano (80), com $\alpha > 0$ como é mostrado na figura 19, mostrando que as autoenergias do sistema apresentam anti-cruzamentos. Na figura especificamos dois caminhos, que vão de um dado estado inicial para um estado emaranhado.

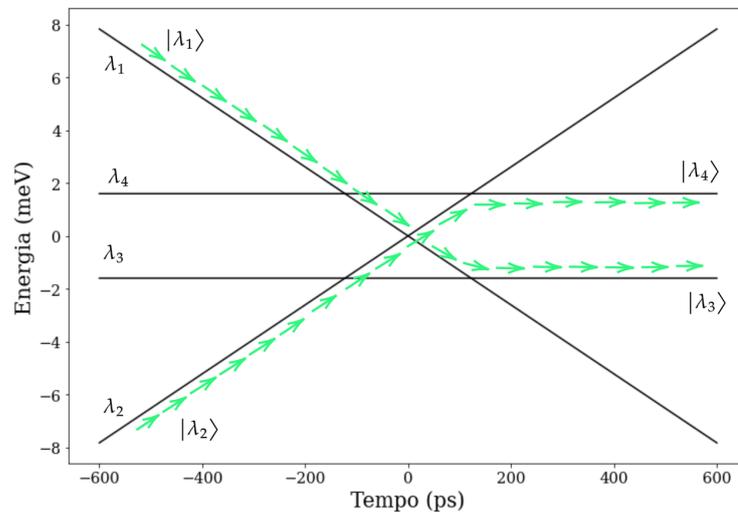


Figura 19 – Comportamento das autoenergias do hamiltoniano (80) no tempo. As setas retratam os caminhos de interesse, partindo de um estado inicial $|\lambda_1\rangle$ ($|\lambda_2\rangle$) de energia λ_1 (λ_2) para o estado emaranhado $|\lambda_3\rangle$ ($|\lambda_4\rangle$) de energia λ_3 (λ_4).

3.3.2.1 Estado inicial $|\lambda_1\rangle$

Escolhendo como estado inicial o estado excitado $|\lambda_1\rangle$. Nesse caso o sistema pode seguir caminhos diferentes dependendo do valor de δ como pode ser visto na figura 20. O comportamento da probabilidade de transição para cada estado é mostrado na figura 21.

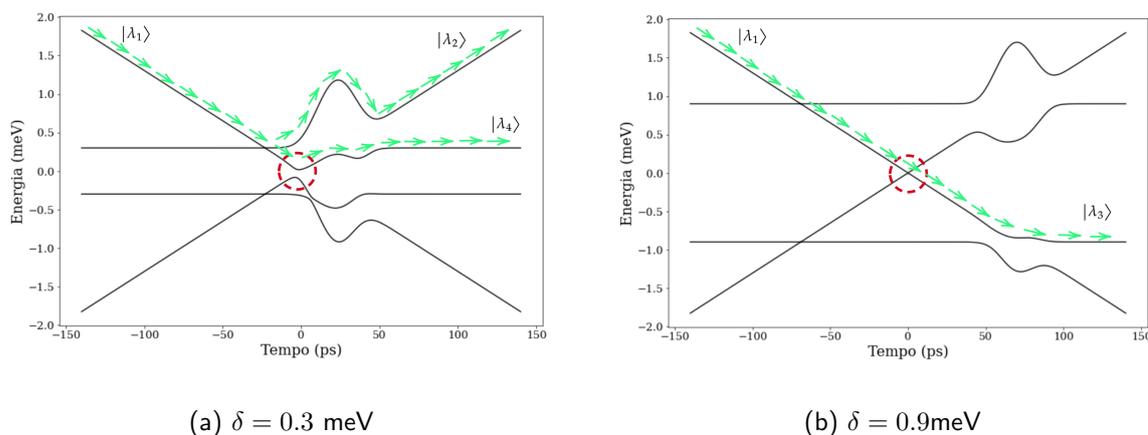


Figura 20 – Comportamento das autoenergias do hamiltoniano (80) para dois valores do *detuning* δ , sendo o estado inicial $|\lambda_1\rangle$.

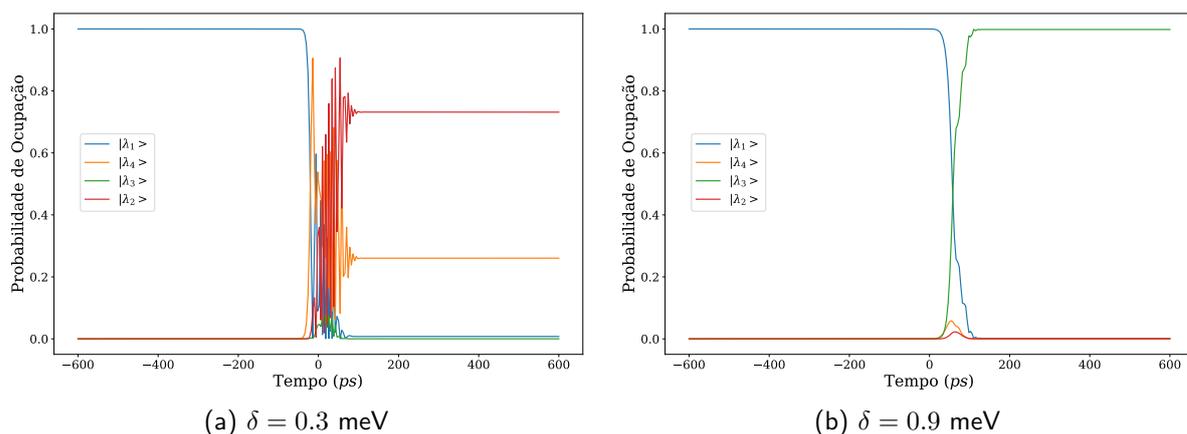
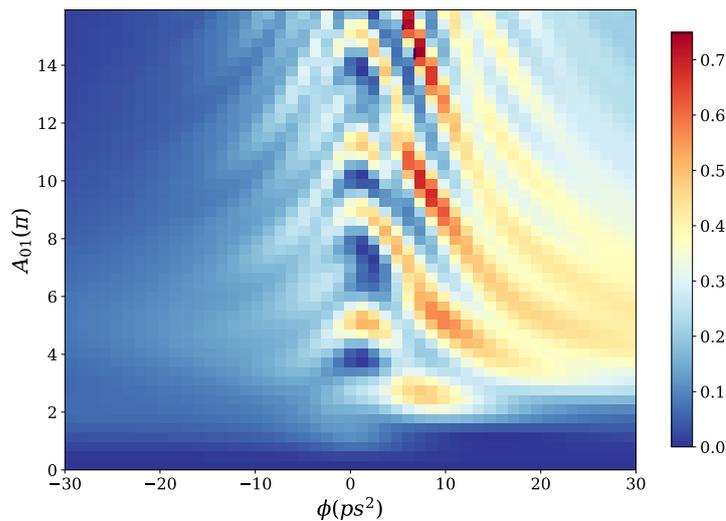
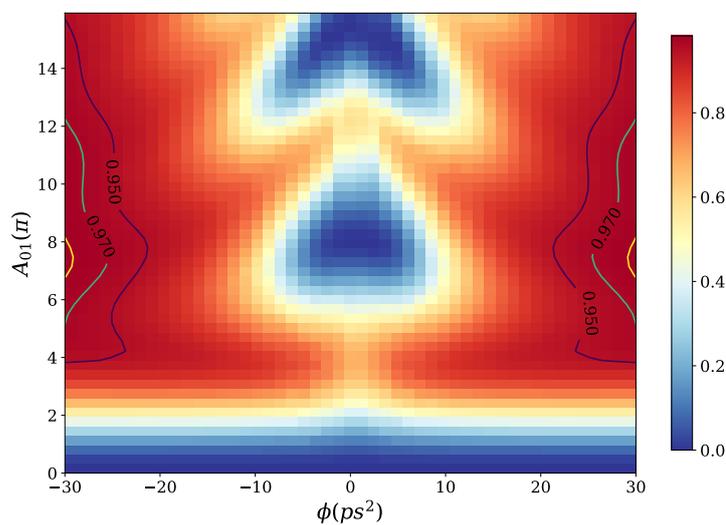


Figura 21 – Comportamento dos estados alvos sendo o estado inicial $|\lambda_1\rangle$.

Para $\delta = 0.3 \text{ meV}$, como pode ser visto na figura 21(a) a probabilidade de transição para o estado emaranhado $|\lambda_4\rangle$ é baixa. Para tentar encontrar um conjunto de parâmetros que melhore essa probabilidade, fizemos a figura 22(a), porém não chegamos a um resultado satisfatório, como era esperado, devido a abertura entre autoenergias, como mostra a figura 20(a). Para valores do *detuning* δ maiores que 0.9 meV, como pode ser visto na figura 22(b) a probabilidade de transição para o estado emaranhado $|\lambda_3\rangle$ é alta.



(a) $\delta = 0.3 \text{ meV}$



(b) $\delta = 0.9 \text{ meV}$

Figura 22 – Probabilidade de transição do estado inicial $|\lambda_1\rangle$ para o estado alvo $|\lambda_4\rangle$ (letra (a)) e para o estado alvo $|\lambda_3\rangle$ (letra(b)). Sendo $\phi_1 = \phi_2 = \phi$, $A_{02} = A_{01}/2$, $\tau_0 = 3\text{ps}$ e $\delta_0 = 0\text{meV}$.

3.3.2.2 Estado inicial $|\lambda_2\rangle$

Agora escolhendo como estado inicial o estado excitado $|\lambda_2\rangle$. Novamente o sistema pode seguir caminhos diferentes dependendo do valor de δ como pode ser visto na figura 23. O comportamento da probabilidade de transição para cada estado é mostrado na figura 24.

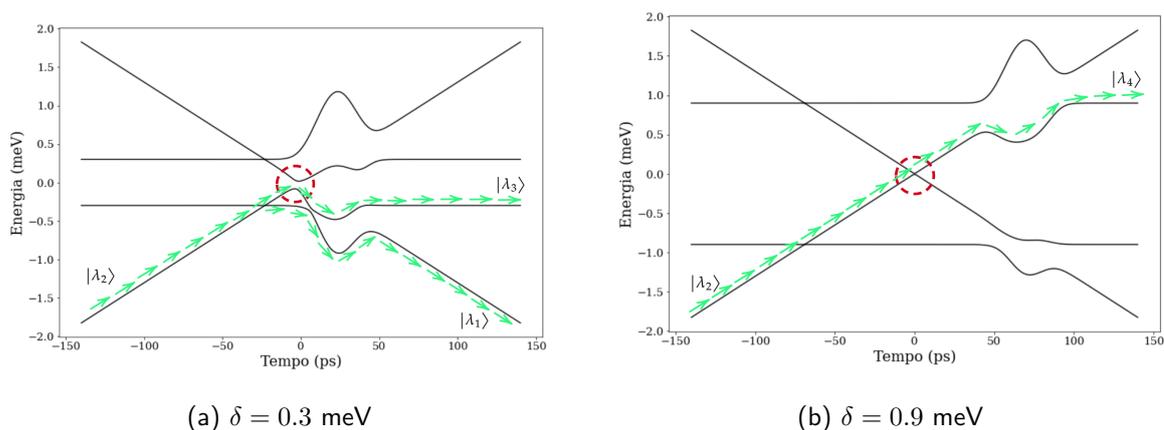


Figura 23 – Comportamento das autoenergias do hamiltoniano (80) para dois valores de δ , sendo o estado inicial $|\lambda_2\rangle$.

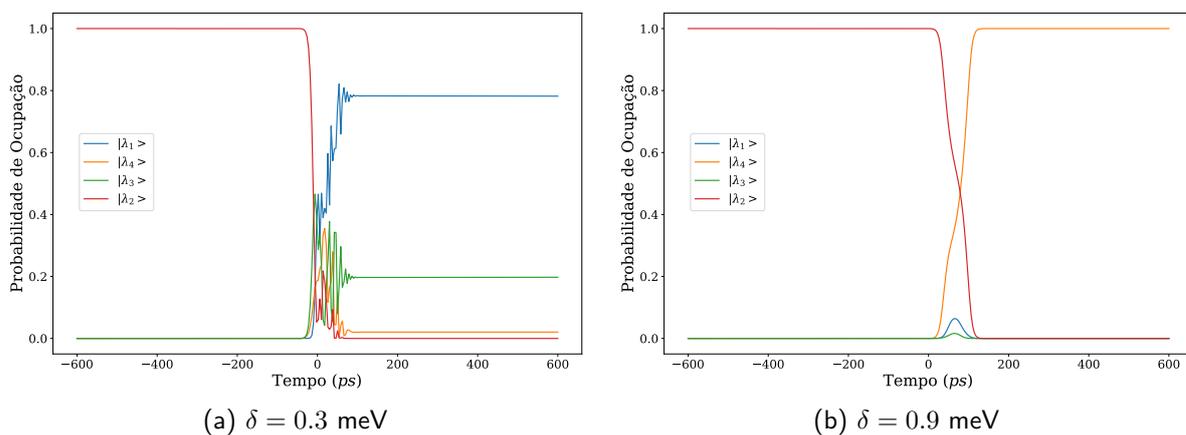


Figura 24 – Comportamento dos estados alvos sendo o estado inicial $|\lambda_2\rangle$.

Novamente para $\delta = 0.3 \text{ meV}$, como pode ser visto na figura 25(a) não é possível encontrar um conjunto de valores que tornem a probabilidade de transição para o estado emaranhado $|\lambda_3\rangle$ satisfatória. Para valores de δ maiores que 0.9 meV , como pode ser visto na figura 25(b) a probabilidade de transição para o estado $|\lambda_4\rangle$ é alta, como era esperado devido ao gap entre os estados ser pequeno, como da para ver em destaque na figura 23 (b)

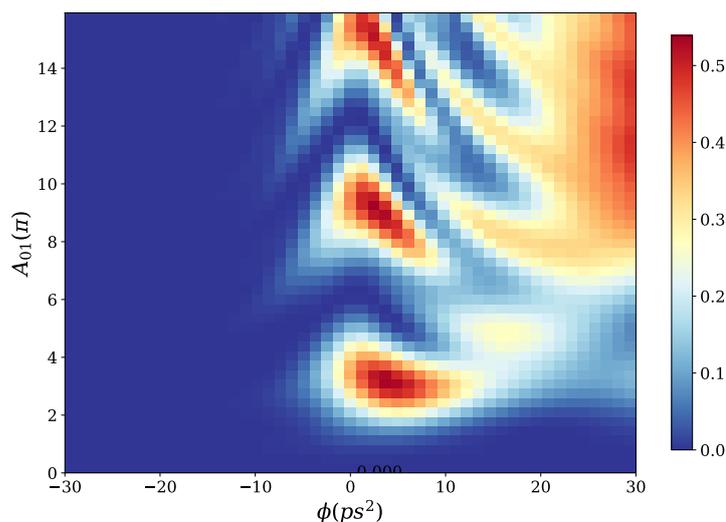
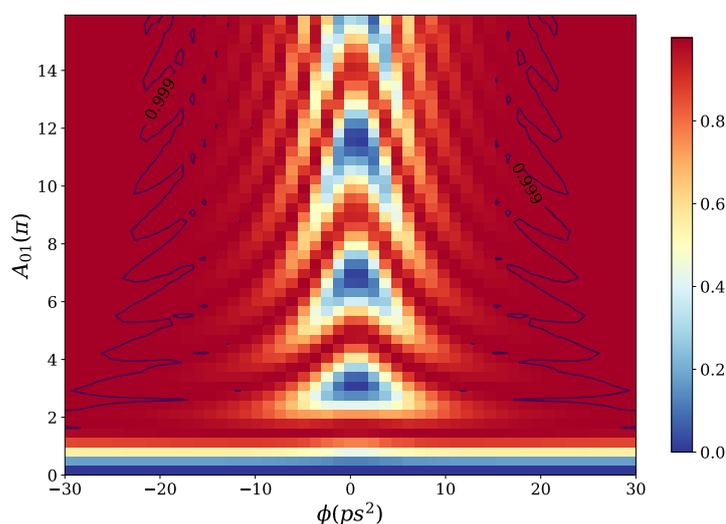
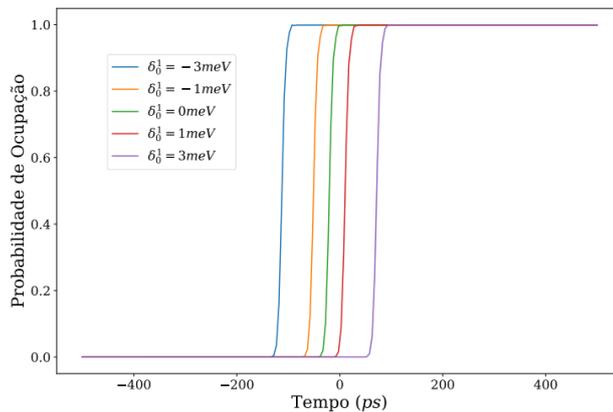
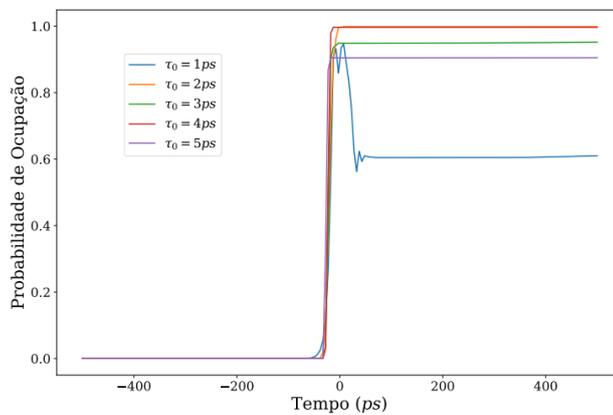
(a) $\delta = 0.3$ meV(b) $\delta = 0.9$ meV

Figura 25 – Probabilidade de transição do estado inicial $|\lambda_2\rangle$ para o estado alvo $|\lambda_3\rangle$ (letra (a)) e para o estado alvo $|\lambda_4\rangle$ (letra(b)). Sendo $\phi_1 = \phi_2 = \phi$, $A_{02} = A_{01}/2$, $\tau_0 = 3\text{ps}$ e $\delta_0 = 0\text{meV}$.

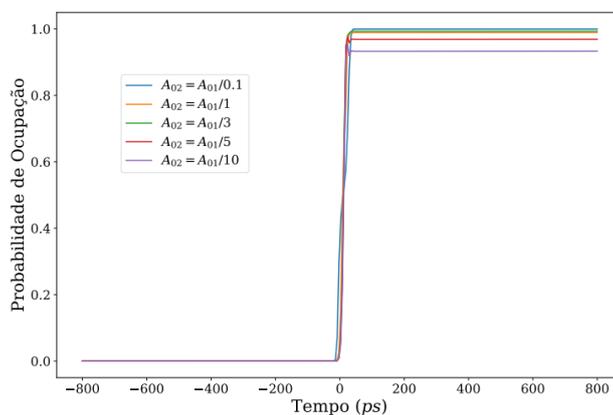
Com base nessa análise inicial, percebemos que a melhor situação é quando o estado alvo é o estado emaranhado $|\lambda_4\rangle$, sendo o estado inicial $|\lambda_2\rangle$. Na figura 25, na região $\phi \sim 0$, temos que $\tau_p \sim \tau_0$, $\alpha \sim 0$ e $E_p \sim E_0$, ou seja, o efeito chirp é fraco, logo o problema se reduz a um sistema de dois níveis excitado por um pulso gaussiano de largura τ_0 e frequência constante (independente do tempo). Esse sistema produz oscilações de Rabi, ou seja oscilações da população como função da área do pulso, que é exatamente o que se observa na figura perto de $\phi \sim 0$. Fizemos mais a figura 26 para entender melhor como os parâmetros se relacionam e como cada um pode influenciar na probabilidade de ocupação final.



(a) $\tau_0 = 2 \text{ ps}$, $\delta = 0.65 \text{ meV}$, $A_{02} = A_{01}/2$.



(b) $\delta_1^0 = 0 \text{ meV}$, $\delta = 0.65 \text{ meV}$, $A_{02} = A_{01}/2$.



(c) $\delta_1^0 = 1 \text{ meV}$, $\delta = 0.65 \text{ meV}$, $\tau_0 = 2 \text{ ps}$.

Figura 26 – Probabilidade de ocupação do estado $|\lambda_4\rangle$. (a) variando δ_1^0 , (b) variando τ_0 e (c) variando A_{02} com relação a A_{01} . Para todos os casos $\phi_1 = \phi_2 = 20 \text{ ps}^2$ e $A_{01} = 4$.

3.3.3 Decoerência

Assim como feito no capítulo 3.2.1, aqui vamos acoplar nosso sistema com o ambiente ao seu redor e considerarmos como fonte de decoerência apenas o decaimento radiativo. Para representar nosso problema podemos considerar o seguinte diagrama:

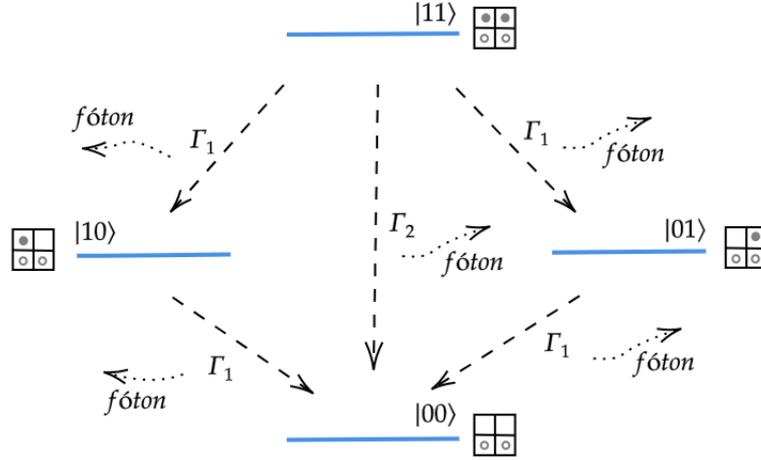


Figura 27 – Diagrama dos dois qubits acoplados por interação de troca. Mostrando as recombinções diretas com suas respectivas taxas de decaimento. Γ_1 para as situações: $|11\rangle \rightarrow |10\rangle$, $|11\rangle \rightarrow |01\rangle$, $|10\rangle \rightarrow |00\rangle$ e $|01\rangle \rightarrow |00\rangle$, e Γ_2 para $|11\rangle \rightarrow |00\rangle$.

Aqui o operador de Liouville, equação (14), fica na forma

$$\begin{aligned}
 L(\rho_S) = & \frac{\Gamma_1}{2} \sum_{j=10,01} (2|00\rangle \langle j|\rho_S|j\rangle \langle 00| - |j\rangle \langle j|\rho_S - \rho_S|j\rangle \langle j|) + \\
 & + \frac{\Gamma_1}{2} \sum_{i=10,01} (2|i\rangle \langle 11|\rho_S|11\rangle \langle i| - |11\rangle \langle 11|\rho_S - \rho_S|11\rangle \langle 11|) + \\
 & + \frac{\Gamma_2}{2} (2|00\rangle \langle 11|\rho_S|11\rangle \langle 00| - |11\rangle \langle 11|\rho_S - \rho_S|11\rangle \langle 11|). \quad (81)
 \end{aligned}$$

E nossa equação mestra na forma de Lindblad fica

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar} [H_S(t), \rho_S(t)] + L(\rho_S), \quad (82)$$

onde $H_S(t)$ é dado pelo hamiltoniano (80) e $L(\rho_S)$ dado pela equação (81).

Nesse caso vamos ter apenas recombinções diretas, porém o tempo que o estado de biexciton $|11\rangle$ leva para decair para o estado fundamental $|00\rangle$ é muito maior que o tempo que os outros estados excitônicos levam para decair, ou seja $\Gamma_2 \ll \Gamma_1$. Dessa forma considerando que $\Gamma_2 = \Gamma_1/5$ e usando nosso melhor conjunto de parâmetros, figura 25(b), construímos a figura 28, ela mostra como nosso sistema se comporta ao interagi-lo com o ambiente externo. Notemos que esse sistema é mais sensível a interação com o ambiente do que nosso sistema formado por dois QDs semicondutores acoplados por tunelamento

(seção 3.2), porém esse continua sendo um resultado muito interessante já que nosso estado de interesse $|\lambda_3\rangle$ continua estavel durante os primeiros ps após iniciar a interação, isso quando consideramos um Γ_1 na ordem de $10^{-4}meV$, para valores maiores o estado decai rapidamente.

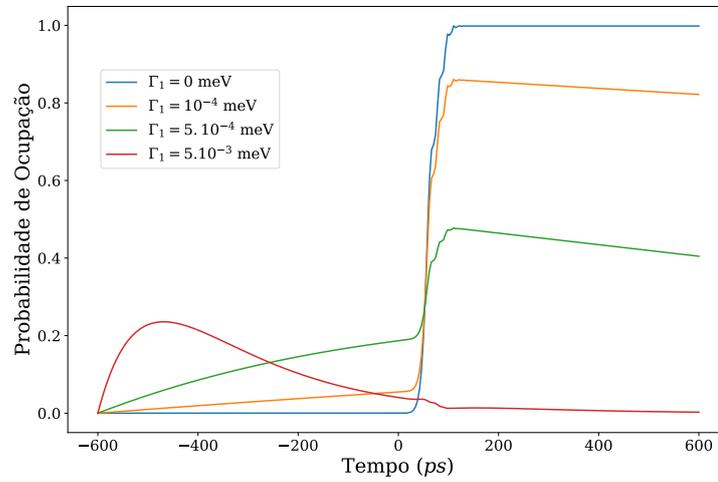


Figura 28 – Probabilidade de ocupação do estado $|\lambda_3\rangle$ para diferentes valores de Γ_1 . Sendo $\Gamma_2 = \Gamma_1/5$, $\phi_1 = \phi_2 = 50$ ps², $A_{01} = 10\pi$, $A_{02} = A_{01}/2$, $\tau_0 = 3$ ps e $\delta_0 = 0$ meV.

4 CONCLUSÃO

Apresentamos um estudo detalhado da dinâmica das transições entre estados quânticos discretos em diversos sistemas de interesse no contexto da informação quântica. Mostramos que através de uma seleção apropriada de interações ópticas e controle dos parâmetros do hamiltoniano é possível conduzir o sistema desde um estado inicial experimentalmente acessível para um estado alvo, que pode ser um estado robusto a decoerência, um estado maximamente emaranhado e etc. A construção de estados emaranhados bipartites é um aspecto fundamental na arquitetura de portas lógicas quânticas.

Inicialmente em um sistema simples de dois níveis, que pode ser interpretado como um qubit, mostramos que a partir da excitação óptica produzida por um pulso gaussiano com frequência variável no tempo (*chirped pulse*) é possível construir um hamiltoniano de Landau-Zener. A manipulação do parâmetro de velocidade permite a evolução adiabática do sistema, produzindo transições entre os dois estados diabáticos. A estratégia usada nesse sistema inicial foi fundamental para estudarmos outros sistemas de interesse.

Em nosso primeiro sistema de interesse considerado, um sistema formado por dois pontos quânticos acoplados por tunelamento, manipulamos a aplicação do pulso gaussiano para contornar os anticruzamentos na estrutura de autovalores e obtivemos uma população apreciável de um estado de exciton indireto, naturalmente robusto a mecanismos de decoerência.

No segundo sistema de interesse, consideramos um sistema geral formado por dois qubits individualmente excitados via pulsos chirped, os qubits são acoplados por uma interação de troca. Esse é um modelo geral e pode ser usado para modelar diversos sistemas, como sistemas excitônicos em cristais bidimensionais, estados de spin em pontos quânticos acoplados, etc. Mostramos numericamente que a partir de um estado inicial, experimentalmente realizável, o sistema evolui para um estado maximamente emaranhado tempos suficientemente longos. Obtemos que a população do estado emaranhado é acima do 90% para parâmetros consistentes com um sistema excitônico. Discutimos o comportamento da população do estado emaranhado para diversos regimes dos parâmetros do hamiltoniano e parâmetros de pulso chirped.

Finalmente, incluímos os mecanismos de relaxação associados a recombinação espontânea. A dinâmica não-unitária é calculada numericamente por meio da equação mestra de von Neumann-Lindblad, mostramos os efeitos sobre a população dos estados de interesse para diversos tempos de relaxação.

Em geral, mostramos a possibilidade da implementação de uma dinâmica controlada através de parâmetros da excitação óptica (*chirped pulse*) que possibilita a construção de estados emaranhados e em alguns casos robustos a processos de decoerência.

Apêndices

APÊNDICE A – Dicalcogenetos de metais de transição

Nosso problema pode ser especificado para materiais bidimensionais como grafeno e dicalcogenetos de metais de transição (TMDs), esses materiais apresentam propriedades físicas de grande interesse fundamental e aplicado decorrentes das características únicas de sua estrutura de bandas e da sua dimensionalidade reduzida. São compostos por um átomo de um metal de transição (tipicamente Mo, W) e outros dois átomos da família dos calcogênios (S, Se, Te), figura 29(a). Nos últimos anos os TMDs que apresentam propriedades semicondutoras como o MoS_2 , WS_2 têm atraído um interesse significativo em particular por suas propriedades ópticas. (MOODY; SCHAIBLEY; XU, 2016) (WANG et al., 2018)

À medida que a espessura do material é reduzida a uma única monocamada, os TMDs transitam de um semicondutor de gap indireto para um com um gap direto nos dois vales de momento K_+ e K_- localizados nas bordas da zona de Brillouin, resultando em um aumento significativo na emissão óptica em comprimentos de onda visíveis, figura 29(b).

A combinação de simetria de inversão temporal, a quebra da simetria de inversão e a forte interação spin-órbita em monocamadas TMDs produzem fenômenos onde os graus de liberdade de spin e o vale são acoplados.

Nas bordas das bandas de condução e de valência, a orientação do spin eletrônico esta unida ao grau de liberdade do pseudospin do vale $\tau = K_+, K_-$, resultando em regras de seleção óptica do tipo quiral: transições ópticas no vale K_+ são acopladas com luz de polarização σ_+ , enquanto que transições ópticas no vale K_- são acoplados com luz de polarização σ_- , figura 29(c).

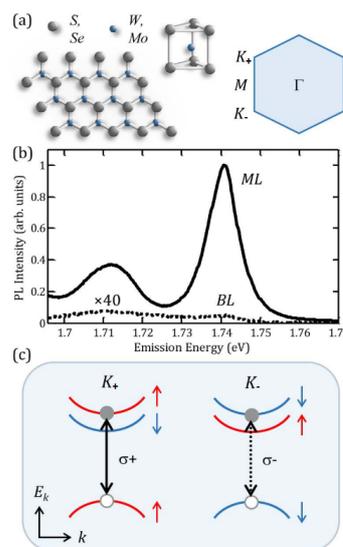


Figura 29 – (a) Representação da rede hexagonal bidimensional formada pelos TMDs. (b) Espectro de fotoluminescência para monocamada (ML) e bicamada (BL) WS_2 . (c) Representação das transições ópticas no vale K_+ (K_-) que são acopladas com luz de polarização σ_+ (σ_-). (MOODY; SCHAIBLEY; XU, 2016)

APÊNDICE B – Cálculo numérico

Os cálculos são implementados na linguagem de programação Python com o auxílio da livreria Qutip, a qual é especificamente projetada para resolver problemas de dinâmica quântica.

Encontramos as probabilidades de transição estacionárias no formalismo da matriz densidade. Inicialmente estudamos o nosso problema desconsiderando os efeitos dissipativos, dessa forma, resolvemos numericamente o sistema de equações diferenciais acopladas dadas pela equação (12), como vimos, escrita na forma

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}[H,\rho(t)], \quad (83)$$

onde H será o hamiltoniano do sistema depois das diversas transformações unitárias sobre o hamiltoniano (72) e $\rho(t)$ é a chamada matriz densidade do sistema e contém toda a informação física do sistema, de forma semelhante à função de onda de Schrödinger. Este formalismo para o caso de sistemas fechados, sem interação com o ambiente, é equivalente ao formalismo de Schrödinger.

No entanto, o formalismo da matriz densidade permite tratar também a dinâmica de sistemas quânticos abertos, onde o sistema interage com o ambiente. Nesse caso devemos resolver a equação (14), que é escrita como

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar}[H(t)_S,\rho_S(t)] + L[\rho_S(t)], \quad (84)$$

onde $L(\rho_S)$ é o operador de Liouville que descreve diversos processos de decoerência.

Para evitar um acesso de informação, aqui decidimos colocar apenas o código usado para fazer a figura 8. Para as outras figuras e para o caso dissipativo o código será muito parecido.

```

1 import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
3 from qutip import *
import time
5
options = Options(nsteps=5000)
7 start_time = time.time()
9 def delta(t):
    delta = hbar*alpha*t
11 return delta
13 def pulso(t):
    pulso = 0.5*Ep*np.exp(-(t)**2/tp**2)

```

```
15     return pulso
17 def hamiltonian_t(t, args):
18     """ evaluate the hamiltonian at time t. """
19     H0 = args[0]
20     H1 = args[1]
21     H2 = args[2]
22     return H0 + delta(t) * H1 + pulso(t) * H2
23
24 def qubit_integrate(delta0, gamma1, gamma2, psi0, tlist):
25
26     # Hamiltonian
27
28     sx = sigmax()
29     sz = sigmaz()
30     sm = destroy(2)
31
32     H0 = 0.5*delta0 * sz
33     H1 = sz
34     H2 = sx
35
36     # collapse operators
37     c_op_list = []
38
39     n_th = 0.0 # zero temperature
40
41     # relaxation
42     rate = gamma1 * (1 + n_th)
43     if rate > 0.0:
44         c_op_list.append(sqrt(rate) * sm)
45
46     # excitation
47     rate = gamma1 * n_th
48     if rate > 0.0:
49         c_op_list.append(sqrt(rate) * sm.dag())
50
51     # dephasing
52     rate = gamma2
53     if rate > 0.0:
54         c_op_list.append(sqrt(rate) * sz)
55
56     # method 3: a string that defines the coefficient. The solver generates
57     # and compiles C code using cython. This method is usually the fastest
58     # for large systems or long time evolutions, but there is fixed-time
59     # overhead that makes it inefficient for small and short-time
60     # evolutions.
61     H = [H0, [H1, delta(tlist)], [H2, pulso(tlist)]]
```

```

61     output = mesolve(H, psi0, tlist, c_op_list, [sm.dag() * sm], {})
        return output.expect[0]
63
64     ## set up the calculation
65     hbar = 0.658
        t0 = 2
67     delta0 = 0.01          # em meV
        gamma1 = 0.0         # relaxation rate
69     gamma2 = 0.0         # dephasing rate
        psi0 = basis(2,0)    # initial state
71     n = 100
        tlist = np.linspace(-100, 100, n)
73     philist = np.linspace(-20, 20, n)
        A0list = np.linspace(0,35, n)
75
76     Px = np.zeros([len(philist), len(A0list)])
77
78     for i, phi in enumerate(philist):
79         alpha = (2*phi)/(t0**4 + (2*phi)**2)
            tp = t0*np.sqrt((1 + (2*phi)**2/t0**4))
81         for j, A0 in enumerate(A0list):
            Ep = (hbar*A0/np.sqrt(np.pi))*(1/np.sqrt(t0*tp))
                    # onde modifiquei !!!
83         p_ex = qubit_integrate(delta0, gamma1, gamma2, psi0, tlist)
            Px[i,j] = np.real(p_ex[n-1])
85
86     A0list, philist = np.meshgrid(A0list, philist)
87
88     print('time elapsed = ' + str(time.time() - start_time))
89
90     ## figura
91     plt.rcParams["font.family"] = "serif"
        plt.rcParams["mathtext.fontset"] = "dejavuserif"
93     plt.rcParams.update({'font.size': 15})
        fig, ax = plt.subplots(figsize=(12,8))
95     im = ax.pcolor(philist, A0list/np.pi, Px, edgecolors='none')
        im.set_cmap('RdYIBu_r')
97     cbar = fig.colorbar(im)
        ax.set_ylabel(r'$A_0 (\pi)$', fontsize=20)
99     ax.set_xlabel(r'$\phi (\pi^2)$', fontsize=20)
        ax.axis('tight')
101
102     CS = plt.contour(philist, A0list/np.pi, Px, [0.999])
103     plt.clabel(CS, fontsize=10, colors='black')
105     ##plt.savefig('P(A0,phi)_cs.pdf', bbox_inches = "tight")

```

Referências

- BORGES, H. Dinâmica coerente de estados quânticos em nanoestruturas semicondutoras acopladas. **Universidade Federal de Uberlândia. Tese de Doutorado.**, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 6.
- DEBNATH, A. et al. High-fidelity biexciton generation in quantum dots by chirped laser pulses. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 88, p. 201305, Nov 2013. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.201305>>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 9.
- GAUGER, E. M. et al. High-fidelity all-optical control of quantum dot spins: Detailed study of the adiabatic approach. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 77, p. 115322, Mar 2008. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.115322>>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 2.
- IBÁÑEZ, S. et al. Interaction of strongly chirped pulses with two-level atoms. **Physical Review A**, APS, v. 84, n. 1, p. 013428, 2011. Citado na página 16.
- LU, T. Population inversion by chirped pulses. **Phys. Rev. A**, American Physical Society, v. 84, p. 033411, Sep 2011. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.84.033411>>. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 9.
- MALINOVSKY, V.; KRAUSE, J. General theory of population transfer by adiabatic rapid passage with intense, chirped laser pulses. **The European Physical Journal D-Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics**, Springer, v. 14, n. 2, p. 147–155, 2001. Citado na página 1.
- MOLAS, M. R. et al. Probing and manipulating valley coherence of dark excitons in monolayer WSe₂. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 123, p. 096803, Aug 2019. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.123.096803>>. Citado na página 27.
- MOODY, G.; SCHAIBLEY, J.; XU, X. Exciton dynamics in monolayer transition metal dichalcogenides. **Journal of the Optical Society of America B**, The Optical Society, v. 33, n. 7, p. C39, apr 2016. Citado 2 vezes nas páginas e 41.
- MURGIDA, G. E.; WISNIACKI, D. A.; TAMBORENEA, P. I. Coherent control of localization, entanglement, and state superpositions in a double quantum dot with two electrons. **Physical Review B**, APS, v. 79, n. 3, p. 035326, 2009. Citado na página 1.
- NAKAHARA, M. **Quantum computing: from linear algebra to physical realizations**. [S.l.]: CRC press, 2008. Citado na página 1.
- RAMSAY, A. J. et al. Phonon-induced rabi-frequency renormalization of optically driven single InGaAs/GaAs quantum dots. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 105, p. 177402, Oct 2010. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.105.177402>>. Citado na página 1.
- SAKURAI, J.; NAPOLITANO, J. Modern quantum mechanics. 2-nd edition. **Person New International edition**, 2014. Citado na página 8.
- SCHLOSSHAUER, M. A. **Decoherence: and the quantum-to-classical transition**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2007. Citado na página 2.

- SCHMIDGALL, E. R.; EASTHAM, P. R.; PHILLIPS, R. T. Population inversion in quantum dot ensembles via adiabatic rapid passage. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 81, p. 195306, May 2010. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.81.195306>>. Citado na página 1.
- SIAS, U. S. Estudo da influência da temperatura de implantação na fotoluminescência de nanocristais de silício. 2006. Citado na página 25.
- STECK, D. A. Quantum and atom optics. 2007. Citado 2 vezes nas páginas 7 e 16.
- WANG, G. et al. Colloquium : Excitons in atomically thin transition metal dichalcogenides. **Reviews of Modern Physics**, American Physical Society (APS), v. 90, n. 2, p. 021001, apr 2018. Citado na página 41.
- WONG, T. G. **Introduction to Classical and Quantum Computing**. [S.l.]: Rooted Grove, 2022. Citado na página 9.
- WUBS, M. et al. Landau-Zener transitions in qubits controlled by electromagnetic fields. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 7, n. 1, p. 218, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 14.
- ZENER, C. Non-adiabatic crossing of energy levels. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character**, The Royal Society London, v. 137, n. 833, p. 696–702, 1932. Citado na página 13.
- ZHANG, X. et al. Qubits based on semiconductor quantum dots. **Chinese Physics B**, IOP Publishing, v. 27, n. 2, p. 020305, feb 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/1674-1056/27/2/020305>>. Citado na página 1.