



**VINÍCIUS ALVES LEITÃO**

**CORRELAÇÕES QUÂNTICAS TÉRMICAS DE UM ÚNICO  
ELÉTRON EM UM PONTO QUÂNTICO DUPLO COM  
CAMPO MAGNÉTICO NÃO-HOMOGENEO**

**LAVRAS – MG**

**2023**

**VINÍCIUS ALVES LEITÃO**

**CORRELAÇÕES QUÂNTICAS TÉRMICAS DE UM ÚNICO ELÉTRON EM UM  
PONTO QUÂNTICO DUPLO COM CAMPO MAGNÉTICO NÃO-HOMOGÊNEO**

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

Prof. Dr. Moisés Porfírio Rojas Leyva  
Orientador

**LAVRAS – MG  
2023**

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

Leitão, Vinícius Alves

Correlações quânticas térmicas de um único elétron em um ponto quântico duplo com campo magnético não-homogêneo / Vinícius Alves Leitão. – Lavras : UFLA, 2023.

71 p. : il.

Dissertação (mestrado acadêmico)–Universidade Federal de Lavras, 2023.

Orientador: Prof. Dr. Moisés Porfírio Rojas Leyva .

Bibliografia.

1. Física quântica. 2. Pontos quânticos. 3. Correlações quânticas. I. Leyva, Moisés Porfírio Rojas. II. Título.

**VINÍCIUS ALVES LEITÃO**

**CORRELAÇÕES QUÂNTICAS TÉRMICAS DE UM ÚNICO ELÉTRON EM UM  
PONTO QUÂNTICO DUPLO COM CAMPO MAGNÉTICO NÃO-HOMOGÊNEO**

**THERMAL QUANTUM CORRELATIONS OF A SINGLE ELÉTRON IN A DOUBLE  
QUANTUM DOT WITH INHOMOGENEOUS MAGNETIC FIELD**

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

APROVADA em 29 de Maio de 2023.

Prof. Dr. Saulo Luís Lima da Silva CEFET-MG  
Prof. Dr. Sérgio Martins de Souza UFLA

Prof. Dr. Moisés Porfírio Rojas Leyva  
Orientador

**LAVRAS – MG  
2023**

*Dedico esse trabalho aos meus pais, Carla e Wagner, à minha irmã, Giovana, e à minha avó materna, Lenir (in memoriam).*

## **AGRADECIMENTOS**

O presente trabalho foi realizado com apoio da Fundação de Amparo à Pesquisa de Minas Gerais (FAPEMIG).

Começarei meus agradecimentos ressaltando a importância do ensino público no Brasil, pois, como professor, enfatizo que é através da educação que poderemos transformar e melhorar nosso país. Agradeço a Universidade Federal de Lavras por tornar minha graduação (e de tantas outras pessoas) possível e agora, me possibilitando uma formação continuada com o mestrado.

Agradeço à minha família que foi meu pilar: à minha mãe, Carla, ao meu pai, Wagner, e à minha irmã, Giovana, por sempre me apoiarem em meus estudos, meus sonhos e minhas conquistas tanto pessoais quanto profissionais.

Agradeço aos professores do programa de mestrado em Física do DFI pelos ensinamentos durante esses dois anos. Principalmente, presto meus agradecimentos ao meu orientador, Moisés, que fez sua parte com excelência se mostrando sempre apto para me ajudar e ao professor Onofre pela sua importantíssima ajuda em situações pontuais em que precisamos de seu auxílio.

Agradeço ao meu grande amigo, que foi meu colega de graduação e de mestrado, Rômulo, pelos anos de amizade em que nos ajudamos e nos aconselhamos, fazendo total diferença em nossa formação como físicos e professores, sendo o tipo de amigo que levarei para a vida toda. Agradeço ao restante dos meus amigos que, de uma forma indireta, também me ajudaram em momentos que precisei conversar e me distrair.

## RESUMO

Teorias de recursos quânticos desempenham um papel central no processamento de informação quântica. Em particular, coerência quântica e emaranhamento são recursos para aplicações em tecnologias quânticas, entre outras, comunicação e informação quântica. Nas últimas décadas, sua implementação em dispositivos de estado sólido tem recebido atenção considerável devido ao fato de que nanoestruturas semicondutoras, como pontos quânticos e pontos quânticos duplos, são promissoras candidatas para a implementação física de processamento de informação quântica. Nesse trabalho, estudamos o comportamento de um sistema de um único elétron confinado em um ponto quântico duplo com um desnível energético  $\varepsilon$  entre os pontos quânticos. Além disso, os pontos quânticos estão sujeitos a um campo magnético homogêneo,  $B_z$ , e um campo magnético não-homogêneo,  $B_x$ , perpendicular à  $B_z$ . Estudamos os diagramas da energia, as populações térmicas e as correlações quânticas térmicas do modelo.

**Palavras-chave:** Física Quântica. Pontos Quânticos. Correlações Quânticas.

## ABSTRACT

Quantum resource theories play a central role in quantum information processing. In particular, quantum coherence and entanglement are resources for applications in quantum technologies, such as quantum communication and information. In recent decades, their implementation in solid-state devices has received considerable attention due to the fact that semiconductor nanostructures such as quantum dots and double quantum dots are promising candidates for physical implementation of quantum processing information. In this work, we study the behavior of a system of a single electron system confined in a double quantum dot where the ground state energies of each quantum dot can be different due to the difference in level  $\epsilon$ . Additionally, the quantum dots are subjected to a homogeneous magnetic field,  $B_z$ , and an inhomogeneous transverse magnetic field,  $B_x$ , perpendicular to  $B_z$ . We study the energy diagrams, the thermal populations and the thermal correlations of the model.

**Keywords:** Quantum Physics. Quantum Dots. Quantum Correlations.



## LISTA DE FIGURAS

|  |    |
|--|----|
| <p>Figura 2.1 – Ilustração de possíveis estruturas heteroepitaxiais em superfície facetada onde os números 1 e 2 representam o material do substrato e o material depositado, respectivamente. a: revestimento uniforme, b: sistema de aglomerado "grossos"isolados, c: sistema de "aglomerados finos", d: sistema heterofásico com grande quantidade de revestimento. . . . .</p>   | 15 |
| <p>Figura 2.2 – A figura mostra diagramas esquemáticos da densidade de estados em função da energia em poços quânticos (a), fios quânticos (b) e pontos quânticos (c).</p>   | 16 |
| <p>Figura 2.3 – A figura ilustra os tipos de confinamentos existentes. A primeira (3D) apresenta o confinamento em heteroestruturas do tipo <i>bulk</i>. A segunda (2D) representa o confinamento em poços quânticos. A terceira (1D) são comumente chamados de fios quânticos, enquanto, a quarta figura, finalmente, simboliza os pontos quânticos (0D). . . . .</p>   | 17 |
| <p>Figura 2.4 – A representação gráfica para o poço de potencial infinito em função de <math>z</math>.</p>   | 17 |
| <p>Figura 2.5 – Na figura, mostra-se um ponto quântico duplo, onde existem cinco eletrodos com a polaridade negativa que são responsáveis pela construção dos pontos quânticos. Dentre esses eletrodos, temos as barreiras de tunelamento, <math>V_L, V_C, V_R</math>, e modificação de potencial, <math>V_l</math> e <math>V_r</math>. O ponto quântico do lado esquerdo corresponde à letra <math>L</math> e o da direita à <math>R</math>. Ambos estão entre a fonte, <math>S</math>, e o dreno, <math>D</math>, sendo a diferença de potencial representada por <math>V_{SD}</math>. . . . .</p> | 19 |
| <p>Figura 2.6 – Representação de um ponto quântico duplo, crescido a partir de uma estrutura de GaAs/AlGaAs. . . . .</p>   | 19 |
| <p>Figura 4.1 – A figura ilustra o modelo de um único elétron em um ponto quântico duplo, sujeito a um campo magnético constante, na direção "<math>z</math>", <math>B_z</math> e um campo magnético não-homogêneo, <math>\pm B_x</math>, apresentando um desnível de energia, <math>\varepsilon</math>, entre os pontos quânticos. O elétron pode ultrapassar o confinamento devido ao efeito túnel <math>t</math>. . . . .</p>   | 33 |
| <p>Figura 4.2 – As figuras mostram as curvas das energias <math>E_n(n = 1, 2, 3, 4)</math> em função de <math>\varepsilon</math>. Em (a) os parâmetros são <math>B_z = 16\mu eV</math>, <math>B_x = 100\mu eV</math> e <math>t = 7\mu eV</math>. Em (b) <math>B_z = 24\mu eV</math>, <math>B_x = 10\mu eV</math> e <math>t = 15,4\mu eV</math>. Em ambas as figuras, as curvas tracejadas correspondem a <math>B_x = 0</math>. . . . .</p>   | 38 |

|  |    |
|--|----|
| Figura 4.3 – A figura mostra as curvas das energias $E_n$ ( $n = 1, 2, 3, 4$ ) em função de $B_z$ . Nessas curvas, fixamos $t = 15,4\mu eV$ . As curvas contínuas correspondem à $B_x = 10\mu eV$ e as tracejadas à $B_x = 0$ . . . . .  | 40 |
| Figura 5.1 – Na figura plotamos as curvas das populações em função da temperatura $T$ na escala logarítmica. Fixamos $B_z = 16\mu eV$ , $B_x = 100\mu eV$ , $t = 7\mu eV$ , onde $\varepsilon = 1\mu eV$ (curvas contínuas) e $\varepsilon = 0$ (curvas tracejadas). . . . .   | 43 |
| Figura 5.2 – A figuras mostram as curvas das populações em função da temperatura $T$ na escala logarítmica para $B_z = 24\mu eV$ , $B_x = 10\mu eV$ , $t = 15,4\mu eV$ e $\varepsilon = 0$ (curvas tracejadas). Em (a) $\varepsilon = 1\mu eV$ (curvas contínuas) e em (b) $\varepsilon = 30\mu eV$ (curvas contínuas). . . . .              | 44 |
| Figura 5.3 – A figura mostra as curvas das populações do operador densidade, para $T = 0$ , em função de $\varepsilon$ . Na figura (a) $B_z = 16\mu eV$ , $B_x = 100\mu eV$ e $t = 7\mu eV$ . Em (b) $B_z = 24\mu eV$ , $B_x = 10\mu eV$ e $t = 15,4\mu eV$ . . . . .  | 45 |
| Figura 5.4 – Representação da profundidade dos possíveis estados do sistema. Os traços em paralelo, inferior e superior, representam o estado fundamental e o primeiro nível excitado de cada ponto quântico, respectivamente. A seta vermelha mostra o sentido de crescimento do valor de $\varepsilon$ . . . . .                           | 45 |
| Figura 5.5 – A figura mostra as curvas da concorrência em função da temperatura $T$ na escala logarítmica. Para a curva azul, $B_z = 16\mu eV$ , $B_x = 100\mu eV$ , $t = 7\mu eV$ e $\varepsilon = 1\mu eV$ . Em vermelho, $B_z = 24\mu eV$ , $B_x = 10\mu eV$ , $t = 15,4\mu eV$ e $\varepsilon = 1\mu eV$ . . . . .                       | 47 |
| Figura 5.6 – A figura mostra as curvas da concorrência, para diferentes valores de $B_x$ , em função do desnível de energia $\varepsilon$ na escala logarítmica. Aqui, fixamos $B_z = 16\mu eV$ , $t = 7\mu eV$ e $T = 0,5\mu eV$ . . . . .  | 48 |
| Figura 5.7 – As figuras mostram as curvas das concorrências em função da temperatura $T$ na escala logarítmica para diferentes valores de $\varepsilon$ . Na figura (a) os valores dos parâmetros são: $B_z = 16\mu eV$ , $B_x = 100\mu eV$ e $t = 7\mu eV$ . Na figura (b) $B_z = 24\mu eV$ , $B_x = 10\mu eV$ e $t = 15,4\mu eV$ . . . . . | 49 |
| Figura 5.8 – A figura mostra as curvas da concorrência, para diferentes valores de $B_x$ , em função da temperatura $T$ na escala logarítmica. Fixamos $B_z = 16\mu eV$ e $t = 7\mu eV$ para $\varepsilon = 1\mu eV$ (curvas contínuas) e para $\varepsilon = 0$ (curvas tracejadas). . . . .  | 50 |

- Figura 5.9 – A figura mostra as curvas da concorrência  $C$  em função de  $B_x$ . Fixamos  $B_z = 16\mu eV$ ,  $t = 7\mu eV$  e  $T = 0,3\mu eV$  para  $\varepsilon = 1\mu eV$  (curva contínua) e  $\varepsilon = 0$  (curva tracejada). . . . . 51
- Figura 5.10 – As figuras mostram as curvas da concorrência (curvas contínuas) e da coerência correlacionada (curvas tracejadas) em função da temperatura  $T$  na escala logarítmica para para dois conjuntos de valores. Na figura (a) os valores são  $B_z = 16\mu eV$ ,  $B_x = 100\mu eV$ ,  $t = 7\mu eV$  e  $\varepsilon = 1\mu eV$ , enquanto na figura (b) os parâmetros são os mesmos, mas  $\varepsilon = 0$ . Na figura (c) fixamos  $B_z = 24\mu eV$ ,  $B_x = 10\mu eV$ ,  $t = 15,4\mu eV$  e  $\varepsilon = 10\mu eV$ . A figura (d) possui os mesmos parâmetros, mas  $\varepsilon = 0$ . . . . . 54
- Figura 5.11 – As figuras mostram as curvas da fidelidade,  $F_n$  associada a cada vetor de estado  $|\varphi_n\rangle$  em função de  $T$  na escala logarítmica. As curvas contínuas correspondem a  $\varepsilon = 30\mu eV$  e as tracejadas possuem  $\varepsilon = 0$  Em (a) fixamos  $B_z = 16\mu eV$ ,  $B_x = 100\mu eV$  e  $t = 7\mu eV$ , enquanto que em (b)  $B_z = 24\mu eV$ ,  $B_x = 10\mu eV$  e  $t = 15,4\mu eV$ . . . . . 56
- Figura 5.12 – A figura mostra as curvas da fidelidade,  $F_n$  associada a cada vetor de estado  $|\varphi_n\rangle$  em função da temperatura  $T$  na escala logarítmica. Fixamos os parâmetros, correspondentes a um ponto de degenerescência entre  $E_3$  e  $E_4$ ,  $B_z = 16\mu eV$ ,  $B_x = 0$ ,  $t = 7\mu eV$  e  $\varepsilon = 2\sqrt{15}\mu eV$ . . . . . 57

## SUMÁRIO

|              |  |    |
|--------------|--|----|
| <b>1</b>     | <b>INTRODUÇÃO</b>  | 11 |
| <b>2</b>     | <b>PONTOS QUÂNTICOS</b>  | 13 |
| <b>2.1</b>   | <b>Heteroestruturas semicondutoras</b>                                 | 13 |
| <b>2.2</b>   | <b>Pontos quânticos</b>  | 15 |
| <b>2.3</b>   | <b>Pontos quânticos duplos</b>   | 18 |
| <b>3</b>     | <b>CORRELAÇÕES QUÂNTICAS E COERÊNCIA QUÂNTICA</b>                      | 21 |
| <b>3.1</b>   | <b>Formalismo operador densidade</b>                                   | 21 |
| <b>3.1.1</b> | <b>Estado puro</b>   | 21 |
| <b>3.1.2</b> | <b>Estado misto</b>  | 23 |
| <b>3.1.3</b> | <b>Operador densidade de um modelo em banho térmico</b>                | 25 |
| <b>3.1.4</b> | <b>Populações</b>  | 26 |
| <b>3.1.5</b> | <b>Operador densidade reduzido</b>                                     | 26 |
| <b>3.2</b>   | <b>Emaranhamento Quântico</b>  | 27 |
| <b>3.2.1</b> | <b>Concorrência Quântica</b>   | 29 |
| <b>3.3</b>   | <b>Coerência Quântica</b>  | 30 |
| <b>3.3.1</b> | <b>Norma-<math>l_1</math></b>  | 30 |
| <b>3.3.2</b> | <b>Coerência Correlacionada</b>  | 31 |
| <b>3.4</b>   | <b>Fidelidade Térmica</b>  | 32 |
| <b>4</b>     | <b>MODELO EM ESTUDO</b>  | 33 |
| <b>4.1</b>   | <b>Descrição do Modelo e suas Energias</b>                             | 33 |
| <b>4.1.1</b> | <b>Operador Densidade do modelo</b>                                    | 35 |
| <b>4.2</b>   | <b>Energias e Operador Densidade para <math>\varepsilon = 0</math></b> | 38 |
| <b>5</b>     | <b>DISCUSSÕES E RESULTADOS</b>   | 42 |
| <b>5.1</b>   | <b>Populações para <math>T &gt; 0</math></b>                           | 42 |
| <b>5.1.1</b> | <b>Populações em <math>T = 0</math></b>                                | 44 |
| <b>5.2</b>   | <b>Concorrência para <math>\varepsilon \neq 0</math></b>               | 46 |
| <b>5.3</b>   | <b>Concorrência para <math>\varepsilon = 0</math></b>                  | 48 |
| <b>5.4</b>   | <b>Coerência Correlacionada para <math>\varepsilon \neq 0</math></b>   | 51 |
| <b>5.5</b>   | <b>Coerência Correlacionada para <math>\varepsilon = 0</math></b>      | 52 |
| <b>5.6</b>   | <b>Fidelidade térmica</b>  | 55 |

|          |   |    |
|----------|---|----|
| <b>6</b> | <b>CONSIDERAÇÕES FINAIS</b> . . . . .   | 58 |
|          | <b>REFERÊNCIAS</b> . . . . .  | 60 |
| <b>A</b> | <b>Apêndice A - Matriz Densidade</b> . . . . .  | 64 |
| <b>B</b> | <b>Apêndice B - Cálculo da matriz densidade para <math>\varepsilon = 0</math></b> . . . . . | 67 |
| <b>C</b> | <b>Apêndice C - Cálculo da concorrência para <math>\varepsilon = 0</math></b> . . . . .     | 70 |

## 1 INTRODUÇÃO

À medida que o tempo passa, a computação clássica vem perdendo espaço e se reconhece a importância de realizar processos mais rápidos através da computação quântica (FOWLER et al., 2012; CÓRCOLES et al., 2015). Diferentemente da computação clássica, onde um *bit* (unidade básica de informação) pode assumir, unicamente, 0 ou 1, na computação quântica, um *qubit* pode ser um deles ou uma combinação linear dos dois. Por mais que apresente certa complicação, se tratando de estados quânticos emaranhados, a computação quântica pode modelar a realidade com mais excelência, tornando os cálculos menos aproximados do que um computador convencional (COELHO, 2013).

O confinamento em um ponto quântico se trata de aprisionar cargas nas três dimensões. Possuem alguns tipos de confinamentos: em uma dimensão (poço quântico), em duas dimensões (fio quântico) e em três dimensões (ponto quântico). Os primeiros indícios de que um confinamento em três dimensões era possível ocorreram no início dos anos de 1980, quando A. I. Ekimov e seus colegas da Ioffe Physical-Technical Institute observaram espectros ópticos incomuns em amostras de vidro contendo semicondutores que foram submetidas a altas temperaturas. Ekimov, então, sugeriu que o aquecimento resultou na precipitação de nanocristais do semicondutor e que o confinamento de elétrons nesses nanocristais sucedeu no comportamento óptico observado (REED, 1993). A nanociência se tornou uma das áreas mais estudadas nas últimas décadas e, conseqüentemente, potencializou a necessidade de fabricar dispositivos de dimensões cada vez menores e, ainda, entender o comportamento da matéria em escalas nanométricas (BUKOWSKI; SIMMONS, 2002).

Os pontos quânticos (*PQs*) em materiais semicondutores têm se mostrado propícios para a implantação na computação quântica (LOSS; DIVINCENZO, 1998; BURKARD; LOSS; DIVINCENZO, 1999), e em mais dispositivos tecnológicos tais como lasers (SANTOS, 2018), memórias de alta densidade (MELO, 2010), células solares (VITORETI et al., 2017), entre outras aplicações (PRADO, 2016; PONTES, 2022). Os *PQs* são regiões de dimensões nanométricas (ordem de  $10^{-9}m$ ) em heteroestruturas, onde cargas podem ser confinadas nas três dimensões espaciais. Por conta do confinamento em regiões extremamente pequenas, esses *PQs* apresentam níveis discretos de energia e se assemelham com átomos e, conseqüentemente, são popularmente conhecidos como átomos artificiais. A composição de mais pontos quânticos

pode ser realizada por meio de tunelamento (BRACKER et al., 2006), sendo chamada de ponto quântico duplo (*PQD*) ou molécula artificial.

Este trabalho constitui em abordar os conceitos dos pontos quânticos e de um ponto quântico duplo e, mais precisamente, aprofundar o estudo de um modelo onde um único elétron está confinado em um *PQD*, sujeito a um bloqueio de Coulomb (ALEINER; BROUWER; GLAZMAN, 2002), e pode alternar entre um *PQ* para outro através do efeito túnel, configurando um sistema de *PQD*. Esses *PQs*, podem ser, ou não, simétricos, configurando o caso particular e o caso geral, respectivamente. Nosso ponto quântico duplo é submetido a um campo magnético transversal (não-homogêneo) e outro paralelo (constante). Mesmo sem a presença de duas partículas, veremos que existe emaranhamento entre o estado de carga e o estado de *spin* do elétron. Estudamos as energias, populações, correlações quânticas e a fidelidade térmica.

Como uma breve descrição do que é abordado em cada capítulo, veremos, no capítulo 2, a apresentação do conceito de *PQ* e *PQD* em heteroestruturas semicondutoras. No capítulo 3, é apresentado o formalismo operador densidade, juntamente com as correlações quânticas e da coerência quântica do modelo. No capítulo 4 é apresentado o modelo em estudo, suas energias e seu operador densidade, tanto para o caso geral quanto para o caso particular. No capítulo 5 são apresentados os gráficos, com discussões, das populações, da concorrência, da coerência correlacionada e da fidelidade térmica. Finalmente, no capítulo 6 são discutidas as observações e conclusões sobre o que foi estudado no decorrer do trabalho.

## 2 PONTOS QUÂNTICOS

### 2.1 Heteroestruturas semicondutoras

Para discutir sobre heteroestruturas de semicondutores, primeiramente, deve-se ressaltar o início da pesquisa sobre os próprios semicondutores. Marconi, em 1895, conduziu tentativas de transmissão sem fio de sinais elétricos, obtendo sucesso, em 1901, com transmissões de um lado a outro do oceano Atlântico. Uma das primeiras etapas de detecção desses sinais eram feitas por um tubo, contendo limalha de ferro. Posteriormente, foi descoberto um material, extraído do chumbo, chamado de galena, que apresentava uma melhor detecção aos sinais de rádio, se comparado ao tubo contendo limalha de ferro. A melhor detecção dos sinais de rádio, utilizando a galena, motivou, inicialmente, a pesquisa por materiais semicondutores (CHIQUITO; JR, 1998).

Os materiais semicondutores apresentam resistência à passagem de corrente elétrica quando é aplicada uma diferença de potencial em sua polaridade. Os avanços mais consideráveis aconteceram após a Segunda Guerra Mundial, quando as pesquisas estavam em alta nos laboratórios da companhia telefônica dos EUA. Essas pesquisas foram guiadas por Willian Shockley com a direção de Karl Lark-Horovitz. O objetivo e empenho de Shockley estavam direcionados a materiais que pudesse ser incorporado às válvulas de recepção dos sinais de rádio, como por exemplo: filmes finos de silício (CHIQUITO; JR, 1998). Em 1947, J. Bardeen e W. Brattain demonstraram o efeito transistor <sup>1</sup> em materiais semicondutores e, dessa forma, a comunidade científica direcionou sua atenção ao estudo desses materiais (OLIVEIRA et al., 2019).

As pesquisas, inicialmente, exploraram as propriedades físicas dos semicondutores em porções de dimensões macroscópicas (*bulk*). Os maiores avanços surgiram por volta de 1970 com o surgimento das estruturas híbridas, ou heteroestruturas, que são formadas por camadas de materiais semicondutores diferentes e intercalados (CHIQUITO, 2001). A engenharia de menos de três dimensões teve início no começo da década de 1970 quando alguns grupos da AT&T Bell Laboratories e da IBM criaram os primeiros poços quânticos bidimensionais, camada atômica por vez, sendo regiões finas de material semicondutor que atraem elétrons (REED, 1993).

---

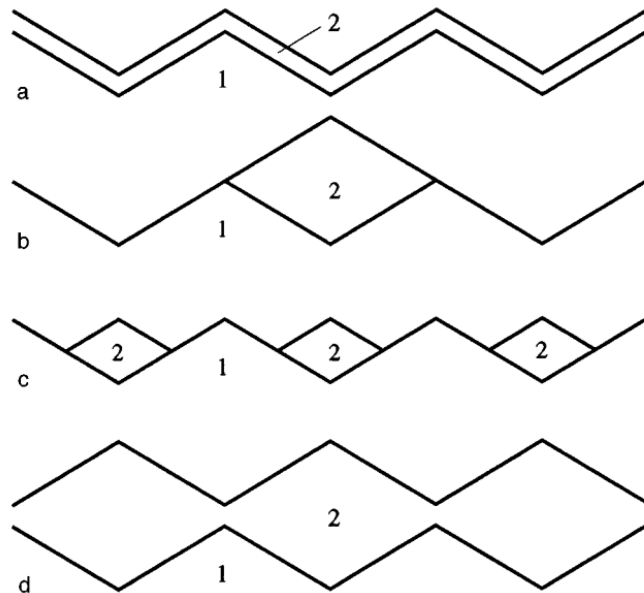
<sup>1</sup> Os transistores estão contidos em praticamente todos os dispositivos eletrônicos da atualidade. Sua função é barrar ou amplificar a corrente elétrica de entrada.



Experimentalmente, foram realizadas as primeiras observações sobre as heteroestruturas em 1974, quando Chang, Easky e Tsu notaram o tunelamento ressonante em barreiras duplas e essa foi a primeira demonstração experimental das novas propriedades físicas de heteroestruturas de poços quânticos (ALFEROV, 1998). Ao longo de muitos anos, foram feitas várias tentativas de fabricar pontos quânticos por "meios tradicionais"(como por exemplo: corrosão seletiva de estruturas de poços quânticos, condensação em matrizes vítreas, crescimento em substratos perfilados e em faces de clivagem), mas a demonstração sobre a fundamental possibilidade de representar um átomo como um espectro de uma densidade de estados em uma estrutura semicondutora macroscópica não foi realizada (LEDENTSOV et al., 1998).

Entre as décadas de 80 e 90, as técnicas de fabricação foram otimizadas, consequentemente se fez possível construir heteroestruturas com o crescimento de camadas monoatômicas individuais, resultando em redes cristalinas artificiais através, como por exemplo, da técnica de epitaxia por feixe molecular, conhecida como MBE (*molecular beam epitaxy*) (OLIVEIRA et al., 2019). Esses materiais heteroestruturados otimizados apresentam diferenças quanto aos materiais do tipo *bulk* devido a diferentes propriedades entre os materiais envolvidos, como, por exemplo, a afinidade eletrônica e a função trabalho (SILVA, 2008). A Fig.(2.1) representa alguns possíveis tipos de crescimento heteroepitaxial de heteroestruturas semicondutoras.

Figura 2.1 – Ilustração de possíveis estruturas heteroepitaxiais em superfície facetada onde os números 1 e 2 representam o material do substrato e o material depositado, respectivamente. a: revestimento uniforme, b: sistema de aglomerado "grossos" isolados, c: sistema de "aglomerados finos", d: sistema heterofásico com grande quantidade de revestimento.



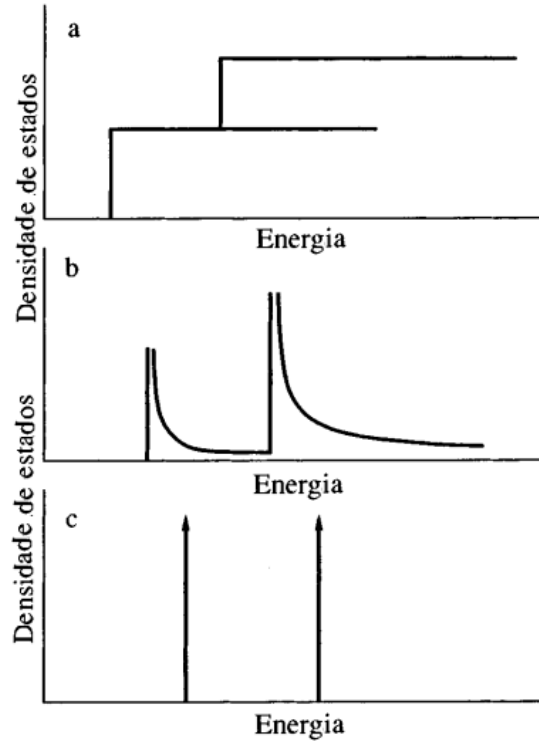
Fonte: extraído de (LEDENTSOV et al., 1998)

## 2.2 Pontos quânticos

A partir da otimização das tecnologias, tornou-se possível o confinamento de partículas em regiões cada vez menores de espaço. Juntando-se finas camadas de semicondutores, produz-se um confinamento em uma dimensão, deixando que a partícula carregada confinada esteja livre em duas dimensões, produzindo um poço potencial. Com técnicas de crescimento ainda mais sofisticadas, foi possível confinar portadores de carga em duas dimensões, produzindo fios quânticos. Por consequência do sucesso do confinamento de partículas com cargas em baixas dimensões em semicondutores, as pesquisas em semicondutores de zero dimensão aumentaram significativamente (BUKOWSKI; SIMMONS, 2002).

A Fig.(2.2) mostra um diagrama esquemático da função de densidade de estados para poços quânticos (a), fios quânticos (b) e pontos quânticos (c). Os pontos quânticos são, comumente, chamados de átomos artificiais uma vez que possuem um espectro de níveis de energia, além de poder conter uma quantidade discreta de elétrons, assim como átomos naturais (KAST-

Figura 2.2 – A figura mostra diagramas esquemáticos da densidade de estados em função da energia em poços quânticos (a), fios quânticos (b) e pontos quânticos (c).



Fonte: modificado de (ALFEROV, 1998)

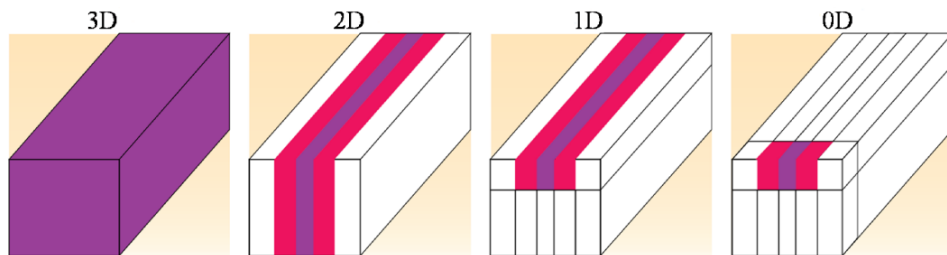
NER et al., 1993). As propriedades dos *PQs* são determinadas pelos distintos processos de formação, sendo, a auto-organização, o modo de crescimento de *PQs*, pelo processo MBE, o mais utilizado. Essa técnica de produção de átomos artificiais apresenta uma densidade de pontos quânticos na ordem de  $10^9 \text{ cm}^{-2}$  a  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (OLIVEIRA et al., 2019).

O confinamento do elétron em um ponto quântico pode ser representado matematicamente analisando, primeiramente, um poço potencial. Podemos representar um elétron confinado em uma dimensão, ( $z$ ), através da equação de Schrodinger (COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOE, 1986):

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

onde  $\hbar$  é a constante de Plank,  $m$  é a massa do elétron,  $\psi$  é a função de onda e  $E$  representa a energia do sistema em questão. O potencial  $V(z)$  possui valor nulo quando  $0 < z < a$  e tende a infinito em todos os demais valores de  $z$ , assim como representa a Fig.(2.4).

Figura 2.3 – A figura ilustra os tipos de confinamentos existentes. A primeira (3D) apresenta o confinamento em heteroestruturas do tipo *bulk*. A segunda (2D) representa o confinamento em poços quânticos. A terceira (1D) são comumente chamados de fios quânticos, enquanto, a quarta figura, finalmente, simboliza os pontos quânticos (0D).

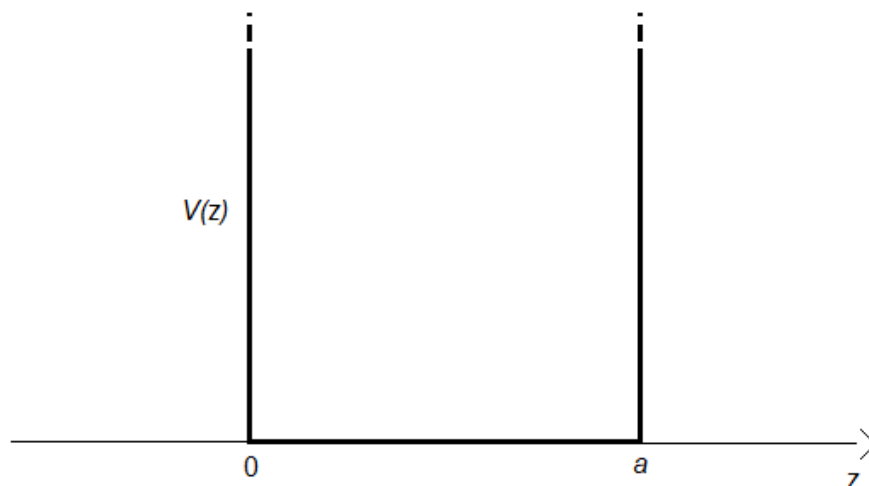


20 Nanômetros

Fonte: extraído de

Oliveira et al. (2019) (p.10)

Figura 2.4 – A representação gráfica para o poço de potencial infinito em função de  $z$ .



Fonte: Autor

As soluções para o poço potencial infinito são as funções de ondas estacionárias, normalizadas,

$$\psi_{n_z}(z) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n_z \pi z}{a}\right), \quad (2.2)$$

onde  $n_z$  corresponde a números inteiros positivos. As energias correspondentes são

$$E_z = \frac{n_z^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (2.3)$$

Seguindo o mesmo raciocínio, é intuitivo imaginar como a energia total de um sistema dado por um ponto quântico seria. Um ponto quântico apresenta confinamento em três dimen-

sões, ou seja, a partícula não possui liberdade para se mover em nenhuma direção. Consequentemente, a energia total dos pontos quânticos é dada por

$$E_T = \frac{n_x^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} + \frac{n_y^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} + \frac{n_z^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad (2.4)$$

onde apresenta energia quantizada em todas as direções e está ilustrado na imagem 0D da Fig.(2.3).

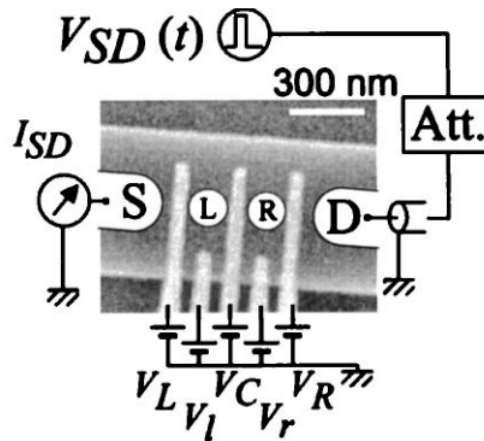
### 2.3 Pontos quânticos duplos

Os dispositivos de ponto quântico duplo (*PQD*) são considerados atualmente, os componentes ideais para estudar a física de elétrons devido ao fato de estarem fortemente correlacionados à flexibilidade para mudar sua geometria e o acoplamento de forma contínua (LIAO; HUANG; WANG, 2015). Existem propostas de *PQD* utilizando a carga do elétron (GORMAN; HASKO; WILLIAMS, 2005; DAHBI et al., 2023; SHINKAI et al., 2009), seu estado de *spin* (D'ANJOU; BURKARD, 2019; BENITO et al., 2019; BURKARD et al., 2021), ambas simultaneamente (YANG; COPPERSMITH; FRIESEN, 2020; MIELKE; PETTA; BURKARD, 2021; FILGUEIRAS; ROJAS; ROJAS, 2020; FERREIRA; ROJAS; ROJAS, 2023) e, também, possuem aplicações em máquinas térmicas (OLIVEIRA; ROJAS; FILGUEIRAS, 2021).

Os *qubits* de *spin* de pontos quânticos de semicondutores são como plataformas para a realização física da computação quântica e têm sido alvo de pesquisas na atualidade (KOPPENS et al., 2006). Embora cada ponto quântico normalmente não hospede mais do que dois elétrons em *qubits* de *spin* tradicionais, pesquisas recentes revelaram que os *qubits* multieletrônicos, nos quais certos pontos podem hospedar mais de dois elétrons, podem ser vantajosos em alguns aspectos (PARDO, 2019).

A título de exemplo, um ponto quântico de vários elétrons pode servir como mediador para troca rápida de *spin* ou um acoplamento ajustável entre pontos próximos. Além disso, é possível demonstrar que dispositivos de pontos quânticos multieletrônicos podem ser mais resistentes a ruídos do que os tradicionais devido ao efeito de triagem dos elétrons do núcleo (HOUSE, 2012).

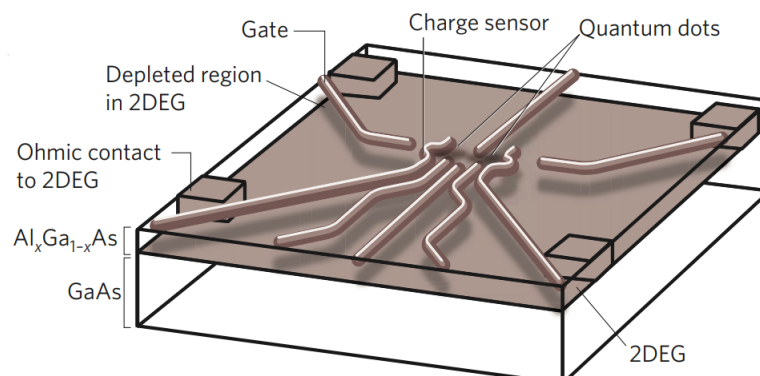
Figura 2.5 – Na figura, mostra-se um ponto quântico duplo, onde existem cinco eletrodos com a polaridade negativa que são responsáveis pela construção dos pontos quânticos. Dentre esses eletrodos, temos as barreiras de tunelamento,  $V_L, V_C, V_R$ , e modificação de potencial,  $V_l$  e  $V_r$ . O ponto quântico do lado esquerdo corresponde à letra  $L$  e o da direita à  $R$ . Ambos estão entre a fonte,  $S$ , e o dreno,  $D$ , sendo a diferença de potencial representada por  $V_{SD}$ .



Fonte: extraído de Fujisawa, Hayashi e Hirayama (2004)

O ponto quântico duplo presente na Fig.(2.5), e ilustrado pela Fig.(2.6) crescido a partir de uma heteroestrutura de GaAs/AlGaAs com um gás de elétrons bidimensional, se trata de uma foto de microscopia eletrônica. Neste *PQP*, existem três barreiras de potencial ( $V_L, V_C$  e  $V_R$ ) e duas de modificação de potencial ( $V_l$  e  $V_r$ ). O elétron pode ser manipulado a partir da diferença de potencial entre a fonte  $S$  e o dreno  $D$ ,  $V_{SD}$ . Após iniciar o sistema, anula-se  $V_{SD}$ , fazendo com que o *PQD* seja ajustado no bloqueio de Coulomb e o elétron aprisionado alterne somente entre o ponto quântico da esquerda ( $L$ ) e o da direita ( $R$ ), através do tunelamento.

Figura 2.6 – Representação de um ponto quântico duplo, crescido a partir de uma estrutura de GaAs/Al-GaAs.



Fonte: extraído de Ladd et al. (2010)

Em nosso trabalho, exploraremos o momento em que existe a manipulação do sistema ( $V_{SD} = 0$ ) e o elétron fique alternando entre os dois pontos quânticos, definindo um *qubit* de estado de carga. Nessa manipulação, observaremos, também, os estados de *spin* do elétron, configurando o nosso outro *qubit*.

### 3 CORRELAÇÕES QUÂNTICAS E COERÊNCIA QUÂNTICA

Tanto as correlações quânticas quanto a coerência quântica representam a condição de superposição quântica e, para trabalharmos com elas, devemos desenvolvê-las no formalismo operador densidade. Ambas estão relacionadas, com devidas propriedades particulares, e apresentam papéis importantíssimos em áreas de pesquisa quântica, como por exemplo a computação e informação quântica (BENNETT; DIVINCENZO, 2000). Será apresentada, nas seções a seguir, o formalismo operador densidade, as correlações quânticas e a coerência quântica.

#### 3.1 Formalismo operador densidade

Quando um sistema está bem definido, ou seja, não apresenta mistura de estados, podemos representá-lo no formalismo vetor de estado, mas se encontra limitado em descrever sistemas físicos que apresentam mistura de estados, ou seja, são descritos por *kets* diferentes. Nesses casos, um outro formalismo é usado para descrever um sistema baseado em mistura de estados: operador densidade. Nessa seção, será apresentado o operador densidade, desenvolvido por J. von Neumann em 1927 (SAKURAI; COMMINS, 1995). De forma geral, o operador densidade é uma matriz Hermitiana (quando aplicado em uma base) que descreve estados estatísticos de sistemas físicos e, conseqüentemente, pode descrever um estado, como, também, uma mistura de estados.

##### 3.1.1 Estado puro

Na introdução ao estudo de Mecânica Quântica aprende-se que podemos descrever um sistema quântico por um vetor de estado. Esse vetor de estado, representado, nesse caso, por  $|\Psi\rangle$ , é chamado de *ket*. Em uma situação onde é determinado um Hamiltoniano, com seus autovalores e seus autovetores, pode-se descrever qualquer estado puro utilizando uma superposição de autoestados fornecidos por

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |\psi_i\rangle, \quad (3.1)$$

onde  $|c_i|^2$  é um número real associado à probabilidade do sistema estar no estado  $|\psi_i\rangle$ .



O operador densidade é uma ferramenta matemática que facilita a aplicação dos postulados da Mecânica Quântica e o cálculo de probabilidades quando se trata de sistemas físicos cujos estados não são perfeitamente conhecidos. Uma vantagem de se utilizar o operador densidade é o fato de poder ser aplicado a qualquer modelo em estudo, seja ele em estado puro ou não.

Quando estamos lidando com um estado puro, podemos escrever o operador densidade da seguinte forma (COHEN-TANNOUJJI; DIU; LALOE, 1986):

$$\hat{\rho}(t) = |\psi_i(t)\rangle\langle\psi_i(t)|. \quad (3.2)$$

Para verificar se a matriz operador densidade corresponde a um estado puro, deve-se estar atento às seguintes propriedades:

1. O operador  $\hat{\rho}$  é hermitiano:

$$\hat{\rho}^\dagger = \left( |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \right)^\dagger = |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \hat{\rho}. \quad (3.3a)$$

2. A soma dos elementos da diagonal principal de  $\hat{\rho}$  é igual a um, ou seja:

$$\text{Tr}[\hat{\rho}] = \sum_n \langle n|\psi_i\rangle\langle\psi_i|n\rangle = \sum_n \langle\psi_i|n\rangle\langle n|\psi_i\rangle = 1 \quad (3.3b)$$

3. As matrizes  $\hat{\rho}^2$  e  $\hat{\rho}$  são iguais:

$$\hat{\rho}^2 = (|\psi_i\rangle\langle\psi_i|)(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i| = |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \hat{\rho} \quad (3.3c)$$

4. A soma dos elementos da diagonal principal de  $\hat{\rho}^2$  é igual a um :

$$\text{Tr}[\hat{\rho}^2] = \text{Tr}[\hat{\rho}] = 1 \quad (3.3d)$$

Portanto, se a matriz possuir essas propriedades, pode-se dizer que ela descreve um estado puro.

### 3.1.2 Estado misto

Por outro lado, podemos avaliar a matriz operador densidade em uma mistura estatística de estados (caso não puro). Para avaliar esse caso, consideraremos um sistema em que suas diversas probabilidades  $p_i$  são arbitrárias e seus valores estão entre zero e um ( $0 \leq p_i \leq 1$ ) com a soma, total, igual a um ( $\sum p_i = 1$ ). Sob essas condições, como seria o cálculo da probabilidade ( $\mathcal{P}$ ) para que a medição de um observável  $\hat{A}$  produza o resultado " $a_n$ "?

Considerando o operador projetor ( $\hat{P}_n$ ), dado por

$$\hat{P}_n = |\psi_n\rangle\langle\psi_n|, \quad (3.4)$$

temos que

$$\mathcal{P}_k(a_n) = \langle\psi_k|\hat{P}_n|\psi_k\rangle \quad (3.5)$$

é a probabilidade de se encontrar " $a_n$ " se o vetor de estado for  $|\psi_k\rangle$ . Pode-se obter a probabilidade desejada usando o somatório

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_k p_k \mathcal{P}_k(a_n), \quad (3.6)$$

onde  $\mathcal{P}_k(a_n) = \text{Tr}[\hat{\rho}_k(t)\hat{P}_n]$  e o operador densidade, correspondente ao vetor  $|\psi_k\rangle$ , é  $\hat{\rho}_k(t) = |\psi_k(t)\rangle\langle\psi_k(t)|$ . Consequentemente,

$$\mathcal{P}(a_n) = \text{Tr}[\hat{\rho}(t)\hat{P}_n],$$

sendo que

$$\hat{\rho}(t) = \sum_k p_k \hat{\rho}_k(t), \quad (3.7)$$

ou

$$\hat{\rho}(t) = \sum_k p_k |\psi_k(t)\rangle\langle\psi_k(t)|. \quad (3.8)$$

Note que a matriz densidade, em uma mistura estatística, é representada pela eq.(3.8), onde  $p_k$  são as probabilidades associadas a cada vetor  $|\psi_k(t)\rangle$  e  $\hat{\rho}_k(t)$  é o operador densidade correspondente a cada estado.

Assim como no caso puro, o operador densidade, também, deve satisfazer algumas propriedades (COHEN-TANNOUDI; DIU; LALOE, 1986):

1. O operador  $\hat{\rho}$  é hermitiano:

$$\hat{\rho}^\dagger = \left( \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \right)^\dagger = \sum_k p_k^* \left( |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \right)^\dagger = \sum_k p_k^* |\psi_k\rangle \langle \psi_k|.$$

mas  $p_k$  são números reais, assim

$$\hat{\rho}^\dagger = \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k| = \hat{\rho} \quad (3.9a)$$

2. A soma dos elementos da diagonal principal de  $\hat{\rho}$  é igual a um, ou seja:

$$\text{Tr}[\hat{\rho}] = \sum_n \sum_k p_k \langle n | \psi_k \rangle \langle \psi_k | n \rangle = \sum_k p_k \sum_n \langle \psi_k | n \rangle \langle n | \psi_k \rangle$$

$$\text{Tr}[\hat{\rho}] = \sum_k p_k \langle \psi_k | \psi_k \rangle = \sum_k p_k$$

mas  $p_k$  é a probabilidade de se estar no estado  $|\psi_k\rangle$ , portanto

$$\text{Tr}[\hat{\rho}] = \sum_k p_k = 1, \quad (3.9b)$$

expressando, assim, a conservação de probabilidade da Mecânica Quântica.

3.  $\hat{\rho}$  e  $\hat{\rho}^2$  não são iguais:

$$\hat{\rho}^2 = \sum_k (p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|) \sum_l (p_l |\psi_l\rangle \langle \psi_l|) = \sum_k \sum_l (p_k p_l |\psi_k\rangle \langle \psi_k | \psi_l\rangle \langle \psi_l|).$$

Considerando uma base  $\{|\psi_k\rangle\}$  ortonormal, temos

$$\hat{\rho}^2 = \sum_{k,l} (p_k p_l |\psi_k\rangle \delta_{kl} \langle \psi_l|) = \sum_k p_k^2 |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \neq \hat{\rho}. \quad (3.9c)$$

4. A soma dos elementos da diagonal de  $\hat{\rho}^2$  é menor ou igual a 1:

$$\text{Tr}[\hat{\rho}^2] = \sum_n \sum_k \langle n | p_k^2 | \psi_k \rangle \langle \psi_k | n \rangle = \sum_n \sum_k p_k^2 \langle \psi_k | n \rangle \langle n | \psi_k \rangle = \sum_k p_k^2 \langle \psi_k | \psi_k \rangle.$$

Mas  $0 \leq p_1, p_2, p_3, \dots, p_k \leq 1$ , conseqüentemente

$$\text{Tr}[\hat{\rho}^2] = \sum_k p_k^2 \leq 1. \quad (3.9d)$$

Note que as duas primeiras propriedades também são observadas no estado puro, conseqüentemente as outras duas propriedades são as que diferem um estado puro de um estado misto.

### 3.1.3 Operador densidade de um modelo em banho térmico

O operador densidade em um banho térmico é um estado de Gibbs  $\hat{\rho}(T)$ , pois o sistema se encontra em equilíbrio estatístico. Portanto temos:

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{Z}, \quad (3.10)$$

onde  $\beta = 1/k_B T$ , sendo que  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura absoluta. A função de partição do sistema é dada por  $Z = \sum_i e^{-\beta \epsilon_i}$  (FILGUEIRAS; ROJAS; ROJAS, 2020).

Usando a completeza em eq.(3.10), temos que

$$\hat{\rho}(T) = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{Z} \sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|. \quad (3.11)$$

É importante destacar, ainda, que  $\hat{H}|\varphi_n\rangle = \epsilon_n|\varphi_n\rangle$ , portanto a eq.(3.11) pode ser escrita como

$$\hat{\rho}(T) = \sum_n \frac{e^{-\beta \epsilon_n}}{Z} |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|. \quad (3.12)$$

Cabe salientar que  $p_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}$  são as probabilidades, de modo que temos

$$\hat{\rho}(T) = \sum_n p_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|. \quad (3.13)$$

Assim, verifica-se que um modelo quântico em um banho térmico é um estado misto.

### 3.1.4 Populações

Posteriormente à definição da matriz operador densidade de algum sistema, pode-se analisar as probabilidades desse sistema estar em um estado  $|\varphi_i\rangle$ . Cada elemento  $\rho_{ii}$  informa a possibilidade do sistema se encontrar em seu respectivo estado  $|\varphi_i\rangle$ , ou seja, os termos que compõem a diagonal da matriz nos informa as probabilidades do sistema apresentar seu estado relacionado. Esses elementos recebem o nome de populações. Por outro lado, os elementos restantes da matriz,  $\rho_{ij}$ , se referem a efeitos de interferências entre seus próprios estados  $|\varphi_i\rangle$  e  $|\varphi_j\rangle$ .

### 3.1.5 Operador densidade reduzido

Considerando um estado arbitrário de um sistema quântico bipartido (um sistema composto de duas partes), cujo operador densidade é  $\rho_{AB}$ , é possível obter algumas informações sobre os subsistemas usando uma operação chamada traço parcial. O traço parcial do subsistema  $B$ , denotado por  $\text{Tr}_B$ , é definido como

$$\text{Tr}_B(\rho_{AB}) = \sum_j (I_A \otimes \langle j|_B) \rho_{AB} (I_A \otimes |j\rangle_B), \quad (3.14a)$$

onde  $\{|j\rangle\}$  é uma base ortonormal do espaço de Hilbert  $\mathcal{H}_B$  do subsistema  $B$ . Similarmente, o traço parcial sob o subsistema  $A$ , chamado de  $\text{Tr}_A$ , é definido como

$$\text{Tr}_A(\rho_{AB}) = \sum_i (\langle i|_A \otimes I_B) \rho_{AB} (|i\rangle_A \otimes I_B), \quad (3.14b)$$

onde  $\{|i\rangle\}$  é uma base ortonormal do espaço de Hilbert  $\mathcal{H}_A$  do subsistema  $A$ . Assim, o operador densidade  $\rho_A$  do subsistema  $A$  é dado por

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B(\hat{\rho}_{AB}), \quad (3.15a)$$

e para o subsistema  $B$ , temos

$$\hat{\rho}_B = \text{Tr}_A(\hat{\rho}_{AB}). \quad (3.15b)$$

Quando temos as matrizes densidade de cada subsistema, podemos analisar a coerência quântica local, separadamente da coerência do sistema global.

### 3.2 Emaranhamento Quântico

Uma pergunta importante de se fazer é: o que diferencia a mecânica quântica da mecânica clássica? Schödinger pensou que a resposta para essa pergunta não estava entre: a quantização de Plank, pois seu análogo clássico seria a força bruta; a complementaridade de Bohr e o princípio da incerteza de Heisenberg porque poderiam ser observados na troca de conhecimento entre o comprimento de onda e a posição da onda; e o princípio da superposição, pois ondas podem ser sobrepostas. Schödinger pensou que a resposta estaria no emaranhamento (VEDRAL, 2014).

Em 1935, foi publicado um artigo, conhecido popularmente como EPR, pelos físicos Albert Einstein, Boris Podolsky e Nathan Rose questionando a completeza da teoria quântica, tomando por base o Princípio da Localidade<sup>1</sup> (EINSTEIN; PODOLSKY; ROSEN, 1935). Com isso, o EPR afirmava que um sistema quântico deveria ter uma quantidade, denominada variável oculta.

Para exemplificar o que foi discutido no EPR, podemos considerar um par de elétrons ( $A$  e  $B$ ) de forma que apresentem uma superposição quântica entre dois estados: no estado 1 o elétron  $A$  apresenta *spin up* e  $B$  *spin down* (no mesmo eixo), enquanto que no estado 2 o elétron  $A$  possui *spin down* e  $B$  *spin up* (no mesmo eixo). Pelos postulados da Mecânica Quântica, sabe-se que ao realizar uma medida no sistema global, ele sofre alteração instantânea mesmo que suas

<sup>1</sup> O Princípio da Localidade diz que nenhuma informação pode ser transmitida com velocidade superior a da luz ( $c$ ).

partículas estejam distantes uma da outra. Suponha que o elétron  $A$  fique na Terra, enquanto o  $B$  viaje para outro planeta. Ao medirmos o *spin* de  $A$ , o elétron  $B$  sofre ação instantânea, ou seja, se medirmos  $A$  com *spin up*,  $B$  possuirá *spin down* independente de onde esteja. Isso viola o Princípio da Localidade, destacado no EPR.

Após alguns anos, em 1964, John Stewart Bell apresentou a primeira indicação da não localidade relativa a teoria quântica (BELL, 1964), ou seja: é incompatível com a quântica que uma partícula possui valores definitivos que não dependem do processo de observação e, também, que a velocidade de propagação dos efeitos físicos tem um limite. Mais tarde, nos anos 80, Aspect e colaboradores, observaram resultados empíricos da não localidade da teoria quântica (ASPECT; GRANGIER; ROGER, 1981; ASPECT; DALIBARD; ROGER, 1982), confirmando as indicações destacadas por Bell. O emaranhamento, então, diz respeito às correlações quânticas entre subsistemas que compõem um sistema global (HORODECKI et al., 2009).

A fim de dar um exemplo sobre estados emaranhados, considere um estado  $|\psi\rangle_{AB}$  que existe em um espaço de Hilbert

$$\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B,$$

onde  $\mathcal{H}_A$  e  $\mathcal{H}_B$  são espaços de Hilbert associados aos sistemas A e B, respectivamente. O estado  $|\psi\rangle_{AB}$ , normalizado, pode ser escrito como

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_{u,v} C_{uv} |u\rangle_A \otimes |v\rangle_B, \quad (3.16)$$

onde  $|u\rangle_A$  e  $|v\rangle_B$  são bases ortonormais aos seus espaços de Hilbert associados. Chamamos o estado representado pela eq. (3.16) de estado produto se

$$|\psi\rangle_{AB} = |\psi\rangle_A |\psi\rangle_B, \quad (3.17)$$

de tal forma que

$$|\psi\rangle_A = \sum_u c_u |u\rangle_A$$

e

$$|\psi\rangle_B = \sum_v c_v |v\rangle_B$$

são os estados ligados aos sistemas A e B. Se o estado está emaranhado, ele não pode ser escrito em um estado produto, representado pela eq.(3.17). Temos um exemplo clássico de estados emaranhados, em dimensão 2, chamados de estados de Bell, onde

$$|\Psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |0\rangle_A \otimes |1\rangle_B \pm |1\rangle_A \otimes |0\rangle_B \right) \quad (3.18)$$

e

$$|\Phi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |0\rangle_A \otimes |0\rangle_B \pm |1\rangle_A \otimes |1\rangle_B \right). \quad (3.19)$$

Esses estados descrevem, por exemplo, o espaço de *spin* 1/2 (HORODECKI et al., 2009).

### 3.2.1 Concorrência Quântica

A concorrência  $C$  se trata de uma função monótona do emaranhamento quântico, ou seja, ela preserva (ou inverte) sua relação de ordem, sendo, também, um quantificador do emaranhamento (WOOTTERS, 2001). Essa medida é utilizada para avaliar o emaranhamento de um sistema com um par de *qubits* (WOOTTERS, 1998). Esse quantificador pode ser determinado através de uma matriz que chamaremos de  $R$ , dada por

$$R = \hat{\rho} \cdot (\sigma_y \otimes \sigma_y) \cdot \hat{\rho}^* \cdot (\sigma_y \otimes \sigma_y), \quad (3.20)$$

em que  $\sigma_y$  é a matriz de Pauli, definida por

$$\sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix},$$

onde  $\hat{\rho}$  é a matriz densidade e  $\hat{\rho}^*$  sua conjugada. Após determinar a matriz  $R$  e encontrar seus valores próprios, a concorrência  $C$  é dada por

$$C = \max \left\{ \left( \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4} \right), 0 \right\}, \quad (3.21)$$

onde  $\lambda_1$  corresponde ao autovalor de  $R$  que possui maior valor absoluto. A concorrência  $C$  será um valor entre 0 e 1, sendo que



- se  $C = 0$ , o sistema não está emaranhado;
- se  $C = 1$ , o sistema está completamente emaranhado;
- se  $0 < C < 1$ , o sistema está parcialmente emaranhado.

### 3.3 Coerência Quântica

A coerência quântica representa a ideia de superposição entre dois ou mais estados simultâneos e é um aspecto fundamental da física quântica que compreende as características definidoras da teoria, desde a própria superposição até as correlações quânticas (STRELTSOV et al., 2015), como por exemplo a discórdia<sup>2</sup> quântica (OLLIVIER; ZUREK, 2001). A quantização da energia e o desenvolvimento da mecânica quântica como uma imagem de unificação entre ondas e partículas, no início do século XX, ampliou ainda mais o papel da coerência na física (STRELTSOV; ADESSO; PLENIO, 2017). Uma ampla variedade de medidas de coerência está em uso, sendo explorada, por exemplo, para a teoria da informação quântica (MA et al., 2016) e termodinâmica (BAUMGRATZ; CRAMER; PLENIO, 2014). A coerência é, comumente, associada a fenômenos de interferência e se trata de uma condição de necessidade para que o emaranhamento ocorra.

#### 3.3.1 Norma- $l_1$

A norma- $l_1$  é uma medida de coerência quântica que é dada pela soma dos elementos que estão fora da diagonal principal da matriz operador densidade, ou seja,

$$C_{l_1} = \sum_{i \neq j} |\langle u_i | \hat{\rho}(T) | u_j \rangle|. \quad (3.22)$$

É de suma importância salientar que os cálculos a respeito da coerência quântica dependem da base utilizada.

<sup>2</sup> Nome dado ao conjunto das correlações quânticas que não estão emaranhadas.

### 3.3.2 Coerência Correlacionada

A coerência quântica de um sistema bipartido (um sistema composto de dois subsistemas) não, necessariamente, deve ser composta pela soma das coerências locais dos seus subsistemas (TAN et al., 2016). Dessa forma, é justificável pensar que uma parte das coerências quânticas estejam armazenadas dentro das correlações quânticas do próprio sistema e não só localmente (TAN et al., 2016). Conseqüentemente, vamos considerar dois subsistemas  $A$  e  $B$ , onde suas coerências locais são dadas por  $C_{l_1}(\hat{\rho}_A)$  e  $C_{l_1}(\hat{\rho}_B)$ , respectivamente. Por outro lado, a coerência total presente nas correlações quânticas do sistema bipartido, descrito pelas bases  $|u_a\rangle_A$  e  $|u_b\rangle_B$ ,  $C_{cc}(\hat{\rho}_{AB})$ , é dada por

$$C_{cc}(\hat{\rho}_{AB}) = C_{l_1}(\hat{\rho}_{AB}) - C_{l_1}(\hat{\rho}_A) - C_{l_1}(\hat{\rho}_B), \quad (3.23)$$

onde  $\hat{\rho}_A$  e  $\hat{\rho}_B$  foram definidos nas eqs.(3.15).

Tendo como objetivo diagonalizar as matrizes dos operadores densidade locais, é necessário realizar uma transformação unitária  $U$ . Esta matriz é dada por

$$U_{A,B} = \begin{bmatrix} \cos(\theta_{A,B}) & -e^{i\phi_{A,B}} \text{sen}(\theta_{A,B}) \\ e^{-i\phi_{A,B}} \text{sen}(\theta_{A,B}) & \cos(\theta_{A,B}) \end{bmatrix}. \quad (3.24)$$

Após as transformações em  $\hat{\rho}_A$  e  $\hat{\rho}_B$ , obtemos os novos operadores densidade

$$\tilde{\rho}_A = U_A \hat{\rho}_A U_A^\dagger \quad (3.25a)$$

e

$$\tilde{\rho}_B = U_B \hat{\rho}_B U_B^\dagger. \quad (3.25b)$$

Note que, com as transformações unitárias, pode-se analisar as coerências quânticas através das alterações dos ângulos  $\theta_{A,B}$  e  $\phi_{A,B}$ . Por consequência da operação unitária ocorrida nas eqs.(3.25), o operador densidade do sistema bipartido sofre, também, a transformação

$$\tilde{\rho}_{AB} = \tilde{U} \hat{\rho}_{AB} \tilde{U}^\dagger, \quad (3.26)$$

onde  $\tilde{U} = U_A \otimes U_B$ . Dadas as transformações anteriores, torna-se viável escolher os parâmetros presentes em  $U$  de tal forma que a coerência quântica esteja presente, em sua totalidade, somente nas correlações quânticas do sistema bipartido. Em outras palavras: encontrar valores para  $\theta$  e  $\phi$  com a finalidade de obter a igualdade

$$C_{cc}(\hat{\rho}_{AB}) = C_{l_1}(\check{\rho}_{AB}). \quad (3.27)$$

### 3.4 Fidelidade Térmica

A fidelidade  $F$  trata-se de um conceito oriundo de teorias de informação quântica que mede a similaridade entre dois estados quânticos. A definição mais simples de  $F$  é dada por

$$F(\varphi, \phi) = |\langle \varphi | \phi \rangle|, \quad (3.28)$$

e caracteriza a fidelidade entre quaisquer dois estados do espaço de Hilbert.

Nesse trabalho, utilizaremos a fidelidade térmica como uma medida da distância entre o um estado próprio do Hamiltoniano e o estado do sistema à temperatura  $T$  (ZHOU et al., 2009). Se  $|\psi\rangle$  é um estado próprio de  $\hat{H}$ , a fidelidade pode ser escrita como

$$F(T) = \langle \psi | \hat{\rho}(T) | \psi \rangle, \quad (3.29)$$

onde  $\hat{\rho}(T)$  é a matriz densidade térmica do sistema.

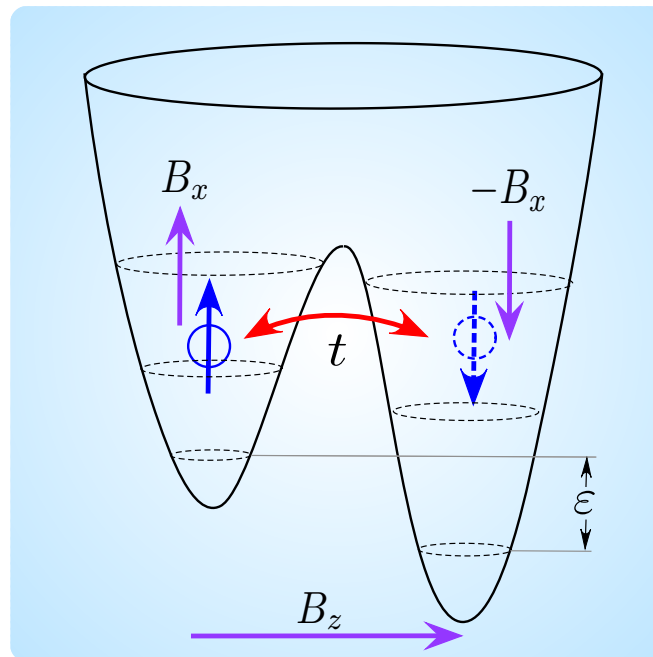
## 4 MODELO EM ESTUDO

Nesse capítulo, será apresentado o sistema quântico em estudo, tanto em seu caso geral quanto em seu caso particular, englobando sua representação ilustrativa, suas energias possíveis, seus estados e sua representação através do formalismo operador densidade.

### 4.1 Descrição do Modelo e suas Energias

O modelo estudado, ilustrado pela Fig.(4.1) é semelhante ao modelo estudado em (BENITO et al., 2017) e se trata de um ponto quântico duplo preenchido com um único elétron, sujeito a um campo magnético transversal variável,  $B_x$  (na direção "x") e outro constante,  $B_z$  (na direção "z") no regime de bloqueio de Coulomb, e imerso em um banho térmico. O desnível de energia entre os pontos quânticos é denotada por  $\varepsilon$ . No modelo, o elétron pode se deslocar entre os dois pontos quânticos devido ao efeito túnel,  $t$ .

Figura 4.1 – A figura ilustra o modelo de um único elétron em um ponto quântico duplo, sujeito a um campo magnético constante, na direção "z",  $B_z$  e um campo magnético não-homogêneo,  $\pm B_x$ , apresentando um desnível de energia,  $\varepsilon$ , entre os pontos quânticos. O elétron pode ultrapassar o confinamento devido ao efeito túnel  $t$ .



Fonte: Autor

O hamiltoniano do modelo é dado por:

$$\hat{H} = \frac{\varepsilon}{2}(\tau_z \otimes \mathbb{I}) + t(\tau_x \otimes \mathbb{I}) + \frac{B_z}{2}(\mathbb{I} \otimes \sigma_z) + \frac{B_x}{2}(\tau_z \otimes \sigma_x), \quad (4.1)$$

onde as matrizes de Pauli  $\tau_k$  e  $\sigma_k$  ( $k = x, z$ ) estão associados ao estado de carga (posição) e ao estado de *spin* do elétron, respectivamente. Dito isso, temos que

$$\mathbb{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (4.2)$$

$$\sigma_x, \tau_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.3)$$

$$\sigma_z, \tau_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (4.4)$$

Dessa forma, a representação matricial do hamiltoniano,  $\hat{H}$ , é:

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} \frac{B_z + \varepsilon}{2} & \frac{B_x}{2} & t & 0 \\ \frac{B_x}{2} & \frac{-B_z + \varepsilon}{2} & 0 & t \\ t & 0 & \frac{B_z - \varepsilon}{2} & -\frac{B_x}{2} \\ 0 & t & -\frac{B_x}{2} & \frac{-B_z - \varepsilon}{2} \end{bmatrix}. \quad (4.5)$$

É importante salientar que o elétron possui duas configurações de carga: localizado no ponto quântico à esquerda  $|L\rangle$  ou no ponto quântico à direita  $|R\rangle$ . O estado do sistema é complementado com os estados de *spin* do elétron  $|0\rangle$  (*spin up*) e  $|1\rangle$  (*spin down*).

Diagonalizando o Hamiltoniano, temos que as energias são:

$$E_{1,2} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{B_z^2 + \varepsilon^2 + B_x^2 + 4t^2 + 2\sqrt{B_z^2 \varepsilon^2 + 4t^2 B_z^2 + \varepsilon^2 h^2}}, \quad (4.6a)$$

$$E_{3,4} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{B_z^2 + \varepsilon^2 + B_x^2 + 4t^2 - 2\sqrt{B_z^2 \varepsilon^2 + 4t^2 B_z^2 + \varepsilon^2 h^2}}. \quad (4.6b)$$

Os vetores de estado associados a cada energia, representados na base fundamental,  $\{|L0\rangle, |L1\rangle, |R0\rangle, |R1\rangle\}$ , são dados por

$$|\varphi_1\rangle = M_+ [a_+ |L0\rangle + b_+ |L1\rangle + |R0\rangle + d_+ |R1\rangle], \quad (4.7a)$$

$$|\varphi_2\rangle = M_- [a_- |L0\rangle + b_- |L1\rangle + |R0\rangle + d_- |R1\rangle], \quad (4.7b)$$

$$|\varphi_3\rangle = N_+ [f_+ |L0\rangle + g_+ |L1\rangle + |R0\rangle + k_+ |R1\rangle], \quad (4.7c)$$

$$|\varphi_4\rangle = N_- [f_- |L0\rangle + g_- |L1\rangle + |R0\rangle + k_- |R1\rangle], \quad (4.7d)$$

onde

$$M_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{a_{\pm}^2 + b_{\pm}^2 + 1 + d_{\pm}^2}}, \quad (4.8a)$$

$$N_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{f_{\pm}^2 + g_{\pm}^2 + 1 + k_{\pm}^2}}, \quad (4.8b)$$

$$a_{\pm} = \frac{(\varepsilon \pm E_1)^2 - E_3^2}{2t(B_z + \varepsilon)}, \quad (4.8c)$$

$$b_{\pm} = \frac{\Delta(B_z + \varepsilon) + 4E_1(\mp B_z \varepsilon - B_z E_1 + E_1 \varepsilon \pm (E_1^2 - E_3^2))}{4B_x t(B_z + \varepsilon)}, \quad (4.8d)$$

$$d_{\pm} = \frac{(B_z \mp E_1)^2 - E_3^2}{B_x(B_z + \varepsilon)}, \quad (4.8e)$$

$$f_{\pm} = \frac{\varepsilon^2 \pm 2\varepsilon E_1 - E_1^2 + E_3^2}{2t(B_z + \varepsilon)}, \quad (4.8f)$$

$$g_{\pm} = \frac{\Delta(B_z + \varepsilon) + 4E_3(\mp B_z \varepsilon - B_z E_3 + E_3 \varepsilon \mp (E_1^2 - E_3^2))}{4B_x t(B_z + \varepsilon)}, \quad (4.8g)$$

$$k_{\pm} = \frac{(B_z \mp E_3)^2 - E_1^2}{B_x(B_z + \varepsilon)}, \quad (4.8h)$$

$$\Delta = B_z^2 + B_x^2 - \varepsilon^2 - 4t^2 \quad (4.8i)$$

#### 4.1.1 Operador Densidade do modelo

Agora que o operador densidade foi definido, é possível representá-lo em forma matricial na base  $\{|L0\rangle, |L1\rangle, |R0\rangle, |R1\rangle\}$ , pois a relação entre ela e a base própria  $|\varphi_i\rangle$  ( $i=1,2,3,4$ ) foi

dada pelas eqs.(4.7). Assim como discutido na subseção (3.1.3), temos que

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

e, para escrever o operador densidade em forma de matriz, os elementos da matriz operador densidade são dados por

$$\rho_{kl} = \langle u_k | \hat{\rho} | u_l \rangle, \quad (4.9)$$

onde os vetores  $|u_l\rangle$  ( $l = 1, 2, 3, 4$ ) correspondem aos vetores  $|L0\rangle$ ,  $|L1\rangle$ ,  $|R0\rangle$ ,  $|R1\rangle$  e seus respectivos *bras*. A fim de exemplificar, o elemento  $\rho_{23}$  pode ser determinado pelo cálculo onde

$$\rho_{23} = \langle u_2 | \hat{\rho}(T) | u_3 \rangle = \langle L1 | \sum_{i=1}^4 \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i | R0 \rangle.$$

Assim, a matriz operador densidade é

$$\hat{\rho}(T) = \begin{bmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \rho_{14} \\ \rho_{12} & \rho_{22} & \rho_{23} & \rho_{24} \\ \rho_{13} & \rho_{23} & \rho_{33} & \rho_{34} \\ \rho_{14} & \rho_{24} & \rho_{34} & \rho_{44} \end{bmatrix}, \quad (4.10)$$

onde os elementos de matriz são

$$\rho_{11} = \frac{M_+^2 a_+^2 e^{-\beta \varepsilon_1} + M_-^2 a_-^2 e^{-\beta \varepsilon_2} + N_+^2 f_+^2 e^{-\beta \varepsilon_3} + N_-^2 f_-^2 e^{-\beta \varepsilon_4}}{Z},$$

$$\begin{aligned}
\rho_{12} &= \frac{M_+^2 a_+ b_+ e^{-\beta \varepsilon_1} + M_-^2 a_- b_- e^{-\beta \varepsilon_2} + N_+^2 f_+ g_+ e^{-\beta \varepsilon_3} + N_-^2 f_- g_- e^{-\beta \varepsilon_4}}{Z}, \\
\rho_{13} &= \frac{M_+^2 a_+ e^{-\beta \varepsilon_1} + M_-^2 a_- e^{-\beta \varepsilon_2} + N_+^2 f_+ e^{-\beta \varepsilon_3} + N_-^2 f_- e^{-\beta \varepsilon_4}}{Z}, \\
\rho_{14} &= \frac{M_+^2 a_+ d_+ e^{-\beta \varepsilon_1} + M_-^2 a_- d_- e^{-\beta \varepsilon_2} + N_+^2 f_+ k_+ e^{-\beta \varepsilon_3} + N_-^2 f_- k_- e^{-\beta \varepsilon_4}}{Z}, \\
\rho_{22} &= \frac{M_+^2 b_+^2 e^{-\beta \varepsilon_1} + M_-^2 b_-^2 e^{-\beta \varepsilon_2} + N_+^2 g_+^2 e^{-\beta \varepsilon_3} + N_-^2 g_-^2 e^{-\beta \varepsilon_4}}{Z}, \\
\rho_{23} &= \frac{M_+^2 b_+ e^{-\beta \varepsilon_1} + M_-^2 b_- e^{-\beta \varepsilon_2} + N_+^2 g_+ e^{-\beta \varepsilon_3} + N_-^2 g_- e^{-\beta \varepsilon_4}}{Z}, \\
\rho_{24} &= \frac{M_+^2 b_+ d_+ e^{-\beta \varepsilon_1} + M_-^2 b_- d_- e^{-\beta \varepsilon_2} + N_+^2 g_+ k_+ e^{-\beta \varepsilon_3} + N_-^2 g_- k_- e^{-\beta \varepsilon_4}}{Z}, \\
\rho_{33} &= \frac{M_+^2 e^{-\beta \varepsilon_1} + M_-^2 e^{-\beta \varepsilon_2} + N_+^2 e^{-\beta \varepsilon_3} + N_-^2 e^{-\beta \varepsilon_4}}{Z}, \\
\rho_{34} &= \frac{M_+^2 d_+ e^{-\beta \varepsilon_1} + M_-^2 d_- e^{-\beta \varepsilon_2} + N_+^2 k_+ e^{-\beta \varepsilon_3} + N_-^2 k_- e^{-\beta \varepsilon_4}}{Z}, \\
\rho_{44} &= \frac{M_+^2 d_+^2 e^{-\beta \varepsilon_1} + M_-^2 d_-^2 e^{-\beta \varepsilon_2} + N_+^2 k_+^2 e^{-\beta \varepsilon_3} + N_-^2 k_-^2 e^{-\beta \varepsilon_4}}{Z}.
\end{aligned}$$

Os cálculos para determinar os elementos da matriz operador densidade foram realizados no apêndice A.

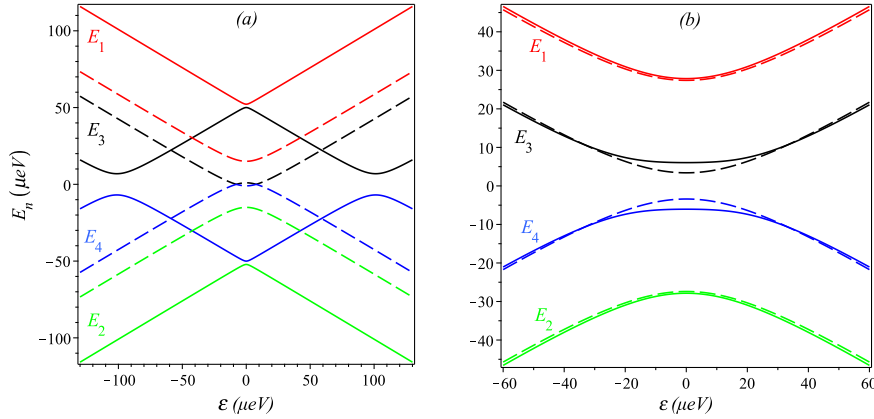
No decorrer do trabalho, utilizaremos dois conjuntos de parâmetros que devem ser destacados: parâmetros experimentais e nossos parâmetros teóricos. Os parâmetros experimentais estão presentes em (BENITO et al., 2017) e correspondem à  $B_z = 24\mu eV$ ,  $t = 15,4\mu eV$  e  $B_x = 10\mu eV$ . Por outro lado, nossos parâmetros teóricos são  $B_z = 16\mu eV$ ,  $t = 7\mu eV$  e  $B_x = 100\mu eV$ . O objetivo é que pudéssemos utilizar ambos conjuntos de valores a fim de compará-los.

A Fig.(4.2) mostra as curvas das energias, em função do desnível de energia,  $\varepsilon$ . Na Fig.(4.2a), fixamos  $B_z = 16\mu eV$  e  $t = 7\mu eV$  com  $B_x = 100\mu eV$  (curvas contínuas) e  $B_x = 0$  (curvas tracejadas). Podemos notar comportamentos diferentes em suas curvas contínuas: observa-se anticruzamento entre  $E_3$  e  $E_4$  quando  $\varepsilon \approx \pm 100\mu eV$  e anticruzamentos entre  $E_1$  e  $E_3$  e entre  $E_2$  e  $E_4$  quando  $\varepsilon = 0$ . Observamos que para  $B_x = 0$ , há degenerescência entre  $E_3$  e  $E_4$  em  $\varepsilon = \pm 2\sqrt{15}\mu eV$ . Já na Fig.(4.2b), fixamos  $B_z = 24\mu eV$  e  $t = 15,4\mu eV$ , onde  $B_x = 10\mu eV$  corresponde às curvas contínuas e  $B_x = 0$  às tracejadas. Neste caso, as curvas contínuas e



tracejadas apresentam comportamentos semelhantes exceto para o intervalo  $\varepsilon \approx \pm 25 \mu eV$ , em que há um anticruzamento maior do que quando  $B_x = 0$ .

Figura 4.2 – As figuras mostram as curvas das energias  $E_n (n = 1, 2, 3, 4)$  em função de  $\varepsilon$ . Em (a) os parâmetros são  $B_z = 16 \mu eV$ ,  $B_x = 100 \mu eV$  e  $t = 7 \mu eV$ . Em (b)  $B_z = 24 \mu eV$ ,  $B_x = 10 \mu eV$  e  $t = 15,4 \mu eV$ . Em ambas as figuras, as curvas tracejadas correspondem a  $B_x = 0$ .



Fonte: Autor

## 4.2 Energias e Operador Densidade para $\varepsilon = 0$

Para o caso especial, onde a diferença de energia entre os níveis dos pontos quânticos é nula ( $\varepsilon = 0$ ). O Hamiltoniano é

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} \frac{B_z}{2} & \frac{B_x}{2} & t & 0 \\ \frac{B_x}{2} & -\frac{B_z}{2} & 0 & t \\ t & 0 & \frac{B_z}{2} & -\frac{B_x}{2} \\ 0 & t & -\frac{B_x}{2} & \frac{B_z}{2} \end{bmatrix}. \quad (4.11)$$

Após diagonalizar  $\hat{H}$ , obtemos suas energias que são dadas por

$$E_{1,2} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{(B_z + 2t)^2 + B_x^2}, \quad (4.12a)$$

$$E_{3,4} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{(B_z - 2t)^2 + B_x^2}. \quad (4.12b)$$

Os vetores próprios, após serem normalizados e escritos na base padrão, são

$$|\psi_1\rangle = \alpha_+ \left[ |L0\rangle - \gamma_+ |L1\rangle + |R0\rangle + \gamma_+ |R1\rangle \right], \quad (4.13a)$$

$$|\psi_2\rangle = \alpha_- \left[ |L0\rangle - \gamma_- |L1\rangle + |R0\rangle + \gamma_- |R1\rangle \right], \quad (4.13b)$$

$$|\psi_3\rangle = \eta_+ \left[ -|L0\rangle + \theta_+ |L1\rangle + |R0\rangle + \theta_+ |R1\rangle \right], \quad (4.13c)$$

$$|\psi_4\rangle = \eta_- \left[ -|L0\rangle + \theta_- |L1\rangle + |R0\rangle + \theta_- |R1\rangle \right]. \quad (4.13d)$$

onde  $\alpha_{\pm}$ ,  $\eta_{\pm}$ ,  $\gamma_{\pm}$  e  $\theta_{\pm}$  são dados por

$$\alpha_{\pm} = \frac{B_x}{\sqrt{2(B_x^2 + \gamma_{\pm}^2)}}, \quad (4.14a)$$

$$\eta_{\pm} = \frac{B_x}{\sqrt{2(B_x^2 + \theta_{\pm}^2)}}, \quad (4.14b)$$

$$\gamma_{\pm} = \frac{B_z + 2t \pm 2E_2}{B_x}, \quad (4.14c)$$

$$\theta_{\pm} = \frac{B_z - 2t \pm 2E_4}{B_x}. \quad (4.14d)$$

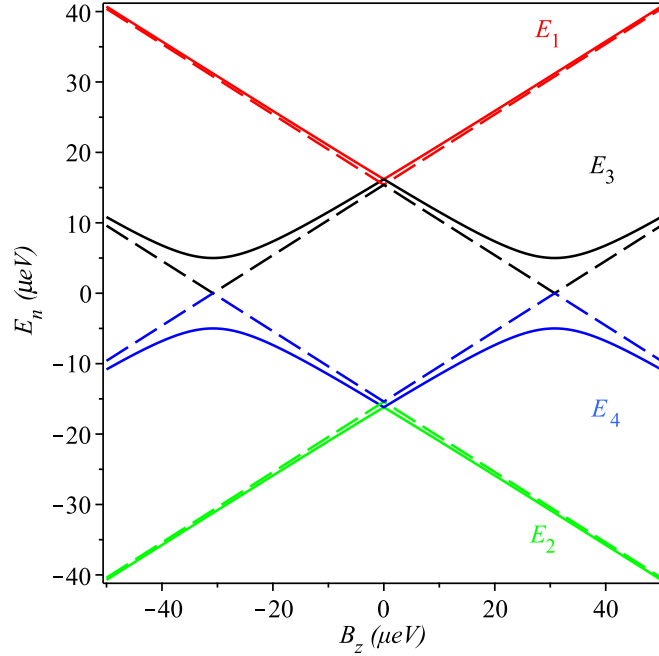
De forma análoga ao que foi feito na subseção (4.1.1), podemos escrever o operador densidade para este caso particular. Nesse caso, serão usados os vetores de estado definidos pelas eqs.(4.13), assim

$$\hat{\rho}(T) = \begin{bmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \rho_{14} \\ \rho_{12} & \rho_{22} & -\rho_{14} & \rho_{24} \\ \rho_{13} & -\rho_{14} & \rho_{11} & -\rho_{12} \\ \rho_{14} & \rho_{24} & -\rho_{12} & \rho_{22} \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

onde os elementos de matriz são dados por

$$\begin{aligned}\rho_{11} &= \frac{\alpha_+^2 e^{-\beta\varepsilon_1} + \alpha_-^2 e^{-\beta\varepsilon_2} + \eta_+^2 e^{-\beta\varepsilon_3} + \eta_-^2 e^{-\beta\varepsilon_4}}{Z}, \\ \rho_{12} &= \frac{-\alpha_+^2 e^{-\beta\varepsilon_1} \gamma_+ - \alpha_-^2 e^{-\beta\varepsilon_2} \gamma_- - \eta_+^2 e^{-\beta\varepsilon_3} \theta_+ - \eta_-^2 e^{-\beta\varepsilon_4} \theta_-}{Z}, \\ \rho_{13} &= \frac{\alpha_+^2 e^{-\beta\varepsilon_1} + \alpha_-^2 e^{-\beta\varepsilon_2} - \eta_+^2 e^{-\beta\varepsilon_3} - \eta_-^2 e^{-\beta\varepsilon_4}}{Z}, \\ \rho_{14} &= \frac{\alpha_+^2 e^{-\beta\varepsilon_1} \gamma_+ + \alpha_-^2 e^{-\beta\varepsilon_2} \gamma_- - \eta_+^2 e^{-\beta\varepsilon_3} \theta_+ - \eta_-^2 e^{-\beta\varepsilon_4} \theta_-}{Z}, \\ \rho_{22} &= \frac{\alpha_+^2 e^{-\beta\varepsilon_1} \gamma_+^2 + \alpha_-^2 e^{-\beta\varepsilon_2} \gamma_-^2 + \eta_+^2 e^{-\beta\varepsilon_3} \theta_+^2 + \eta_-^2 e^{-\beta\varepsilon_4} \theta_-^2}{Z}, \\ \rho_{24} &= \frac{-\alpha_+^2 e^{-\beta\varepsilon_1} \gamma_+^2 - \alpha_-^2 e^{-\beta\varepsilon_2} \gamma_-^2 + \eta_+^2 e^{-\beta\varepsilon_3} \theta_+^2 + \eta_-^2 e^{-\beta\varepsilon_4} \theta_-^2}{Z}.\end{aligned}$$

Figura 4.3 – A figura mostra as curvas das energias  $E_n$  ( $n = 1, 2, 3, 4$ ) em função de  $B_z$ . Nessas curvas, fixamos  $t = 15,4\mu eV$ . As curvas contínuas correspondem à  $B_x = 10\mu eV$  e as tracejadas à  $B_x = 0$ .



Fonte: Autor

A Fig.(4.3) mostra as curvas das energias do sistema, em função de  $B_z$ , para  $\varepsilon = 0$ . As curvas contínuas correspondem a  $B_x = 10\mu eV$  e as tracejadas a  $B_x = 0$ . Para  $B_z = 0$ , temos degenerescências entre  $E_1$  e  $E_3$ ,  $E_2$  e entre  $E_4$ , para quaisquer valores de  $B_x$ . Vemos, também,

mais dois pontos de cruzamentos, em  $B_z \approx \pm 30,8 \mu eV$ , entre as curvas tracejadas de  $E_3$  e  $E_4$ , todavia podemos observar que a introdução do campo transversal,  $B_x$ , ocasiona o anticruzamento dessas curvas nesses mesmos pontos.

## 5 DISCUSSÕES E RESULTADOS

Nesse capítulo apresentaremos os resultados do modelo estudado, onde um único elétron, que está confinado em um ponto quântico duplo, apresenta correlações quânticas entre seus estados de carga e de *spin*. O capítulo é composto pela análise das populações, concorrência, coerência correlacionada, além da fidelidade térmica. Todas as análises serão efetuadas tendo em vista a existência, ou não, do desnível de energia entre os pontos quânticos  $\varepsilon$ .

### 5.1 Populações para $T > 0$

As populações nos fornece as probabilidades de encontrar o elétron em cada um dos estados permitidos do ponto quântico duplo. Deve-se destacar que as probabilidades estão relacionadas a cada estado de tal forma que

$$\rho_{11} \rightarrow |L0\rangle,$$

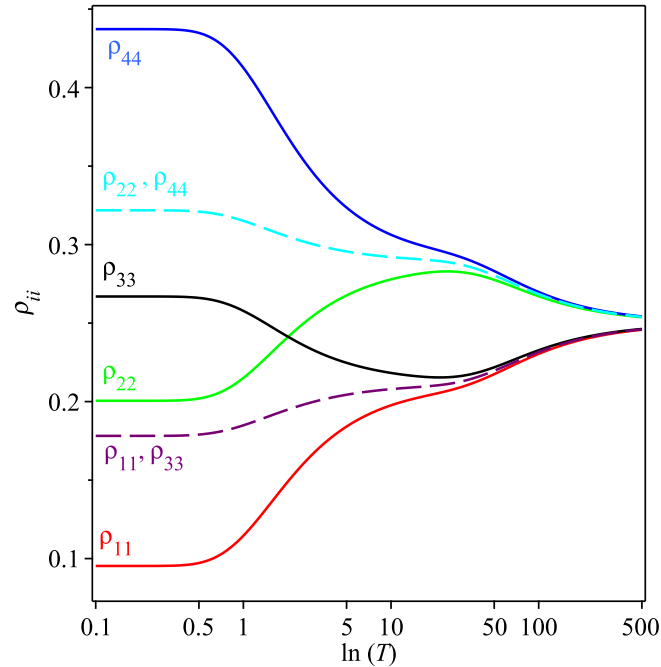
$$\rho_{22} \rightarrow |L1\rangle,$$

$$\rho_{33} \rightarrow |R0\rangle,$$

$$\rho_{44} \rightarrow |R1\rangle.$$

As populações do modelo, em função da temperatura  $T$  na escala logarítmica, são mostradas na Fig.(5.1), fixando  $B_z = 16\mu eV$ ,  $B_x = 100\mu eV$ ,  $t = 7\mu eV$ , onde  $\varepsilon = 1\mu eV$  correspondem às curvas contínuas e  $\varepsilon = 0$  às tracejadas. As curvas contínuas nos mostram que, em baixas temperaturas, é mais provável que o elétron seja encontrado no primeiro estado excitado na direita ( $\rho_{33}$ ) do que no estado de mínima energia da esquerda ( $\rho_{22}$ ). À medida que a temperatura aumenta, o elétron tende a sair do estado  $\rho_{44}$  e do estado excitado  $\rho_{33}$ , aparecendo no ponto quântico da esquerda ( $\rho_{11}$  e  $\rho_{22}$ ). Em  $T \approx 2\mu eV$ , vemos um cruzamento de  $\rho_{22}$  e  $\rho_{33}$  evidenciando a inversão de probabilidade entre o nível de mínima energia da esquerda  $\rho_{22}$  e o primeiro estado excitado da direita  $\rho_{33}$ . Com  $\varepsilon = 0$ , temos simetria entre os dois pontos quânticos e, consequentemente, o estado de carga não alterará as populações. Pode-se concluir, nesse caso, que a probabilidade só é alterada pelo *spin* e é independente do estado eletrônico.

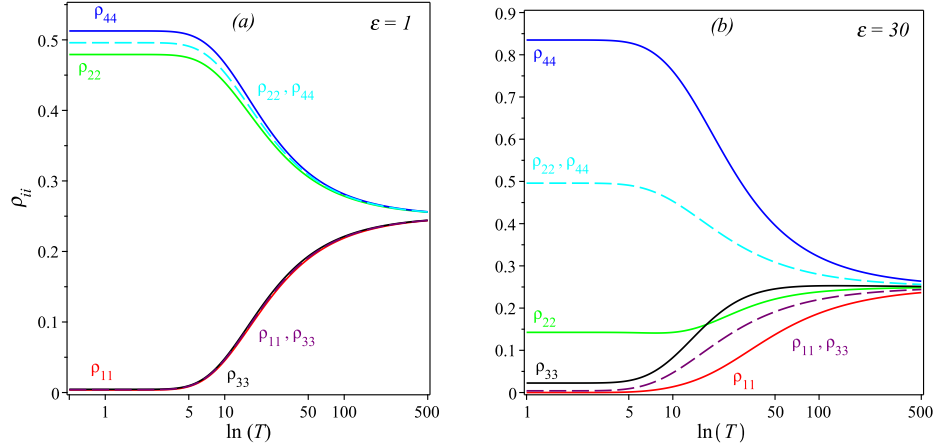
Figura 5.1 – Na figura plotamos as curvas das populações em função da temperatura  $T$  na escala logarítmica. Fixamos  $B_z = 16\mu eV$ ,  $B_x = 100\mu eV$ ,  $t = 7\mu eV$ , onde  $\varepsilon = 1\mu eV$  (curvas contínuas) e  $\varepsilon = 0$  (curvas tracejadas).



Fonte: Autor

Na Fig.(5.2) plotamos as curvas das populações, em função da temperatura  $T$  na escala logarítmica, fixando  $B_z = 24\mu eV$ ,  $B_x = 10\mu eV$  e  $t = 15.4\mu eV$ , onde as curvas tracejadas correspondem à  $\varepsilon = 0$ . Na Fig.(5.2a), fixando  $\varepsilon = 1\mu eV$ , temos  $\rho_{11} \approx \rho_{33} \approx 0$  e torna  $\rho_{44}$  o estado mais provável. A Fig.(5.2b) revela diferenças expressivas das populações quando  $\varepsilon = 30\mu eV$ . Quando o sistema inicia,  $\rho_{44}$  é, consideravelmente, maior que todas as outras probabilidades e, conforme a temperatura aumenta, todas as outras populações apresentam crescimentos. No momento em que  $T \approx 17\mu eV$ , há o cruzamento entre as populações  $\rho_{22}$  e  $\rho_{33}$  e, por consequência, a probabilidade do elétron se encontrar no primeiro estado excitado no  $PQ$  da direita se torna maior do que estar no primeiro nível do  $PQ$  da esquerda. Em ambas as figuras, as curvas tracejadas nos mostram que, para baixas temperaturas, a probabilidade do elétron ter *spin up* ( $\rho_{11}$  e  $\rho_{33}$ ) é quase nula e cresce à medida que a temperatura aumenta. O contrário acontece com as populações relativas ao *spin down* ( $\rho_{22}$  e  $\rho_{44}$ ) onde, para baixas temperaturas, é  $\rho_{22} + \rho_{44} \approx 1$  e decrescem com o aumento de  $T$ .

Figura 5.2 – As figuras mostram as curvas das populações em função da temperatura  $T$  na escala logarítmica para  $B_z = 24\mu eV$ ,  $B_x = 10\mu eV$ ,  $t = 15.4\mu eV$  e  $\varepsilon = 0$  (curvas tracejadas). Em (a)  $\varepsilon = 1\mu eV$  (curvas contínuas) e em (b)  $\varepsilon = 30\mu eV$  (curvas contínuas).



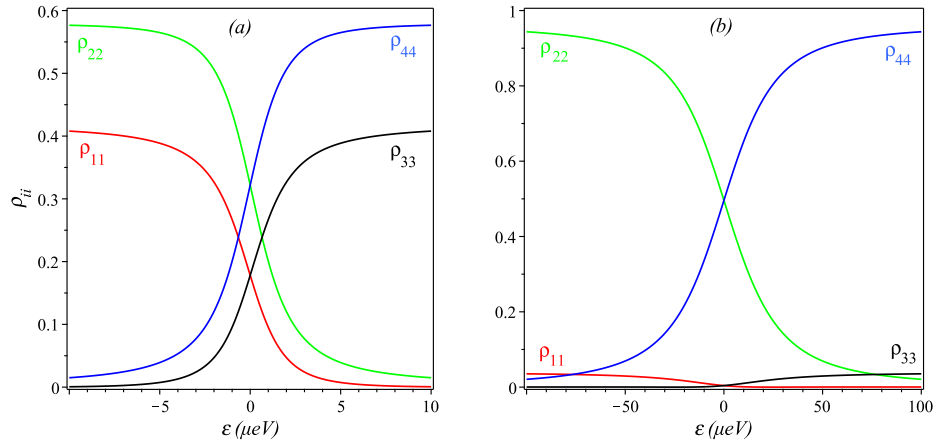
Fonte: Autor

### 5.1.1 Populações em $T = 0$

Estudaremos o comportamento das curvas das populações no regime em que a temperatura está no zero absoluto. Quando  $T = 0$ , o sistema em estudo se encontra no estado  $|\varphi_2\rangle$ , ou seja, no estado fundamental, definido entre as eqs.(4.7). As Figs.(5.3) nos mostram as curvas das populações do sistema em  $T = 0$  em função de  $\varepsilon$  na escala logarítmica. A Fig.(5.3a) mostra o comportamento das curvas para  $B_z = 16\mu eV$ ,  $B_x = 100\mu eV$  e  $t = 7\mu eV$ . Já a Fig.(5.3b) corresponde à  $B_z = 24\mu eV$ ,  $B_x = 10\mu eV$  e  $t = 15.4\mu eV$ .

Analisando, primeiramente, a Fig.(5.3a), podemos notar que existem cruzamentos entre as populações em três valores:  $\varepsilon = 0$  e  $\varepsilon \approx \pm 0,66\mu eV$ . Em  $\varepsilon = 0$ , temos que  $\rho_{11} = \rho_{33}$  e  $\rho_{22} = \rho_{44}$ . Ao aumentar o desnível, as populações referentes aos estados da direita crescem, diminuindo a probabilidade do elétron estar na esquerda (ilustrado pela Fig.(5.4a)). Quando  $\varepsilon \approx 0,66\mu eV$ , há um cruzamento entre as populações  $\rho_{22}$  e  $\rho_{33}$  (ilustrado pela Fig.(5.4b)) nos mostrando que o aumento de  $\varepsilon$  tornou o primeiro estado excitado do  $PQ$  da direita mais provável do que o estado de menor energia do  $PQ$  da esquerda.

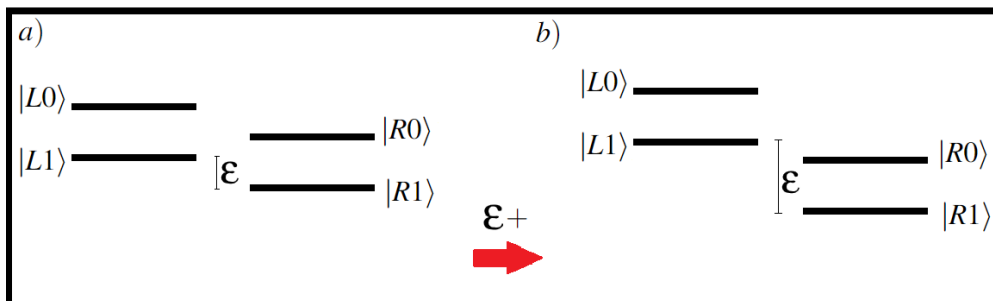
Figura 5.3 – A figura mostra as curvas das populações do operador densidade, para  $T = 0$ , em função de  $\varepsilon$ . Na figura (a)  $B_z = 16\mu eV$ ,  $B_x = 100\mu eV$  e  $t = 7\mu eV$ . Em (b)  $B_z = 24\mu eV$ ,  $B_x = 10\mu eV$  e  $t = 15.4\mu eV$ .



Fonte: Autor

A Fig.(5.3b) apresenta cruzamentos em  $\varepsilon = 0$  e  $\varepsilon \approx \pm 76,76\mu eV$ . A discussão relativa a esses cruzamentos é semelhante ao que foi feito anteriormente, ou seja, ao aumentar  $\varepsilon$  as populações relativas ao  $PQ$  da esquerda diminuem ( $\rho_{11}$  e  $\rho_{33}$ ), enquanto as que estão associadas ao  $PQ$  da direita crescem ( $\rho_{22}$  e  $\rho_{44}$ ). Depois do cruzamento de  $\rho_{22}$  e  $\rho_{33}$ , a probabilidade do elétron estar no estado excitado da direita ( $\rho_{33}$ ) se tornou maior que estar no primeiro nível da esquerda  $\rho_{22}$ .

Figura 5.4 – Representação da profundidade dos possíveis estados do sistema. Os traços em paralelo, inferior e superior, representam o estado fundamental e o primeiro nível excitado de cada ponto quântico, respectivamente. A seta vermelha mostra o sentido de crescimento do valor de  $\varepsilon$ .



Fonte: Autor



## 5.2 Concorrência para $\varepsilon \neq 0$

A fim de quantificar o emaranhamento do ponto quântico duplo, com  $\varepsilon \neq 0$ , usaremos a concorrência  $C$ , discutida na subseção (3.2.1). Para calcular a concorrência, deve-se construir a matriz  $R$ , dada pela eq.(3.20), onde

$$R = \hat{\rho} \cdot (\sigma_y \otimes \sigma_y) \cdot \hat{\rho}^* \cdot (\sigma_y \otimes \sigma_y).$$

Mas a matriz  $\hat{\rho}$  é real, conseqüentemente,  $\hat{\rho}^* = \hat{\rho}$ . Assim, a matriz  $R$  possui a forma

$$R = \begin{bmatrix} R_1 & R_2 & R_3 & R_4 \\ R_5 & R_6 & R_7 & -R_3 \\ R_8 & R_9 & -R_6 & -R_2 \\ R_{10} & -R_8 & -R_5 & R_1 \end{bmatrix}, \quad (5.1)$$

onde os elementos de matriz são:

$$R_1 = \rho_{11}\rho_{44} - \rho_{12}\rho_{34} - \rho_{13}\rho_{24} + \rho_{14}^2, \quad (5.2a)$$

$$R_2 = (\rho_{23} - \rho_{14})\rho_{13} - \rho_{11}\rho_{34} + \rho_{12}\rho_{33}, \quad (5.2b)$$

$$R_3 = (\rho_{23} + \rho_{14})\rho_{12} - \rho_{11}\rho_{24} + \rho_{13}\rho_{22}, \quad (5.2c)$$

$$R_4 = 2(\rho_{14}\rho_{11} - \rho_{13}\rho_{12}), \quad (5.2d)$$

$$R_5 = (\rho_{14} - \rho_{23})\rho_{24} + \rho_{12}\rho_{44} - \rho_{22}\rho_{34}, \quad (5.2e)$$

$$R_6 = -\rho_{12}\rho_{34} - \rho_{13}\rho_{24} + \rho_{22}\rho_{33} + \rho_{23}^2, \quad (5.2f)$$

$$R_7 = 2(\rho_{23}\rho_{22} - \rho_{24}\rho_{12}), \quad (5.2g)$$

$$R_8 = (\rho_{14} - \rho_{23})\rho_{34} + \rho_{13}\rho_{44} - \rho_{33}\rho_{24}, \quad (5.2h)$$

$$R_9 = 2(\rho_{33}\rho_{23} - \rho_{34}\rho_{13}), \quad (5.2i)$$

$$R_{10} = 2(\rho_{14}\rho_{44} - \rho_{34}\rho_{24}). \quad (5.2j)$$

Os valores próprios  $\lambda_i (i = 1, 2, 3, 4)$  da matriz  $R$  são expressões muito extensas, portanto não é possível de serem escritos aqui. Com os valores próprios de  $R$ , podemos determinar a concor-

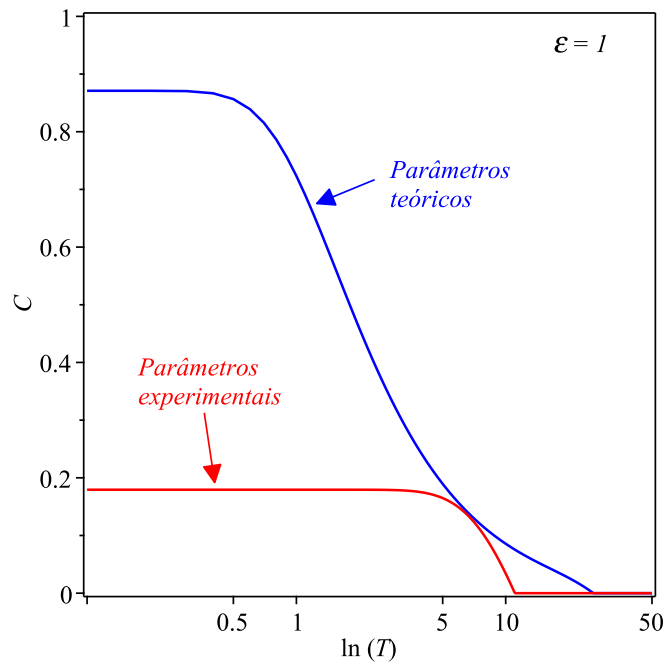
rência quântica do sistema através da eq.(3.21), onde

$$C = \max \left\{ \left( \left| \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_3} \right| - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_4} \right), 0 \right\}. \quad (5.3)$$

Note que, diferentemente da eq.(3.21), existe um módulo que compreende dois autovalores de  $R$ . Em alguns casos, correspondentes a determinado valores de parâmetros,  $\lambda_1$  é o maior em valor absoluto e para outros  $\lambda_3$  possui o maior valor. O módulo age a fim de não permitir que a diferença entre os possíveis maiores valores próprios não resulte em um número negativo.

Na Fig.(5.5) plotamos a concorrência em função da temperatura na escala logarítmica. A curva da concorrência, em azul, corresponde à  $B_z = 16\mu eV$ ,  $B_x = 100\mu eV$ ,  $t = 7\mu eV$  e  $\varepsilon = 1\mu eV$  e a curva em vermelho corresponde à  $B_z = 24\mu eV$ ,  $B_x = 10\mu eV$ ,  $t = 15.4\mu eV$  e  $\varepsilon = 1\mu eV$ . Nessa figura, vemos uma diferença expressiva da concorrência para os dois conjuntos de dados, onde os dados experimentais mostram um fraco emaranhamento e isto acontece devido ao fraco campo  $B_x = 10\mu eV$ . Por outro lado, observa-se um forte aumento da concorrência para  $B_x = 100\mu eV$ .

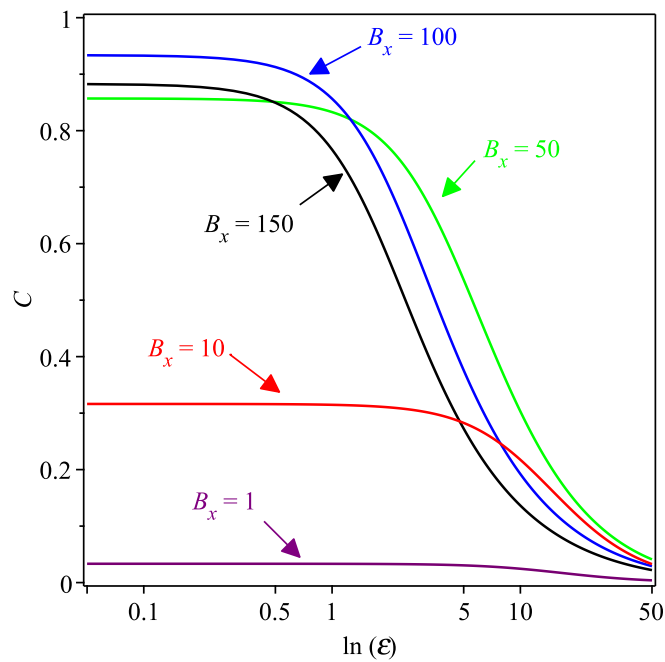
Figura 5.5 – A figura mostra as curvas da concorrência em função da temperatura  $T$  na escala logarítmica. Para a curva azul,  $B_z = 16\mu eV$ ,  $B_x = 100\mu eV$ ,  $t = 7\mu eV$  e  $\varepsilon = 1\mu eV$ . Em vermelho,  $B_z = 24\mu eV$ ,  $B_x = 10\mu eV$ ,  $t = 15.4\mu eV$  e  $\varepsilon = 1\mu eV$



Fonte: Autor

Na Fig.(5.6), pode-se observar o efeito de  $\varepsilon$  na concorrência  $C$  do sistema a uma temperatura fixa de  $T = 0,5\mu eV$  para diferentes valores de  $B_x$ . Assim como foi discutido no parágrafo anterior, o desnível de energia atua de forma mais acintosa no emaranhamento para maiores valores de  $B_x$ . Note que quanto maior o valor de  $B_x$ , menor será o valor de  $\varepsilon$  para que a concorrência comece a decair.

Figura 5.6 – A figura mostra as curvas da concorrência, para diferentes valores de  $B_x$ , em função do desnível de energia  $\varepsilon$  na escala logarítmica. Aqui, fixamos  $B_z = 16\mu eV$ ,  $t = 7\mu eV$  e  $T = 0,5\mu eV$ .



Fonte: Autor

### 5.3 Concorrência para $\varepsilon = 0$

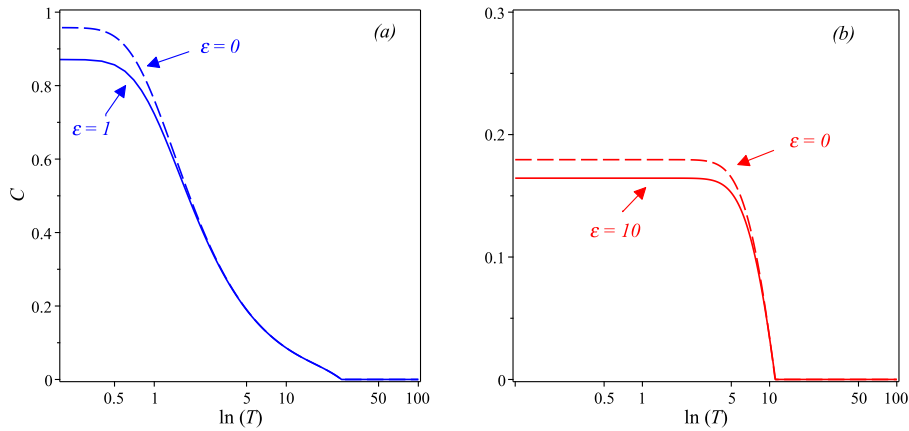
Assim como visto na subseção (3.2.1), calculamos a matriz  $R = \hat{\rho}(\sigma_y \otimes \sigma_y)\hat{\rho}^*(\sigma_y \otimes \sigma_y)$  com base na eq.(3.20). Note que a matriz densidade do modelo, em questão, só possui termos reais em sua composição, portanto  $\hat{\rho}^*$  é real. Os cálculos para a concorrência, com ausência de  $\varepsilon$ , estão presentes no apêndice C. Calculando os autovalores de  $R$ , temos que eles são dados pelas expressões:

$$\lambda_{1,2} = \rho_{12}^2 + \rho_{14}^2 + (\rho_{22} - \rho_{24})(\rho_{11} + \rho_{13}) - 2(\rho_{12}\rho_{14}) \pm \pm 2\sqrt{|(\rho_{11} + \rho_{13})(\rho_{22} - \rho_{24})(\rho_{12} - \rho_{14})^2|}, \quad (5.4a)$$

$$\lambda_{3,4} = \rho_{12}^2 + \rho_{14}^2 + (\rho_{22} + \rho_{24})(\rho_{11} - \rho_{13}) + 2(\rho_{12}\rho_{14}) \pm \pm 2\sqrt{|(\rho_{11} - \rho_{13})(\rho_{22} + \rho_{24})(\rho_{12} + \rho_{14})^2|}. \quad (5.4b)$$

Como visto, anteriormente, a concorrência é calculada de forma que os valores próprios da matriz  $R$  se apresentam em ordem decrescente. Analisando os autovalores acima, podemos notar que o maior valor possível pode ser observado em  $\lambda_1$  ou em  $\lambda_3$ . Consequentemente, podemos determinar a concorrência através da eq. (3.21).

Figura 5.7 – As figuras mostram as curvas das concorrências em função da temperatura  $T$  na escala logarítmica para diferentes valores de  $\varepsilon$ . Na figura (a) os valores dos parâmetros são:  $B_z = 16\mu eV$ ,  $B_x = 100\mu eV$  e  $t = 7\mu eV$ . Na figura (b)  $B_z = 24\mu eV$ ,  $B_x = 10\mu eV$  e  $t = 15,4\mu eV$ .

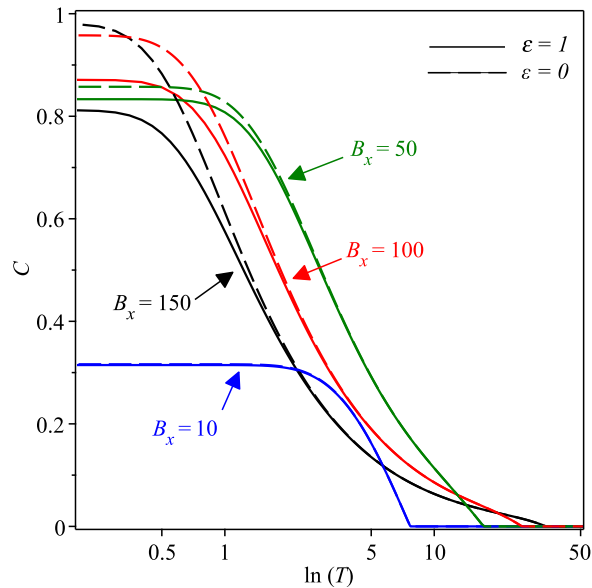


Fonte: Autor

Na Fig.(5.7), comparamos a concorrência em  $\varepsilon \neq 0$  e  $\varepsilon = 0$ . Na Fig.(5.7a) as curvas correspondem à  $B_z = 16\mu eV$ ,  $B_x = 100\mu eV$  e  $t = 7\mu eV$ , para  $\varepsilon = 1\mu eV$  e  $\varepsilon = 0$ . Nota-se que, para baixas temperaturas, quando  $\varepsilon = 0$ , o sistema é mais emaranhado do que quando  $\varepsilon = 1\mu eV$ , mas ambas as curvas se encontram com o aumento da temperatura. Já na Fig.(5.7b) fixamos  $B_z = 24\mu eV$ ,  $B_x = 10\mu eV$  e  $t = 15,4\mu eV$ , com  $\varepsilon = 10\mu eV$  e  $\varepsilon = 0$ . A concorrência neste caso é mais fraca, mas a inserção de  $\varepsilon$  gera um decaimento mais fraco do emaranhamento. Em ambas

as figuras, percebemos que não há ganho de emaranhamento no modelo com a presença de  $\varepsilon$  e, para aumentá-lo, deve-se nivelar os pontos quânticos existentes.

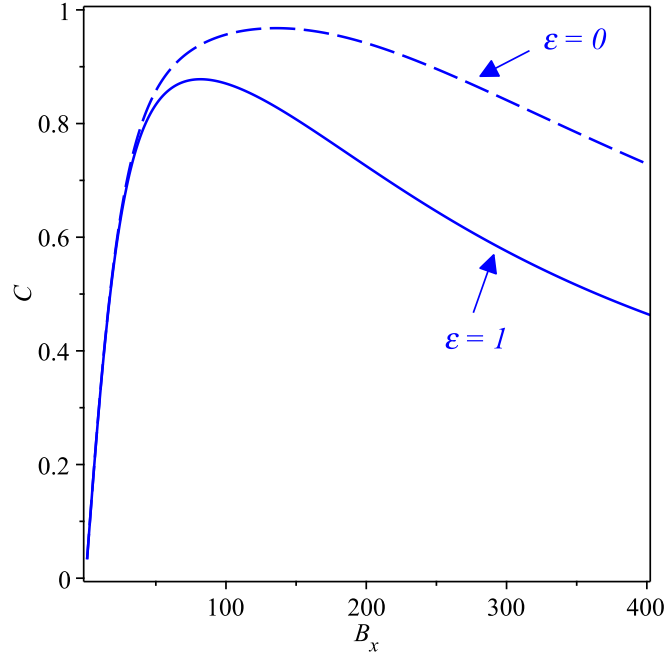
Figura 5.8 – A figura mostra as curvas da concorrência, para diferentes valores de  $B_x$ , em função da temperatura  $T$  na escala logarítmica. Fixamos  $B_z = 16\mu eV$  e  $t = 7\mu eV$  para  $\varepsilon = 1\mu eV$  (curvas contínuas) e para  $\varepsilon = 0$  (curvas tracejadas).



Fonte: Autor

Agora, fixando os mesmos valores de parâmetros da Fig.(5.7a), analisaremos o papel do campo transversal  $B_x$  na concorrência. Na Fig.(5.8) as curvas contínuas correspondem a  $\varepsilon = 1\mu eV$  e as tracejadas à  $\varepsilon = 0$ . Observando as curvas contínuas, percebe-se que  $C$  é fraca para  $B_x = 10\mu eV$ , mas com o aumento do campo  $B_x$ , o emaranhamento se torna maior. Vemos que o aumento de  $B_x$  ajuda no emaranhamento até um valor crítico, pois podemos notar que a concorrência para  $B_x = 150\mu eV$  é menor do que para  $B_x = 100\mu eV$ . Por outro lado, estudando a situação para  $\varepsilon = 0$ , vemos que o aumento de  $B_x$ , levando em conta somente parâmetros estudados, ajuda no emaranhamento, mas vale ressaltar que para  $B_x$  muito forte o emaranhamento decai. As curvas da Fig.(5.9) nos mostram os efeitos do campo  $B_x$  no emaranhamento a uma temperatura fixa de  $T = 0,3\mu eV$ .

Figura 5.9 – A figura mostra as curvas da concorrência  $C$  em função de  $B_x$ . Fixamos  $B_z = 16\mu eV$ ,  $t = 7\mu eV$  e  $T = 0,3\mu eV$  para  $\varepsilon = 1\mu eV$  (curva contínua) e  $\varepsilon = 0$  (curva tracejada).



Fonte: Autor

#### 5.4 Coerência Correlacionada para $\varepsilon \neq 0$

Assim como apresentado na subseção (3.3.2), a coerência correlacionada  $C_{cc}$  nos fornece a diferença entre a quantidade de coerência contida no sistema global e as coerências que são puramente locais. Vale ressaltar que em nosso modelo não temos duas partículas correlacionadas, portanto a coerência quântica do único elétron é gerada pelos graus de liberdade do estado de carga e do *spin* do elétron. Esses dois graus de liberdade podem ser denotados pelos subsistemas  $A$  e  $B$ , respectivamente.

Utilizando as eqs.(3.15), podemos determinar o operador densidade reduzido de cada subsistema. Calculando os traços parciais da matriz operador densidade  $\hat{\rho}_{AB}$ , evidenciado na eq.(4.10), temos que as matrizes densidade reduzidas são

$$\hat{\rho}_A = \begin{bmatrix} \rho_{11} + \rho_{22} & \rho_{13} + \rho_{24} \\ \rho_{13} + \rho_{24} & \rho_{33} + \rho_{44} \end{bmatrix} \quad (5.5)$$

e

$$\hat{\rho}_B = \begin{bmatrix} \rho_{11} + \rho_{33} & \rho_{12} + \rho_{34} \\ \rho_{12} + \rho_{34} & \rho_{22} + \rho_{44} \end{bmatrix}. \quad (5.6)$$

Como nosso objetivo é escolher uma base que diminua as coerências da matriz densidade de cada subsistema, devemos usar a transformação unitária, dada pela eq.(3.24), onde

$$U_{A,B} = \begin{bmatrix} \cos(\theta_{A,B}) & -e^{i\phi_{A,B}} \text{sen}(\theta_{A,B}) \\ e^{-i\phi_{A,B}} \text{sen}(\theta_{A,B}) & \cos(\theta_{A,B}) \end{bmatrix}.$$

Ao fazer a transformação, escolhemos  $\phi_{A,B} = 0$ , encontramos ângulos  $\theta_{A,B}$  que zeram os elementos fora da diagonal principal de cada subsistema. Assim, para que as correlações quânticas estejam presentes somente no sistema bipartido, os ângulos  $\theta_{A,B}$  devem ser

$$\theta_A = \arctan \left[ \frac{\chi_A + \sqrt{(\chi_A)^2 + 4(\rho_{13} + \rho_{24})^2}}{2(\rho_{13} + \rho_{24})} \right] \quad (5.7a)$$

e

$$\theta_B = \arctan \left[ \frac{\chi_B + \sqrt{(\chi_B)^2 + 4(\rho_{12} + \rho_{34})^2}}{2(\rho_{12} + \rho_{34})} \right], \quad (5.7b)$$

onde  $\chi_{A,B} = \rho_{11} \pm \rho_{22} \mp \rho_{33} - \rho_{44}$ . Agora que temos os ângulos necessários, representados pelas eqs.(5.7), realizamos a operação

$$\tilde{\rho}_{AB} = (U_A \otimes U_B) \rho_{AB} (U_A^\dagger \otimes U_B^\dagger). \quad (5.8)$$

Os termos da matriz  $\tilde{\rho}_{AB}$  são muito extensos de forma que tornam a escrita desse operador inviável. Nesse cenário, podemos calcular a coerência correlacionada somando os módulos de cada elemento fora da diagonal principal, ou seja,

$$C_{cc}(\hat{\rho}(T)) = C_{l_1}(\tilde{\rho}_{AB}).$$

## 5.5 Coerência Correlacionada para $\varepsilon = 0$

Agora, vamos calcular a coerência correlacionada para o caso particular, onde não há desnível de energia entre os pontos quânticos. Para determinar os operadores densidade reduzi-

dos usaremos eqs.(3.15). Consequentemente, temos que

$$\hat{\rho}_A = \begin{bmatrix} \rho_{11} + \rho_{22} & \rho_{13} + \rho_{24} \\ \rho_{13} + \rho_{24} & \rho_{11} + \rho_{22} \end{bmatrix} \quad (5.9)$$

e

$$\hat{\rho}_B = \begin{bmatrix} 2\rho_{11} & 0 \\ 0 & 2\rho_{22} \end{bmatrix}. \quad (5.10)$$

Note que, nesse caso, os elementos fora da diagonal de  $\hat{\rho}_B$  são zero, portanto não existe a necessidade de usar a transformação unitária  $U_B$  nessa situação. Por outro lado, ainda precisamos usar a transformação  $U_A$  (definida pela eq.(3.24)) para diagonalizar o operador  $\hat{\rho}_A$ . Consequentemente, temos que

$$\tilde{\rho}_A = U_A \rho_A U_A^\dagger \quad (5.11)$$

e

$$\tilde{\rho}_{AB} = (U_A \otimes \mathbb{I}) \rho_{AB} (U_A^\dagger \otimes \mathbb{I}). \quad (5.12)$$

A escolha da transformação que anula os elementos fora da diagonal (as coerências) é efetuado escolhendo  $\theta = \frac{\pi}{4}$  e  $\phi = 0$ , assim, através das eqs.(5.11) e (5.12), podemos escrever as matrizes  $\tilde{\rho}_A$  e  $\tilde{\rho}_{AB}$ , ou seja,

$$\tilde{\rho}_A = \begin{bmatrix} \rho_{11} + \rho_{22} - \rho_{13} - \rho_{24} & 0 \\ 0 & \rho_{11} + \rho_{22} + \rho_{13} + \rho_{24} \end{bmatrix} \quad (5.13)$$

e

$$\tilde{\rho}_{AB} = \begin{bmatrix} \rho_{11} - \rho_{13} & 0 & 0 & \rho_{12} + \rho_{14} \\ 0 & \rho_{22} - \rho_{24} & \rho_{12} - \rho_{14} & 0 \\ 0 & \rho_{12} - \rho_{14} & \rho_{11} + \rho_{13} & 0 \\ \rho_{12} + \rho_{14} & 0 & 0 & \rho_{22} + \rho_{24} \end{bmatrix}. \quad (5.14)$$

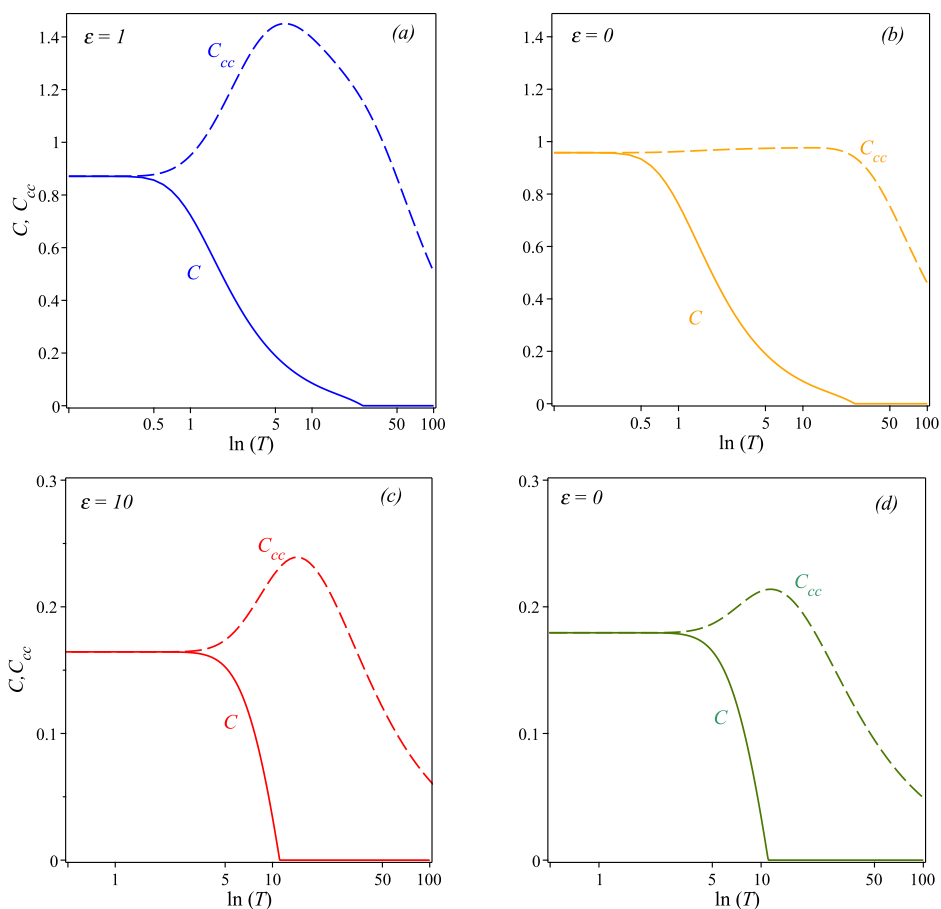
Com isso, podemos calcular a coerência correlacionada, usando a eq.(3.23), obtendo

$$C_{cc}(\tilde{\rho}_{AB}(T)) = 2 \left( |\rho_{12} + \rho_{14}| + |\rho_{12} - \rho_{14}| \right). \quad (5.15)$$



As Figs.(5.10) mostram as curvas da concorrência (curvas contínuas) e da coerência correlacionada (curvas tracejadas) em função da temperatura na escala logarítmica para nossos dois grupos de dados. Na Fig.(5.10a), fixando  $B_z = 16\mu eV$ ,  $B_x = 100\mu eV$ ,  $t = 7\mu eV$  e  $\varepsilon = 1\mu eV$ , vemos que a coerência correlacionada é constituída somente por estados emaranhados ( $C \approx 0,87$ ) até  $T \approx 0,5\mu eV$ , logo, por flutuações térmicas surgem correlações quânticas não emaranhadas (discórdia quântica) e o emaranhamento decai até  $T \approx 25\mu eV$ , onde se anula. Por outro lado, a discórdia aumenta até alcançar o máximo, em  $T \approx 5,97\mu eV$ , para logo decair até atingir o valor zero. A Fig.(5.10b) corresponde aos mesmos dados da figura anterior, mas com  $\varepsilon = 0$ .

Figura 5.10 – As figuras mostram as curvas da concorrência (curvas contínuas) e da coerência correlacionada (curvas tracejadas) em função da temperatura  $T$  na escala logarítmica para para dois conjuntos de valores. Na figura (a) os valores são  $B_z = 16\mu eV$ ,  $B_x = 100\mu eV$ ,  $t = 7\mu eV$  e  $\varepsilon = 1\mu eV$ , enquanto na figura (b) os parâmetros são os mesmos, mas  $\varepsilon = 0$ . Na figura (c) fixamos  $B_z = 24\mu eV$ ,  $B_x = 10\mu eV$ ,  $t = 15,4\mu eV$  e  $\varepsilon = 10\mu eV$ . A figura (d) possui os mesmos parâmetros, mas  $\varepsilon = 0$ .



Fonte: Autor

A inexistência de  $\varepsilon$  faz com que o valor de  $C$  e  $C_{cc}$  se inicie em, aproximadamente, 0,96. Após as curvas se separarem, a concorrência enfraquece, até zero, e a coerência apresenta um sutil aumento, decrescendo depois. Conclusivamente, a ausência de  $\varepsilon$  promove um aumento na concorrência e nas correlações quânticas não emaranhadas. Já as Figs.(5.10c) e (5.10d) correspondem à  $B_z = 24\mu eV$ ,  $B_x = 10\mu eV$ ,  $t = 15,4\mu eV$ . Fixando  $\varepsilon = 10\mu eV$ , vemos que as curvas partem de um valor inferior ( $C \approx 0,164$ ) às curvas que possuem  $\varepsilon = 0$  ( $C \approx 0,179$ ). É notável que o ponto máximo de  $C_{cc}$  é maior para  $\varepsilon = 10\mu eV$ , evidenciando que a presença do desnível, assim como para o conjunto de dados anterior, diminui a concorrência e aumenta as correlações quânticas não emaranhadas.

## 5.6 Fidelidade térmica

Nesse capítulo, analisaremos as curvas da fidelidade para os estados próprios  $|\varphi_n\rangle$  ( $n = 1, 2, 3, 4$ ), definidos nas eqs.(4.7). Portanto, temos que, para um vetor de estado  $|\varphi_n\rangle$ , a fidelidade é determinada por

$$F_n(T) = \langle \varphi_n | \hat{\rho}(T) | \varphi_n \rangle. \quad (5.16)$$

No nosso modelo, o operador densidade é dado por

$$\hat{\rho}(T) = \sum_i^4 \frac{e^{-E_i/T}}{Z} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|. \quad (5.17)$$

Substituindo (5.17) em (5.16), a expressão para a fidelidade do nosso modelo,  $F_n$ , associada ao vetor de estado  $|\varphi_n\rangle$ , é

$$F_n(T) = \langle \varphi_n | \sum_i^4 \frac{e^{-E_i/T}}{Z} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i | \varphi_n \rangle. \quad (5.18)$$

Mas, note que

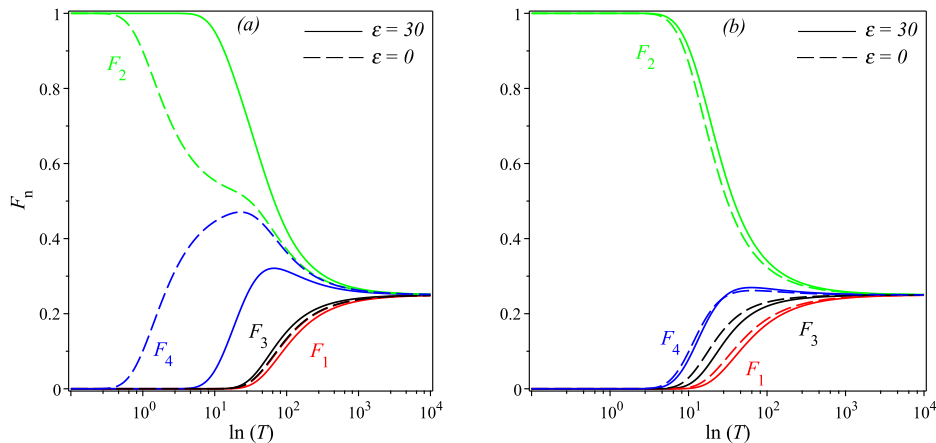
$$\langle \varphi_n | \varphi_i \rangle = \delta_{in},$$

pois os vetores  $|\varphi_n\rangle$  ( $n = 1, 2, 3, 4$ ) são reais e ortogonais entre si. Consequentemente, a eq.(5.18) pode ser reescrita como

$$F_n(T) = \frac{e^{-E_n/T}}{Z}. \quad (5.19)$$

Analisando, primeiramente, a Fig.(5.11a), onde foram fixados  $B_z = 16\mu eV$ ,  $B_x = 100\mu eV$  e  $t = 7\mu eV$ , nota-se que as curvas de  $F_2$ , associada a energia do estado fundamental ( $E_2$ ), apresentam diferença de decaimento com a presença de  $\varepsilon$ . Comparando a curva contínua ( $\varepsilon = 30\mu eV$ ) e a tracejada ( $\varepsilon = 0$ ), em verde, é evidente que quando há desnível na energia, a fidelidade é mais robusta. Já para  $F_4$ , correspondente ao primeiro estado excitado, em azul, a fidelidade é nula tanto para  $\varepsilon \neq 0$  quanto para  $\varepsilon = 0$  em baixas temperaturas. Com o aumento da temperatura, a fidelidade emerge primeiro para o caso  $\varepsilon = 0$ , atingindo seu máximo para logo, assintoticamente, chegar ao valor de  $F_4 = 0,25$ . Observa-se que  $F_4$ , para  $\varepsilon = 30\mu eV$ , surge a temperaturas maiores, mas, assintoticamente, também atinge o valor de 0,25. Por outro lado, as curvas da fidelidade  $F_1$  e  $F_3$  correspondem aos estados mais excitados e pode-se observar que a fidelidade surge por consequência de flutuações térmicas a temperaturas maiores. A Fig.(5.11b), fixando  $B_z = 24\mu eV$ ,  $B_x = 10\mu eV$  e  $t = 15,4\mu eV$ , mostra que  $F_3$ , para  $\varepsilon = 0$ , emerge primeiro do que para  $\varepsilon = 30\mu eV$ , diferentemente da figura anterior.

Figura 5.11 – As figuras mostram as curvas da fidelidade,  $F_n$  associada a cada vetor de estado  $|\varphi_n\rangle$  em função de  $T$  na escala logarítmica. As curvas contínuas correspondem a  $\varepsilon = 30\mu eV$  e as tracejadas possuem  $\varepsilon = 0$ . Em (a) fixamos  $B_z = 16\mu eV$ ,  $B_x = 100\mu eV$  e  $t = 7\mu eV$ , enquanto que em (b)  $B_z = 24\mu eV$ ,  $B_x = 10\mu eV$  e  $t = 15,4\mu eV$ .

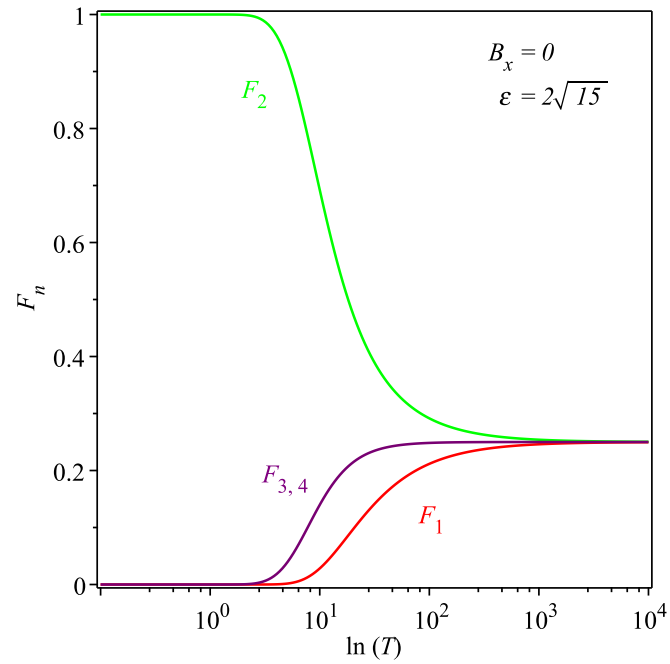


Fonte: Autor

Assim como foi discutido no subcapítulo (4.1), as energias  $E_2$  e  $E_4$  apresentam dois pontos de degenerescência com  $B_x = 0$  (ver curvas tracejadas da Fig.(4.2a)), e os cruzamentos entre essas curvas acontece em  $\varepsilon = \pm 2\sqrt{15}\mu eV$ . O que deve acontecer com as curvas de  $F_3$  e  $F_4$  para esses dados? A Fig.(5.12) mostra as curvas da fidelidade quando há degenerescência

e, assim como esperado,  $F_2$  e  $F_4$  se sobrepõem, apresentando o mesmo comportamento com o aumento da temperatura.

Figura 5.12 – A figura mostra as curvas da fidelidade,  $F_n$  associada a cada vetor de estado  $|\varphi_n\rangle$  em função da temperatura  $T$  na escala logarítmica. Fixamos os parâmetros, correspondentes a um ponto de degenerescência entre  $E_3$  e  $E_4$ ,  $B_z = 16\mu eV$ ,  $B_x = 0$ ,  $t = 7\mu eV$  e  $\varepsilon = 2\sqrt{15}\mu eV$ .



Fonte: Autor

## 6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Nesta dissertação, apresentamos resultados das populações, fidelidade térmica e das correlações quânticas térmicas em um ponto quântico duplo. O dispositivo consiste de um único elétron em um ponto quântico duplo sujeito a um campo magnético homogêneo, na direção "z", e outro não-homogêneo, na direção "x". O elétron pode saltar do ponto quântico da esquerda ( $|L\rangle$ ) para o da direita ( $|R\rangle$ ) por tunelamento  $t$ . Os pontos quânticos podem ser assimétricos, apresentando um desnivelamento  $\varepsilon$ . Além do estado de carga, o elétron pode apresentar *spin up* ( $|0\rangle$ ) ou *spin down* ( $|1\rangle$ ). Posteriormente, esse modelo foi inserido em banho térmico.

Primeiramente, calculamos as possíveis energias e observamos o comportamento das curvas, reconhecendo a importância dos campos magnéticos  $B_x$  e  $B_z$  para que exista a quebra da degenerescência e pontos de anticruzamento. Após inseri-lo em banho térmico, estudamos as curvas das populações em função da temperatura com a existência, ou não, de simetria entre os  $PQs$ . Examinamos as implicações da assimetria, quando  $T = 0$ , notando pontos de cruzamentos das populações.

Estudando a concorrência quântica, notamos que esse dispositivo, mesmo que com um só elétron, possui correlações quânticas. As correlações são geradas pelos *qubits* de seu *spin* e de seu estado de carga. Notamos que o responsável pelo emaranhamento do sistema, tanto para o caso geral quanto para o caso particular, é o campo não-homogêneo  $B_x$ . A inexistência de  $B_x$  remete à ausência de emaranhamento e, ainda, percebemos que o aumento de sua intensidade ajuda até certo ponto e, então, o emaranhamento diminui de acordo com seu aumento. Vimos que a presença de simetria entre os  $PQs$  favorece o emaranhamento, o tornando mais robusto em todos os casos estudados.

Utilizando transformações unitárias, para ângulos particulares de  $\theta$  e  $\phi$ , conseguimos eliminar as coerências locais de cada subsistema  $\rho_A$  e  $\rho_B$ , fazendo com que toda coerência quântica se localize no sistema composto  $\rho_{AB}$ . Plotando as curvas da coerência correlacionada  $C_{cc}$ , percebeu-se que, para baixas temperaturas, elas coincidem com as curvas da concorrência  $C$  de seu respectivo grupo de parâmetros. Com o aumento de  $T$ , observa-se um crescimento das curvas da  $C_{cc}$  por consequência de flutuações térmicas, resultando no aumento da discórdia quântica, atingindo um pico para decair e se anular depois.

Finalmente, estudamos a fidelidade térmica para  $B_z = 16\mu eV$ ,  $t = 7\mu eV$ ,  $B_x = 100\mu eV$  e notamos que a existência de assimetria entre os  $PQs$  deixa a fidelidade do estado fundamental

mais robusta para baixas temperaturas, mas para  $B_z = 24\mu eV$ ,  $t = 15,4\mu eV$ ,  $B_x = 10\mu eV$  não há diferenças significativas com a existência de  $\varepsilon$ . Observamos as curvas da fidelidade para o primeiro e segundo estado excitado em pontos de degenerescência entre  $E_3$  e  $E_4$ , notando a sobreposição das curvas de suas respectivas fidelidades.

Como perspectivas futuras, seria interessante estudar o modelo desta dissertação no contexto de uma máquina térmica quântica, em particular uma máquina térmica de Otto quântica em equilíbrio termodinâmico com um reservatório térmico.

## REFERÊNCIAS

- ALEINER, I. L.; BROUWER, P. W.; GLAZMAN, L. I. Quantum effects in coulomb blockade. **Physics Reports**, Elsevier, v. 358, n. 5-6, p. 309–440, 2002.
- ALFEROV, Z. I. The history and future of semiconductor heterostructures. **Semiconductors**, Springer, v. 32, n. 1, p. 1–14, 1998.
- ASPECT, A.; DALIBARD, J.; ROGER, G. Experimental test of bell’s inequalities using time-varying analyzers. **Physical review letters**, APS, v. 49, n. 25, p. 1804, 1982.
- ASPECT, A.; GRANGIER, P.; ROGER, G. Experimental tests of realistic local theories via bell’s theorem. **Physical review letters**, APS, v. 47, n. 7, p. 460, 1981.
- BAUMGRATZ, T.; CRAMER, M.; PLENIO, M. B. Quantifying coherence. **Physical Review Letters**, APS, v. 113, n. 14, p. 140401, 2014.
- BELL, J. S. On the einstein podolsky rosen paradox. **Physics Physique Fizika**, APS, v. 1, n. 3, p. 195, 1964.
- BENITO, M. et al. Electric-field control and noise protection of the flopping-mode spin qubit. **Physical Review B**, APS, v. 100, n. 12, p. 125430, 2019.
- BENITO, M. et al. Input-output theory for spin-photon coupling in si double quantum dots. **Physical Review B**, APS, v. 96, n. 23, p. 235434, 2017.
- BENNETT, C. H.; DIVINCENZO, D. P. Quantum information and computation. **Nature**, Nature Publishing Group UK London, v. 404, n. 6775, p. 247–255, 2000.
- BRACKER, A. S. et al. Engineering electron and hole tunneling with asymmetric inas quantum dot molecules. **Applied Physics Letters**, American Institute of Physics, v. 89, n. 23, p. 233110, 2006.
- BUKOWSKI, T. J.; SIMMONS, J. H. Quantum dot research: current state and future prospects. **Critical Reviews in Solid State and Material Sciences**, Taylor & Francis, v. 27, n. 3-4, p. 119–142, 2002.
- BURKARD, G. et al. Semiconductor spin qubits. **Reviews of Modern Physics (2022)**, 2021.
- BURKARD, G.; LOSS, D.; DIVINCENZO, D. P. Coupled quantum dots as quantum gates. **Physical Review B**, APS, v. 59, n. 3, p. 2070, 1999.
- CHIQUITO, A. J. Pontos quânticos: átomos artificiais e transistores atômicos. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, SciELO Brasil, v. 23, p. 159–167, 2001.
- CHIQUITO, A. J.; JR, F. L. O transistor, 50 anos. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 20, n. 4, p. 309–314, 1998.
- COELHO, A. S. O. **Emaranhamento multicor para redes de informação quântica**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2013.
- COHEN-TANNOUJDI, C.; DIU, B.; LALOE, F. Quantum mechanics, volume 1. **Quantum Mechanics**, v. 1, p. 898, 1986.

- CÓRCOLES, A. D. et al. Demonstration of a quantum error detection code using a square lattice of four superconducting qubits. **Nature Communications**, Nature Publishing Group, v. 6, n. 1, p. 1–10, 2015.
- DAHBI, Z. et al. Effect of induced transition on the quantum entanglement and coherence in two-coupled double quantum dot system. **Annalen der Physik**, Wiley Online Library, v. 535, n. 3, p. 2200537, 2023.
- D'ANJOU, B.; BURKARD, G. Optimal dispersive readout of a spin qubit with a microwave resonator. **Physical Review B**, APS, v. 100, n. 24, p. 245427, 2019.
- EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B.; ROSEN, N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? **Physical review**, APS, v. 47, n. 10, p. 777, 1935.
- FERREIRA, M.; ROJAS, O.; ROJAS, M. Thermal entanglement and quantum coherence of a single electron in a double quantum dot with rashba interaction. **Physical Review A**, APS, v. 107, n. 5, p. 052408, 2023.
- FILGUEIRAS, C.; ROJAS, O.; ROJAS, M. Thermal entanglement and correlated coherence in two coupled double quantum dots systems. **Annalen der Physik**, Wiley Online Library, v. 532, n. 8, p. 2000207, 2020.
- FOWLER, A. G. et al. Surface codes: Towards practical large-scale quantum computation. **Physical Review A**, APS, v. 86, n. 3, p. 032324, 2012.
- FUJISAWA, T.; HAYASHI, T.; HIRAYAMA, Y. Controlled decoherence of a charge qubit in a double quantum dot. **Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena**, American Vacuum Society, v. 22, n. 4, p. 2035–2038, 2004.
- GORMAN, J.; HASKO, D.; WILLIAMS, D. Charge-qubit operation of an isolated double quantum dot. **Physical Review Letters**, APS, v. 95, n. 9, p. 090502, 2005.
- HORODECKI, R. et al. Quantum entanglement. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 81, n. 2, p. 865, 2009.
- HOUSE, M. G. **Lateral Quantum Dots for Quantum Information Processing**. Tese (Doutorado) — UCLA, 2012.
- KASTNER, M. A. et al. Artificial atoms. **Physics Today**, v. 46, n. 1, p. 24–31, 1993.
- KOPPENS, F. H. et al. Driven coherent oscillations of a single electron spin in a quantum dot. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 442, n. 7104, p. 766–771, 2006.
- LADD, T. D. et al. Quantum computers. **Nature**, Nature Publishing Group UK London, v. 464, n. 7285, p. 45–53, 2010.
- LEDENTSOV, N. et al. Quantum dot heterostructures: fabrication, properties, lasers. **Semiconductors**, Springer, v. 32, n. 4, p. 343–365, 1998.



- LIAO, Y.-H.; HUANG, J.; WANG, W.-Z. Real two-stage kondo effect in parallel double quantum dot. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, Elsevier, v. 377, p. 354–361, 2015.
- LOSS, D.; DIVINCENZO, D. P. Quantum computation with quantum dots. **Physical Review A**, APS, v. 57, n. 1, p. 120, 1998.
- MA, J. et al. Converting coherence to quantum correlations. **Physical Review Letters**, APS, v. 116, n. 16, p. 160407, 2016.
- MELO, H. A. de. **Propriedades eletrônicas de pontos quânticos contendo muitos elétrons**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Ceará, 2010.
- MIELKE, J.; PETTA, J. R.; BURKARD, G. Nuclear spin readout in a cavity-coupled hybrid quantum dot-donor system. **PRX Quantum**, APS, v. 2, n. 2, p. 020347, 2021.
- OLIVEIRA, J. L. D. de; ROJAS, M.; FILGUEIRAS, C. Two coupled double quantum-dot systems as a working substance for heat machines. **Physical Review E**, APS, v. 104, n. 1, p. 014149, 2021.
- OLIVEIRA, P. A. A. d. et al. **Emaranhamento em moléculas de pontos quânticos semicondutores**. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, 2019.
- OLLIVIER, H.; ZUREK, W. H. Quantum discord: a measure of the quantumness of correlations. **Physical Review Letters**, APS, v. 88, n. 1, p. 017901, 2001.
- PARDO, J. D. C. **Acoplamento Kondo-Majorana em pontos quânticos duplos**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2019.
- PONTES, S. M. A. **Pontos quânticos de carbono incorporados em matriz polimérica para aplicação em diodo emissor de luz**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Ceará, 2022.
- PRADO, S. J. Estudo das propriedades eletrônicas e ópticas em pontos quânticos duplos. **RECEN-Revista Ciências Exatas e Naturais**, v. 18, n. 2, p. 282–295, 2016.
- REED, M. A. Quantum dots. **Scientific American**, JSTOR, v. 268, n. 1, p. 118–123, 1993.
- SAKURAI, J. J.; COMMINS, E. D. **Modern Quantum Mechanics, Revised Edition**. [S.l.]: American Association of Physics Teachers, 1995.
- SANTOS, W. F. da S. **Predição da dinâmica de lasers de pontos quânticos semicondutores utilizando redes neurais artificiais**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal da Bahia, 2018.
- SHINKAI, G. et al. Correlated coherent oscillations in coupled semiconductor charge qubits. **Physical Review Letters**, APS, v. 103, n. 5, p. 056802, 2009.
- SILVA, J. da C. **Confinamento quântico em hetero-estruturas semicondutoras de baixa dimensionalidade**. Tese (Doutorado) — Universidade Federal da Bahia, 2008.

STRELTSOV, A.; ADESSO, G.; PLENIO, M. B. Colloquium: Quantum coherence as a resource. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 89, n. 4, p. 041003, 2017.

STRELTSOV, A. et al. Measuring quantum coherence with entanglement. **Physical Review Letters**, APS, v. 115, n. 2, p. 020403, 2015.

TAN, K. C. et al. Unified view of quantum correlations and quantum coherence. **Physical Review A**, APS, v. 94, n. 2, p. 022329, 2016.

VEDRAL, V. Quantum entanglement. **Nature Physics**, Nature Publishing Group UK London, v. 10, n. 4, p. 256–258, 2014.

VITORETI, A. B. F. et al. Células solares sensibilizadas por pontos quânticos. **Química Nova**, SciELO Brasil, v. 40, p. 436–446, 2017.

WOOTTERS, W. K. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. **Physical Review Letters**, APS, v. 80, n. 10, p. 2245, 1998.

WOOTTERS, W. K. Entanglement of formation and concurrence. **Quantum Inf. Comput.**, v. 1, n. 1, p. 27–44, 2001.

YANG, Y.-C.; COPPERSMITH, S.; FRIESEN, M. High-fidelity entangling gates for quantum-dot hybrid qubits based on exchange interactions. **Physical Review A**, APS, v. 101, n. 1, p. 012338, 2020.

ZHOU, Y. et al. Optimal teleportation via thermal entangled states of a two-qubit heisenberg chain. **EPL (Europhysics Letters)**, IOP Publishing, v. 86, n. 5, p. 50004, 2009.

## A APÊNDICE A - MATRIZ DENSIDADE

Apresentaremos, aqui, os cálculos dos elementos da matriz densidade  $\hat{\rho}(T)$  na base padrão  $\{|L0\rangle, |L1\rangle, |R0\rangle, |R1\rangle\}$ . O operador densidade é dado pela eq.(3.11), portanto

$$\hat{\rho}(T) = \frac{e^{-\beta E_1}}{Z} |\varphi_1\rangle\langle\varphi_1| + \frac{e^{-\beta E_2}}{Z} |\varphi_2\rangle\langle\varphi_2| + \frac{e^{-\beta E_3}}{Z} |\varphi_3\rangle\langle\varphi_3| + \frac{e^{-\beta E_4}}{Z} |\varphi_4\rangle\langle\varphi_4|. \quad (\text{A.1})$$

Os vetores de estado  $|\varphi_n\rangle (n = 1, 2, 3, 4)$  foram definidos nas eqs.(4.7). Substituindo os vetores de estado, temos que

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(T) = & \frac{M_+^2 e^{-\beta E_1}}{Z} \left[ a_+ |L0\rangle + b_+ |L1\rangle + |R0\rangle + d_+ |R1\rangle \right] \left[ a_+ \langle L0| + b_+ \langle L1| + \langle R0| + d_+ \langle R1| \right] + \\ & + \frac{M_-^2 e^{-\beta E_2}}{Z} \left[ a_- |L0\rangle + b_- |L1\rangle + |R0\rangle + d_- |R1\rangle \right] \left[ a_- \langle L0| + b_- \langle L1| + \langle R0| + d_- \langle R1| \right] + \\ & + \frac{N_+^2 e^{-\beta E_3}}{Z} \left[ f_+ |L0\rangle + g_+ |L1\rangle + |R0\rangle + k_+ |R1\rangle \right] \left[ f_+ \langle L0| + g_+ \langle L1| + \langle R0| + k_+ \langle R1| \right] + \\ & + \frac{N_-^2 e^{-\beta E_4}}{Z} \left[ f_- |L0\rangle + g_- |L1\rangle + |R0\rangle + k_- |R1\rangle \right] \left[ f_- \langle L0| + g_- \langle L1| + \langle R0| + k_- \langle R1| \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Fazendo as operações a fim de desenvolver a eq.(A.2), o operador densidade  $\hat{\rho}(T)$  é escrito como

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}(T) = & \frac{M_+^2 e^{-\beta E_1}}{Z} \left[ a_+ (a_+ |L0\rangle\langle L0| + b_+ |L0\rangle\langle L1| + |L0\rangle\langle R0| + d_+ |L0\rangle\langle R1|) + \right. \\
& + b_+ (a_+ |L1\rangle\langle L0| + b_+ |L1\rangle\langle L1| + |L1\rangle\langle R0| + d_+ |L1\rangle\langle R1|) + \\
& + (a_+ |R0\rangle\langle L0| + b_+ |R0\rangle\langle L1| + |R0\rangle\langle R0| + d_+ |R0\rangle\langle R1|) + \\
& \left. + d_+ (a_+ |R1\rangle\langle L0| + b_+ |R1\rangle\langle L1| + |R1\rangle\langle R0| + d_+ |R1\rangle\langle R1|) \right] + \\
& + \frac{M_-^2 e^{-\beta E_2}}{Z} \left[ a_- (a_- |L0\rangle\langle L0| + b_- |L0\rangle\langle L1| + |L0\rangle\langle R0| + d_- |L0\rangle\langle R1|) + \right. \\
& + b_- (a_- |L1\rangle\langle L0| + b_- |L1\rangle\langle L1| + |L1\rangle\langle R0| + d_- |L1\rangle\langle R1|) + \\
& + (a_- |R0\rangle\langle L0| + b_- |R0\rangle\langle L1| + |R0\rangle\langle R0| + d_- |R0\rangle\langle R1|) + \\
& \left. + d_- (a_- |R1\rangle\langle L0| + b_- |R1\rangle\langle L1| + |R1\rangle\langle R0| + d_- |R1\rangle\langle R1|) \right] + \\
& + \frac{N_+^2 e^{-\beta E_3}}{Z} \left[ f_+ (f_+ |L0\rangle\langle L0| + g_+ |L0\rangle\langle L1| + |L0\rangle\langle R0| + k_+ |L0\rangle\langle R1|) + \right. \\
& + g_+ (f_+ |L1\rangle\langle L0| + g_+ |L1\rangle\langle L1| + |L1\rangle\langle R0| + k_+ |L1\rangle\langle R1|) + \\
& + (f_+ |R0\rangle\langle L0| + g_+ |R0\rangle\langle L1| + |R0\rangle\langle R0| + k_+ |R0\rangle\langle R1|) + \\
& \left. + k_+ (f_+ |R1\rangle\langle L0| + g_+ |R1\rangle\langle L1| + |R1\rangle\langle R0| + k_+ |R1\rangle\langle R1|) \right] + \\
& + \frac{N_-^2 e^{-\beta E_4}}{Z} \left[ f_- (f_- |L0\rangle\langle L0| + g_- |L0\rangle\langle L1| + |L0\rangle\langle R0| + k_- |L0\rangle\langle R1|) + \right. \\
& + g_- (f_- |L1\rangle\langle L0| + g_- |L1\rangle\langle L1| + |L1\rangle\langle R0| + k_- |L1\rangle\langle R1|) + \\
& + (f_- |R0\rangle\langle L0| + g_- |R0\rangle\langle L1| + |R0\rangle\langle R0| + k_- |R0\rangle\langle R1|) + \\
& \left. + k_- (f_- |R1\rangle\langle L0| + g_- |R1\rangle\langle L1| + |R1\rangle\langle R0| + k_- |R1\rangle\langle R1|) \right].
\end{aligned} \tag{A.3}$$

Agora que temos a expressão de  $\hat{\rho}(T)$ , podemos escrever a matriz do sistema bipartido com base na definição (4.9), utilizando a base padrão  $\{|L0\rangle, |L1\rangle, |R0\rangle, |R1\rangle\}$ , onde

$$\rho_{kl} = \langle u_k | \hat{\rho}(T) | u_l \rangle.$$

Dessa forma, a matriz operador densidade  $\hat{\rho}_{AB}$  é

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

Consequentemente, a matriz acima possui a configuração

$$\hat{\rho}_{AB}(T) = \begin{bmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \rho_{14} \\ \rho_{12} & \rho_{22} & \rho_{23} & \rho_{24} \\ \rho_{13} & \rho_{23} & \rho_{33} & \rho_{34} \\ \rho_{14} & \rho_{24} & \rho_{34} & \rho_{44} \end{bmatrix}.$$

## B APÊNDICE B - CÁLCULO DA MATRIZ DENSIDADE PARA $\varepsilon = 0$

Assim como foi feito no apêndice A, calcularemos, aqui, a matriz densidade para o caso particular. Os cálculos são semelhantes, mas os vetores de estado são dados por expressões diferentes e, conseqüentemente, resulta em elementos diferentes na matriz densidade. O operador densidade é dado por

$$\hat{\rho}(T) = \frac{e^{-\beta E_1}}{Z} |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{e^{-\beta E_2}}{Z} |\psi_2\rangle\langle\psi_2| + \frac{e^{-\beta E_3}}{Z} |\psi_3\rangle\langle\psi_3| + \frac{e^{-\beta E_4}}{Z} |\psi_4\rangle\langle\psi_4|. \quad (\text{B.1})$$

Os vetores de estado  $|\psi_n\rangle$  ( $n = 1, 2, 3, 4$ ) foram definidos nas eqs.(4.13). Substituindo os vetores de estado na eq.(B.1):

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(T) = & \frac{\alpha_+^2 e^{-\beta E_1}}{Z} \left[ |L0\rangle - \gamma_+ |L1\rangle + |R0\rangle + \gamma_+ |R1\rangle \right] \left[ \langle L0| - \gamma_+ \langle L1| + \langle R0| + \gamma_+ \langle R1| \right] + \\ & + \frac{\alpha_-^2 e^{-\beta E_2}}{Z} \left[ |L0\rangle - \gamma_- |L1\rangle + |R0\rangle + \gamma_- |R1\rangle \right] \left[ \langle L0| - \gamma_- \langle L1| + \langle R0| + \gamma_- \langle R1| \right] + \\ & + \frac{\eta_+^2 e^{-\beta E_3}}{Z} \left[ -|L0\rangle + \theta_+ |L1\rangle + |R0\rangle + \theta_+ |R1\rangle \right] \left[ -\langle L0| + \theta_+ \langle L1| + \langle R0| + \theta_+ \langle R1| \right] + \\ & + \frac{\eta_-^2 e^{-\beta E_4}}{Z} \left[ -|L0\rangle + \theta_- |L1\rangle + |R0\rangle + \theta_- |R1\rangle \right] \left[ -\langle L0| + \theta_- \langle L1| + \langle R0| + \theta_- \langle R1| \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Fazendo as operações a fim de desenvolver a eq.(B.2), o operador densidade  $\hat{\rho}(T)$  é escrito como

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}(T) = & \frac{\alpha_+^2 e^{-\beta E_1}}{Z} \left[ (|L0\rangle\langle L0| - \gamma_+ |L0\rangle\langle L1| + |L0\rangle\langle R0| + \gamma_+ |L0\rangle\langle R1|) + \right. \\
& + \gamma_+ ( - |L1\rangle\langle L0| + \gamma_+ |L1\rangle\langle L1| - |L1\rangle\langle R0| - \gamma_+ |L1\rangle\langle R1|) + \\
& + (|R0\rangle\langle L0| - \gamma_+ |R0\rangle\langle L1| + |R0\rangle\langle R0| + \gamma_+ |R0\rangle\langle R1|) + \\
& \left. + \gamma_+ (|R1\rangle\langle L0| - \gamma_+ |R1\rangle\langle L1| + |R1\rangle\langle R0| + \gamma_+ |R1\rangle\langle R1|) \right] + \\
& + \frac{\alpha_-^2 e^{-\beta E_2}}{Z} \left[ (|L0\rangle\langle L0| - \gamma_- |L0\rangle\langle L1| + |L0\rangle\langle R0| + \gamma_- |L0\rangle\langle R1|) + \right. \\
& + \gamma_- ( - |L1\rangle\langle L0| + \gamma_- |L1\rangle\langle L1| - |L1\rangle\langle R0| - \gamma_- |L1\rangle\langle R1|) + \\
& + (|R0\rangle\langle L0| - \gamma_- |R0\rangle\langle L1| + |R0\rangle\langle R0| + \gamma_- |R0\rangle\langle R1|) + \\
& \left. + \gamma_- (|R1\rangle\langle L0| - \gamma_- |R1\rangle\langle L1| + |R1\rangle\langle R0| + \gamma_- |R1\rangle\langle R1|) \right] + \\
& + \frac{\eta_+^2 e^{-\beta E_3}}{Z} \left[ (|L0\rangle\langle L0| - \theta_+ |L0\rangle\langle L1| - |L0\rangle\langle R0| - \theta_+ |L0\rangle\langle R1|) + \right. \\
& + \theta_+ ( - |L1\rangle\langle L0| + \theta_+ |L1\rangle\langle L1| + |L1\rangle\langle R0| + \theta_+ |L1\rangle\langle R1|) + \\
& + ( - |R0\rangle\langle L0| + \theta_+ |R0\rangle\langle L1| + |R0\rangle\langle R0| + \theta_+ |R0\rangle\langle R1|) + \\
& \left. + \theta_+ ( - |R1\rangle\langle L0| + \theta_+ |R1\rangle\langle L1| + |R1\rangle\langle R0| + \theta_+ |R1\rangle\langle R1|) \right] + \\
& + \frac{\eta_-^2 e^{-\beta E_4}}{Z} \left[ (|L0\rangle\langle L0| - \theta_- |L0\rangle\langle L1| - |L0\rangle\langle R0| - \theta_- |L0\rangle\langle R1|) + \right. \\
& + \theta_- ( - |L1\rangle\langle L0| + \theta_- |L1\rangle\langle L1| + |L1\rangle\langle R0| + \theta_- |L1\rangle\langle R1|) + \\
& + ( - |R0\rangle\langle L0| + \theta_- |R0\rangle\langle L1| + |R0\rangle\langle R0| + \theta_- |R0\rangle\langle R1|) + \\
& \left. + \theta_- ( - |R1\rangle\langle L0| + \theta_- |R1\rangle\langle L1| + |R1\rangle\langle R0| + \theta_- |R1\rangle\langle R1|) \right].
\end{aligned}
\tag{B.3}$$

Agora que temos a expressão de  $\hat{\rho}(T)$ , podemos escrever a matriz do sistema bipartido com base na definição (4.9), utilizando a base padrão  $\{|L0\rangle, |L1\rangle, |R0\rangle, |R1\rangle\}$ , onde

$$\rho_{kl} = \langle u_k | \hat{\rho}(T) | u_l \rangle.$$

Então, podemos construir a matriz  $\hat{\rho}_{AB}$ :

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

Consequentemente, a matriz operador densidade, para o caso particular, onde  $\varepsilon = 0$ , possui a forma

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



### C APÊNDICE C - CÁLCULO DA CONCORRÊNCIA PARA $\varepsilon = 0$

Para calcular a concorrência quântica, devemos, primeiramente, escrever a matriz  $R = \hat{\rho} \cdot (\sigma_y \otimes \sigma_y) \cdot \hat{\rho}^* \cdot (\sigma_y \otimes \sigma_y)$ , onde  $\hat{\rho}$  possui o seguinte formato:

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

Como  $\hat{\rho}$  é real ( $\hat{\rho} = \hat{\rho}^*$ ) a matriz  $R$  é escrita da forma

$$R = \begin{bmatrix} R_1 & R_2 & R_3 & R_4 \\ R_5 & R_1 & R_6 & -R_3 \\ R_3 & -R_4 & R_1 & -R_2 \\ -R_6 & -R_3 & -R_5 & R_1 \end{bmatrix},$$

onde

$$\begin{aligned} R_1 &= \rho_{12}^2 + \rho_{14}^2 + \rho_{11}\rho_{22} - \rho_{13}\rho_{24}, \\ R_2 &= 2(\rho_{11}\rho_{12} - \rho_{13}\rho_{14}), \\ R_3 &= \rho_{13}\rho_{22} - (2\rho_{12}\rho_{14} + \rho_{11}\rho_{24}), \\ R_4 &= 2(\rho_{11}\rho_{14} - \rho_{12}\rho_{13}), \\ R_5 &= 2(\rho_{12}\rho_{22} + \rho_{14}\rho_{24}), \\ R_6 &= -2(\rho_{12}\rho_{24} + \rho_{14}\rho_{22}). \end{aligned}$$

Diagonalizando  $R$ , e substituindo as expressões acima, temos quatro autovalores distintos:

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

Agora que temos os autovalores de  $R$ , podemos calcular a concorrência de acordo com a expressão dada pela eq.(3.21)

$$C = \max \left[ \left( |\sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_3}| - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_4} \right), 0 \right]. \quad (\text{C.1})$$