



Dissertação de Mestrado

**Emaranhamento de Qubits de Éxcitons de Vale
nos Novos Sistemas Bidimensionais
Integrados em uma Nanocavidade**

Celso Alves do Nascimento Júnior

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
INSTITUTO DE FÍSICA

Brasília
2023

Dissertação de Mestrado

Emaranhamento de Qubits de Éxcitons de Vale nos Novos Sistemas Bidimensionais Integrados em uma Nanocavidade

Celso Alves do Nascimento Júnior

Dissertação de Mestrado submetida
ao Instituto de Física como requisito parcial
para obtenção do grau de Mestre em Física
Teórica.

Orientador: Prof. Dr. Qu Fanyao (In Memoriam)

Brasília

2023

d769e do Nascimento Júnior, Celso Alves.
Emaranhamento de Qubits de Éxcitons de Vale nos Novos
Sistemas Bidimensionais Integrados em uma Nanocavidade /
Celso Alves do Nascimento Júnior; orientador Qu Fanyao (In
Memoriam) . -- Brasília, 2023.
101 p.

Universidade de Brasília (Instituto de Física) -- , 2023.

1. Palavra chave 1. 2. Palavra chave 2. 3. Palavra chave 3. 4.
Palavra chave 4. I. , Qu Fanyao (In Memoriam), orient. II. Título

Dissertação de Mestrado

Emaranhamento de Qubits de Éxcitons de Vale nos Novos Sistemas Bidimensionais Integrados em uma Nanocavidade

Celso Alves do Nascimento Júnior

Dissertação de Mestrado submetida
ao Instituto de Física como requisito parcial
para obtenção do grau de Mestre em Física
Teórica.

Trabalho aprovado. Brasília, 20 de janeiro de 2023:

Prof. Dr. Qu Fanyao (In Memoriam),
IF/UNB
Orientador

Prof. Dr. David Lima Azevedo, IF/UNB
Presidente

Prof. Dr. Alexandre Cavalheiro Dias,
IF/UNB
Examinador

Prof. Dr. André J. Chaves, ITA
Examinador

Brasília
2023

Dedico esse trabalho ao meu Deus querido, que meu deus forças para nunca desistir do meu sonho, que nos momentos críticos da caminhada sempre esteve comigo, me alegrando e renovando-me as esperanças.

Agradecimentos

Agradeço ao meu querido orientador Prof.Dr. Qu Fanyao (In Memoriam), pela sua paciência e disponibilidade. Sempre acreditou e motivou os meus estudos e minha pesquisa. O seu exemplo como educador é notável e admirável, tal como seu exemplo como pesquisador, que para mim é digna de ser seguida e imitada.

À minha querida esposa Quézia, mulher virtuosa, que também é uma grande incentivadora dos meus projetos e que em breve me dará o maior presente que um homem pode receber: meu filho Alfredo.

Aos meus pais, as minhas irmãs, a minha sogra, meu sogro, meus cunhados e todos aqueles que de alguma maneira torceram por mim.

Ao Prof. Dr. Alexandre Cavalheiro Dias por sua amizade. Deixo aqui registrado a minha gratidão por seu apoio, principalmente após o falecimento do meu prezado orientador, momento este que todos nós, que fazíamos parte do seu grupo, ficamos extremamente fragilizados.

Ao Prof. Dr. Cláudio Manoel Gomes de Sousa , que sempre incentivou os meus estudos e que despertou em mim o desejo de realizar este projeto.

Ao Prof. Dr. Alexandre da Silva Fernandes.

Ao Prof. Dr. Augusto Alcade.

À Prof.^a Dra. Halyne Silva Borges.

Ao Prof. Dr. David Lima Azevedo

A todos os meus colegas de laboratório, em especial: Dr. Eronildo, Carlos, David e Victor.

*“Procurai o que faz as Plêiades e o Órion
e torna a sombra da noite em manhã, e faz escurecer
o dia como a noite, que chama as águas do mar,
e as derrama sobre a terra; o Senhor é o seu nome.”
(Amós 5:8-Bíblia Sagrada, São Paulo, 2009.)*

Resumo

Neste trabalho analisamos a dinâmica dos qubits de éxcitons em três sistemas quânticos distintos, nos quais nos permitiu extrair várias informações relevantes, como a concorrência, que é o meio pelo qual é possível calcular o quanto que um sistema quântico está emaranhado. Éxcitons são quasipartículas compostas por um par elétron-buraco. São excelentes sistemas para serem usados como bits quânticos, pois sua neutralidade elétrica é extremamente vantajosa, tornando-os menos suscetíveis a decoerência devido a flutuações eletrostáticas em sua vizinhança. Nesse trabalho, propomos dois tipos de qubits de éxcitons: qubits de éxcitons brilhantes e qubits de éxcitons escuros. Primeiramente estudamos um sistema quântico aberto composto por dois vales povoados por éxcitons claros, em que foi mostrado que a concorrência em função do tempo sempre decai, ou seja, sempre alcançava estados estacionários nulos. Já no segundo estudo introduzimos ao primeiro sistema uma microcavidade bimodal, onde fora utilizado dois estados iniciais diferentes: O primeiro com os qubits de éxcitons em um estado não correlacionado, ou seja, não emaranhado, e os fótons da cavidade em um estado de Bell (estado maximamente emaranhado), já no segundo estado inicial, deixamos os qubit de éxcitons em um estado de Bell e os fótons da cavidade em um estado não correlacionado. Em seguida foram realizados cálculos pós-dinâmicos, como a separação das matrizes de densidade do sistema composto, e por fim calculamos a concorrência para o sistema excitônico. Com essa análise foi mostrado que a concorrência apresentou valores estacionários satisfatórios para o seu uso na Computação Quântica, mostrando que a cavidade introduzida ao sistema beneficiou o emaranhamento dos qubits de éxcitons. No terceiro estudo trabalhamos com um sistema de três níveis situados em um único vale, povoados por qubits de éxcitons claros e escuros, onde a motivação para ser trabalhar com essas últimas quasipartículas é o fato do tempo de vida radiativa serem muito maiores do que dos éxcitons claros, portanto, sua utilidade para a Computação Quântica é notável. No entanto, os éxcitons escuros são opticamente inativos, o que é um grande desafio a ser superado antes de qualquer tentativa de se tentar operá-los. Propomos um mecanismo empregando um campo magnético no plano da amostra para tornar os éxcitons escuros brilhantes. Demonstramos também que a emissão de éxcitons escuros pode ser efetivamente controlada pela magnitude e orientação do campo magnético aplicado. Ainda em relação ao último sistema, encontramos as soluções estacionárias analíticas, como também correlacionamos as equações de movimento obtidas através da Equação Mestre de Lindblad com as equações obtidas usando o formalismo das equações de taxas.

Palavras-chave: Qubits de Éxcitons, Emaranhamento, Concorrência. Computação Quântica.

Abstract

In this work we analyze the dynamics of exciton qubits in three quantum systems different areas in which it allowed us to extract several relevant information, such as the concurrence, which is the means by which it is possible to calculate how entangled a quantum system is. Excitons are quasiparticles composed of an electron-hole pair. They are excellent systems to be used as quantum bits, because their electrical neutrality is extremely advantageous, making them less susceptible to decoherence due to electrostatic fluctuations in your neighborhood. In this work, we propose two types of exciton qubits: bright exciton qubits and dark exciton qubits. First we study the open quantum system composed of two valleys populated by bright excitons, in which it was shown that concurrence as a function of time it always decays, that is, it always reached zero steady states. Already in the second study, we introduced a bimodal microcavity to the first system, where it was used two different initial states: The first with the exciton qubits in a non-correlated (non-entangled state) and the cavity photons in a Bell state (unentangled state). maximally entangled), already in the second initial state, we leave the exciton qubits in a Bell state and the cavity photons in an uncorrelated state. Then post-dynamic calculations were performed, such as the separation of the density matrices of the composite system, and finally we calculate the concurrence for the excitonic system. With this analysis it was shown that the concurrence presented satisfactory stationary values for its use in Quantum Computing, showing that the cavity introduced to the system benefited from the entanglement of exciton qubits. In the third study, we worked with a system of three levels located in a single valley, populated by exciton qubits bright and dark, where the motivation for working with these last quasiparticles is the fact that the radiative lifetimes of dark excitons are much longer than those of bright excitons, so their usefulness for Quantum Computing is much greater. However, dark excitons are optically inactive, which is a big challenge to be overcome before any attempt is made to try to operate them. We propose a mechanism employing a magnetic field in the sample plane to make the dark excitons light. We also demonstrate that the emission of dark excitons can be effectively controlled by the magnitude and orientation of the applied magnetic field. Still in relation to last system we find the analytical stationary solutions, as well as compare the equations of motion obtained through the Lindblad Master Equation with the equations obtained using the formalism of rate equations.

Keywords: Exciton Qubits, Entanglement, Concurrence. Quantum Computing.

Lista de ilustrações

Figura 1.1 – Eniac, um dos primeiros computadores. Teve o início de seu desenvolvimento em 1943, na Universidade da Pensilvânia, Estados Unidos, sendo finalizado três anos depois. Ocupava 1800 metros quadrados e pesava 50 toneladas.	20
Figura 2.2 – Esfera de Bloch	26
Figura 2.3 – Mudança do estado $ \psi\rangle$ após a aplicação do Operador Not	28
Figura 2.4 – Representações do Operador Not	28
Figura 2.5 – Mudança do estado $ \psi\rangle$ após a aplicação da Porta Y	29
Figura 2.6 – Representações da Porta Y	29
Figura 2.7 – Mudança do estado $ \psi\rangle$ após a aplicação da Porta Z	30
Figura 2.8 – Representações da Porta Z	30
Figura 2.9 – Mudança do estado $ \psi\rangle$ após a aplicação da Porta Hadamard	31
Figura 2.10–Representação da Porta Hadamard	31
Figura 2.11–Representação da Porta C_{not}	32
Figura 2.12–Representação da Porta Toffoli	33
Figura 2.13–Representação de um circuito quântico	34
Figura 2.14–Representação do Algoritmo de Deutsch.	36
Figura 3.15–Rede de Bravais:(a) Cúbica Simples(SC), (b) Cúbica de Corpo Centrado(BCC) e (c) Cúbica de Face Centrada(FCC).	40
Figura 3.16–Primeira(vermelha) e segunda(amarela) zonas de Brillouin para uma rede SC bidimensional.	41
Figura 3.17–Tabela periódica onde estão destacados os metais de transição e os calcogênios	43
Figura 3.18–Estruturas 1T, 2H e 3R.Os átomos escuros representam metal de transição e os átomos claros representam calcogênios.	44
Figura 3.19–Três primeiras zonas de Brillouin: Na figura estão destacados os pontos de alta simetria Γ , K e K' , como também os vetores de rede, K_1 e K_2 . Também está destacado o ponto M que é o ponto médio dos pontos K e K'	44
Figura 3.20–Estruturas de banda do WSe_2 para vários tipos de estruturas, desde a sua forma <i>bulk</i> , até a monocamada: Nota-se, que comparando as estruturas de bandas, a única que apresenta um gap direto, é a monocamada.	45

Figura 3.21–Estrutura de banda com acoplamento spin-orbita da monocamada de WSe ₂ usando DFT (utilizando o pacote computacional Quantum Espresso): A cor vermelha representa o estado com spin para cima e a cor preta representa o estado com spin para baixo. Está em destaque os pontos de alta simetria Γ , K e K' , que são respectivamente a origem e os vértices da primeira Zona de Brillouin.	46
Figura 3.22–Representação das configurações excitônicas: (a) éxciton claro, nota-se que elétron e buraco estão no mesmo vale e tem spins iguais.(b) éxciton escuro com spin proibido, nota-se que o elétron e o buraco estão no mesmo vale, porém com spins opostos. (c) éxciton escuro com conservação do momento proibido, ou seja elétron e buraco com mesmo spin, porém em vales diferentes.	47
Figura 3.23–Representação das configurações excitônicas dos trions (a) singleto. (b) tripleto, (c) trion escuro.	48
Figura 3.24–Representação das configurações excitônicas dos biéxcitons: (a) biéxciton claro-claro intravale. (b) biéxciton claro-claro intervala. (c) biéxciton claro-escuro intravale. (d) biéxciton claro-escuro intervala. (e) biéxciton escuro-escuro intravale. (f) biéxciton escuro-escuro intervala	49
Figura 3.25–Representação das soluções do pseudo-spin para o vale K e K' . Foi usado a seguinte condição inicial $S_z^K(0) = 1$. Parâmetros usados: $\Omega_L = 24$ GHz, $\Omega_e = 0$, $\gamma_s = 0.33$ GHz, $\gamma_v = 0$ e $\theta = \frac{\pi}{2}$ rad (YANG et al., 2015).	51
Figura 3.26–Diagrama de Estados	52
Figura 4.27–Cálculo de Estrutura de Bandas e cálculo de DOS(Densidade dos estado) do WSe ₂ usando DFT(Quantum Espresso).	57
Figura 4.28–Relação $E(k)$ para uma única banda em um cristal unidimensional . . .	60
Figura 5.29–Populações Excitônicas e Concorrência em função do tempo. Neste gráficos foram usados os seguintes parâmetros: $\Omega_+ = \Omega_- = 0.1$ meV , $\delta = 0.5$ meV, $\Gamma_{10} = \Gamma_{20} = 1$ meV, $\Gamma_{21} = \Gamma_{30} = \Gamma_{31} = \Gamma_{32} = 0$	72
Figura 5.30–Concorrência em função do tempo com diferentes valores de δ . Neste gráfico foram usados os seguintes parâmetros: $g_1 = g_2 = 0.1$ meV , $\Gamma_{10} = \Gamma_{20} = 1$ meV e $\Gamma_{21} = \Gamma_{30} = \Gamma_{31} = \Gamma_{32} = 0$	73
Figura 5.31–Populações nos vales $K(K')$ e Concorrência em função do tempo usando o estado inicial $ \Psi_B\rangle$ Neste cálculo foi considerado todos os temas de decoerência iguais a zero($\mathcal{L}[\rho(t)] = 0$)	77

- Figura 5.32–Concorrência $C(\rho)(t \rightarrow \infty)$ em função de dessintonias do campo excitônico quando $B = 0T$. O painel (a) é para o estado inicial $|\Psi_A\rangle$. O painel (b) é para o estado inicial $|\Psi_B\rangle$. (veja o texto para uma descrição dos estados iniciais). Os seguintes parâmetros são usados nos cálculos: $\delta = \delta_0 = 0.6\text{meV}$ (MOLAS et al., 2019; ROBERT et al., 2017), acoplamentos dos modos éxciton-cavidade $g_+ = g_- = 0.1\text{THz}$, e as taxas de decoerência $\Gamma_K = \Gamma_{K'} = 1\text{THz}$ (DE; LAKE, 2017), $\kappa = \kappa_0 = 0,243\text{THz}$ (DE; LAKE, 2017). Os pontos em cinzas no painel (b) representam os dois conjuntos de parâmetros de dessintonias $(\Delta_K, \Delta_{K'})$ usados na maioria dos cálculos.(BORGES H et al., 2022) 78
- Figura 5.33–Evolução temporal da concorrência excitônica em $B = 0T$ para diferentes δ . Em ambos os gráficos (a) e (b) usamos o estado inicial $|\Psi_A\rangle$. Na figura superior temos uma dessintonia ressonante ($\Delta_K = \Delta_{K'}$), enquanto na figura inferior corresponde à uma dessintonia não ressonante ($\Delta_K \neq \Delta_{K'}$). 79
- Figura 5.34–Evolução temporal da concorrência excitônica em $B = 0T$ para diferentes δ . Em ambos os gráficos (a) e (b) usamos o estado inicial $|\Psi_B\rangle$. Na figura superior temos uma dessintonia ressonante ($\Delta_K = \Delta_{K'}$), enquanto na figura inferior corresponde à uma dessintonia não ressonante ($\Delta_K \neq \Delta_{K'}$). 80
- Figura 5.35–Igual à Fig.5.33 mas para $B = 0.5T$. As curvas mostradas nos gráficos (a) e (b) são obtidas com o estado inicial $|\Psi_A\rangle$, Gráfico superior corresponde à dessintonia ressonante ($\Delta_K = \Delta_{K'}$), enquanto o gráfico inferior correspondem à dessintonia não ressonante ($\Delta_K \neq \Delta_{K'}$). 81
- Figura 5.36–Igual à Fig.5.34 mas para $B = 0.5T$. Os painéis (a) e (b) correspondem ao estado inicial $|\Psi_B\rangle$. Gráfico superior corresponde à dessintonia ressonante ($\Delta_K = \Delta_{K'}$), enquanto o Gráfico inferior correspondem à dessintonia não ressonante ($\Delta_K \neq \Delta_{K'}$). 82
- Figura 5.37–Evolução temporal da concorrência excitônica em monocamada de WSe_2 monocamada integrada à cavidade em campo magnético vertical zero (gráfico superior(a)) e 0,5 T (gráfico inferior(b)) para cinco taxas de perda de cavidade, para $\Delta_K = 7\text{meV}$, $\Delta_{K'} = 3,5\text{meV}$, a taxa de perda de cavidade é dimensionada por $\kappa = \eta\kappa_0$ com $\kappa_0 = 0,234\text{THz}$ e acoplamento de troca $\delta = \delta_0 = 0,6\text{meV}$. Assumimos neste gráfico o estado inicial $|\Psi_A\rangle$ 83
- Figura 5.38–Evolução temporal da concorrência excitônica em monocamada de WSe_2 integrada à cavidade em campo magnético vertical zero (gráfico superior (a)) e 0,5 T (gráfico inferior(b)) para cinco taxas de perda de cavidade, para $\Delta_K = 7\text{meV}$, $\Delta_{K'} = 3,5\text{meV}$, a taxa de perda de cavidade é dimensionada por $\kappa = \eta\kappa_0$ com $\kappa_0 = 0,234\text{THz}$ e acoplamento de troca $\delta = \delta_0 = 0,6\text{meV}$. Esse gráfico foi obtido assumindo o estado inicial $|\Psi_B\rangle$ 84
- Figura 5.39–Diagrama de estados do sistema excitônico de três níveis 85

- Figura 5.40–Dinâmica excitônica do sistema de três níveis: Foram usados os seguintes parâmetros: $\Gamma_{20} = 0.1\mu eV$, $\Gamma_{10} = 0.005\mu eV$, $\Gamma_{21} = 0.2\mu eV$, $\omega_{20} = 2eV$, $\omega_{10} = 1.95eV$, $\omega = 1.93eV$ e $\Omega = 0.12eV$. Notamos que as soluções referentes à matriz de densidade tendem à um estado estacionário devido à relaxação provenientes do Liouvilliano coincidindo com as soluções estacionárias oriundas do sistema de equações homogêneas ($\frac{d\rho}{dt} = 0$). Notamos também que para qualquer intervalo de tempo temos $\rho_{00} + \rho_{11} + \rho_{22} = 1$ como também $n_0 + n_1 + n_2 = 1$. (GUPTA et al., 2021) 89
- Figura 5.41–Polarização do vale: Nota-se que a polarização do vale se mantém constante no caso dos estados referentes aos éxcitons claros. Isso se deve ao fato de termos aplicado um campo paralelo ao plano da amostra ($\theta = \frac{\pi}{2}$ rad), fazendo com que a polarização do vale referentes aos éxcitons escuros varie com o campo. Nota-se também que em $B = 0$ T não há há mistura dos estados excitônicos(os éxcitons escuros não brilham). 92
- Figura 5.42–Intensidade de fotoluminescência em função do campo magnético do plano: Nota-se que analogamente o que aconteceu com a polarização do vale, a alteração do campo magnético no plano não alterou a intensidade de fotoluminescência dos éxcitons claros, como era previsto. 93
- Figura 5.43–Espectro de fotoluminescência à 50K dos éxcitons escuros em função da energia: É notado que a intensidade de fotoluminescência aumenta a medida que a intensidade do campo magnético no plano aumenta, como era previsto (SCHWARTZ et al., 2015)(SHAN et al., 2022). 94
- Figura 5.44–Espectro de fotoluminescência dos éxcitons claros e escuros no vale K em função da energia à 50K: Nota-se que quando o ângulo é de 0 rad, significando que o campo magnético é perpendicular ao plano da amostra não há mistura nos estados excitônicos, fazendo com que não haja clareamento dos éxcitons escuros. Fazendo o ângulo igual à $\frac{\pi}{4}$ rad temos uma componente não nula do vetor campo magnético no plano da amostra fazendo com que haja clareamento de alguns éxcitons escuros. Em contrapartida quando o ângulo é de $\frac{\pi}{2}$ rad, ou seja quando o campo magnético está contido paralelamente ao plano da amostra temos mistura dos estados excitônicos, fazendo com que mais éxcitons escuros brilhem. 95

Lista de tabelas

Tabela 2.1 – Relação entre n, l, m_l para n até 4	24
Tabela 2.2 – Algumas posições do vetor de estado $ \psi\rangle$ na Esfera de Bloch	27

Lista de abreviaturas e siglas

BCC	Cúbica de Corpo Centrado	39
FCC	Cúbica de Face Centrado.....	39
LDA	Densidade Local.....	56
PL	Espectro de Fotoluminescência.....	91
PZB	Primeira Zona de Brillouin.....	40
RWA	Transformação de Onda Girante	85
SC	Cúbica Simples.....	39
SOC	Acoplamento Spin-Órbita.....	45
TMD	Dicalcogenetos de metais de transição	39

Lista de símbolos

Símbolos

$\langle O \rangle$	Valor esperado de um operador O	23
ϵ_0	Permissividade absoluta do vácuo	23
\hbar	Constante reduzida de Plank	23
$ 0\rangle$	Estado Fundamental	51
$ \psi\rangle$	vetor de estado	22
$ X_{c,c'}\rangle$	Estado Referente aos Éxcitons Claros	51
$ X_{e,e'}\rangle$	Estado Referente aos Éxcitons Escuros	51
\mathcal{A}	Absorção	88
$\mathcal{D}(\rho(t))$	Matriz de Decaimento	90
$\mathcal{L}(\rho(t))$	Liouvilliano	64
\mathcal{P}_e	Intensidade de Fotoluminescência	91
μ	Massa Reduzida de um sistema	23
∇	Operador Laplaciano	23
\oplus	Operador Soma para números binários	34
ρ	Matriz de densidade	24
$\tilde{\rho}$	spin-flip	37
\vec{r}	Vetor posição	23
$C(\rho)$	Concorrência	37
E	Energia de um Sistema	23
H	Hamiltoniano de um Sistema	23
K	Vale K	52
K'	Vale K'	52
l	Número quântico azimutal	23
m_e	Massa do elétron	23
m_l	Número quântico magnético	23
m_p	Massa do próton	23
n	Número quântico principal	23
r	Módulo do vetor posição	23
$U(t, t_0)$	Operador de Evolução Temporal	61
$u(T, x)$	Função de Distribuição de Boltzmann	52
U_f	Operador Oráculo	34
V	Potencial de um Sistema	23
X	Porta X	27
Y	Porta Y	28

Z	Número Atômico	23
Z	Porta Z.....	29

Sumário

1	Introdução	19
2	Computação Quântica	22
2.1	Conceitos de Mecânica Quântica	22
2.1.1	Equação de Schrödinger	22
2.1.2	Matriz de Densidade	24
2.2	Qubits (Bits Quânticos)	25
2.2.1	Esfera de Bloch	25
2.3	Operadores Lógicos (Portas Quânticas)	26
2.3.1	Operador Not	27
2.3.2	Porta Y	28
2.3.3	Porta Z	29
2.3.4	Porta Hadamard	30
2.3.5	Porta C_{not}	31
2.3.6	Porta Toffoli	32
2.4	Circuitos Quânticos	33
2.4.1	Algoritmo de Deutsch	33
2.4.2	Outros Circuitos Quânticos	36
2.5	Estados de Bell (Emaranhamento Quântico)	36
2.5.1	Concorrência	37
3	Materiais Bidimensionais	39
3.1	Conceitos Básicos	39
3.2	Conceitos de Física do Estado Sólido	39
3.2.1	Rede de Bravais	39
3.2.2	Rede Recíproca	39
3.2.3	Primeira Zona de Brillouin (PZB)	40
3.2.4	Teorema de Bloch	41
3.3	Estrutura dos TMD's	42
3.3.1	Estados Excitônicos	45
3.3.2	Pseudo-Spin	48
3.3.3	Dinâmica do Vale	51
4	Metodologia	54
4.1	Teoria do Funcional de Densidade	54
4.2	Modelo de Tight-Binding	57

4.2.1	Funções de Wannier	60
4.3	Equação Mestra de Lindblad	61
4.3.1	Operador de Evolução Temporal	61
4.3.2	Sistemas Quânticos Fechados	63
4.3.3	Sistemas Quânticos Abertos	63
4.3.4	Matriz de Densidade Reduzida	64
5	Resultados	68
5.1	Qubits de Éxcitons Claros	68
5.1.1	Qubits de Éxcitons Claros	68
5.1.2	Qubits de Éxcitons Claros em uma Nanocavidade	73
5.2	Qubits de Éxcitons Escuros	84
5.2.1	Relação Entre os Formalismos da Matriz de Densidade e das Equações de Taxas	88
5.2.2	Cálculo da Fotoluminescência de um Sistema formado por Qubits de Éxcitons	91
6	Conclusão	97
	Referências	99

1 Introdução

Os computadores que as pessoas desfrutam confortavelmente nos dias de hoje, desde um notebook utilizado em casa, à uma máquina de alto processamento usada nos grandes centros de pesquisa, tem como premissa o modelo teórico desenvolvido por Alan Turing, que foi publicado em seu famoso artigo de 1936 (TURING et al., 1936). Neste artigo, Turing desenvolve ferramentas teóricas como portas lógicas, linguagem binária e circuitos, que são a essência de qualquer computador clássico. Na tese de Church-Turing é postulado que qualquer problema computável pode ser resolvido usando uma Máquina de Turing, que é um dispositivo abstrato baseado no artigo acima exposto, se esse problema também for solucionável por outro computador. Essa tese não se concentrou no tempo de processamento do problema, pois como será explanado a seguir, o tempo decorrente de um cálculo se tornou um empecilho nos dias de hoje. Existe um outro empecilho referente à computação clássica: nos primeiros computadores eram necessários 10^{19} átomos para representar um único bit de informação, e com o avanço tecnológico (principalmente com a descoberta dos transistores), a quantidade de átomos necessária para comportar um bit foi diminuindo com o passar dos anos. Foi Gordon Moore que observou que a quantidade de átomos necessária para comportar um bit diminuía pela metade após um ano e meio, ou seja, o número de transistores de um processador estava dobrando a cada 18 meses. O leitor pode ser perguntar: E qual seria o limite imposto pela a que foi chamada posteriormente de Lei de Moore? Quando um bit for representado por um único átomo, ou seja, não havendo meios físicos para aumentar a densidade de bits em um chip de processamento. A implicação disso é que, ao se alcançar esse nível tecnológico, o computador deixa de ser clássico, logo seus mecanismos são explicado pela Mecânica Quântica (MATTIELO et al., 2012).

Dentro da perspectiva do grande avanço científico-tecnológico que vivemos atualmente, se notou a necessidade da construção de computadores com maior poder de processamento, tendo em vista que os computadores clássicos se mostraram vagarosos (no sentido de tempo de processamento) no cálculo de algumas simulações. Diante desse cenário, a Computação Quântica está ganhando cada vez mais investimento das grandes empresas de tecnologia e universidades, pois se essa tecnologia for dominada por inteiro, toda a humanidade se beneficiará, e cálculos que nunca se pensou que seriam possíveis no atual momento, poderão ser realizados em um tempo assustadoramente rápido. Dentro dessa perspectiva, na natureza quântica da matéria, há um fenômeno imprescindível para que a computação quântica seja uma realidade, O Emaranhamento. O próprio Albert Einstein não acreditava que esse fenômeno fosse fisicamente possível, pois segundo ele, violaria um dos princípios da relatividade. Hoje porém, já está comprovado que o Emaranhamento faz parte da natureza quântica da matéria. Vamos mostrar neste trabalho que os éxcitons são excelentes sistemas,

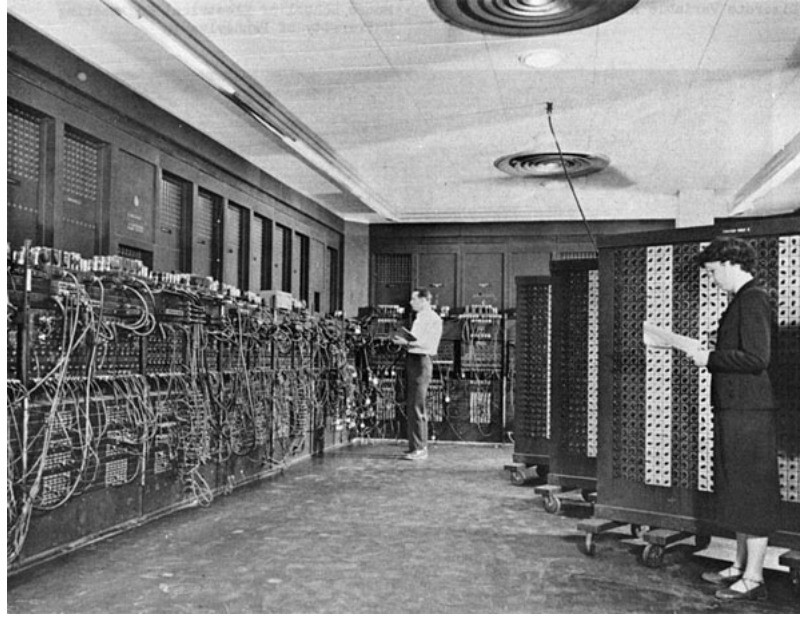


Figura 1.1 – Eniac, um dos primeiros computadores. Teve o início de seu desenvolvimento em 1943, na Universidade da Pensilvânia, Estados Unidos, sendo finalizado três anos depois. Ocupava 1800 metros quadrados e pesava 50 toneladas.

Fonte: [WHEN...](#) (s.d., p. 24)

quando o objetivo é a construção de qubits (bits quânticos).

Éxcitons são sistemas formados por um par elétron-buraco, onde o primeiro se encontra na banda de condução e o segundo se encontra na banda de valência. Este presente trabalho tem o objetivo de apresentar os resultados provenientes do estudo da Dinâmica Excitônica, onde será feita uma minuciosa análise de dados obtidos através de métodos computacionais confeccionados pelo autor.

No capítulo 2 será feita uma introdução à Computação Quântica, trazendo elementos da Mecânica Quântica, tais como o conceito de operadores, vetores de estado, Equação de Schrödinger, Matriz de Densidade, onde todas as ideias se mostraram imprescindíveis para a construção dos tópicos subsequentes. A seguir, no mesmo capítulo, será construído o conceito de qubit e sua representação na esfera de Bloch. A seguir traremos os conceitos de Portas Quânticas e alguns circuitos quânticos elementares e encerraremos o capítulo trazendo os conceitos de Estados de Bell e Emaranhamento. No capítulo 3 faremos uma introdução à Física do Estado Sólido, trazendo seus principais conceitos, como estado cristalino, rede de Bravais, rede recíproca, zonas de Brillouin e teorema de Bloch. Em seguida, e ainda no mesmo capítulo, introduziremos a estrutura cristalina dos TMD's, traremos as ideias de estados excitônicos, Pseudo-Spin e dinâmica do vale. No capítulo 4 abordaremos as metodologias utilizadas neste trabalho, com destaque à Equação Mestra de Lindblad, que será protagonista em todos os cálculos no capítulo posterior. No capítulo 5 serão desenvolvidos os resultados obtidos. O primeiro sistema analisado será o sistema qubit excitônico povoado por éxcitons

claros em dois vales. No segundo sistema iremos introduzir uma microcavidade bimodal ao primeiro, onde será mostrado que algumas propriedades físicas, como o emaranhamento entre os qubit de éxcitons será drasticamente alterado de um sistema para o outro. O último estudo trará um sistema excitônico povoado por éxcitons claros e escuros, calculando sua dinâmica usando a Equação Mestra de Lindblad. Ainda neste capítulo traremos a relação entre os formalismos da matriz de densidade e das equações de taxas. Em seguida será feito o cálculo de fotoluminescência do sistema excitônico, no qual é introduzido um campo magnético no plano da amostra no sentido de intensificar esse efeito nos éxcitons escuros. No capítulo 6 traremos as considerações finais e as expectativas para trabalhos futuros.

2 Computação Quântica

2.1 Conceitos de Mecânica Quântica

A unidade básica de informação de um computador clássico é o bit. Em linguagem de máquina, que é a linguagem binária, se tem combinações dos números 0 e 1, ou seja, um bit, pode-se atribuir o valor de 0 ou de 1. O bit é a unidade básica de informação e todas as tarefas que um computador clássico realiza, está baseado nessa linguagem. Entretanto, para a Computação Quântica, a unidade básica de informação é o qubit, que diferentemente do bit, é um sistema que obedece às leis da Mecânica Quântica. Antes de se definir o qubit é necessário elucidar alguns fundamentos básicos da Mecânica Quântica.

A Mecânica Quântica é a área da Ciência responsável pela análise de sistemas de ordem de grandeza atômica ou molecular. Suas premissas foram desenvolvidas a partir do século 20 onde, atualmente, é um dos pilares que sustentam a Física Moderna. Nesta subseção será transmitido alguns conceitos de Mecânica Quântica, conceitos esses que se fazem imprescindíveis para um bom entendimento das ideias que serão abordadas adiante.

2.1.1 Equação de Schrödinger

Na Mecânica Quântica, o objeto matemático que contém as informações do sistema em estudo é o vetor de estado (OLIVEIRA, 2005):

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle, \quad (2.1)$$

onde $|\psi\rangle$ está contido em um espaço vetorial, chamado espaço de Hilbert. Note que 2.1 é um somatório de estados $|\phi_n\rangle$ (vetores de base), logo o vetor de estado poderá conter vários estados distintos. A propriedade $\langle\phi_n|\phi_{n'}\rangle = \delta_{n,n'}$ dos vetores de base, será chamada de produto interno e também $\sum_{\phi_n} |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = 1$ será chamada de relação de completeza. Definamos que c_n é a amplitude de probabilidade de $|\psi\rangle$ ser encontrado em um estado $|\phi_n\rangle$, onde se estiver normalizado, ou seja, se $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ se respeita a seguinte relação

$$\sum_n |c_n|^2 = 1. \quad (2.2)$$

Observa-se que diferentemente da Mecânica Clássica, onde um sistema estará bem definido, se souber a posição e o momento, logo um estado possível, na Mecânica Quântica, com seu vetor de estado, se tem as probabilidades de um sistema estar em um estado ou em outro. A ferramenta matemática que encontra a forma funcional do vetor de estado é a equação de Schrödinger (estacionária), que é equivalente as equações de Hamilton para a Mecânica

Clássica, sua forma é

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 |\psi\rangle + V |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (2.3)$$

onde \hbar é a constante de Plank reduzida, m é a massa da partícula e E é a energia. Definamos como operador Hamiltoniano, ou simplesmente Hamiltoniano a quantidade $H = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$, que é um operador que atua em $|\psi\rangle$, logo 2.3 pode ser escrita assim

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle. \quad (2.4)$$

Os valores possíveis para a energia vão depender da dimensão do espaço de Hilbert no qual $|\psi\rangle$ está inserido. Chamemos esses valores da energia de E_n , onde para cada valor de E_n está associado um estado $|\phi_n\rangle$, onde

$$H |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle. \quad (2.5)$$

Todo elemento físico efetivamente mensurável pode ser descrito por um operador O hermitiano, onde os mesmos agem nos vetores de estado, tal como em 2.4. Esses operadores, tais como foram descritos são chamados de observáveis. O valor esperado de um certo operador O é descrito como

$$\langle O \rangle = \langle \psi | O | \psi \rangle. \quad (2.6)$$

Uma das soluções mais importantes para a equação de Schrödinger, que foi realizada pelo próprio físico austríaco, é a do átomo de hidrogênio, onde temos um elétron com carga $-e$ orbitando um núcleo com carga e , logo o potencial do sistema descrito pode ser escrito como

$$V(r) = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2.7)$$

onde $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ e Z é o número atômico. Se usarmos 2.3 temos

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 |\psi\rangle + \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (2.8)$$

onde $\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$ é a massa reduzida do sistema, m_e é a massa do elétron e m_p é a massa do próton. Como o sistema está sendo resolvido em coordenadas esféricas o laplaciano também deverá estar transformado para o sistema de coordenadas adotado. A função de onda procurada, onde foi adotada a técnica de separação de variáveis, é do tipo

$$\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\phi) = R_n(r) \Xi_{l,m_l}(\theta,\phi) \quad (2.9)$$

onde n, l, m_l são os números quânticos principal, azimutal e magnético, respectivamente, em que $n = 1, 2, 3, \dots$, também temos que $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ e $m_l = -l, -l + 1, \dots, l$. Da função de onda temos que $|\Xi_{l,m_l}(\theta,\phi)|^2 d\Omega$ é a probabilidade do elétron ser encontrado entre θ e $\theta + d\theta$ e ϕ e $\phi + d\phi$, analogamente $|R_n(r)|^2 r^2 dr$ é a probabilidade do elétron estar entre uma distancia r e $r + dr$. As energias referentes a cada estado é dada por(OLIVEIRA, 2005)

$$E_n = \frac{-\mu Z^2 e^4}{4\pi\epsilon_0 2\hbar n^2} \quad (2.10)$$

Sistemas que são de alguma forma semelhantes ao átomo de hidrogênio são chamados de hidrogenóides. Veremos no capítulo 3 que os sistemas excitônicos, que são o alvo desse trabalho, são também sistemas hidrogenóides.

n	l	Subnível	m_l	Nº de orbitais no subnível
1	0	1s	0	1
2	0	2s	0	1
	1	2p	-1,0,1	3
3	0	3s	0	1
	1	3p	-1,0,1	3
	2	3d	-2, -1,0,1,2	5
4	0	4s	0	1
	1	4p	-1,0,1	3
	2	4d	-2, -1,0,1,2	5
	3	4f	-3, -2, -1,0,1,2,3	7

Tabela 2.1 – Relação entre n , l , m_l para n até 4

2.1.2 Matriz de Densidade

Antes da definição da Matriz de Densidade será necessário definir os conceitos de ensemble. Um ensemble é uma coleção de sistemas físicos tal que cada um dos sistemas é caracterizado pelo ket $|\psi\rangle$ (vetor de estado). Em um ensemble existe uma porcentagem w_1 caracterizados por $|\psi_1\rangle$, uma outra porcentagem w_2 caracterizados por $|\psi_2\rangle$, e assim por diante, onde, evidentemente $\sum_i w_i = 1$. Se quisermos calcular o valor esperado de um certo observável O em relação a um certo ensemble devemos utilizar a seguinte relação

$$\langle O \rangle = \sum_i w_i \langle \psi_i | O | \psi_i \rangle. \quad (2.11)$$

Usaremos a relação de completeza na equação acima usando uma base geral $|\phi_n\rangle$, assim

$$\langle O \rangle = \sum_i w_i \sum_{\phi_n} \sum_{\phi_m} \langle \psi_i | \phi_n \rangle \langle \phi_n | O | \phi_m \rangle \langle \phi_m | \psi_i \rangle. \quad (2.12)$$

Rearranjado os produtos internos na equação acima temos

$$\langle O \rangle = \sum_{\phi_n} \sum_{\phi_m} \left(\sum_i w_i \langle \phi_m | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \phi_n \rangle \right) \langle \phi_n | O | \phi_m \rangle. \quad (2.13)$$

Definamos a Matriz de Densidade ou Operador Densidade como

$$\rho = \sum_i w_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|. \quad (2.14)$$

Substituindo a definição acima em 2.13, temos

$$\langle O \rangle = \sum_{\phi_n} \sum_{\phi_m} \langle \phi_m | \rho | \phi_n \rangle \langle \phi_n | O | \phi_m \rangle. \quad (2.15)$$

Pela relação de completeza temos que $|\phi_n\rangle\langle\phi_n| = 1$, concluindo que

$$\langle O \rangle = \sum_{\phi_n} \sum_{\phi_m} \langle \phi_m | \rho O | \phi_m \rangle = \text{tr}(\rho O), \quad (2.16)$$

ou seja, o valor esperado de um certo observável é o traço do produto entre o Operador Densidade pelo próprio observável. Existem algumas propriedades extremamente importantes do Operador Densidade. A primeira é que o mesmo é hermitiano, a segunda é que esse operador obedece a condição de normalização, ou seja

$$\text{tr}(\rho) = \sum_i \sum_{\phi_n} w_i \langle \phi_n | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \phi_n \rangle = \sum_i \sum_{\phi_n} w_i \langle \psi_i | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \psi_i \rangle = \sum_i w_i \langle \psi_i | \psi_i \rangle = \sum_i w_i = 1. \quad (2.17)$$

Uma importante característica do Operador de Densidade para ensembles puros é $\rho^2 = \rho$, onde a consequência imediata dessa propriedade é (NAPOLITANO; SAKURAI, 2013)

$$\text{tr}(\rho^2) = 1. \quad (2.18)$$

2.2 Qubits (Bits Quânticos)

Nesta seção será definido o conceito de qubit como também as principais portas lógicas usadas para operar esses objetos. Basicamente um qubit é um sistema quântico de dois níveis com o seguinte estado

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \quad (2.19)$$

onde α e β são números complexos e obedecem 2.2. Como o qubit é um sistema de dois níveis, temos que os vetores de estado $|0\rangle$ e $|1\rangle$ podem ser escritos como vetores colunas de ordem dois, assim

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

Nota-se a principal diferença entre um bit clássico e o qubit: Enquanto que o bit clássico só existe em um estado bem definido, ou sendo 0, ou sendo 1, o qubit pode existir nos dois estados simultaneamente (princípio da superposição), fazendo com que o qubit seja extremamente poderoso no ponto de vista computacional. Um empecilho a esse tipo de sistema é sua alta sensibilidade ao interagir com o meio ao qual está inserido, pois, o simples ato de medir um sistema quântico, colapsa o estado de superposição para os estados $|0\rangle$ ou $|1\rangle$.

2.2.1 Esfera de Bloch

Como α e β de 2.19 são números complexos, definamos que seus respectivos argumentos definidos no intervalo $[0, 2\pi]$, sejam $\text{Arg}(\alpha) = \xi$ e $\text{Arg}(\beta) - \text{Arg}(\alpha) = \lambda$, logo

podemos escrever 2.19 como

$$|\psi\rangle = |\alpha|e^{i\xi} |0\rangle + |\beta|e^{i(\xi+\lambda)} |1\rangle. \quad (2.21)$$

Como α e β obedecem 2.2 , podemos escrevemos

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1, \quad (2.22)$$

que é análogo à $\sin^2\eta + \cos^2\eta = 1$, portanto podemos escrever os módulos de α e β em função de senos e cossenos. Façamos $|\alpha| = \cos(\eta)$ e $|\beta| = \sin(\eta)$, e em seguida $\theta = 2\eta$, logo 2.21 pode ser escrito como

$$|\psi\rangle = e^{i\xi} \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\lambda} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle \right], \quad (2.23)$$

onde podemos negligenciar $e^{i\xi}$, que é chamado de fator de fase global, com isso a equação poderá ser escrita assim

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\lambda} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle. \quad (2.24)$$

O estado de um qubit pode ser representado através de um vetor de estado situado em uma esfera unitária, chamada de Esfera de Bloch, como mostrado na figura 2.2(SILVA, 2018).

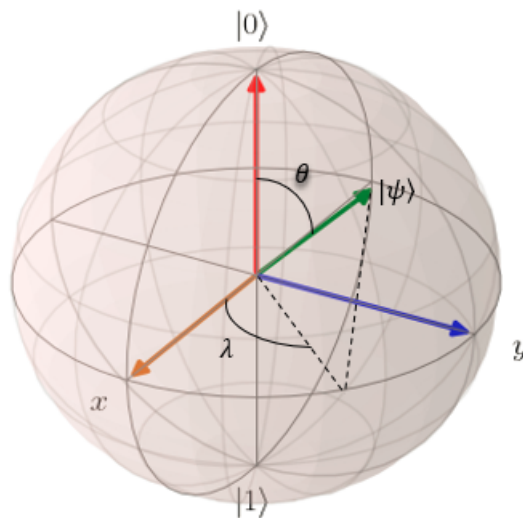


Figura 2.2 – Esfera de Bloch

Fonte: Feito pelo autor

2.3 Operadores Lógicos (Portas Quânticas)

A função dos operadores na Mecânica Quântica é realizar uma transformação sobre um determinado estado $|\psi_1\rangle$ resultando em um novo estado $|\psi_2\rangle$, onde a operação inversa

θ	λ	$ \psi\rangle$	direção
0	0	$ 0\rangle$	polo norte
π	0	$ 1\rangle$	polo sul
$\frac{\pi}{2}$	0	$\frac{ 0\rangle+ 1\rangle}{\sqrt{2}}$	equador, eixo x
$\frac{\pi}{2}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{ 0\rangle+i 1\rangle}{\sqrt{2}}$	equador, eixo y.

Tabela 2.2 – Algumas posições do vetor de estado $|\psi\rangle$ na Esfera de Bloch

(com o operador inverso) poderá ser realizada. Em virtude do caráter de inversibilidade do operador, temos que considerarmos que operador O obedeça a seguinte relação $OO^\dagger = 1$. Vamos agora trazer alguns detalhes de alguns operadores (portas lógicas) que, na visão do autor, são as mais elementares e significativas (do ponto de vista didático) para a Computação Quântica.

2.3.1 Operador Not

Também chamado de Porta X ou Matriz X de Pauli. Esse operador tem a propriedade de girar o vetor de estado do qubit em π rad em torno do eixo x. Sua forma matricial é dada por

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

O Operador Not age nos estados de base do qubit como mostrado abaixo

$$\begin{aligned} X|0\rangle &= |1\rangle \\ X|1\rangle &= |0\rangle. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Vejamos como exemplo a aplicação desse operador no seguinte estado

$$|\psi\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2}|0\rangle + \frac{1}{2}|1\rangle. \quad (2.27)$$

Vamos primeiramente analisar onde é a posição desse vetor de estado na Esfera de Bloch. Para isso devemos encontrar θ e λ . Para encontrar θ , por definição devemos lembrar que $\alpha = \frac{\sqrt{3}}{2}$ e $\beta = \frac{1}{2}$, logo $\theta = 2\cos^{-1}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right) = 2\sin^{-1}\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{\pi}{3}$ rad. Para encontrar λ temos que lembrar que $Arg(\beta) - Arg(\alpha) = \lambda$, logo $Arg\left(\frac{1}{2}\right) - Arg\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right) = \lambda = 0$ rad, pois tanto α como β são números reais, logo a parte imaginária é nula. Ao aplicarmos a Operador Not notamos que

$$X|\psi\rangle = \frac{1}{2}|0\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}|1\rangle. \quad (2.28)$$

Analisaremos agora a posição do novo vetor de estado. Então temos $\theta = 2\cos^{-1}\left(\frac{1}{2}\right) = 2\sin^{-1}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right) = \frac{2\pi}{3}$ rad e $\lambda = 0$, logo o vetor de estado girou π rad em relação ao eixo x, como pode ser visto na figura 2.3.

2.3.2 Porta Y

A Porta Y, que também é chamada de Matriz Y de Pauli, gira o vetor de estado π rad em torno do eixo y. Sua forma matricial é

$$Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.29)$$

Se usarmos o estado dado por 2.27 como exemplo novamente, teremos o seguinte estado após a aplicação do operador

$$Y |\psi\rangle = \frac{-i}{2} |0\rangle + \frac{\sqrt{3}i}{2} |1\rangle \quad (2.30)$$

No estado acima temos $\alpha = \frac{-i}{2}$ e $\beta = \frac{\sqrt{3}i}{2}$, logo $|\alpha| = \frac{1}{2}$ e $|\beta| = \frac{\sqrt{3}}{2}$, e portanto $\theta = \frac{2\pi}{3}$ rad. Já para λ temos $\text{Arg}(\frac{\sqrt{3}i}{2}) - \text{Arg}(\frac{-i}{2}) = \lambda = \pi$ rad.

Nota-se na figura 2.5 que o vetor de estado gira π rad em relação ao eixo y quando a Porta Y é aplicada.

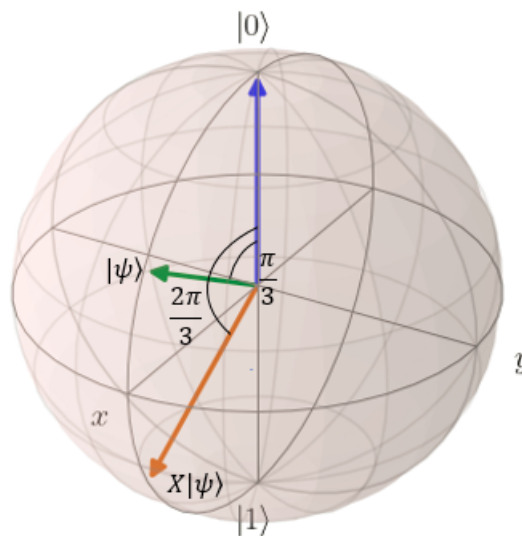


Figura 2.3 – Mudança do estado $|\psi\rangle$ após a aplicação do Operador Not

Fonte: Feito pelo autor

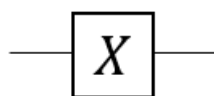


Figura 2.4 – Representações do Operador Not

Fonte: Feito pelo autor

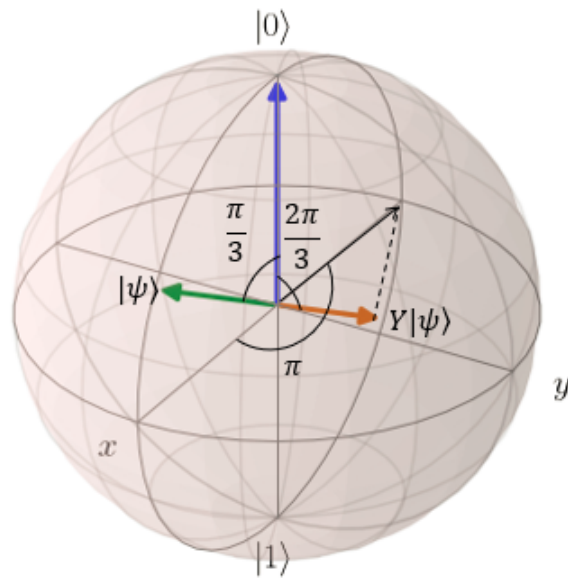


Figura 2.5 – Mudança do estado $|\psi\rangle$ após a aplicação da Porta Y

Fonte: Feito pelo autor

2.3.3 Porta Z

A porta Z, que também é chamada de Matriz Z de Pauli, tem a propriedade de girar o vetor de estado em π rad em torno do eixo z. Sua forma matricial é

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.31)$$

Aplicando esse operador em 2.27 temos

$$Z|\psi\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2}|0\rangle - \frac{1}{2}|1\rangle. \quad (2.32)$$

Diretamente temos $\theta = -\frac{\pi}{3}$ rad e $\lambda = 0$ rad. Observe na figura 2.7 que o vetor de estado gira π rad em torno do eixo z após a aplicação da Porta Z.

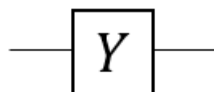


Figura 2.6 – Representações da Porta Y

Fonte: Feito pelo autor

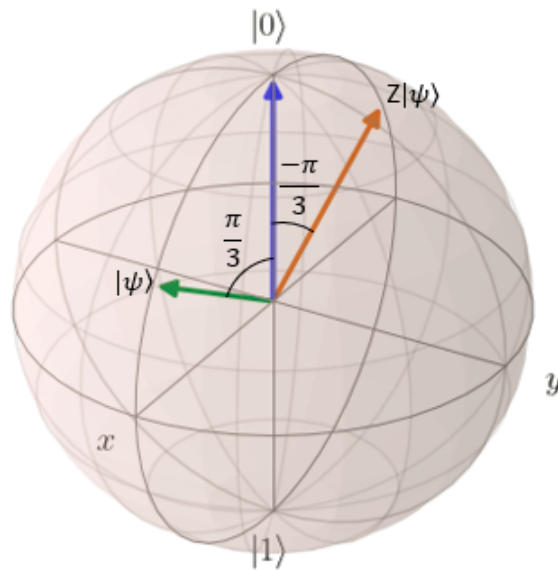


Figura 2.7 – Mudança do estado $|\psi\rangle$ após a aplicação da Porta Z

Fonte: Feito pelo autor

2.3.4 Porta Hadamard

Esse operador gira o vetor estado $\frac{\pi}{2}$ rad em torno do eixo y e π rad em torno do eixo x . Sua forma matricial é

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.33)$$

Essa operação é muito útil pois ao ser aplicado nos estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$ temos

$$\begin{aligned} H|0\rangle &= \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \\ H|1\rangle &= \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (2.34)$$

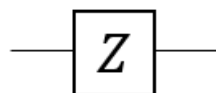


Figura 2.8 – Representações da Porta Z

Fonte: Feito pelo autor

ou seja, transforma-os em estados de superposição com probabilidades iguais de $|0\rangle$ e $|1\rangle$. Aplicando a porta Hadamard em no estado 2.27 temos

$$H|\psi\rangle = \frac{\sqrt{3}+1}{\sqrt{8}}|0\rangle + \frac{\sqrt{3}-1}{\sqrt{8}}|1\rangle, \quad (2.35)$$

onde temos diretamente $\theta = \frac{\pi}{6}$ rad e $\lambda = 0$ rad. Observa-se na figura 2.9 que o vetor de estado $|\psi\rangle$ girou $\frac{\pi}{2}$ rad em torno do eixo y e π rad em torno do eixo x .

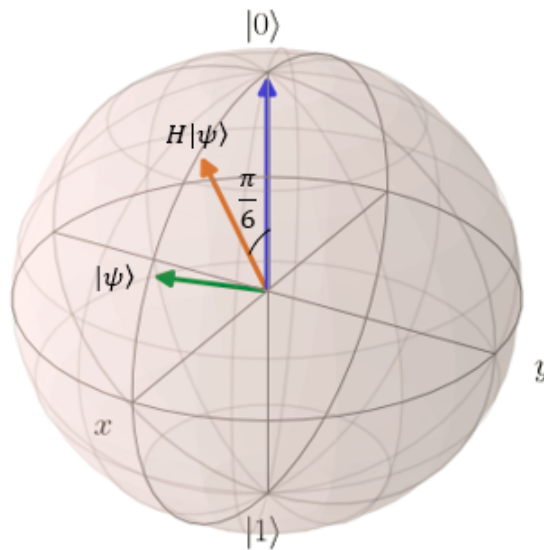


Figura 2.9 – Mudança do estado $|\psi\rangle$ após a aplicação da Porta Hadamard

Fonte: Feito pelo autor

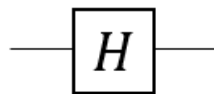


Figura 2.10 – Representação da Porta Hadamard

Fonte: Feito pelo autor

2.3.5 Porta C_{not}

É um operador que age em um sistema com dois qubits. O primeiro qubit é chamado de controlador e o segundo é chamado de alvo. Quando o qubit controlador está no estado $|0_c\rangle$, o operador C_{not} age como operador unitário, ou seja, o sistema se mantém sem alteração. Contudo se o estado do qubit controlador for $|1_c\rangle$ o operador C_{not} altera o estado do qubit

alvo, ou seja, se o qubit alvo estiver no estado $|0_a\rangle$ é alterado para $|1_a\rangle$ e se estiver no estado $|1_a\rangle$ é alterado para $|0_a\rangle$. Sua forma matricial é

$$C_{not} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.36)$$

Supomos dois qubits, $|\psi_a\rangle$ e $|\psi_c\rangle$, onde seus vetores de estado são $|\psi_c\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_c\rangle + |1_c\rangle)$ e $|\psi_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_a\rangle - |1_a\rangle)$. O sistema com dois qubits é expresso pelo produto tensorial dos dois vetores de estado, $|\psi_c\rangle \otimes |\psi_a\rangle = |\Psi_{c,a}\rangle$. Logo temos

$$|\Psi_{c,a}\rangle = \frac{1}{2}(|0_c0_a\rangle - |0_c1_a\rangle + |1_c0_a\rangle - |1_c1_a\rangle) \quad (2.37)$$

onde $|A_cB_a\rangle = |A_c\rangle \otimes |B_a\rangle$ e A_c e B_a são os estados do qubit controlador e do qubit alvo, respectivamente. Agora aplicando o operador C_{not} em $|\Psi_{c,a}\rangle$ temos

$$C_{not}|\Psi_{c,a}\rangle = \frac{1}{2}(|0_c0_a\rangle - |0_c1_a\rangle + |1_c1_a\rangle - |1_c0_a\rangle) \quad (2.38)$$

onde é notado as alterações somente nos estados referentes ao qubit alvo, quando o estado do qubit controlador é $|1_c\rangle$.

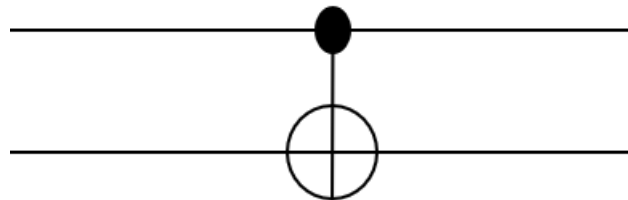


Figura 2.11 – Representação da Porta C_{not}

Fonte: Feito pelo autor

2.3.6 Porta Toffoli

A Porta Toffoli é similar a porta C_{not} (SILVA, 2018), diferindo desta por se tratar de um sistema de três qubits, dois controladores e um alvo. A forma matricial da Porta Toffoli é

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.39)$$

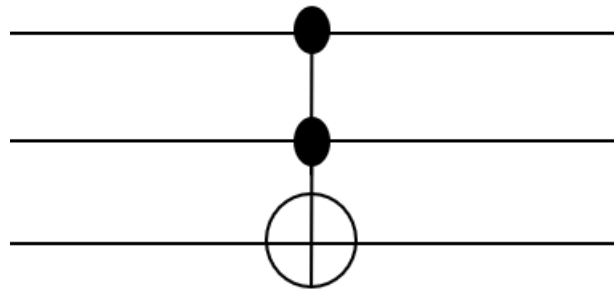


Figura 2.12 – Representação da Porta Toffoli

Fonte: Feito pelo autor

2.4 Circuitos Quânticos

Circuitos Quânticos são conjuntos de portas lógicas, onde operações são realizadas com um conjunto de qubits. As operações com os qubits são guiadas por "fios", que servem como o caminho pelo qual os qubits devem passar. A leitura de circuito quântico, convencionalmente, deve acontecer da esquerda para a direita. Neste presente trabalho iremos trazer com mais detalhes teóricos o circuito quântico mais elementar, O algoritmo de Deutsch, e citaremos outros circuitos, porém, sem nos prender aos detalhes técnicos. Antes de iniciarmos devemos nos atentar a um detalhe extremamente singular, detalhe esse que é uma das razões pelas quais faz com que a Computação Quântica seja extremamente poderosa: O Paralelismo Quântico, que é a propriedade que torna possível a realização de várias operações simultaneamente, que é a essência da Algoritmo de Deutsch.

2.4.1 Algoritmo de Deutsch

Se uma dada função é definida como $f : \{0,1\} \rightarrow \{0,1\}$ então, a partir de ferramentas provenientes da Computação Quântica poder-se-á determinar se esta função é constante, ou

seja $f(0) = f(1)$ ou balanceada, $f(0) \neq f(1)$. Essa tarefa, usando a Computação Clássica, demandaria duas operações, porém usando a propriedade de Paralelismo da Computação Quântica, pode ser realizada com uma única operação. Inicialmente temos um estado $|\psi_0\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle = |01\rangle$, que será operado por duas portas Hadamard H , logo após essa operação temos $|\psi_1\rangle$ dado por

$$|\psi_1\rangle = H|0\rangle H|1\rangle = \left[\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \right] \otimes \left[\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right] = \frac{|0\rangle}{2} \otimes (|0\rangle - |1\rangle) + \frac{|1\rangle}{2} \otimes (|0\rangle - |1\rangle) \quad (2.40)$$

Agora, sobre $|\psi_1\rangle$ aplicamos o seguinte operador U_f , chamado na literatura de Oráculo, que é um operador (porta) criado conforme a necessidade, porém seguindo todas as normas das operações quânticas citadas anteriormente. U_f agindo em um estado genérico $|x\rangle \otimes |y\rangle = |x,y\rangle$ deverá transformá-lo conforme a seguinte expressão

$$U_f |x,y\rangle = |x,y \oplus f(x)\rangle \quad (2.41)$$

onde \oplus é o símbolo para soma de números binários. Aplicando U_f em $|\psi_1\rangle$, temos

$$U_f |\psi_1\rangle = U_f \left[\frac{|0\rangle}{2} \otimes (|0\rangle - |1\rangle) \right] + U_f \left[\frac{|1\rangle}{2} \otimes (|0\rangle - |1\rangle) \right] = U_f \left[\frac{|0\rangle}{2} \otimes |0\rangle \right] - U_f \left[\frac{|0\rangle}{2} \otimes |1\rangle \right] \quad (2.42)$$

$$+ U_f \left[\frac{|1\rangle}{2} \otimes |0\rangle \right] - U_f \left[\frac{|1\rangle}{2} \otimes |1\rangle \right]. \quad (2.43)$$

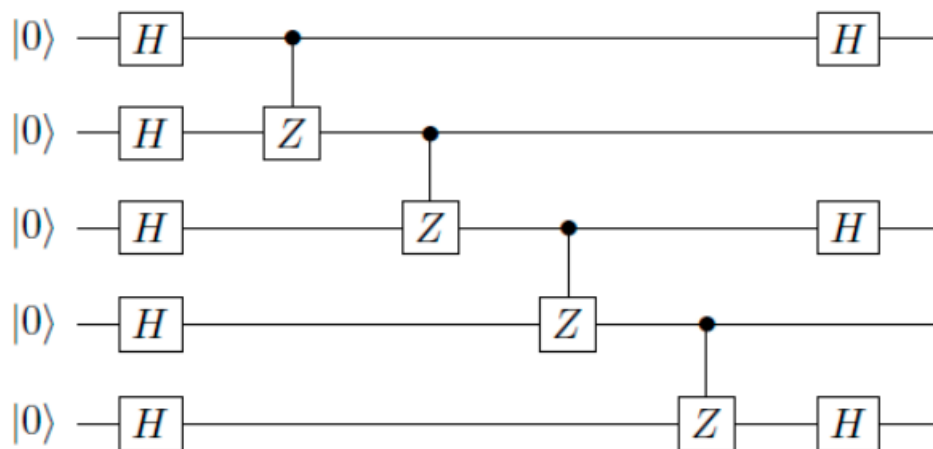


Figura 2.13 – Representação de um circuito quântico

Fonte: (BAISHYA et al., s.d.)

Aplicando a definição 2.58 obtemos a seguinte expressão

$$U_f |\psi_1\rangle = \frac{1}{2} \{ |0\rangle \otimes |0\rangle \oplus f(0) - |0\rangle \otimes |1\rangle \oplus f(0) + |1\rangle \otimes |0\rangle \oplus f(1) - |1\rangle \otimes |1\rangle \oplus f(1) \}. \quad (2.44)$$

Analisando a equação acima para $f(0) = f(1) = 0$, temos que

$$U_f |\psi_1\rangle = \frac{1}{2} (|00\rangle - |01\rangle + |10\rangle - |11\rangle). \quad (2.45)$$

Analisando o caso para $f(0) = f(1) = 1$ obtemos

$$U_f |\psi_1\rangle = \frac{1}{2} (|01\rangle - |00\rangle + |11\rangle - |10\rangle). \quad (2.46)$$

Nota-se uma certa semelhança entre as duas equações acima, precisamente nos dois primeiros e nos dois últimos termos das equações, que diferem entre si somente pelo sinal. Contudo o que fora exposto acima, postularemos o seguinte resultado geral do operador U_f aplicado no estado $|x\rangle \otimes (|0\rangle - |1\rangle)$, assim

$$U_f [|x\rangle \otimes (|0\rangle - |1\rangle)] = (-1)^{f(x)} |x\rangle \otimes (|0\rangle - |1\rangle). \quad (2.47)$$

A equação acima é válida para todos os casos, inclusive para $f(0) \neq f(1)$. Testando o resultado acima em $|\psi_1\rangle$ obtido em 2.40, temos

$$U_f |\psi_1\rangle = (-1)^{f(0)} \left[\frac{|0\rangle}{2} \otimes (|0\rangle - |1\rangle) \right] + (-1)^{f(1)} \left[\frac{|1\rangle}{2} \otimes (|0\rangle - |1\rangle) \right], \quad (2.48)$$

que pode ser testado para $f(0) = f(1) = 0$ e $f(0) = f(1) = 1$, onde chegaremos nos resultados 2.45 e 2.46, respectivamente. Na forma geral, podemos escrever para o caso $f(0) = f(1)$, assim

$$U_f |\psi_1\rangle = (-1)^{f(0)} \left[\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \right] \otimes \left[\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right], \quad (2.49)$$

e para o caso $f(0) \neq f(1)$

$$U_f |\psi_1\rangle = \pm \left[\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right] \otimes \left[\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right]. \quad (2.50)$$

Chamaremos 2.49 e 2.50 de $|\psi_2\rangle$. Agora para finalizar o circuito se aplica a porta Hadamard em ambos os casos obtendo

$$H |\psi_2\rangle = \begin{cases} \mp |0\rangle \otimes \left[\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right] & \text{se } f(0) = f(1) \\ \pm |1\rangle \otimes \left[\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right] & \text{se } f(0) \neq f(1) \end{cases}. \quad (2.51)$$

Observa-se em 2.51 que com uma única medida encontra-se a solução para o problema, pois se medirmos o primeiro qubit e tivermos como resposta o estado $|0\rangle$, logo a $f(0) = f(1)$ e se tivermos como resposta o estado $|1\rangle$, logo a função é balanceada, ou seja, $f(0) \neq f(1)$, medida essa que classicamente não é possível ser realizada simultaneamente. (SILVA, 2018).

2.4.2 Outros Circuitos Quânticos

Existem uma infinidade de outros Circuitos Quânticos que são deveras importantes por suas aplicações, entretanto, por conta de suas complexidades, no sentido do arcabouço teórico que o possuem, fogem do escopo desse trabalho. Porém devemos citá-los aqui, e o leitor mais curioso deverá consultar as referências bibliográficas dessa dissertação, onde terão acesso aos trabalhos que tratam desses circuitos. Os mais significativos são:

- Algoritmo de Shor
- Algoritmo de Grover
- Soma Aritmética de Draper
- Transformada de Fourier Quântica: É a um algoritmo que se utiliza da transformada de Fourier discreta, na perspectiva da Mecânica Quântica.

2.5 Estados de Bell (Emaranhamento Quântico)

Supomos os estados 2.20 citados anteriormente. Sabemos que o estado composto $|10\rangle$, pode ser obtido pelo produto tensorial abaixo

$$|1\rangle \otimes |0\rangle = |10\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.52)$$

Entretanto existem estados compostos que não podem ser obtidos pelo produto tensorial de dois estados mais elementares, como no exemplo 2.52. Esses estados especiais são chamados de estados de Bell. Esses estados podem ser obtidos usando a Porta Hadamard em conjunto

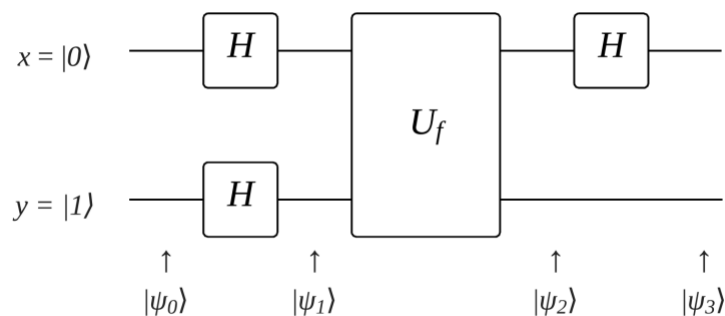


Figura 2.14 – Representação do Algoritmo de Deutsch.

Fonte: (SILVA, 2018)

com a Porta C_{not} . Primeiramente usamos o estado composto de 2.52 e nele aplicamos a porta Hadamard, assim :

$$H |10\rangle = H |1\rangle \otimes |0\rangle = \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) \otimes |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle - |10\rangle). \quad (2.53)$$

Agora, no estado obtido em 2.53 aplicamos a Porta C_{not} , logo, podemos escrever

$$C_{not} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle - |10\rangle) \right] = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle - |11\rangle), \quad (2.54)$$

que é um Estado de Bell, ou seja, esse estado encontrado não pode ser obtido pelo produto tensorial de dois estados mais elementares. Os Estados de Bell se apresentam na suas formas gerais como se segue:

$$|\beta_{\pm}^1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle \pm |11\rangle), \quad |\beta_{\pm}^2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle \pm |10\rangle). \quad (2.55)$$

Os Estados de Bell são importantes pois se os qubits envolvidos estiverem nesses estados, eles estarão totalmente emaranhados, ou seja, existe uma ligação entre eles de tal maneira, que se quisermos descrever algumas das propriedades de um dos qubits, isso somente será possível se o outro qubit também for mensurado, de modo que, podemos entender que o emaranhamento de dois estados quânticos nada mais é que a transformação de dois estados, outrora sendo duas entidades totalmente separadas, em um estado em que não podemos distinguir totalmente um estado do outro (mesmo que os qubits estejam separados por grandes distâncias), por isso que em muitos textos da literatura científica o emaranhamento quântico também é chamado de entrelaçamento.

2.5.1 Concorrência

É de suma importância para um sistema quântico composto por mais de um qubit, o cálculo do quanto que o sistema está emaranhado. A medida física que mede o quanto que o sistema está emaranhado chama-se Concorrência. Definindo a Matriz de Densidade do sistema dado por 2.14, definimos a Concorrência por

$$C(\rho) = \max \{0, \sqrt{\kappa_1} - \sqrt{\kappa_2} - \sqrt{\kappa_3} - \sqrt{\kappa_4}\}, \quad (2.56)$$

onde κ_n são os autovalores da matriz \mathcal{S} , definida como:

$$\mathcal{S} = \rho \tilde{\rho}. \quad (2.57)$$

Definamos $\tilde{\rho}$ como

$$\tilde{\rho} = (Y \otimes Y) \rho^* (Y \otimes Y), \quad (2.58)$$

onde Y é a Porta Y definida por 2.29 e ρ^* é o conjugado complexo de ρ . Em alguns textos da literatura científica $\tilde{\rho}$ é chamado de de "spin-flip" de ρ . Os valores de $C(\rho)$ se encontram

no intervalo $[0,1]$ onde se $C(\rho) = 0$ é dito que o sistema não está emaranhado e $C(\rho) = 1$ é dito que o sistema está maximamente emaranhado, como nos Estados de Bell. É importante salientar que a matriz de densidade pode ser dependente do tempo, portanto, a Concorrência, que é um funcional da matriz de densidade, também terá essa dependência. No capítulo 5 deste trabalho será mostrado o comportamento da concorrência em função do tempo em sistemas compostos.

3 Materiais Bidimensionais

3.1 Conceitos Básicos

Com a descoberta do grafeno em 2004, o mundo se deparou com certos tipos materiais tidos como simplesmente teóricos até então. Os materiais bidimensionais, ou 2D, possuem propriedades únicas e tem sido objeto de intenso estudo por parte da comunidade científica. Com o avanço da espectroscopia de materiais foi observado que algumas amostras são constituídas de finas camadas, como o grafite, por exemplo. Com o avanço dos anos vários outros materiais dessa natureza foram descobertos, tais como o Disseleneto de Tungstênio (WSe_2), entre outros (MIRÓ; AUDIFFRED; HEINE, 2014). No presente trabalho os materiais analisados serão do tipo TMD (Dicalcogenetos de Metais de Transição), que tem sua estrutura cristalina formada por metais de transição e calcogenetos.

3.2 Conceitos de Física do Estado Sólido

Será tratado a seguir alguns tópicos de Física do Estado Sólido. Esses tópicos são considerados essenciais para um entendimento pleno dos resultados que foram obtidos nesta dissertação, logo os mesmos não podem ser negligenciados.

3.2.1 Rede de Bravais

A periodicidade de uma estrutura básica, que podem conter átomos ou grupos de átomos ligados entre si, é a característica fundamental do estado cristalino, de onde muitas das propriedades físicas são oriundas. Uma rede de Bravais é um arranjo infinito de pontos arranjados periodicamente de tal maneira, que qualquer ponto neste objeto pode ser encontrado por um vetor do tipo

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3, \quad (3.1)$$

onde n_1 , n_2 e n_3 são números inteiros e \vec{a}_1 , \vec{a}_2 e \vec{a}_3 são chamados de vetores primitivos.

3.2.2 Rede Recíproca

A ideia de rede recíproca leva em consideração os efeitos do potencial da rede cristalina sobre os elétrons (OLIVEIRA, 2005). Define-se como rede recíproca formada por vetores de onda \vec{K} em que é obedecido a seguinte relação

$$e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}} = 1. \quad (3.2)$$

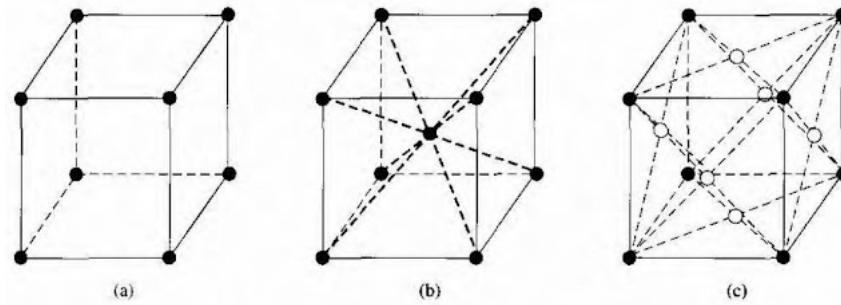


Figura 3.15 – Rede de Bravais:(a) Cúbica Simples(SC), (b) Cúbica de Corpo Centrado(BCC) e (c) Cúbica de Face Centrada(FCC).

Fonte: UNIT... (s.d., p. 24)

A rede recíproca deve conter a propriedade de periodicidade , logo se consideramos a onda plana $e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}$ temos

$$e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} = e^{i\vec{K}\cdot(\vec{r}+\vec{R})}, \quad (3.3)$$

onde a igualdade de 3.3 só poderá ser satisfeita se 3.2 também o for.

Os vetores primitivos da rede de Bravais ($\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$) se relacionam com os vetores da rede Recíproca ($\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$) através das seguintes relações:

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \\ \vec{b}_2 &= 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \\ \vec{b}_3 &= 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Observe que $\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$ é o volume da célula unitária da rede de Bravais e que

$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}. \quad (3.5)$$

3.2.3 Primeira Zona de Brillouin (PZB)

Tomemos duas funções de onda ψ_k e ψ_{k+K} onde \vec{K} é um vetor da rede recíproca do tipo

$$\vec{K} = K_1 \vec{b}_1 + K_2 \vec{b}_2 + K_3 \vec{b}_3. \quad (3.6)$$

Como a rede recíproca é periódica isso implica que

$$|\psi_k|^2 = |\psi_{k+K}|^2, \quad (3.7)$$

logo todos os valores de k que são fisicamente diferentes pertencem a uma única célula unitária da rede recíproca. A essa região chama-se de Primeira Zona de Brillouin (PZB). A PBZ pode ser construída tomando um ponto arbitrário da rede recíproca, e ligando esse objeto aos primeiros vizinhos. Logo em seguida traça-se planos perpendiculares nos pontos

médios dessas linhas. O intersecção desses planos, que equivale a um ponto no espaço recíproco, e que contém toda a física necessária para o entendimento da estrutura cristalina é chamada de PZB(OLIVEIRA, 2005).

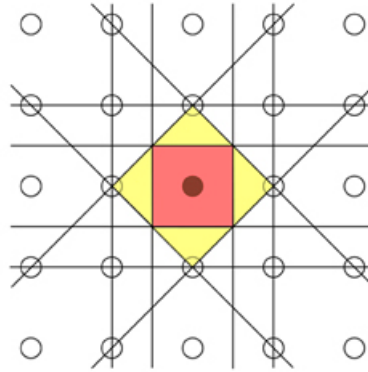


Figura 3.16 – Primeira(vermelha) e segunda(amarela) zonas de Brillouin para uma rede SC bidimensional.

Fonte: BRILLOUIN... (s.d., p. 24)

3.2.4 Teorema de Bloch

Sabe-se que os íons da rede cristalina ocupam posições regulares, o que implica numa propriedade periódica do potencial $U(\vec{r})$, ou seja

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R}), \quad (3.8)$$

onde \vec{R} é um vetor de rede. Ao se pensar em duas funções de ondas do tipo $\psi(\vec{r})$ e $\psi(\vec{r} + \vec{R})$ é de esperar que

$$|\psi(\vec{r})|^2 = |\psi(\vec{r} + \vec{R})|^2, \quad (3.9)$$

ou seja, as funções de onda se diferem somente por um fator de fase do tipo $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}$, logo podemos escrever

$$\psi(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\psi(\vec{r}). \quad (3.10)$$

A expressão 3.10 é o teorema de Bloch, e nele está explícita a propriedade de periodicidade da função de onda da rede cristalina. Devido à importância desse teorema, se mostra a necessidade de uma demonstração. Construamos um operador de traslação $T_{\vec{R}}$, que, ao ser aplicado em uma função, acresce o argumento \vec{R} , assim

$$T_{\vec{R}}f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R}). \quad (3.11)$$

Ao se considerar uma Hamiltoniana periódica, sendo operada por $T_{\vec{R}}$ temos

$$T_{\vec{R}}H\psi = H(\vec{r} + \vec{R})\psi(\vec{r} + \vec{R}) = H\psi(\vec{r} + \vec{R}) = HT_{\vec{R}}\psi, \quad (3.12)$$

que implica em

$$[T_{\vec{R}}, H] = 0. \quad (3.13)$$

Ao se fazer sucessivas aplicações do operador de traslação na mesma função é fácil notar que $T_{\vec{R}}T_{\vec{R}'}\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{R} + \vec{R}')$, ou seja

$$T_{\vec{R}}T_{\vec{R}'} = T_{\vec{R}'}T_{\vec{R}} = T_{\vec{R}+\vec{R}'}. \quad (3.14)$$

Da mecânica quântica sabemos que os autoestados de H podem, portanto, ser escolhidos como autoestados simultâneos para todos os $T_{\vec{R}}$ (ASHCROFT; MERMIN, 1976), logo

$$T_{\vec{R}}\psi = c(\vec{R})\psi, \quad (3.15)$$

onde $c(\vec{R})$ são os autovalores de $T_{\vec{r}}$. É fácil perceber também que $T_{\vec{R}}T_{\vec{R}'}\psi(\vec{r}) = c(\vec{R})c(\vec{R}')\psi(\vec{r})$ e que se usarmos 3.14 vemos que $T_{\vec{R}}T_{\vec{R}'}\psi = T_{\vec{R}+\vec{R}'}\psi = c(\vec{R} + \vec{R}')\psi$, concluindo que

$$c(\vec{R} + \vec{R}') = c(\vec{R})c(\vec{R}'). \quad (3.16)$$

Consideramos três vetores primitivos da rede de Bravais \vec{a}_i , logo se pode escrever $c(\vec{a}_i)$, da seguinte maneira

$$c(\vec{a}_i) = e^{2\pi i x_i}, \quad (3.17)$$

por escolhas adequadas de x_i . Ao calcular $c(\vec{R})$ onde \vec{R} é um vetor da rede de Bravais do tipo 3.1, e usando 3.16 temos que $C(\vec{R}) = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 = c(n_1\vec{a}_1)c(n_2\vec{a}_2)c(n_3\vec{a}_3)$ onde encontramos

$$c(\vec{R}) = c(\vec{a}_1)^{n_1}c(\vec{a}_2)^{n_2}c(\vec{a}_3)^{n_3}. \quad (3.18)$$

Usando 3.17 temos que $c(\vec{R}) = e^{2\pi i x_1 n_1} e^{2\pi i x_2 n_2} e^{2\pi i x_3 n_3} = e^{2\pi i (x_1 n_1 + x_2 n_2 + x_3 n_3)}$, ou seja, podemos definir um vetor do tipo

$$\vec{k} = x_1\vec{b}_1 + x_2\vec{b}_2 + x_3\vec{b}_3 \quad (3.19)$$

em que a propriedade 3.5 seja aplicável para escrever

$$c(\vec{R}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}, \quad (3.20)$$

onde \vec{k} é um vetor da rede recíproca. Finalmente escrevemos

$$T_{\vec{R}}\psi = \psi(\vec{r} + \vec{R}) = c(\vec{R})\psi = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\psi(\vec{r}), \quad (3.21)$$

demonstrando assim o teorema de Bloch 3.10(ASHCROFT; MERMIN, 1976).

3.3 Estrutura dos TMD's

Os TMD's são materiais que obedecem a seguinte configuração MX_2 , onde M é um metal de transição, onde os mais estudados são dos grupos IV, V e VI e X é um calcogênio.

Esses materiais, em sua forma bidimensional, tem excelentes propriedades ópticas e eletrônicas, propriedades essas que não são encontradas geralmente na suas formas tridimensionais ou *bulk*. Para obtenção desses materiais existem várias técnicas de esfoliação (DAMINELLI, 2019). Em sua estrutura tridimensional, os TMD's se assemelham ao grafite, com a diferença que nestes as "monocamadas" são formadas por uma camada composta por metais de transição "sanduichados" por duas camadas de calcogenetos, conforme pode ser visto na figura 3.18. Em relação a polimorfia dos TMD's existem três categorias :1T, 2H e 3R, onde o número geralmente representa o quantidade de camadas presente por célula unitária e a letra representa tetragonal, hexagonal e romboédrico. Enquanto a estrutura 1T tem característica metálica (geralmente do grupo VI), o 2H e 3R são semicondutores e são geralmente instáveis.

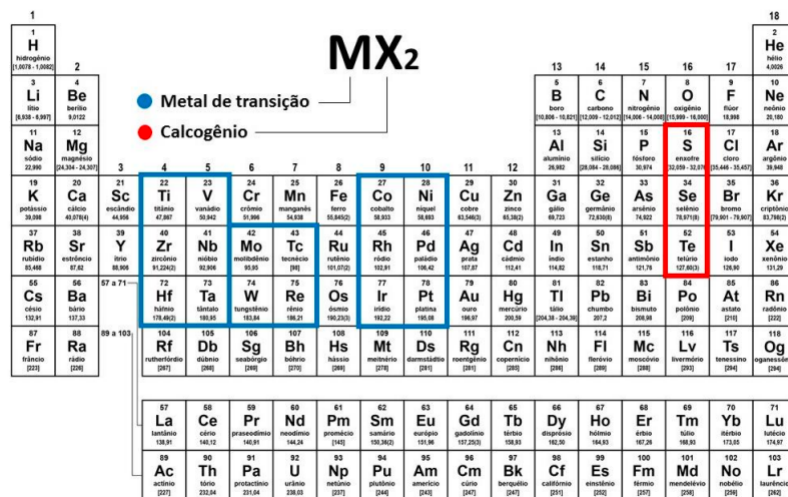


Figura 3.17 – Tabela periódica onde estão destacados os metais de transição e os calcogenetos

Fonte: Daminelli (2019, p. 24)

Já as monocamadas de TMD's se apresentam como 1T e 2H. Neste trabalho investigaremos a estrutura 2H, por ter comportamento semicondutor, com os metais de transição do grupo VI, com diversas possibilidades de aplicações. Na monocamada 2H, o metal de transição se liga trigonalmente à seis átomos de calcogênios e cada calcogênio se liga a três átomos de metal. De modo geral o vetores da rede de Bravais de um TMD de estrutura 2H são

$$\vec{R}_1 = (a,0,0) \tag{3.22}$$

e

$$\vec{R}_2 = \left(\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}a}{2}, 0 \right), \tag{3.23}$$

onde *a* é a constante de rede. Usando as equações 3.4 podemos encontrar os vetores da rede

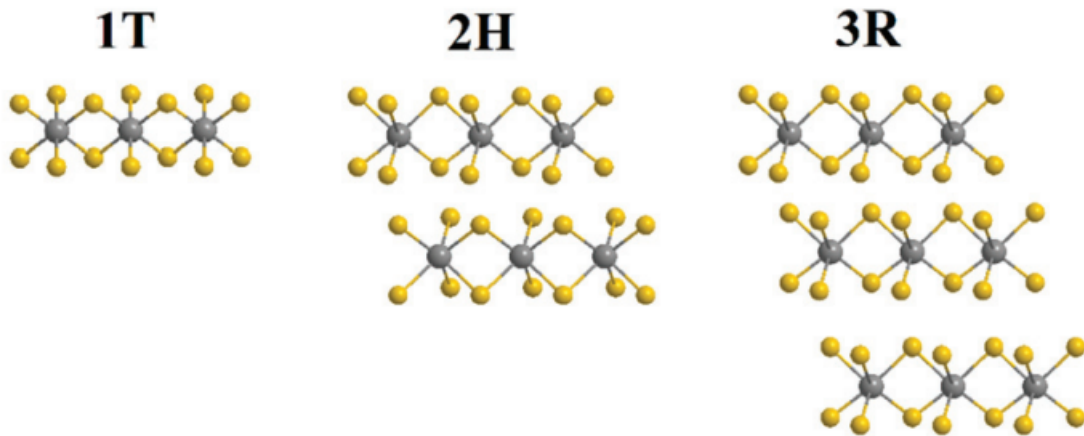


Figura 3.18 – Estruturas 1T, 2H e 3R. Os átomos escuros representam metal de transição e os átomos claros representam calcogênios.

Fonte: Coogan e Gun'ko (2021, p. 24)

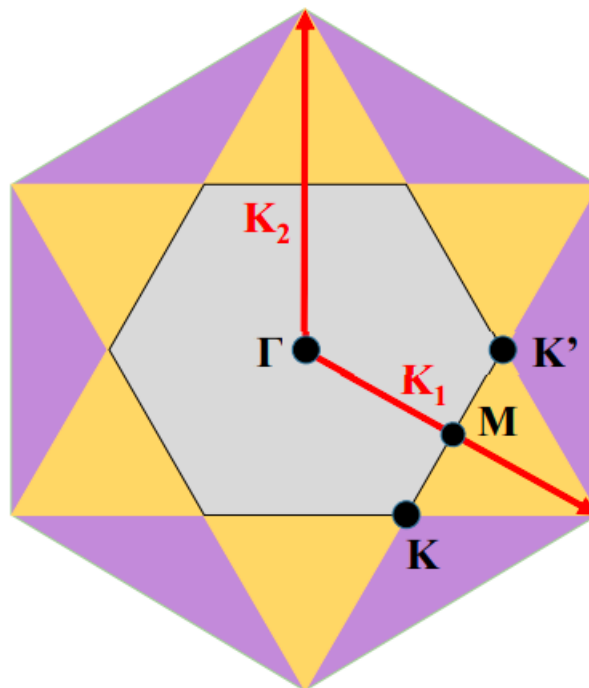


Figura 3.19 – Três primeiras zonas de Brillouin: Na figura estão destacados os pontos de alta simetria Γ , K e K' , como também os vetores de rede, K_1 e K_2 . Também está destacado o ponto M que é o ponto médio dos pontos K e K' .

Fonte: Riche (2020, p. 24)

Recíproca, que são

$$\vec{K}_1 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{-1}{2}, 0 \right) \quad (3.24)$$

e

$$\vec{K}_2 = (0,1,0). \quad (3.25)$$

Para cálculo da estrutura de bandas dentre outros, devemos definir alguns pontos de alta simetria da rede cristalina. São eles os pontos Γ , K e K' de coordenadas $\Gamma = (0,0,0)$, $K = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{-2\pi}{\sqrt{3}a}, 0\right)$ e $K' = \left(\frac{4\pi}{3a}, 0, 0\right)$. Uma propriedade dessas estruturas é o gap de banda direto nos pontos K e K' . Nessas estruturas há também a quebra de degenerescência do spin devido ao acoplamento spin-órbita e também a propriedade de conservação de simetria temporal e assimetria de inversão espacial.

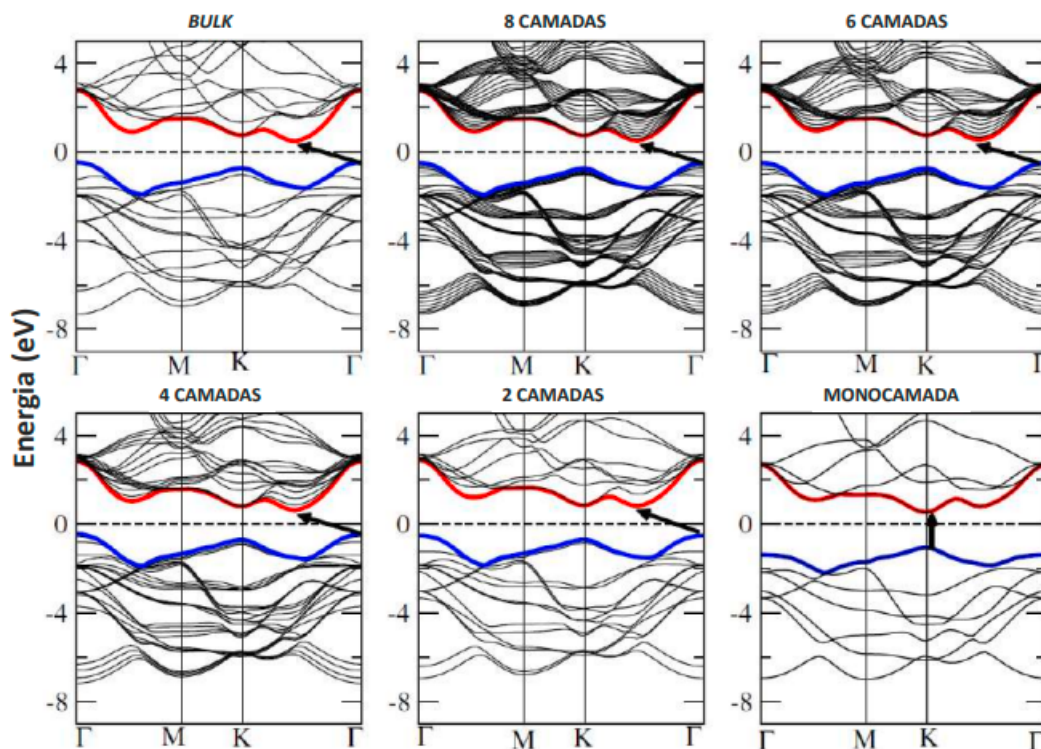


Figura 3.20 – Estruturas de banda do WSe_2 para vários tipos de estruturas, desde a sua forma *bulk*, até a monocamada: Nota-se, que comparando as estruturas de bandas, a única que apresenta um gap direto, é a monocamada.

Fonte: Kumar e Ahluwalia (2012, p. 24)

3.3.1 Estados Excitônicos

Éxcitons são quasipartículas formados por um par elétron-buraco ligados pela interação Coulombiana. O confinamento quântico e a blindagem reduzida apresentam nos TMD's bidimensionais fortes interações Coulombianas, favorecendo o aparecimento de éxcitons. Os semicondutores convencionais apresentam energia de ligação bem mais baixa do que as os TMD's, como também os éxcitons podem ser observados em temperaturas mais altas nesses materiais (RICHE, 2020). A constante dielétrica do material também interfere quanto

a ligação do par elétron-buraco, sendo que os materiais com constante dielétrica menor tendem a ter a energia de ligação maior (RICHE, 2020).

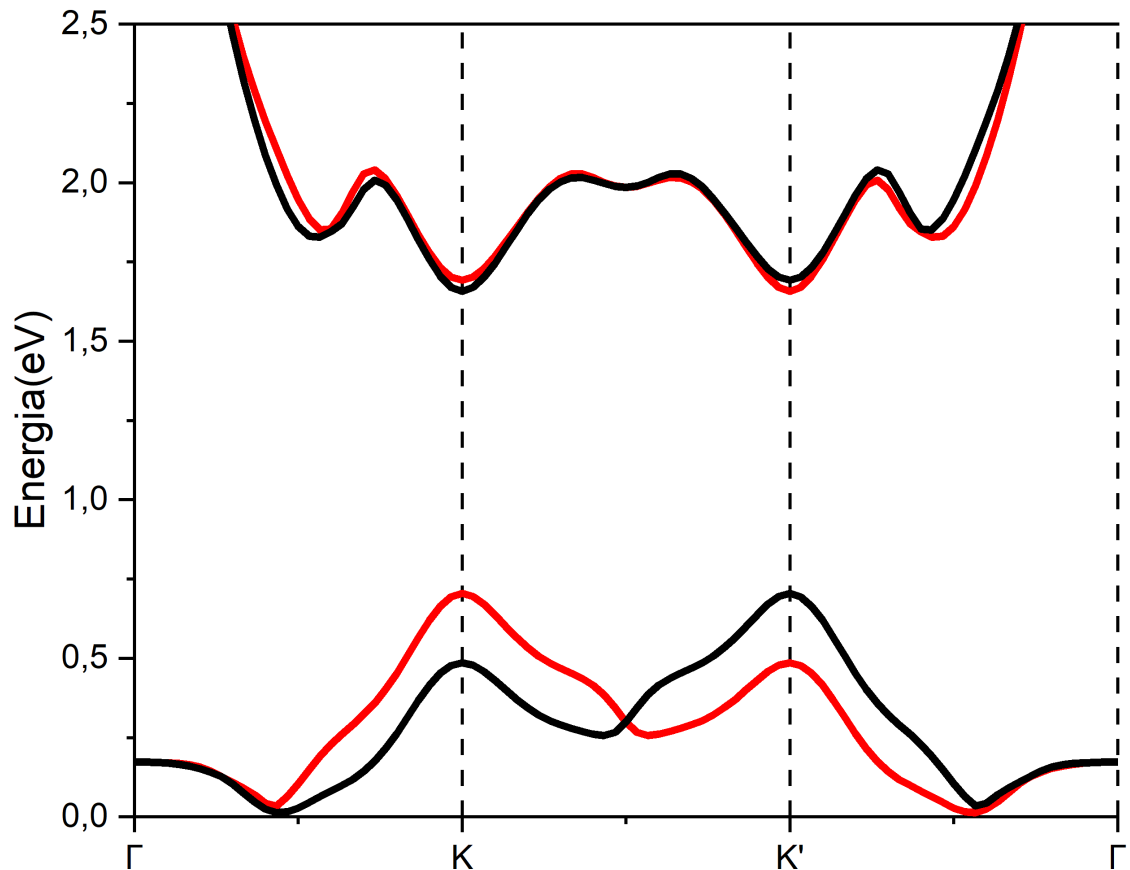


Figura 3.21 – Estrutura de banda com acoplamento spin-orbita da monocamada de WSe_2 usando DFT (utilizando o pacote computacional Quantum Espresso): A cor vermelha representa o estado com spin para cima e a cor preta representa o estado com spin para baixo. Está em destaque os pontos de alta simetria Γ , K e K' , que são respectivamente a origem e os vértices da primeira Zona de Brillouin.

Fonte: Feito pelo autor

Uma diferença notável entre os semicondutores convencionais e os TMD's bidimensionais é que naqueles a formação excitônica se dá na origem da primeira zona de Brillouin, no ponto Γ , e já nesses a formação se dá nos vértices da primeira zona de Brillouin (K e K'), onde se pode manipular os graus de liberdade mais facilmente (RICHE, 2020). Para se criar um éxciton a partir da incidência da luz sobre o TMD, deve-se obedecer três regras:

- A frequência dos fótons incidentes sobre o sistema devem ser maiores ou iguais que o

gap de banda óptico.

- Deverá haver conservação do momento.
- O spin total devem ser zero.

Tais sistemas que obedecem a essas três regras são chamados de éxcitons claros. Quando se bombeia fótons no material TMD algumas dessas partículas são absorvidas pelos os elétrons que estão na banda de valência, logo esses elétrons se transferem para a banda de condução deixando o buraco, com carga positiva nesta banda. Esses éxcitons decaem radioativamente podendo com isso ocorrer o desacoplamento do par elétron-buraco. Uma característica importante dos éxcitons claros é que essas quasipartículas tendem a ser éxcitons diretos, ou seja, o par elétron-buraco se localizam nos pontos K e K' e tem momento de centro de massa igual a zero. Existem uma outra classe de éxcitons, chamados de éxcitons escuros, que não são formados pela interação da luz com a matéria, mas por processos de espalhamento (emissão ou absorção de fônons) e que podem ser opticamente ativados por outros mecanismos físicos. Essas quasipartículas podem se apresentar em duas configurações:

- O elétron e o buraco em vales diferentes (buraco no vale K e elétron no vale K' por exemplo, que são éxcitons indiretos) e são proibidos pelo momento.
- O elétron e o buraco podem estar no mesmo vale (éxciton direto) porém com spins opostos, ou seja, proibidos pelo spin.

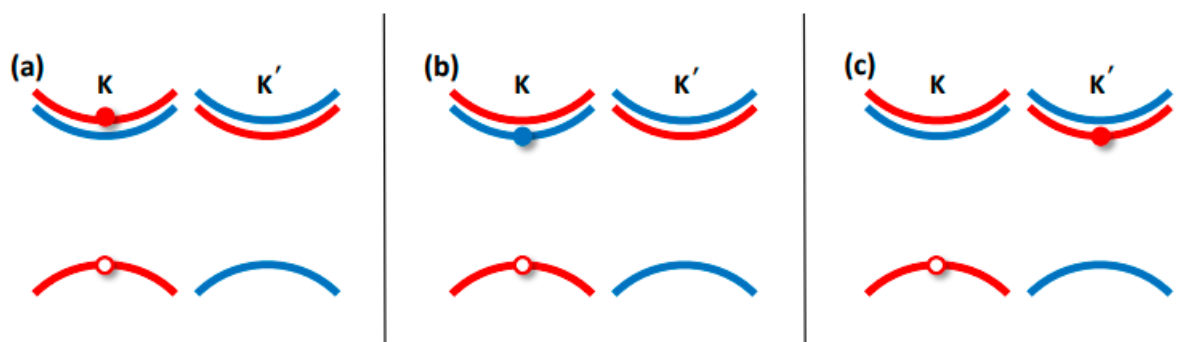


Figura 3.22 – Representação das configurações excitônicas: (a) éxciton claro, nota-se que elétron e buraco estão no mesmo vale e tem spins iguais. (b) éxciton escuro com spin proibido, nota-se que o elétron e o buraco estão no mesmo vale, porém com spins opostos. (c) éxciton escuro com conservação do momento proibido, ou seja elétron e buraco com mesmo spin, porém em vales diferentes.

Fonte: Riche (2020, p. 24)

Existem ainda éxcitons iônicos, que são chamados de tríons, onde evidentemente são formados por três partículas, ou um elétron e dois buracos (carga positiva) ou por dois elétrons e um buraco (carga negativa) sendo os mais comuns o singlete e o tripleto e o tríon escuro. Na figura 3.23 contém os diagramas das configurações dos três tríons citados.

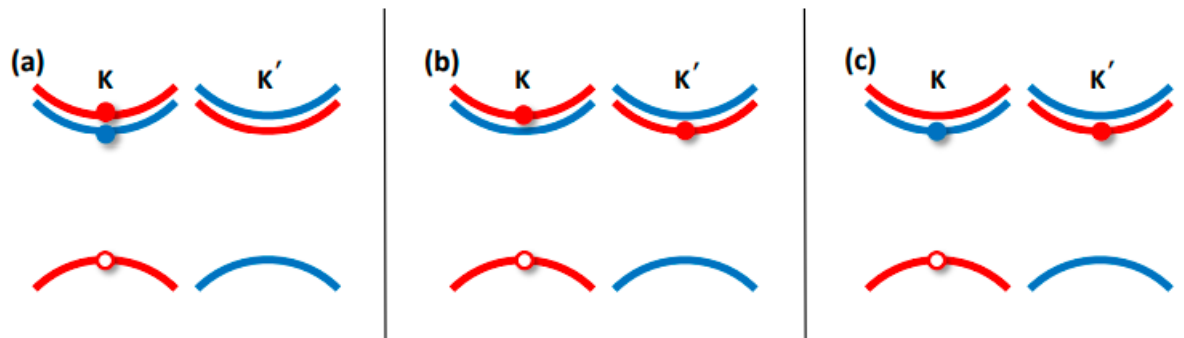


Figura 3.23 – Representação das configurações excitônicas dos tríons (a) singlete, (b) tripleto, (c) tríon escuro.

Fonte: Riche (2020, p. 24)

Quando há uma grande quantidade de fótons incidindo sobre o material, haverá uma grande quantidade de éxcitons claros sendo criados, porém se o espectro de fotoluminescência (que mede a luminosidade da amostra) for analisado, será percebido que depois de um certo valor para energia, não haverá mais o aumento da luminosidade da amostra. A resposta para esse fenômeno é que com o aumento do número de éxcitons claros, aumentará por sua vez a possibilidade de colisão entre os éxcitons, podendo assim haver algum aniquilamento. Como há um desbalanceio de carga no sistema, haverá a possibilidade da formação de éxcitons com quatro corpos, denominados biéxcitons. Segue na figura 3.24 as configurações possíveis dos biéxcitons.

3.3.2 Pseudo-Spin

Como foi explicado anteriormente, ao incidir luz em uma amostra de TMD, poderemos ter a criação de éxcitons. Na verdade, se incidirmos luz circularmente polarizada à direita (sentido horário) σ_+ conseguiremos acessar o vale K , ou seja, podemos criar éxcitons no vale K , já se incidirmos luz polarizada à esquerda (sentido anti-horário) σ_- poderemos ter acesso ao vale K' , criando éxcitons nesse vale. Essa situação pode ser descrita como um sistema de dois níveis, com os estados $|K_{\pm}\rangle$ e logo esses estados podem ser representados através de uma esfera de Bloch, onde um estado situado no polo norte configura um estado $|K_+\rangle$ (luz circularmente polarizada a direita, acessando o vale K) e um estado situado no polo sul configura o estado $|K_-\rangle$ (luz circularmente polarizada a esquerda, acessando o vale K'), e também o estado poderá estar no equador, configurando um estado misturado $|K_{\pm}\rangle$ equivalente a

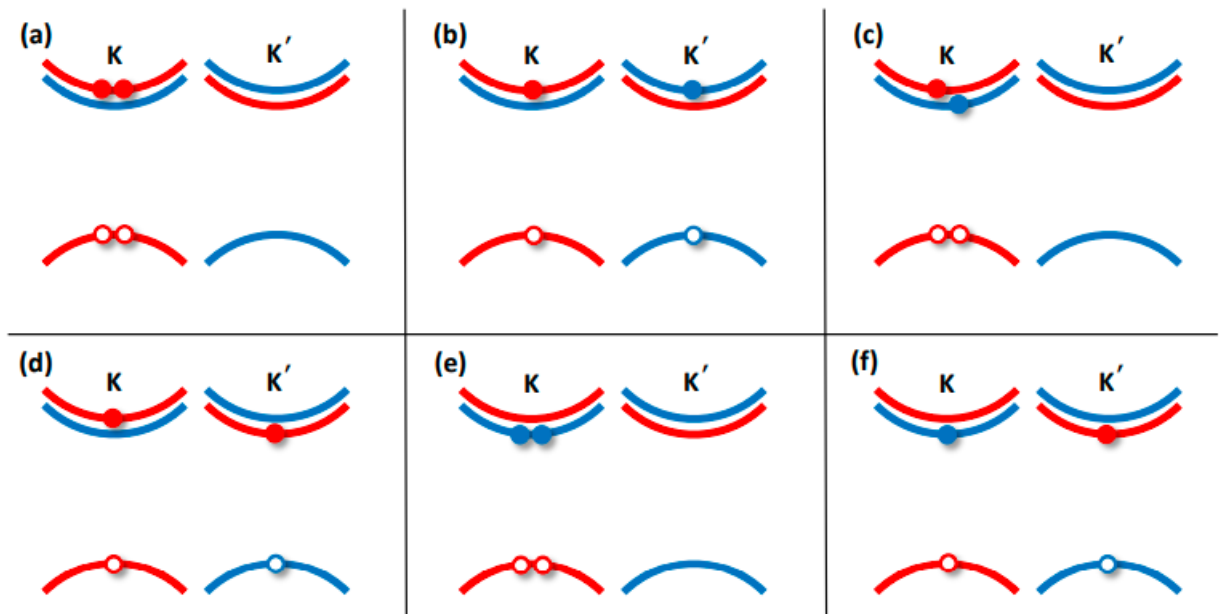


Figura 3.24 – Representação das configurações excitônicas dos biéxcitons: (a) biéxciton claro-claro intravale. (b) biéxciton claro-claro intervalle. (c) biéxciton claro-escuro intravale. (d) biéxciton claro-escuro intervalle. (e) biéxciton escuro-escuro intravale. (f) biéxciton escuro-escuro intervalle

Fonte: Riche (2020, p. 24)

uma luz linearmente polarizada. Esse tipo de sistema é chamado de pseudo-spin do vale. Com a descoberta de materiais 2D(TMD's), como o grafeno, por exemplo, o interesse por esse tipo de sistema aumentou exponencialmente, muito do que se deve às diversas aplicações que o estudo desses sistemas oferece. O estudo mais elaborado desses sistemas descobriu que os picos das bandas de condução e de valência podem ser encontrados, utilizando os índices pseudospin do vale, o que traz consigo algumas informações importantes sobre o comportamento quântico do sistema em estudo. Uma das maiores dificuldades desses sistemas é que o tempo de coerência do vale é extremamente pequeno, dificultando sua análise. Se tivermos uma estrutura com geometria hexagonal, as bandas de valência e condução localizadas nos vales K e K' apontam para os vértices dessa estrutura. Devido à forte interação Coulombiana, são formados éxcitons (par elétron-buraco). Devido à localização do éxciton (K ou K') eles só podem ser excitados por luzes circularmente polarizadas (σ^+ ou σ^-), e isso é muito parecido com a definição de spin, por exemplo no que foi realizado no experimento de Stern-Gerlach. Por causa dessa semelhança, esses vales podem ser considerados como um pseudo-spins, que podem ser representados por um vetor \vec{S}^{τ} na esfera Bloch. Essa representação pode ser feita da seguinte forma: As componentes do vetor \vec{S}^{τ} que estão no plano xy são \vec{S}_x^{τ} e \vec{S}_y^{τ} , onde \vec{S}_x^{τ} descreve a polarização do vale e \vec{S}_y^{τ} descreve a superposição coerente dos estados do vale. A dinâmica do vale pode ser modelada através da equação: (YANG et al., 2015) (ROBERT et al., 2017)

$$\frac{d\vec{S}^\tau}{dt} = \vec{\Omega}_L \times \vec{S}^\tau + \tau \Omega_e \hat{z} \times \vec{S}^\tau - \gamma_s \vec{S}^\tau - \gamma_v (\vec{S}^\tau - \vec{S}^{-\tau}), \quad (3.26)$$

onde $\tau = \pm 1$ é o índice para os vales K e K' , $\vec{\Omega}_L = \frac{g\mu_B \vec{B}_i}{\hbar}$, onde \vec{B}_i é o campo proveniente da interação de troca Coulombiana e $\Omega_e(B_z)$, onde B_z é um campo magnético perpendicular ao plano da amostra (YANG et al., 2015). O primeiro e o segundo termo desta equação descrevem a precessão de spin sobre os campos, o terceiro termo descreve o relaxamento de spin intrínseco dentro de um determinado vale com taxa de γ_s e o quarto termo é o espalhamento entre vales conservando o spin com taxa γ_v . Consideramos que $\vec{\Omega}_L = \Omega_L(\cos\theta \hat{x} + \sin\theta \hat{y})$, portanto, um campo paralelo ao plano xy . Separando em termos dos vales K e K' , temos

$$\frac{d\vec{S}^K}{dt} = \Omega_L(\cos(\theta)\hat{x} + \sin(\theta)\hat{y}) \times \vec{S}^K + \Omega_e \hat{z} \times \vec{S}^K - \gamma_s \vec{S}^K - \gamma_v (\vec{S}^K - \vec{S}^{K'}) \quad (3.27)$$

e

$$\frac{d\vec{S}^{K'}}{dt} = \Omega_L(\cos(\theta)\hat{x} + \sin(\theta)\hat{y}) \times \vec{S}^{K'} - \Omega_e \hat{z} \times \vec{S}^{K'} - \gamma_s \vec{S}^{K'} + \gamma_v (\vec{S}^K - \vec{S}^{K'}). \quad (3.28)$$

Executando os produtos vetoriais das equações acima, temos

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{S}^K}{dt} = & \Omega_L(\sin(\theta)S_z^K \hat{x} + \cos(\theta)S_y^K \hat{z} - \cos(\theta)S_z^K \hat{y} - \sin(\theta)S_x^K \hat{z}) + \Omega_e(S_x^K \hat{y} - S_y^K \hat{x}) \\ & - \gamma_s(S_x^K \hat{x} + S_y^K \hat{y} + S_z^K \hat{z}) - \gamma_v[(S_x^K - S_x^{K'})\hat{x} + (S_y^K - S_y^{K'})\hat{y} + (S_z^K - S_z^{K'})\hat{z}] \end{aligned} \quad (3.29)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{S}^K}{dt} = & \Omega_L(\sin(\theta)S_z^{K'} \hat{x} + \cos(\theta)S_y^{K'} \hat{z} - \cos(\theta)S_z^{K'} \hat{y} - \sin(\theta)S_x^{K'} \hat{z}) - \Omega_e(S_x^{K'} \hat{y} - S_y^{K'} \hat{x}) \\ & - \gamma_s(S_x^{K'} \hat{x} + S_y^{K'} \hat{y} + S_z^{K'} \hat{z}) + \gamma_v[(S_x^K - S_x^{K'})\hat{x} + (S_y^K - S_y^{K'})\hat{y} + (S_z^K - S_z^{K'})\hat{z}]. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Separando agora, em termos dos componentes cartesianos, temos

$$\begin{aligned} \dot{S}_x^K &= \Omega_L \sin(\theta) S_z^K - \Omega_e S_y^K - \gamma_s S_x^K - \gamma_v (S_x^K - S_x^{K'}) \\ \dot{S}_y^K &= -\Omega_L \cos(\theta) S_z^K + \Omega_e S_x^K - \gamma_s S_y^K - \gamma_v (S_y^K - S_y^{K'}) \\ \dot{S}_z^K &= \Omega_L (\cos(\theta) S_y^K - \sin(\theta) S_x^K) - \gamma_s S_z^K - \gamma_v (S_z^K - S_z^{K'}) \\ \dot{S}_x^{K'} &= \Omega_L \sin(\theta) S_z^{K'} + \Omega_e S_y^{K'} - \gamma_s S_x^{K'} + \gamma_v (S_x^K - S_x^{K'}) \\ \dot{S}_y^{K'} &= -\Omega_L \cos(\theta) S_z^{K'} - \Omega_e S_x^{K'} - \gamma_s S_y^{K'} + \gamma_v (S_y^K - S_y^{K'}) \\ \dot{S}_z^{K'} &= \Omega_L (\cos(\theta) S_y^{K'} - \sin(\theta) S_x^{K'}) - \gamma_s S_z^{K'} + \gamma_v (S_z^K - S_z^{K'}), \end{aligned} \quad (3.31)$$

que pode ser facilmente resolvido numericamente.

Vemos na figura 3.25 as soluções numéricas para S_z^K , $S_z^{K'}$ e S_z , em que as duas primeiras são curvas periódicas que são amortecidas pelo fator γ_s , em contrapartida temos uma curva estacionária para S_z . Observamos que comportamento ondulatório das soluções são por conta da precessão de pseudo-spin dominados pelos fatores Ω_e e Ω_L .

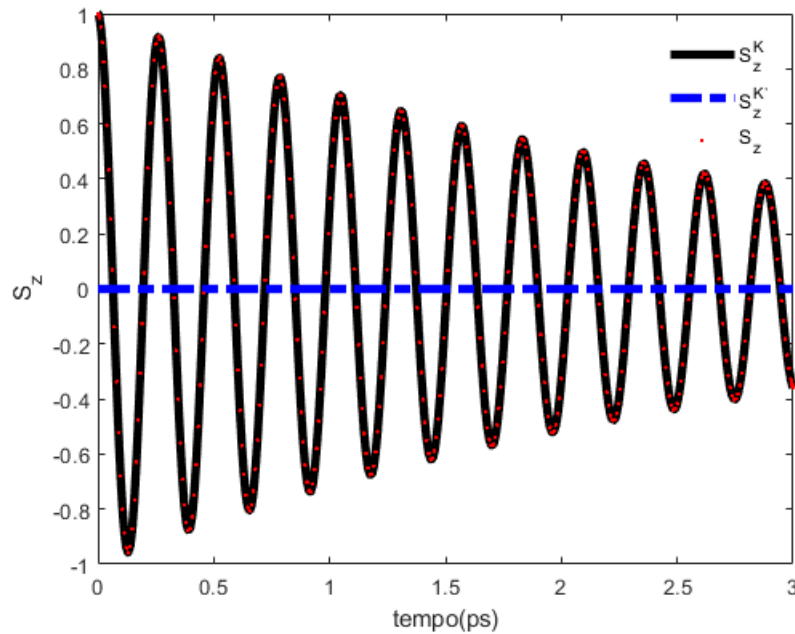


Figura 3.25 – Representação das soluções do pseudo-spin para o vale K e K' . Foi usado a seguinte condição inicial $S_z^K(0) = 1$. Parâmetros usados: $\Omega_L = 24$ GHz, $\Omega_e = 0$, $\gamma_s = 0.33$ GHz, $\gamma_v = 0$ e $\theta = \frac{\pi}{2}$ rad (YANG et al., 2015).

Fonte: Feito pelo autor

3.3.3 Dinâmica do Vale

Agora nos deteremos ao estudo da dinâmica excitônica via equações de taxas. No nosso trabalho, o objetivo será calcular a dinâmica excitônica utilizando o formalismo da matriz de densidade, porém, por ser tratar de formalismos equivalentes e devido a sua importância, traremos aqui o formalismo das equações de taxas para um sistema de seis níveis, ou seja, um sistema excitônico situado em dois vales, K e K' , cada um portando o estado fundamental $|0\rangle$, um estado referente ao éxcitons claros $|X_{c,c'}\rangle$ e um estado referente ao éxcitons escuros $|X_{e,e'}\rangle$.

Analisando o diagrama de estados da figura 3.26 podemos construir o seguinte sistema de equações diferenciais acopladas, considerando inclusive o vale K' , que na perspectiva da figura 3.26 não está incluso. As equações são:

$$\frac{dX_c}{dt} = g - \frac{X_c}{\tau_x} - \frac{X_c}{\tau_{skx}} + \frac{X_{c'}}{\tau_{skx}} - \frac{X_c}{\tau_{sf}} + \frac{X_e}{\tau_{sf}} \Theta_{(x-x_0)} \quad (3.32)$$

$$\frac{dX_e}{dt} = -\frac{X_e}{\tau_{xd}} - \frac{X_e}{\tau_{sf}} + \frac{X_c}{\tau_{sf}} \Theta_{(x_0-x)} \quad (3.33)$$

$$\frac{dX_{c'}}{dt} = g' - \frac{X_{c'}}{\tau_x} - \frac{X_{c'}}{\tau_{skx}} + \frac{X_c}{\tau_{skx}} - \frac{X_{c'}}{\tau_{sf}} \Theta_{(x_0-x)} + \frac{X_{e'}}{\tau_{sf}} \quad (3.34)$$

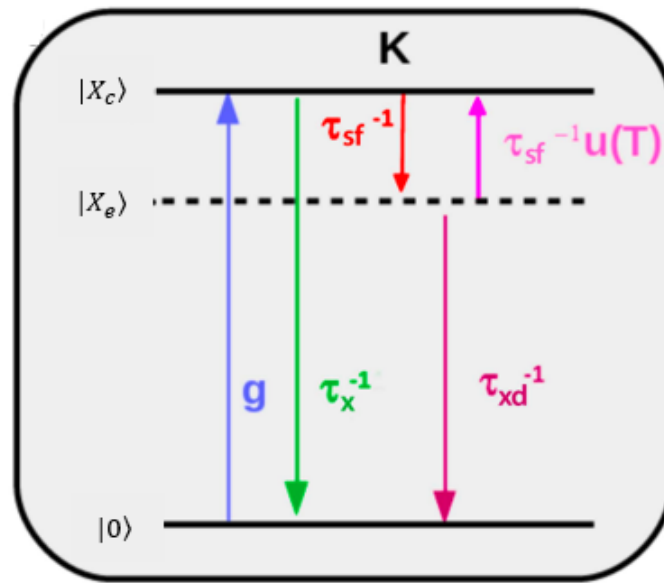


Figura 3.26 – Diagrama de Estados

Fonte: Riche (2020, p. 24)

$$\frac{dX_{e'}}{dt} = -\frac{X_{e'}}{\tau_{xd}} - \frac{X_{e'}}{\tau_{sf}} + \frac{X_{c'}}{\tau_{sf}} \Theta_{(x_0-x)}, \quad (3.35)$$

onde a função $\Theta_{(x-x_0)}$ é definida como

$$\Theta_{(x-x_0)} = \begin{cases} u(T,x), & x > x_0 \\ 1, & x < x_0, \end{cases} \quad (3.36)$$

e

$$u(T,x) = e^{\frac{-|\Delta E_x|}{k_b T}}, \quad (3.37)$$

onde 3.37 é a função de distribuição de Boltzmann, que se apresenta nos termos que vão de um nível de energia mais baixo para um mais alto (sentido não natural), ΔE_x representa a diferença de energia entre os estados excitônicos, T é a temperatura, k_b é a constante de Boltzmann e $X_c(X_{c'})$ e $X_e(X_{e'})$ são as concentrações dos éxcitons claros e escuros no vale $K(K')$. Temos também g e g' que é a taxa de criação de éxcitons claros nos vales K e K' , τ_x e τ_{xd} que são os tempos de recombinação dos éxcitons claros e escuros, ou seja, o tempo em que os elétrons decaem para o estado fundamental, τ_{skx} é o tempo de espalhamento intervale e τ_{sf} é o tempo de espalhamento entre os éxcitons claros e escuros intravale. Note que nas equações acima negligenciamos os casos em que $x < x_0$ por ser tratar de uma espalhamento natural, logo a função $\Theta_{x-x_0} = u(T,x)$.

Fazendo as derivadas temporais de todas equações acima iguais a zero, encontramos um sistema de equações lineares, que podem ser resolvidas facilmente, encontrando assim as

soluções, chamadas de soluções estacionárias. Com posse das soluções estacionárias é possível o cálculo de várias propriedades físicas do material TMD, tais como a fotoluminescência e a polarização do vale.

4 Metodologia

4.1 Teoria do Funcional de Densidade

Para o problema de muitos corpos, que é o caso da estrutura cristalina, onde temos núcleos positivos e pesados e elétrons leves com carga negativa, a Hamiltoniana que descreve o sistema é do tipo

$$H = T_e + T_n + V_{ee} + V_{nn} + V_{en}, \quad (4.1)$$

onde T_e é a energia cinética dos elétrons, T_n é a energia cinética nuclear, V_{ee} é a interação elétron-elétron, V_{nn} é a interação núcleo-núcleo e V_{en} é a interação elétron-núcleo. Como se trata de multicorpos temos que a energia cinética para o sistema acima é a soma da energia cinética dos núcleos (T_n), dado por

$$T_n = \sum_{i=1} \frac{\hbar^2}{2M_i} \nabla_{R_i}^2, \quad (4.2)$$

onde M_i e R_i são a massa e a posição nuclear, respectivamente. A energia cinética dos elétrons (T_e) é dada por

$$T_e = \sum_{i=1} \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_{r_i}^2, \quad (4.3)$$

onde m_i e r_i são a massa e a posição do elétron. A energia potencial é a soma das energias potenciais das interações elétron-elétron (V_{ee}), dada por

$$V_{ee} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_i - r_j|}. \quad (4.4)$$

A interação núcleo-núcleo (V_{nn}) pode ser escrita como

$$V_{nn} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{Z_i Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0 |R_i - R_j|}. \quad (4.5)$$

Nas equações 4.4 e 4.5 temos que $i \neq j$, pois se assim não fosse coincidiria a posição de dois elétrons ou dois núcleos, gerando assim potencial infinito, logo o somatório é dividido por 2 e Z_i e Z_j são os números atômicos dos núcleos. Para a interação núcleo-elétron (V_{ne}) temos

$$V_{ne} = \sum_i \sum_j \frac{Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_i - R_j|}. \quad (4.6)$$

Usando a aproximação de Born-Oppenheimer é possível separar a parte eletrônica da nuclear, levando em consideração que a massa do núcleo é muito superior à massa eletrônica, e portanto, a velocidade de um elétron é bem maior que a de um núcleo, de modo que os

elétrons mudam seu estado de movimento quase que instantâneo a mudança de posição do núcleo. Levando em consideração essa aproximação temos que $T_n = 0$ e $V_{nn} = \text{constante}$, logo o Hamiltoniano pode ser expresso como

$$H_e = T_e + V_{ee} + V_{en}, \quad (4.7)$$

onde V_{en} é chamado nesta perspectiva, de potencial externo e vai depender do material. Usaremos os dois teoremas de Hohenberg-Kohn no Hamiltoniano 4.7. O primeiro teorema diz que a energia total do sistema e o potencial são um único funcional da densidade eletrônica. Chamando V_{en} de $V(\vec{r})$, que é o potencial externo da rede cristalina, $n(\vec{r})$ de densidade eletrônica, logo o funcional da energia total $E\{n(\vec{r})\}$ é

$$E\{n(\vec{r})\} = \langle \psi | H_e | \psi \rangle = \int n(\vec{r})V(\vec{r})d\vec{r} + F\{n(\vec{r})\}, \quad (4.8)$$

onde $F\{n(\vec{r})\} = T_e\{n(\vec{r})\} + V_{ee}\{n(\vec{r})\}$, que é chamado de funcional de Hohenberg-Kohn, que é independente do material. Já o segundo teorema relata que a densidade eletrônica que minimiza a energia, é a densidade do estado fundamental, ou seja, se usarmos uma função de onda de teste $|\tilde{\psi}\rangle$, temos

$$\langle \tilde{\psi} | H | \tilde{\psi} \rangle = \int \tilde{n}(\vec{r})V(\vec{r})d\vec{r} + F\{\tilde{n}(\vec{r})\} = E\{\tilde{n}(\vec{r})\} \geq E\{n(\vec{r})\}, \quad (4.9)$$

ou seja, qualquer densidade que não seja a do estado fundamental fornecerá uma energia maior do que $E\{n(\vec{r})\}$. O problema ainda não estaria solucionado pois para usarmos o princípio variacional e obter o estado fundamental é necessário conhecer $F\{n(\vec{r})\}$. Em 1965, Kohn e Sham, publicaram um artigo que contém a equação, que é chamada na literatura de equação de Kohn-Sham, que determinam $F\{n(\vec{r})\}$. Nesse aproximação V_{ee} é escrito como

$$V_{ee}\{n(\vec{r})\} = V_H\{n(\vec{r})\}, \quad (4.10)$$

onde $V_H\{n(\vec{r})\}$ é a potencial de Hartree, que é o potencial Coulombiano, potencial esse que é dado por

$$V_H\{n(\vec{r})\} = \frac{1}{2} \int \int dr dr' \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|r - r'|}. \quad (4.11)$$

Nesta aproximação a energia cinética T_e é substituída pela energia cinética de um gás de elétrons não interagente T_s , mais um termo $E_{xc}\{n(\vec{r})\}$ que se refere aos termos de troca-correlação. Com essas aproximações a equação da energia total 4.8 pode ser reescrita como

$$E\{n(\vec{r})\} = \langle \psi | H_e | \psi \rangle = \int n(\vec{r})V(\vec{r})d\vec{r} + T_s\{n(\vec{r})\} + \frac{1}{2} \int \int dr dr' \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|r - r'|} + E_{xc}\{n(\vec{r})\}. \quad (4.12)$$

Agora têm-se a equação de Kohn-Sham, definida como

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + v_s(\vec{r}) \right) \phi_i(\vec{r}) = E_i \phi_i(\vec{r}), \quad (4.13)$$

onde $v_s(\vec{r})$, que é chamado de potencial externo efetivo, que é definido como

$$v_s(\vec{r}) = V(\vec{r}) + \int d\vec{r}' \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + V_{xc}\{n(\vec{r})\}, \quad (4.14)$$

onde $V_{xc}\{n(\vec{r})\}$ é o potencial de troca-correlação definido por

$$V_{xc}\{n(\vec{r})\} = \frac{\partial E_{xc}\{n(\vec{r})\}}{\partial n(\vec{r})}. \quad (4.15)$$

Uma solução para a equação de Kohn-Sham, que representa a densidade é

$$n(\vec{r}) = \sum_i |\phi_i(\vec{r})|^2. \quad (4.16)$$

Isolando $V(\vec{r})$ em 4.14 e substituindo em 4.12 temos

$$E\{n(\vec{r})\} = \int n(\vec{r}) \left[-v_s(\vec{r}) + \int d\vec{r}' \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + V_{xc}\{n(\vec{r})\} \right] d\vec{r} + T_s\{n(\vec{r})\} \quad (4.17)$$

$$+ \frac{1}{2} \int \int d\vec{r} d\vec{r}' \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + E_{xc}\{n(\vec{r})\}. \quad (4.18)$$

Realizando os devidos produtos eliminamos uma das integrais, logo podemos escrever

$$E\{n(\vec{r})\} = \int n(\vec{r})v_s(\vec{r})d\vec{r} - \frac{1}{2} \int \int \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' d\vec{r} - \int n(\vec{r})V_{xc}\{n(\vec{r})\} d\vec{r} + T_s\{n(\vec{r})\} + E_{xc}\{n(\vec{r})\}. \quad (4.19)$$

Em relação a energia de troca-correlação, sua forma exata não é conhecida. Porém existem algumas aproximações, como a de densidade local (LDA). A energia de troca e correlação usando essa aproximação é

$$E_{xc}^{LDA} = \int d\vec{r} f(n(\vec{r})), \quad (4.20)$$

onde $f(n(\vec{r}))$ é uma função da densidade do estado fundamental. É importante salientar que a solução da equação 4.13 necessita de um procedimento auto-consistente, ou seja, inicialmente começa-se com um "chute" para a densidade do estado fundamental, em que se determina v_s , então a equação 4.13 pode ser resolvida, encontrando-se 4.16. O resultado 4.16 é comparado com o passo anterior, e esse procedimento é repetido reiteradas vezes até que haja uma convergência entre v_s e 4.16. Essa densidade obtida da convergência é a densidade do estado fundamental(DIAS, 2016)(FREIRE, 2017).

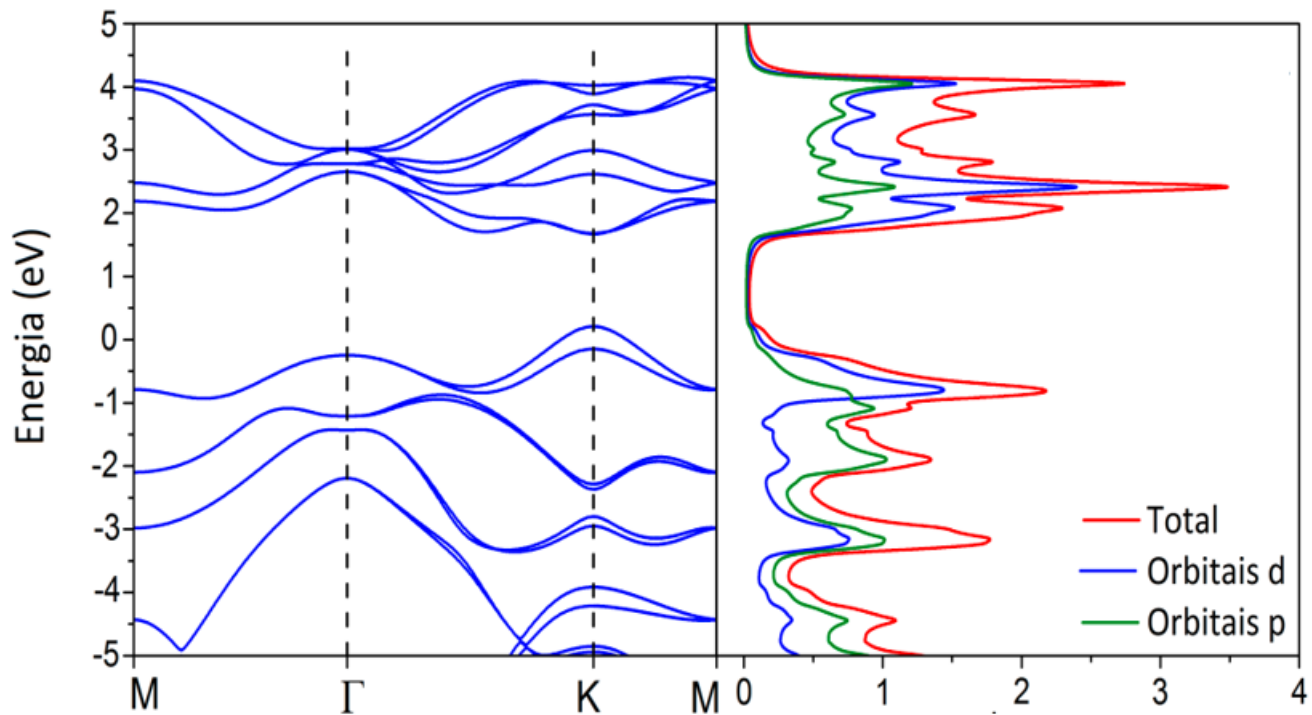


Figura 4.27 – Cálculo de Estrutura de Bandas e cálculo de DOS(Densidade dos estado) do WSe₂ usando DFT(Quantum Espresso).

Fonte:Dias (2019, p. 24)

4.2 Modelo de Tight-Binding

Cada espécie química na natureza (átomos) contém níveis eletrônicos bem definidos. No formato cristalino, onde vários elétrons estão interagindo, existe um acoplamento dos níveis eletrônicos formando níveis que se diferem dos níveis dos átomos isolados. Esses acoplamentos das funções de onda são bem diferentes se os materiais são condutores, isolantes ou semicondutores. Se o material for um condutor, geralmente os acoplamentos são baixos devido aos elétrons de valência estarem bem próximos ao núcleo atômico (ROY, 2015), logo, existe uma forte interação Coulombiana entre eles. Já nos materiais condutores, geralmente, o acoplamento é alto e os elétrons de valência conseguem se deslocar com muita facilidade. Já os semicondutores tem um carácter intermediário e o modelo Tight-Binding foi construído para ser aplicado nesses últimos, em que a sobreposição das funções de ondas de átomos vizinhos são suficientemente grandes para que haja uma correção nas funções de ondas dos átomos isolados. Neste modelo, o Hamiltoniano da rede pode ser aproximado para um Hamiltoniano de um ponto de rede, como uma posição atômica, por exemplo. Para o cálculo de bandas usando modelo Tight-Binding partimos da equação de Schrödinger

$$H |\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle, \quad (4.21)$$

onde a função de onda $\Psi_n(\vec{k}, \vec{r})$ é expressa através das funções de Bloch, logo

$$\Psi_n(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{n'} c_{nn'}(\vec{k}) \phi_{n'}(\vec{k}, \vec{r}), \quad (4.22)$$

onde n são os níveis eletrônicos, \vec{k} é o vetor de estado e \vec{r} é o vetor posição. Temos também que

$$\phi_{n'}(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{R}\vec{k}} \zeta_n(\vec{r} - \vec{R}), \quad (4.23)$$

onde ζ_n são os orbitais atômicos e $e^{i\vec{R}\vec{k}}$ é o fator de fase apresentado em 3.10 que representa a periodicidade da rede cristalina, ou seja, as funções de Bloch devem ser invariantes às translações, portanto, se somarmos um vetor qualquer \vec{R}' às referidas funções temos

$$\phi_{n'}(\vec{k}, \vec{r} + \vec{R}') = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{R}\vec{k}} \zeta_n(\vec{r} - (\vec{R} - \vec{R}')). \quad (4.24)$$

realizando a seguinte operação $\vec{R}'' = \vec{R} - \vec{R}'$, obtemos

$$\phi_{n'}(\vec{k}, \vec{r} + \vec{R}') = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i(\vec{R}' + \vec{R}'')\vec{k}} \zeta_n(\vec{r} - (\vec{R}'')) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\vec{R}'\vec{k}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{R}''\vec{k}} \zeta_n(\vec{r} - \vec{R}'') = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\vec{R}'\vec{k}} \phi_{n'}(\vec{k}, \vec{r}). \quad (4.25)$$

O cálculo da energia em função do vetor de onda \vec{k} , é dado pelo valor esperado do Hamiltoniano, fazendo $n' = 1$ em 4.23 temos

$$E(\vec{k}) = \int \phi^*(\vec{k}, \vec{r}) H \phi(\vec{k}, \vec{r}) d\vec{r}. \quad (4.26)$$

Substituindo 4.23 com as devidas observações citadas acima temos

$$E(\vec{k}) = \int \left[\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{R}\vec{k}} \zeta_n^*(\vec{r} - \vec{R}) \right] H \left[\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}'} e^{i\vec{R}'\vec{k}} \zeta_n(\vec{r} - \vec{R}') \right] d\vec{r}, \quad (4.27)$$

ficando

$$E(\vec{k}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}} \sum_{\vec{R}'} e^{i\vec{k}(\vec{R}' - \vec{R})} \int \zeta_n^*(\vec{r} - \vec{R}) H \zeta_n(\vec{r} - \vec{R}') d\vec{r}, \quad (4.28)$$

onde adotamos que $\vec{x} = \vec{r} - \vec{R}$, logo temos

$$E(\vec{k}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}} \sum_{\vec{R}'} e^{i\vec{k}(\vec{R}' - \vec{R})} \int \zeta_n^*(\vec{x}) H \zeta_n(\vec{x} - (\vec{R}' - \vec{R})) d\vec{x}. \quad (4.29)$$

Considerando novamente que $\vec{R}'' = \vec{R}' - \vec{R}$ chegamos à

$$E(\vec{k}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}} \sum_{\vec{R}''} e^{i\vec{k}\vec{R}''} \int \zeta_n^*(\vec{x}) H \zeta_n(\vec{x} - \vec{R}'') d\vec{x}. \quad (4.30)$$

Como o primeiro somatório vai até o limite N , podemos então escrever

$$E(\vec{k}) = \sum_{\vec{R}''} e^{i\vec{k}\vec{R}''} \int \zeta_n^*(\vec{x}) H \zeta_n(\vec{x} - \vec{R}'') d\vec{x}, \quad (4.31)$$

onde podemos, neste momento separar os diferentes termos do somatório acima, primeiramente, o primeiro termo desse somatório é calculado fazendo $\vec{R}'' = 0$, calculando então esse termo temos:

$$\int \zeta^*(\vec{x})H\zeta(\vec{x})d\vec{x}. \quad (4.32)$$

Sabendo que $H\zeta(\vec{x}) = \epsilon_s\zeta(\vec{x})$ encontramos

$$\int \zeta^*(\vec{x})H\zeta(\vec{x})d\vec{x} = \int \zeta^*(\vec{x})\epsilon_s\zeta(\vec{x})d\vec{x} = \epsilon_s, \quad (4.33)$$

onde concluímos que para $\vec{R}'' = 0$ encontramos ϵ_s , que é a energia do orbital s do átomo isolado. Como encontramos o primeiro termo do somatório 4.31, devemos fazer mais transformações, onde $\vec{R}'' = \vec{\eta} \neq 0$, logo 4.31 ficará

$$E(\vec{k}) = \epsilon_s + \sum_{\eta} e^{i\vec{k}\vec{\eta}} \int \zeta^*(\vec{x})H\zeta(\vec{x} - \vec{\eta})d\vec{x}, \quad (4.34)$$

e fazendo

$$\gamma(\eta) = \int \zeta^*(\vec{x})H\zeta(\vec{x} - \vec{\eta})d\vec{x}, \quad (4.35)$$

temos finalmente

$$E(\vec{k}) = \epsilon_s + \sum_{\eta} e^{i\vec{k}\vec{\eta}}\gamma(\eta), \quad (4.36)$$

onde a função $\gamma(\eta)$ terá valores que variam para cada material.

Podemos realizar o cálculo, em carácter de exemplo, do caso de um cristal unidimensional (onde é possível realizar o cálculo analítico), ou seja $\vec{\eta} = \pm a_0\hat{i}$ e $\vec{k} = k\hat{i}$, em que a_0 é a constante de rede, logo a solução para 4.36 fica

$$E(k) = \epsilon_s + \gamma(a_0) [e^{ika_0} + e^{-ika_0}] = \epsilon_s + 2\gamma(a_0)\cos(ka_0). \quad (4.37)$$

A equação 4.37 fornece a relação de dispersão de uma banda em um cristal unidimensional. Na figura 4.28 vemos também que 4.37 nos fornece a largura da banda, que no espaço de Bravais é equivalente à constante da rede a_0 e no espaço recíproco é igual à $\frac{2\pi}{a_0}$. De maneira análoga, se pode encontrar as expressões para cristais em duas e três dimensões.

Na natureza são mais comuns materiais que contém mais de uma espécie química na célula unitária. De maneira geral, usando o teorema de Bloch, podemos encontrar que

$$|H - E(\vec{k})I| = 0, \quad (4.38)$$

onde H é o matriz Hamiltoniana do sistema e I é a matriz identidade que acompanha a dimensão da Hamiltoniana. Para um caso simples de um material com dois átomos por célula unitária temos uma Hamiltoniana do tipo

$$H = \begin{pmatrix} H_{AA} - E & H_{AB} \\ H_{BA} & H_{BB} - E \end{pmatrix}. \quad (4.39)$$

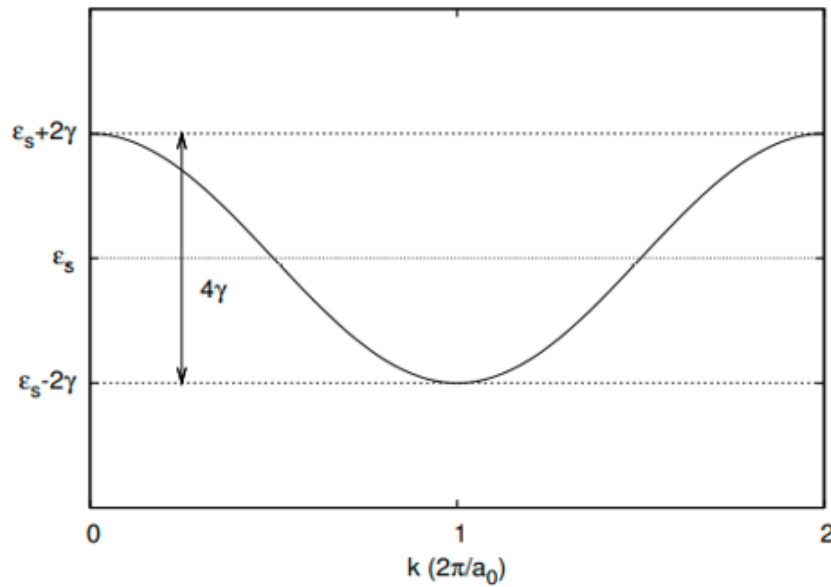


Figura 4.28 – Relação $E(k)$ para uma única banda em um cristal unidimensional

Fonte: Roy (2015, p. 24)

Sabendo que $H_{AB} = H_{BA}^*$ temos como solução da equação 2.27 a seguinte expressão

$$E(\vec{k}) = -\frac{1}{2}(H_{AA} + H_{BB}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(H_{AA} - H_{BB})^2 + |H_{AB}|^2}, \quad (4.40)$$

onde os elementos da Hamiltoniana podem ser encontrados utilizando o mesmos procedimentos que foram usados para a banda única (ROY, 2015)(DIAS, 2016).

4.2.1 Funções de Wannier

Como foi exposto através da equação 4.23, as funções de base nas quais foi construída toda a teoria até aqui exposta, são baseadas em orbitais atômicos, meio este que gera funções localizadas provenientes da estrutura cristalográfica. Porém existem outras maneiras de escolher estas funções de base e ainda assim, gerar funções bem localizadas, que é o caso das Funções de Wannier, que são funções oriundas das transformadas inversas de Fourier das funções de Bloch,. Essa transformação faz com que as bases das funções de Wannier pertençam ao espaço real e sejam ortonormais, diferentemente das funções de Bloch, que pertencem ao espaço recíproco. Existe um pacote computacional pós DFT, chamado Wannier90, que gera as funções de Wannier.

4.3 Equação Mestra de Lindblad

4.3.1 Operador de Evolução Temporal

Dado o estado no tempo t_0 como $|\alpha\rangle$ e um estado em um tempo posterior t dado por $|\alpha, t_0, t\rangle$ em que se cumpra o seguinte limite

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\alpha, t_0, t\rangle = |\alpha\rangle, \quad (4.41)$$

a mudança de estado será definido através de um operador $U(t, t_0)$ que será construído conforme a seguinte equação

$$|\alpha, t_0, t\rangle = U(t, t_0) |\alpha\rangle, \quad (4.42)$$

onde sabemos que

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t_0) |a'\rangle, \quad (4.43)$$

onde $|a'\rangle \langle a'|$ é chamado de operador de projeção e $c_{a'}$ são os coeficientes de expansão. Em um tempo posterior temos

$$|\alpha, t_0, t\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \alpha, t_0, t\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t) |a'\rangle, \quad (4.44)$$

onde claramente

$$\sum_{a'} |c_{a'}(t)|^2 = \sum_{a'} |c_{a'}(t_0)|^2, \quad (4.45)$$

pois as somas das probabilidades antes e depois tem que ser invariantes a um deslocamento temporal. Assumamos que $|\alpha, t_0, t\rangle$ e $|\alpha\rangle$ são normalizados, logo

$$\langle \alpha, t_0, t | \alpha, t_0, t\rangle = \langle \alpha | \alpha\rangle = 1, \quad (4.46)$$

como também temos

$$\langle \alpha | U^\dagger(t_0, t) U(t_0, t) | \alpha\rangle = \langle \alpha, t_0, t | \alpha, t_0, t\rangle, \quad (4.47)$$

onde concluímos que

$$U^\dagger(t_0, t) U(t_0, t) = 1, \quad (4.48)$$

portanto $U(t_0, t)$ é unitário e será chamado de operador de evolução temporal. Uma outra propriedade que será exigida de $U(t_0, t)$ é

$$U(t_0, t_2) = U(t_1, t_2) U(t_0, t_1) \rightarrow t_2 > t_1 > t_0. \quad (4.49)$$

Para um operador de evolução temporal infinitesimal temos

$$|\alpha, t_0, t_0 + dt\rangle = U(t_0, t_0 + dt) |\alpha, t_0\rangle, \quad (4.50)$$

em que o limite seja cumprido

$$\lim_{dt \rightarrow 0} U(t_0, t_0 + dt) = 1. \quad (4.51)$$

Suporemos que

$$U(t_0 + dt, t_0) = 1 - i\Omega dt, \quad (4.52)$$

onde Ω é Hermitiano. Substituindo 4.52 em 4.50 encontramos

$$|\alpha, t_0, t_0 + dt\rangle = (1 - i\Omega dt) |\alpha, t_0\rangle = |\alpha, t_0\rangle - i\Omega dt |\alpha, t_0\rangle. \quad (4.53)$$

Calculando o limite para $dt \rightarrow 0$ temos como resultado $|\alpha, t_0\rangle$, como esperado. Analisando agora o produto interno $U^\dagger(t_0, t_0 + dt)U(t_0, t_0 + dt)$, temos

$$(1 + i\Omega^\dagger dt)(1 - i\Omega dt) = 1. \quad (4.54)$$

onde iremos descartar termos de segunda ordem, como dt^2 . Como Ω tem dimensão de frequência e sabendo que o Hamiltoniano que é o gerador da evolução temporal, portanto $\Omega = \frac{H}{\hbar}$, com isso a equação 4.52 pode ser escrita como

$$U(t_0 + dt, t_0) = 1 - i\frac{H}{\hbar}dt. \quad (4.55)$$

Aplicando a propriedade 4.49 temos

$$U(t_0, t + dt) = U(t, t + dt)U(t_0, t) = \left(1 - i\frac{H}{\hbar}dt\right)U(t_0, t). \quad (4.56)$$

Subtraindo dos dois lados da equação acima pelo termo $U(t_0, t)$, rearranjando os termos e dividindo toda a equação por dt temos

$$\frac{U(t_0, t + dt) - U(t_0, t)}{dt} = -\frac{iH}{\hbar}U(t_0, t), \quad (4.57)$$

onde o lado esquerdo da equação acima é a definição de derivada, logo, usando essa informação e multiplicando toda a equação por $i\hbar$, encontramos

$$i\hbar \frac{\partial U(t_0, t)}{\partial t} = HU(t_0, t), \quad (4.58)$$

que é a equação de Schrödinger para o operador de evolução temporal. Multiplicando 4.58 por $|\alpha, t_0\rangle$, recuperamos a equação de Schrödinger habitual. Há três casos para a solução de 4.58:

- H é independente do tempo.
- H é dependente do tempo e $[H(t_1), H(t_2)] = 0$ para $t_1 \neq t_2$.
- H é dependente do tempo e $[H(t_1), H(t_2)] \neq 0$ para $t_1 \neq t_2$.

Nos preocupamos com o primeiro caso pois como veremos no capítulo 5, os Hamiltonianos tratados neste trabalho são do tipo independentes do tempo. Resolvendo 4.58, que é uma

equação diferencial parcial onde H é constante no tempo. Consideremos a solução para 4.58 como

$$U(t_0, t) = e^{\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}}, \quad (4.59)$$

onde pode-se provar que o operador acima é obtido usando a expansão de Taylor $\sum_n^{\infty} \frac{x^n}{n!} = e^x$, até termos de segunda ordem, onde

$$e^{\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}} = 1 + \frac{-iH(t-t_0)}{\hbar} + \frac{(-i)^2}{2} \left[\frac{H(t-t_0)}{\hbar} \right]. \quad (4.60)$$

Calculando a derivada temporal nos dois lados da igualdade de 4.60 temos

$$i \frac{\partial}{\partial t} e^{\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}} = \frac{H}{\hbar} \left(1 - \frac{iH}{\hbar} (t-t_0) \right), \quad (4.61)$$

lembrando que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left[1 - \frac{\frac{iH}{\hbar}(t-t_0)}{n} \right]^n = e^{\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}}, \quad (4.62)$$

comprovando assim que 4.59 é solução de 4.58 (NAPOLITANO; SAKURAI, 2013).

4.3.2 Sistemas Quânticos Fechados

Aplicando o Operador de Evolução Temporal na definição de matriz de densidade 2.14, podemos escrever

$$\rho(t) = \sum_n w_n |\psi_n(t)\rangle \langle \psi_n(t)| = \sum_n w_n U |\psi_n(0)\rangle \langle \psi_n(0)| U^\dagger = U \rho(0) U^\dagger. \quad (4.63)$$

Usando agora o resultado 4.59 com $t_0 = 0$, temos

$$\rho(t) = e^{\frac{-iHt}{\hbar}} \rho(0) e^{\frac{iHt}{\hbar}}. \quad (4.64)$$

Aplicando a derivada dos dois lados da equação e em seguida utilizando a regra do produto para derivação temos

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = HU \rho(0) U^\dagger - U \rho(0) U^\dagger H = [H, \rho(t)], \quad (4.65)$$

onde a equação 4.65 é chamada de Equação de Liouville, que é análoga a equação de Schrödinger, ou seja, também é uma equação de carácter dinâmico para sistemas quânticos. (NAPOLITANO; SAKURAI, 2013).

4.3.3 Sistemas Quânticos Abertos

Em Sistemas Quânticos Abertos, há interação do meio externo com o sistema, havendo evidentemente perda de coerência, que é a propriedade quântica responsável pela superposição de estados, que por sua vez, está totalmente ligada ao emaranhamento. Nestes

sistemas, a evolução temporal não é dada por um operador unitário, como é o caso de sistemas fechados, logo a equação que governa a Dinâmica desses tipos de sistemas não pode ser dado por 4.65. A equação que governa Sistemas Quânticos Abertos é a Equação Mestra de Lindblad, dada por

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H, \rho(t)] + \mathcal{L}(\rho(t)), \quad (4.66)$$

onde $\mathcal{L}(\rho(t))$ é chamado de Liouvilliano e é o termo responsável pela decoerência do sistema (acoplamento entre o sistema e o meio no qual o mesmo está introduzido). O Liouvilliano em sua forma geral, é dado por

$$\mathcal{L}(\rho(t)) = \sum_n \Gamma_n \left(L_n \rho(t) L_n^\dagger - \frac{1}{2} \{L_n L_n^\dagger, \rho(t)\} \right), \quad (4.67)$$

onde L_n são chamados de operadores de colapso, que são os operadores dos quais o ambiente se acopla ao sistema e Γ_n são as respectivas taxas. As soluções de 4.66 são obtidas através da um sistema de equações diferenciais acopladas, onde o objetivo é encontrar os elementos da matriz de densidade. Na maioria dos casos, exceto para o sistema de dois níveis, 4.66 só admite solução numérica, onde se pode adotar algum método de aproximação numérico, como o método Runge-Kutta. Há um empecilho nas soluções de 4.66, pois a matriz de densidade total (solução) está em função também do meio externo (que é tratado como um subsistema), logo deve-se encontrar uma maneira de se separar a matriz de densidade do sistema em que se deseja estudar suas propriedades, da matriz de densidade total. A matriz de densidade do sistema isolado (subsistema), é chamada de matriz de densidade reduzida.

4.3.4 Matriz de Densidade Reduzida

Antes de definir a matriz de densidade reduzida iremos introduzir um exemplo simples, e depois desenvolver o formalismo geral. Considerando o seguinte vetor de estado:

$$\psi_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_A 0_B\rangle + |1_A 1_B\rangle), \quad (4.68)$$

onde definiremos a matriz de densidade total do sistema A acoplado com o sistema B como

$$\rho_{AB} = |\psi_{AB}\rangle \langle \psi_{AB}|. \quad (4.69)$$

Substituindo na equação acima os seus respectivos vetores de estados, temos

$$\rho_{AB} = \frac{1}{2}(|0_A 0_B\rangle \langle 0_A 0_B| + |0_A 0_B\rangle \langle 1_A 1_B| + |1_A 1_B\rangle \langle 0_A 0_B| + |1_A 1_B\rangle \langle 1_A 1_B|). \quad (4.70)$$

Vamos definir a matriz de densidade reduzida do sistema A como

$$\rho_A = \text{tr}_B(\rho_{AB}), \quad (4.71)$$

onde tr_B é o traço parcial referente ao sistema B . Desenvolvendo 4.71, temos

$$\rho_A = \frac{1}{2}(tr_B(|0_A 0_B\rangle\langle 0_A 0_B|) + tr_B(|0_A 0_B\rangle\langle 1_A 1_B|) + tr_B(|1_A 1_B\rangle\langle 0_A 0_B|) + tr_B(|1_A 1_B\rangle\langle 1_A 1_B|)). \quad (4.72)$$

Como tr_B só atua em $|0_B\rangle$ e $|1_B\rangle$, logo

$$\rho_A = \frac{1}{2}(tr_B[|0_B\rangle\langle 0_B|] |0_A\rangle\langle 0_A| + tr_B[|0_B\rangle\langle 1_B|] |0_A\rangle\langle 1_A| + tr_B[|1_B\rangle\langle 0_B|] |1_A\rangle\langle 0_A| + tr_B[|1_B\rangle\langle 1_B|] |1_A\rangle\langle 1_A|). \quad (4.73)$$

Sabendo que o traço de uma matriz é a soma de sua diagonal principal, portanto podemos escrever

$$tr_B(|0_B\rangle\langle 0_B|) = 1, \quad (4.74)$$

pois $|0_B\rangle\langle 0_B|$ é uma matriz que possui apenas um elemento diferente de zero. Por exemplo, se chamarmos essa matriz de B , o elemento não nulo seria b_{00} e todos os outros elementos dessa matriz são iguais a zero, portanto

$$tr_B(|0_B\rangle\langle 1_B|) = 0. \quad (4.75)$$

Por ser uma matriz onde o único elemento que não é nulo está fora da diagonal principal, logo a soma de sua diagonal principal é zero, concluindo que

$$tr_B(|1_B\rangle\langle 1_B|) = 1, \quad (4.76)$$

e também

$$tr_B(|1_B\rangle\langle 0_B|) = 0. \quad (4.77)$$

Observe que temos apenas alguns casos em que o traço é igual a um, onde o bra é igual ao ket, e se forem diferentes o resultado é igual a zero, então podemos substituir esses traços por deltas de Kronecker, assim

$$tr_B(|b\rangle\langle b'|) = \langle b|b'\rangle = \delta_{b,b'}. \quad (4.78)$$

Substituindo este resultado em 4.73 temos

$$\rho_A = \frac{1}{2}(\langle 0_B|0_B\rangle |0_A\rangle\langle 0_A| + \langle 0_B|1_B\rangle |0_A\rangle\langle 1_A| + \langle 1_B|0_B\rangle |1_A\rangle\langle 0_A| + \langle 1_B|1_B\rangle |1_A\rangle\langle 1_A|), \quad (4.79)$$

que permanece em sua forma final

$$\rho_A = \frac{1}{2}(|0_A\rangle\langle 0_A| + |1_A\rangle\langle 1_A|). \quad (4.80)$$

Vamos agora definir o caso geral, partindo do seguinte vetor de estado

$$\psi = \sum_{a,b} c_{ab} |a,b\rangle, \quad (4.81)$$

onde temos

$$\rho_{AB} = |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (4.82)$$

Com isso podemos definir, usando os resultados anteriores que

$$\rho_A = \text{tr}_B(\rho_{AB}), \quad (4.83)$$

onde o procedimento de cálculo pode ser seguido como fora feito anteriormente. Observe que podemos fazer o mesmo procedimento para calcular ρ_b .

Com tudo o que foi dito anteriormente, podemos então concluir, que as matriz de densidade do subsistema A é

$$\rho_A = \sum_a c_a |a\rangle\langle a|, \quad (4.84)$$

e do subsistema B

$$\rho_B = \sum_b c_b |b\rangle\langle b|. \quad (4.85)$$

Então a matriz de densidade total pode ser escrita como

$$\rho_{AB} = |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{a,b} \sum_{a',b'} c_{a,b} c_{a',b'}^* |a,b\rangle\langle a',b'|. \quad (4.86)$$

Vamos agora calcular a matriz de densidade reduzida do subsistema A em relação à matriz de densidade total, dada por 4.86, assim:

$$\rho_A = \text{tr}_B(\rho_{AB}) = \text{tr}_B\left(\sum_{a,b} \sum_{a',b'} c_{a,b} c_{a',b'}^* |a,b\rangle\langle a',b'|\right). \quad (4.87)$$

O traço parcial é uma operação que pode ser introduzida nos somatórios, portanto a equação acima pode ser escrita como

$$\rho_A = \sum_{a,b} \sum_{a',b'} \text{tr}_B(c_{a,b} c_{a',b'}^* |a,b\rangle\langle a',b'|). \quad (4.88)$$

Como tr_B só atua em $|b\rangle$ e $\langle b'|$ temos

$$\rho_A = \sum_{a,b} \sum_{a',b'} c_{a,b} c_{a',b'}^* \text{tr}_B(|b\rangle\langle b'|) |a\rangle\langle a'|. \quad (4.89)$$

Aplicando a equação 4.78 na equação acima, podemos escrever

$$\rho_A = \sum_{a,b} \sum_{a',b'} c_{a,b} c_{a',b'}^* \delta_{b,b'} |a\rangle\langle a'|, \quad (4.90)$$

chegando na expressão

$$\rho_A = \sum_{a,a'} \sum_b c_{a,b} c_{a',b}^* |a\rangle\langle a'|. \quad (4.91)$$

Testando nossa solução geral em

$$\psi_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_A 0_B\rangle + |1_A 1_B\rangle), \quad (4.92)$$

onde $c_{00} = c_{11} = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Calculando a matriz de densidade total:

$$\rho_{AB} = c_{00}c_{00}^* |0_A 0_B\rangle\langle 0_A 0_B| + c_{00}c_{11}^* |0_A 0_B\rangle\langle 1_A 1_B| + c_{11}c_{00}^* |1_A 1_B\rangle\langle 0_A 0_B| + c_{11}c_{11}^* |1_A 1_B\rangle\langle 1_A 1_B|. \quad (4.93)$$

Aplicando diretamente 4.91 a 4.93 encontramos

$$\rho_A = c_{00}c_{00}^* |0_A\rangle\langle 0_A| + c_{11}c_{11}^* |1_A\rangle\langle 1_A|, \quad (4.94)$$

concluindo que

$$\rho_A = \frac{1}{2}(|0_A\rangle\langle 0_A| + |1_A\rangle\langle 1_A|), \quad (4.95)$$

que é a forma final da matriz de densidade reduzida do exemplo proposto.

5 Resultados

5.1 Qubits de Éxcitons Claros

5.1.1 Qubits de Éxcitons Claros

Éxcitons são quasipartículas formadas por um par elétron-buraco. O par elétron-buraco está unido em virtude da interação Coulombiana, em que o buraco tem carga positiva e o elétron tem carga negativa. Nesta seção, será visualizado o estudo de dois subsistemas excitônicos (um no vale K e outro no vale K'), onde cada subsistema terá dois níveis, logo o número de estados possíveis para o sistema total também serão quatro :

$$|0_K\rangle \otimes |0_{K'}\rangle = |0_K, 0_{K'}\rangle = |0\rangle \quad (5.1)$$

$$|0_K\rangle \otimes |1_{K'}\rangle = |0_K, 1_{K'}\rangle = |1\rangle \quad (5.2)$$

$$|1_K\rangle \otimes |0_{K'}\rangle = |1_K, 0_{K'}\rangle = |2\rangle \quad (5.3)$$

$$|1_K\rangle \otimes |1_{K'}\rangle = |1_K, 1_{K'}\rangle = |3\rangle, \quad (5.4)$$

onde $|0_K\rangle$ e $|1_K\rangle$ são o estado fundamental e o estado excitado no vale K , respectivamente, e $|0_{K'}\rangle$ e $|1_{K'}\rangle$ são os estados fundamentais e excitados no vale K' , respectivamente. Vamos considerar também que haverá interação de troca entre os éxcitons em distintos vales e consideraremos a interação da luz com o sistema. O Hamiltoniano que descreve o sistema, será (BORGES H et al., 2022)

$$H = H_X + H_{XL} + H_{\text{exch}}, \quad (5.5)$$

onde o primeiro termo do Hamiltoniano pode ser escrito como

$$H_X = \hbar [\omega_X S_{11}^K + \omega'_X S_{11}^{K'}], \quad (5.6)$$

que descreve o sistema excitônico sem interações. Os operadores excitônicos são

$$S_{11}^K = |1\rangle_K \langle 1| \otimes \mathbb{1}^{K'} \quad (5.7)$$

$$S_{11}^{K'} = \mathbb{1}^K \otimes |1\rangle_{K'} \langle 1|, \quad (5.8)$$

onde $\mathbb{1}^K$ e $\mathbb{1}^{K'}$ são os operadores identidades definidos nos espaços vetoriais dos éxcitons nos vales K e K' , respectivamente, $\hbar\omega_X = E_{0X}^K + E_Z$ e $\hbar\omega'_X = E_{0X}^{K'} - E_Z$, onde E_X^τ são a energia do éxciton do vale τ de campo zero e $E_Z = \frac{\mu}{2}g_b B$ é a energia de Zeeman, μ é o magneton de Bohr e $g_b = -4,25$ é o fator de Lande para éxcitons claros do material WSe₂ (FÖRSTE et al., 2020).

O segundo termo de (5.5) é a interação éxciton-laser, que é dada por

$$H_{XL} = \frac{\Omega_+}{2}(S_-^K \otimes \mathbb{1}^{K'})e^{i\omega_R t} + \frac{\Omega_-}{2}(\mathbb{1}^K \otimes S_-^{K'})e^{i\omega_L t} + h.c.,$$

onde Ω_\pm é a força do acoplamento óptico para o laser polarizado σ_\pm e $h.c$ representa o conjugado Hermitiano. O terceiro termo corresponde à contribuição da interação de troca, ou exchange, que é dado por

$$H_{\text{exch}} = \delta(S_+^K \otimes S_-^{K'} + S_-^K \otimes S_+^{K'}),$$

onde δ é o parâmetro de acoplamento da troca de Coulomb e $S_+^{K,K'} = |1\rangle_{K,K'} \langle 0|_{K,K'}$ e $S_-^{K,K'} = |0\rangle_{K,K'} \langle 1|_{K,K'}$. O Hamiltoniano 5.5 em sua forma matricial pode ser escrita na forma($\hbar = 1$)

$$H = \begin{pmatrix} \omega'_X + \omega_X & \frac{\Omega_+(e^{-it\omega_R})}{2} & \frac{\Omega_-(e^{-it\omega_L})}{2} & 0 \\ \frac{\Omega_+(e^{it\omega_R})}{2} & \omega_X & \delta & \frac{\Omega_-(e^{-it\omega_L})}{2} \\ \frac{\Omega_-(e^{it\omega_L})}{2} & \delta & \omega'_X & \frac{\Omega_+(e^{-it\omega_R})}{2} \\ 0 & \frac{\Omega_-(e^{it\omega_L})}{2} & \frac{\Omega_+(e^{it\omega_R})}{2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.9)$$

Com este Hamiltoniano, podemos agora calcular a dinâmica do sistema usando a equação mestre de Lindblad

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \frac{-i}{\hbar}[H, \rho(t)] + \mathcal{L}(\rho), \quad (5.10)$$

onde $\rho(t)$ é a matriz densidade do sistema, $\mathcal{L}(\rho) = \sum_n [\frac{1}{2}[2L_n\rho(t)L_n^\dagger - \rho(t)]L_n^\dagger L_n - L_n^\dagger L_n\rho(t)]$ e L_n são operadores de colapso, que no nosso caso, usaremos a seguinte coleção de operadores:

$$L_{10} = \sqrt{\Gamma_{10}} |0\rangle \langle 1| \quad (5.11)$$

$$L_{20} = \sqrt{\Gamma_{20}} |0\rangle \langle 2| \quad (5.12)$$

$$L_{21} = \sqrt{\Gamma_{21}} |1\rangle \langle 2| \quad (5.13)$$

$$L_{30} = \sqrt{\Gamma_{30}} |0\rangle \langle 3| \quad (5.14)$$

$$L_{31} = \sqrt{\Gamma_{31}} |1\rangle\langle 3| \quad (5.15)$$

$$L_{32} = \sqrt{\Gamma_{32}} |2\rangle\langle 3| \quad (5.16)$$

$$L_{10}^\dagger L_{10} = \sqrt{\Gamma_{10}}\sqrt{\Gamma_{10}} |1\rangle\langle 0|0\rangle\langle 1| = \Gamma_{10} |1\rangle\langle 1| \quad (5.17)$$

$$L_{20}^\dagger L_{20} = \sqrt{\Gamma_{20}}\sqrt{\Gamma_{20}} |2\rangle\langle 0|0\rangle\langle 2| = \Gamma_{20} |2\rangle\langle 2| \quad (5.18)$$

$$L_{21}^\dagger L_{21} = \sqrt{\Gamma_{21}}\sqrt{\Gamma_{21}} |2\rangle\langle 1|1\rangle\langle 2| = \Gamma_{20} |2\rangle\langle 2| \quad (5.19)$$

$$L_{30}^\dagger L_{30} = \sqrt{\Gamma_{30}}\sqrt{\Gamma_{30}} |3\rangle\langle 0|0\rangle\langle 3| = \Gamma_{30} |3\rangle\langle 3| \quad (5.20)$$

$$L_{31}^\dagger L_{31} = \sqrt{\Gamma_{31}}\sqrt{\Gamma_{31}} |3\rangle\langle 1|1\rangle\langle 3| = \Gamma_{31} |3\rangle\langle 3| \quad (5.21)$$

$$L_{32}^\dagger L_{32} = \sqrt{\Gamma_{32}}\sqrt{\Gamma_{32}} |3\rangle\langle 2|2\rangle\langle 3| = \Gamma_{32} |3\rangle\langle 3|. \quad (5.22)$$

Os operadores representam o decaimento excitônico de um estado para outro, respeitando que sempre que os decaimentos ocorram de um estado de maior energia para um estado de menor energia. Esses operadores são responsáveis pelas relaxações do sistema, ou seja, o segundo termo de 5.10 é responsável pelo acoplamento entre o ambiente e o sistema, vindo assim a destruir a coerência, que é uma propriedade fundamental nos sistemas quânticos. Substituindo em $\mathcal{L}(\rho)$ as devidas contribuições de espalhamento, temos sua forma explícita, dada por:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\rho) = & \frac{1}{2}[2L_{10}\rho(t)L_{10}^\dagger - \rho(t)]L_{10}^\dagger L_{10} - L_{10}^\dagger L_{10}\rho(t) + \frac{1}{2}[2L_{20}\rho(t)L_{20}^\dagger - \rho(t)]L_{20}^\dagger L_{20} - L_{20}^\dagger L_{20}\rho(t) + \\ & \frac{1}{2}[2L_{21}\rho(t)L_{21}^\dagger - \rho(t)]L_{21}^\dagger L_{21} - L_{21}^\dagger L_{21}\rho(t) + \frac{1}{2}[2L_{30}\rho(t)L_{30}^\dagger - \rho(t)]L_{30}^\dagger L_{30} - L_{30}^\dagger L_{30}\rho(t) + \\ & \frac{1}{2}[2L_{31}\rho(t)L_{31}^\dagger - \rho(t)]L_{31}^\dagger L_{31} - L_{31}^\dagger L_{31}\rho(t) + \frac{1}{2}[2L_{32}\rho(t)L_{32}^\dagger - \rho(t)]L_{32}^\dagger L_{32} - L_{32}^\dagger L_{32}\rho(t). \end{aligned} \quad (5.23)$$

Substituindo nossos operadores na equação acima temos

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(\rho) = & \Gamma_{10} |0\rangle \langle 1| \rho |1\rangle \langle 0| - \frac{1}{2}(\Gamma_{10} |1\rangle \langle 1| \rho + \rho \Gamma_{10} |1\rangle \langle 1|) + \Gamma_{20} |0\rangle \langle 2| \rho |2\rangle \langle 0| - \frac{1}{2}(\Gamma_{20} |2\rangle \langle 2| \rho \\
& + \rho \Gamma_{20} |2\rangle \langle 2|) + \Gamma_{21} |1\rangle \langle 2| \rho |2\rangle \langle 1| - \frac{1}{2}(\Gamma_{21} |2\rangle \langle 2| \rho + \rho \Gamma_{21} |2\rangle \langle 2|) + \Gamma_{30} |0\rangle \langle 3| \rho |3\rangle \langle 0| - \frac{1}{2}(\Gamma_{30} |3\rangle \langle 3| \rho \\
& + \rho \Gamma_{30} |3\rangle \langle 3|) + \Gamma_{31} |1\rangle \langle 3| \rho |3\rangle \langle 1| \\
& - \frac{1}{2}(\Gamma_{31} |3\rangle \langle 3| \rho + \rho \Gamma_{31} |3\rangle \langle 3|) + \Gamma_{32} |2\rangle \langle 3| \rho |3\rangle \langle 2| - \frac{1}{2}(\Gamma_{32} |3\rangle \langle 3| \rho + \rho \Gamma_{32} |3\rangle \langle 3|). \quad (5.24)
\end{aligned}$$

Sabendo que $\langle 1| \rho |1\rangle$, $\langle 2| \rho |2\rangle$ e $\langle 3| \rho |3\rangle$ são os elementos da matriz de densidade ρ_{11} , ρ_{22} e ρ_{33} , respectivamente, podemos escrever a relação acima como

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(\rho) = & \Gamma_{10} |0\rangle \langle 0| \rho_{11} - \frac{1}{2}(\Gamma_{10} |1\rangle \langle 1| \rho + \rho \Gamma_{10} |1\rangle \langle 1|) + \Gamma_{20} |0\rangle \langle 0| \rho_{22} - \frac{1}{2}(\Gamma_{20} |2\rangle \langle 2| \rho + \rho \Gamma_{20} |2\rangle \langle 2|) \\
& + \Gamma_{21} |1\rangle \langle 1| \rho_{22} - \frac{1}{2}(\Gamma_{21} |2\rangle \langle 2| \rho + \rho \Gamma_{21} |2\rangle \langle 2|) + \Gamma_{30} |0\rangle \langle 0| \rho_{33} - \frac{1}{2}(\Gamma_{30} |3\rangle \langle 3| \rho + \rho \Gamma_{30} |3\rangle \langle 3|) \\
& + \Gamma_{31} |1\rangle \langle 1| \rho_{33} - \frac{1}{2}(\Gamma_{31} |3\rangle \langle 3| \rho + \rho \Gamma_{31} |3\rangle \langle 3|) + \Gamma_{32} |2\rangle \langle 2| \rho_{33} - \frac{1}{2}(\Gamma_{32} |3\rangle \langle 3| \rho + \rho \Gamma_{32} |3\rangle \langle 3|). \quad (5.25)
\end{aligned}$$

Podemos escrever a equação acima na forma matricial, assim:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(\rho) = & \begin{pmatrix} \Gamma_{10}\rho_{11} + \Gamma_{20}\rho_{22} + \Gamma_{30}\rho_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Gamma_{21}\rho_{22} - \Gamma_{10}\rho_{11} + \Gamma_{31}\rho_{33} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\rho_{22}(\Gamma_{20} + \Gamma_{21}) + \Gamma_{32}\rho_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\rho_{33}(\Gamma_{30} + \Gamma_{31} + \Gamma_{32}) \end{pmatrix} + \\
& \begin{pmatrix} 0 & -\rho_{01}\frac{1}{2}\Gamma_{10} & -\rho_{02}\frac{1}{2}(\Gamma_{20} + \Gamma_{21}) & -\rho_{03}\frac{1}{2}(\Gamma_{30} + \Gamma_{31} + \Gamma_{32}) \\ -\rho_{10}\frac{1}{2}\Gamma_{10} & 0 & -\rho_{12}\frac{1}{2}(\Gamma_{10} + \Gamma_{20} + \Gamma_{21}) & -\rho_{13}\frac{1}{2}(\Gamma_{10} + \Gamma_{30} + \Gamma_{31} + \Gamma_{32}) \\ -\rho_{20}\frac{1}{2}(\Gamma_{20} + \Gamma_{21}) & -\rho_{21}\frac{1}{2}(\Gamma_{10} + \Gamma_{20} + \Gamma_{21}) & 0 & -\rho_{23}\frac{1}{2}(\Gamma_{20} + \Gamma_{21} + \Gamma_{30} + \Gamma_{31} + \Gamma_{32}) \\ -\rho_{30}\frac{1}{2}(\Gamma_{30} + \Gamma_{31} + \Gamma_{32}) & -\rho_{31}\frac{1}{2}(\Gamma_{10} + \Gamma_{30} + \Gamma_{31} + \Gamma_{32}) & -\rho_{32}\frac{1}{2}(\Gamma_{20} + \Gamma_{21} + \Gamma_{30} + \Gamma_{31} + \Gamma_{32}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.26)
\end{aligned}$$

Se fizermos $\frac{1}{2}\Gamma_{10} = \gamma_1$, $\frac{1}{2}(\Gamma_{20} + \Gamma_{21}) = \gamma_2$, $\frac{1}{2}(\Gamma_{10} + \Gamma_{20} + \Gamma_{21}) = \gamma_3$, $\frac{1}{2}(\Gamma_{30} + \Gamma_{31} + \Gamma_{32}) = \gamma_4$, $\frac{1}{2}(\Gamma_{10} + \Gamma_{30} + \Gamma_{31}) + \Gamma_{32} = \gamma_5$ e $\frac{1}{2}(\Gamma_{20} + \Gamma_{21} + \Gamma_{30} + \Gamma_{31} + \Gamma_{32}) = \gamma_6$, na segunda matriz, podemos escrever

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(\rho) = & \begin{pmatrix} \Gamma_{10}\rho_{11} + \Gamma_{20}\rho_{22} + \Gamma_{30}\rho_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Gamma_{21}\rho_{22} - \Gamma_{10}\rho_{11} + \Gamma_{31}\rho_{33} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\rho_{22}(\Gamma_{20} + \Gamma_{21}) + \Gamma_{32}\rho_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\rho_{33}(\Gamma_{30} + \Gamma_{31} + \Gamma_{32}) \end{pmatrix} + \\
& \begin{pmatrix} 0 & -\rho_{01}\gamma_1 & -\rho_{02}\gamma_2 & -\rho_{03}\gamma_4 \\ -\rho_{10}\gamma_1 & 0 & -\rho_{12}\gamma_2 & -\rho_{13}\gamma_5 \\ -\rho_{20}\gamma_2 & -\rho_{21}\gamma_3 & 0 & -\rho_{23}\gamma_6 \\ -\rho_{30}\gamma_4 & -\rho_{31}\gamma_5 & -\rho_{32}\gamma_6 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.27)
\end{aligned}$$

onde a primeira matriz é chamada de matriz de decaimento e a segunda é chamada de matriz de defasagem. Com posse do Liouvilliano e do Hamiltoniano do sistema podemos calcular

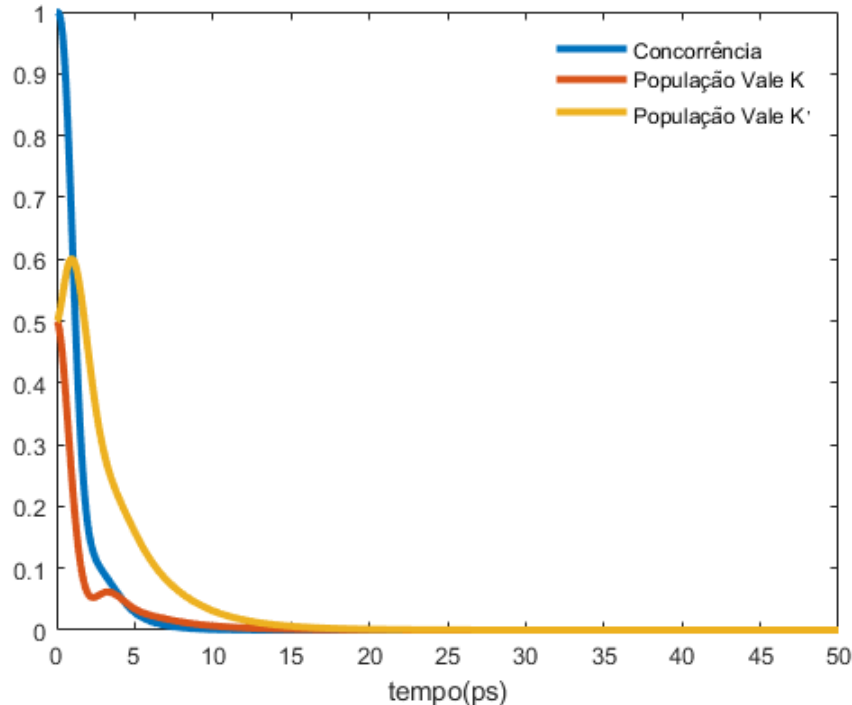


Figura 5.29 – Populações Excitônicas e Concorrência em função do tempo. Neste gráfico foram usados os seguintes parâmetros: $\Omega_+ = \Omega_- = 0.1\text{meV}$, $\delta = 0.5\text{meV}$, $\Gamma_{10} = \Gamma_{20} = 1\text{meV}$, $\Gamma_{21} = \Gamma_{30} = \Gamma_{31} = \Gamma_{32} = 0$.

a dinâmica excitônica usando 5.10, onde devemos resolver um sistema de 16 equações diferenciais temporais acopladas, onde cada uma das soluções equivale a um elemento da matriz de densidade. Após termos resolvido o sistema numericamente, podemos enfim calcular a concorrência usando 2.56.

Note que na Fig.5.29 que a concorrência cai abruptamente, juntamente com as populações (termos da diagonal principal da matriz de densidade) devido à forte interação do sistema quântico com o meio externo, fazendo com que a decoerência seja predominante. Observando ainda a figura 5.29 vemos que o estado inicial utilizado é um estado de Bell, tendo em vista que a concorrência parte do máximo permitido, e vemos que mesmo com esse estado privilegiado para o emaranhamento do sistema excitônico não fora suficiente para se ter soluções estacionárias não nulas. Analisaremos na seção seguinte que o acréscimo de uma cavidade ao sistema exerce um papel fundamental contra os mecanismos de decoerência. Vemos na Fig.5.30 que a concorrência pode ser alterada variando o valor do exchange. Essa propriedade será mais usada no próximo sistema a ser estudado, pois se viu que os efeitos de decoerência em todos os casos estudados no presente sistema sempre derrubam a concorrência, mostrando que o mesmo deverá ser alterado para que possamos alcançar estados estacionários não nulos.

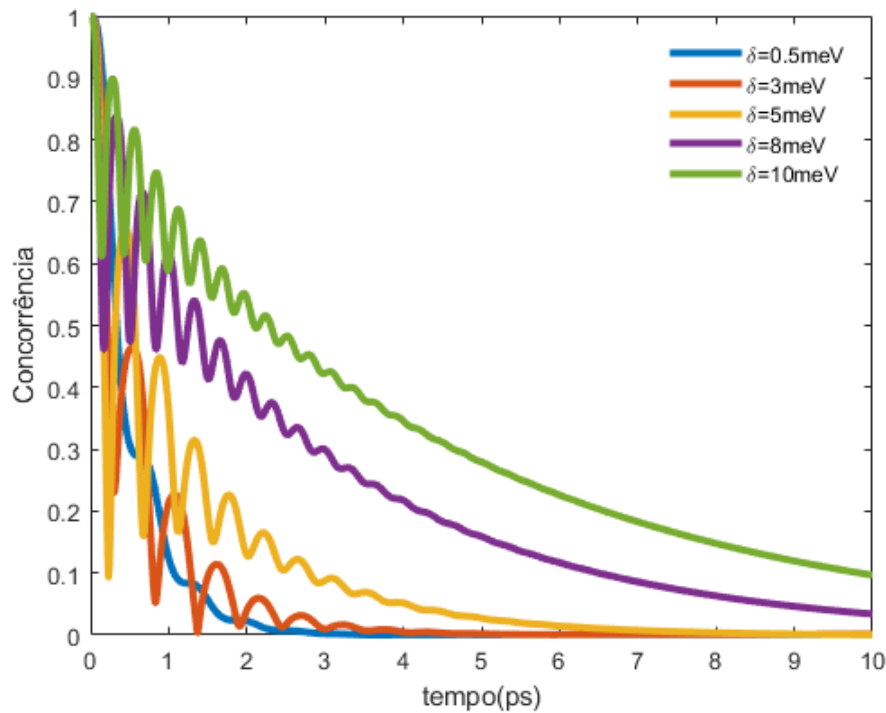


Figura 5.30 – Concorrência em função do tempo com diferentes valores de δ . Neste gráfico foram usados os seguintes parâmetros: $g_1 = g_2 = 0.1\text{meV}$, $\Gamma_{10} = \Gamma_{20} = 1\text{meV}$ e $\Gamma_{21} = \Gamma_{30} = \Gamma_{31} = \Gamma_{32} = 0$.

5.1.2 Qubits de Éxcitons Claros em uma Nanocavidade

Traremos nessa seção o estudo de éxcitons claros localizados em diferentes vales, acoplados por dois modos de cavidade. Consideramos uma monocamada de WSe_2 integrada em uma cavidade óptica bimodal de simetria circular. Os vetores de base que formam o sistema descrito acima são do tipo $|c_1, c_2, e_1, e_2\rangle$, onde $|e_1\rangle$ e $|e_2\rangle$ são os estados dos éxcitons nos vales K e K' (RUAN et al., 2022), respectivamente e podem valer em ambos os vales, $|0_{K,K'}\rangle$ e $|1_{K,K'}\rangle$ e $|c_1\rangle$ e $|c_2\rangle$ são os estados de Fock para os modos da cavidade de polarização R (direita) e L (esquerda), respectivamente e podem valer em ambos os modos $|0_{R,L}\rangle$ e $|1_{R,L}\rangle$. A base do estado de Fock é numericamente truncada para qualquer valor esperado relevante e não muda quando o tamanho da base aumenta em um, extrapolando o limite acima estabelecido, isto é, é permitido no máximo um fóton criando éxcitons em cada um dos vales. Podemos notar que através da base que foi estabelecida e dentro dos limites dos estados do sistema excitônico e da cavidade, que se terá uma coleção de 16 estados possíveis. Diferente do sistema anterior, não poderemos explicitar matricialmente o Hamiltoniano e o Liouvilliano, como também os vetores das bases que o formam, por se tratar de matrizes de ordem 16, deixando assim inviável sua exposição explícita, logo usaremos a notação de operadores, que é mais compacta. O Hamiltoniano do sistema sob a aproximação de onda girante (RWA) é descrito por (BORGES H et al., 2022)

$$H = H_X + H_c + H_I + H_{\text{exch}}, \quad (5.28)$$

onde o primeiro termo da Eq. 5.28 é o Hamiltoniano proveniente dos éxcitons, dado por

$$H_X = \frac{\hbar}{2} [\omega_X S_{11}^K + \omega'_X S_{11}^{K'}], \quad (5.29)$$

onde

$$S_{11}^K = \mathbb{1}^R \otimes \mathbb{1}^L (|1\rangle_K \langle 1|_K) \otimes \mathbb{1}^{K'} \quad (5.30)$$

e

$$S_{11}^{K'} = \mathbb{1}^R \otimes \mathbb{1}^L \otimes \mathbb{1}^K \otimes (|1\rangle_{K'} \langle 1|_{K'}), \quad (5.31)$$

em que $\mathbb{1}^R$ e $\mathbb{1}^L$, $\mathbb{1}^K$ e $\mathbb{1}^{K'}$ são os operadores identidades definidos nos espaços vetoriais dos modos da cavidade R e L e dos éxcitons nos vales K e K' , respectivamente. (FERNÁNDEZ, 2016). Além disso, as energias $\hbar\omega_X = E_{0X}^K + E_Z$ e $\hbar\omega'_X = E_{0X}^{K'} - E_Z$, onde E_X^τ são a energia do éxciton do vale τ de campo zero e $E_Z = \frac{\mu}{2} g_b B$ é a energia de Zeeman, μ é o magneton de Bohr e g_b é o fator de Lande para éxcitons claros do material WSe₂ (FÖRSTE et al., 2020). O Hamiltoniano da cavidade bimodal é

$$H_c = \hbar\omega_a a^\dagger a + \hbar\omega_b b^\dagger b, \quad (5.32)$$

onde os modos de cavidade são descritos pelos operadores bosônicos $a^\dagger a$ e $b^\dagger b$. Os operadores a^\dagger (b^\dagger) e a (b) criam e aniquilam éxcitons no vale K (K') respectivamente, e suas formas explícitas (em formato de operadores) são

$$a = (|0\rangle_R \langle 1|_R) \otimes \mathbb{1}^L \otimes \mathbb{1}^K \otimes \mathbb{1}^{K'} \quad (5.33)$$

e

$$b = \mathbb{1}^R \otimes (|0\rangle_L \langle 1|_L) \otimes \mathbb{1}^K \otimes \mathbb{1}^{K'}. \quad (5.34)$$

A frequência da cavidade de cada modo é dada por ω_a e ω_b . Para satisfazer as regras de seleção óptica, o modo a (b) é circular à direita (R) (esquerda (L)). O terceiro termo de (5.28) é a interação éxciton-cavidade, que pode ser escrita como

$$H_I = g_+ [a^\dagger (\mathbb{1}^R \otimes \mathbb{1}^L \otimes S_-^K \otimes \mathbb{1}^{K'})] + g_- [b^\dagger (\mathbb{1}^R \otimes \mathbb{1}^L \otimes \mathbb{1}^K \otimes S_-^{K'})] + h.c., \quad (5.35)$$

onde, $g_{+(-)}$ representa a força de acoplamento entre os éxcitons claros nos vales K (K') com os modos da cavidade, $h.c$ significa o conjugado Hermitiano, $S_+^{K,K'} = |1\rangle_{K,K'} \langle 0|_{K,K'}$ e $S_-^{K,K'} = |0\rangle_{K,K'} \langle 1|_{K,K'}$. Finalmente, o último termo de (5.28) refere-se à interação Coulombiana de exchange entre os éxcitons claros, dado por

$$H_{\text{exch}} = \frac{\delta}{2} e^{-2i\theta} (\mathbb{1}^R \otimes \mathbb{1}^L \otimes S_+^K \otimes S_-^{K'}) + \frac{\delta}{2} e^{2i\theta} (\mathbb{1}^R \otimes \mathbb{1}^L \otimes S_-^K \otimes S_+^{K'}), \quad (5.36)$$

onde θ é o ângulo no plano polar xy .

A dinâmica é estudada por meio do operador da matriz de densidade $\rho(t)$ do sistema composto formado pelos dois éxcitons claros nos seus respectivos vales e a cavidade bimodal. Sua evolução temporal é dada pela Equação Mestra de Lindblad 4.66, onde o Liouvilliano $\mathcal{L}(\rho) = \mathcal{L}_{K(K')} + \mathcal{L}_{\text{cav}}$ descreve as contribuições da decoerência para à dinâmica, sendo $\mathcal{L}_{K(K')}$ o operador para decoerência excitônica, onde usaremos os seguintes operadores de colapso $S_-^{K(K')}$ e $S_+^{K(K')}$, de forma que

$$\mathcal{L}_{K(K')} = \frac{\Gamma_X}{2} \left[2S_-^{K(K')} \rho S_+^{K(K')} - \rho S_+^{K(K')} S_-^{K(K')} - S_+^{K(K')} S_-^{K(K')} \rho \right], \quad (5.37)$$

e \mathcal{L}_{cav} é o contribuição para a decoerência do campo da cavidade que pode ser expresso como

$$\mathcal{L}_{\text{cav}} = \frac{\kappa}{2} (2a\rho a^\dagger - \rho a^\dagger a - a^\dagger a \rho) + \frac{\kappa}{2} (2b\rho b^\dagger - \rho b^\dagger b - b^\dagger b \rho),$$

onde κ é sua respectiva taxa. Dentro deste contexto, exploraremos a dinâmica do sistema dissipativo e analisaremos o comportamento dinâmico do emaranhamento quântico entre qubits excitônicos. Para este propósito, consideraremos dois tipos de estados iniciais, o primeiro é

$$|\Psi_A\rangle = |\psi_X\rangle \otimes |\psi_f^E\rangle, \quad (5.38)$$

em que o subsistema excitônico está em um estado não correlacionado (não emaranhado) $|\psi_X\rangle = |1\rangle_K \otimes |0\rangle_{K'}$, enquanto que o campo está em um estado linearmente polarizado, que corresponde a um estado de Bell, que é maximamente emaranhado (TOKMAN; WANG; BELYANIN, 2015), $|\psi_f^E\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_R |1\rangle_L + |1\rangle_R |0\rangle_L)$. O segundo estado inicial que consideramos é

$$|\Psi_B\rangle = |\psi_X^E\rangle \otimes |\psi_f\rangle, \quad (5.39)$$

onde os éxcitons estão em um estado emaranhado, $|\psi_X^E\rangle = C_1 |0\rangle_K |1\rangle_{K'} + C_2 |1\rangle_K |0\rangle_{K'}$, e o campo é dado por um estado de Fock, $|\psi_f\rangle = |0\rangle_R |1\rangle_L$. Aqui, $|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$, se $B = 0$ e quando $E_{0X}^K = E_{0X}^{K'}$, então $C_1 = C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

Vamos definir a dessintonia de energia entre os modos do campo e os éxcitons como

$$\Delta_K = E_{0X}^K - \hbar\omega_a \quad (5.40)$$

e

$$\Delta_{K'} = E_{0X}^{K'} - \hbar\omega_b. \quad (5.41)$$

Se as energias de dois modos são estritamente iguais, então $\Delta_K = \Delta_{K'}$. No entanto, as imperfeições da simetria da cavidade podem modificar a energia dos modos levando a uma pequena diferença entre as dessintonias no vale K e K' , ou seja, $\Delta_K \neq \Delta_{K'}$. Em nosso sistema, os dois estados do éxciton são acoplados indiretamente via campo da cavidade, servindo como um sistema de dois qubits. O emaranhamento de dois qubits é quantificado por meio da concorrência 2.56 que pode ser obtida da matriz de densidade reduzida dos éxcitons ρ_X . Essa matriz de densidade reduzida carrega apenas a dinâmica dos éxcitons considerando

os efeitos de todas as interações contidas no Hamiltoniano total. Obtemos ρ_X calculando o traço parcial da matriz da matriz de densidade geral do sistema, como foi realizado em 4.91 logo temos (NIELSEN; CHUANG, 2000)

$$\rho_X \equiv \text{Tr}_c(\rho_S), \quad (5.42)$$

onde o índice c se refere às variáveis do campo da cavidade. Para calcular a concorrência excitônica, devemos resolver a Equação Mestra de Lindblad, considerando o Hamiltoniano completo 5.28, levando em consideração à decoerência excitônica 5.37 e de perda de cavidade 5.38. Uma vez obtida a matriz de densidade total do sistema $\rho_S(t)$ (matriz essa que é obtida após a solução de um sistema de 256 equações diferenciais acopladas, onde cada equação equivale a um elemento da matriz de densidade), aplicamos a operação de traço parcial 5.42 para obter a matriz de densidade reduzida do sistema excitônico, ρ_X . Em seguida, calculamos a concorrência $C(\rho)$, que deve nos informar sobre o emaranhamento resultante das múltiplas interações dos éxcitons com os campos da cavidade. Também avaliamos a concorrência estacionária, $C(\rho)(t \rightarrow \infty)$, que é obtida para tempos suficientemente longos, onde não se observa variação temporal da concorrência (BORGES H et al., 2022).

O resultado baseado em dinâmica unitária, assumindo que o estado inicial do campo é um estado de Bell ($C(\rho) = 1$), onde desligamos todos os canais de espalhamento que causam a decoerência do campo e dos éxcitons ($\mathcal{L}(\rho(t)) = 0$) pode ser observado na figura 5.31. Como não foram considerados mecanismos de decoerência, verificamos que a concorrência oscila periodicamente e atinge seu valor máximo em momentos bem definidos.

Esse comportamento indica que, em dinâmica unitária, há uma efetiva transferência de emaranhamento entre o campo quântico e o subsistema do éxciton. Vamos demonstrar que essa transferência também pode ser efetiva em dinâmicas não-unitárias ($\mathcal{L}(\rho(t)) \neq 0$) e leva ao emaranhamento excitônico estacionário. A menos que mencionado explicitamente, os seguintes parâmetros são usados nos cálculos: $\delta = \delta_0 = 0.6\text{meV}$ (MOLAS et al., 2019)(ROBERT et al., 2017), acoplamento de modos de cavidade com os éxcitons $g_+ = g_- = 0.1\text{THz}$, e as taxas de perda $\Gamma_K = \Gamma_{K'} = 1\text{THz}$ (DE; LAKE, 2017), $\kappa = \kappa_0 = 0,243\text{THz}$ (DE; LAKE, 2017). A concorrência estacionária é mostrada na Figura 5.32, $C(\rho)(t \rightarrow \infty)$ em função das dessintonias Δ_K e $\Delta_{K'}$ em $B = 0$ para os dois estados iniciais (a) $|\Psi_A\rangle$ e (b) $|\Psi_B\rangle$.

Dois recursos interessantes são exibidos: Um é o impacto do estado inicial na concorrência, e a outra é a dependência da concorrência em relação às dessintonias ($\Delta_K, \Delta_{K'}$). Para o sistema com dessintonia ressonante ($\Delta_K = \Delta_{K'}$), se o sistema evolui do estado inicial $|\Psi_A\rangle$, a concorrência aumenta inicialmente e depois oscila com o tempo, finalmente satura em seu valor máximo de $C(\rho) \sim 0.3$. Em contraste, se o sistema está no estado inicial $|\Psi_B\rangle$, a concorrência tem uma queda em $\Delta_K = \Delta_{K'}$ e um valor estacionário de $C(\rho) \sim 0,9$ na região ampla da figura onde $\Delta_K \neq \Delta_{K'}$. A física embutida na figura 5.32 pode ser entendida da seguinte forma: Se $\Delta_K = \Delta_{K'}$, então o acoplamento entre os éxcitons e os modos de cavidade é grande. Para o sistema com um estado inicial $|\Psi_A\rangle$, o subsistema dos fótons maximamente

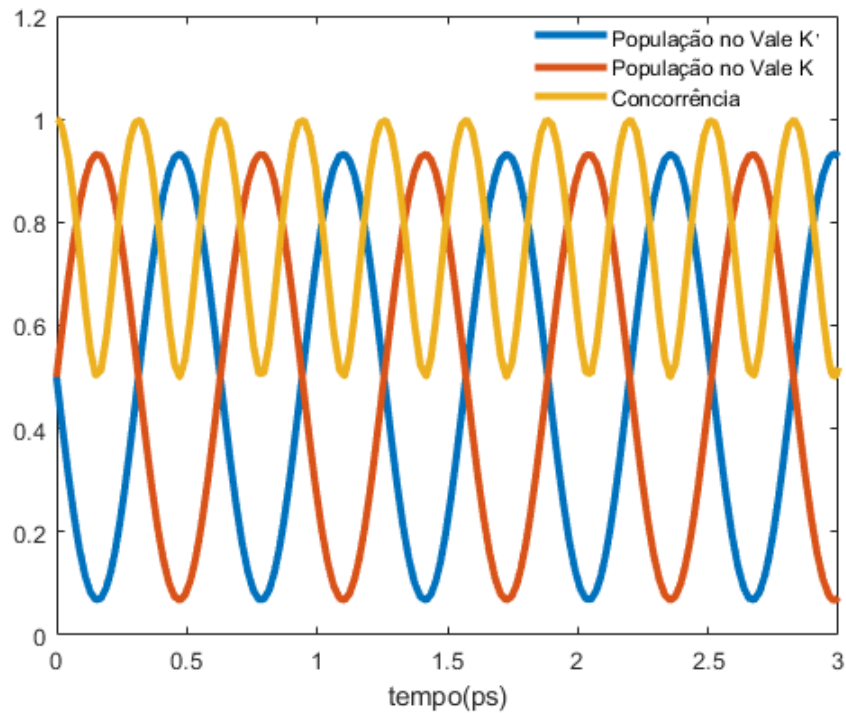


Figura 5.31 – Populações nos vales K(K') e Concorrência em função do tempo usando o estado inicial $|\Psi_B\rangle$. Neste cálculo foi considerado todos os tempos de decoerência iguais a zero ($\mathcal{L}[\rho(t)] = 0$)

emaranhados transfere parte de seu emaranhamento para os éxcitons, levando a um aumento da emaranhamento do sistema excitônico. Este comportamento é mais pronunciado para $\Delta_K < 2\text{meV}$. Por outro lado, para o sistema com um estado excitônico inicialmente emaranhado $|\Psi_B\rangle$, ele pode transferir uma fração de seu emaranhamento para o subsistema dos fótons. Isso causa uma diminuição abrupta no emaranhamento excitônico na região definida por $\Delta_K = \Delta_{K'}$ onde o acoplamento éxciton-campo é mais eficiente. A oscilação apreciável da concorrência dos éxcitons na escala de tempo de picossegundos evidencia a transferência de emaranhamento entre os dois subsistemas. Além disso, os canais de espalhamento provenientes da decoerência provoca um comportamento assintótico das populações excitônicas, estacionando o emaranhamento no intervalo $C(\rho) < 0.3$.

As Figuras 5.33 e 5.34 mostram a evolução temporal da concorrência dos qubits de éxcitons para diferentes valores da força de interação de troca elétron-buraco (δ). As curvas nos gráficos 5.33 (a) e (b) são obtidas assumindo que $|\Psi_A\rangle$ é o estado inicial, enquanto que nos gráficos 5.34 (a) e (b) mostram as concorrências com um estado de Bell para os éxcitons, onde portanto, o estado inicial é $|\Psi_B\rangle$. Em 5.33, para os sistemas com dessintonias ressonantes ($\Delta_K = \Delta_{K'}$) e não ressonantes ($\Delta_K \neq \Delta_{K'}$), a concorrência não exibe uma diferença observável. Nota-se que δ só desempenha um papel em estágios iniciais da dinâmica da concorrência. Com o passar do tempo, a concorrência evolui para um estágio estacionário devido à decoerência. Em ambos os casos, a concorrência estacionária é de cerca de 0,25.

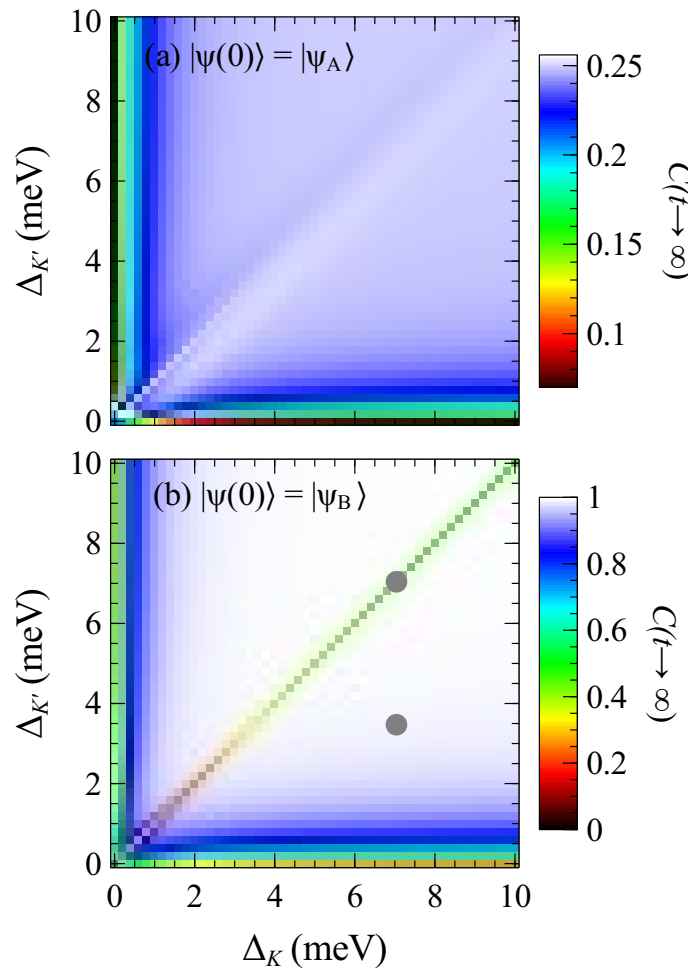


Figura 5.32 – Concorrência $C(\rho)(t \rightarrow \infty)$ em função de dessintonias do campo excitônico quando $B = 0T$. O painel (a) é para o estado inicial $|\Psi_A\rangle$. O painel (b) é para o estado inicial $|\Psi_B\rangle$. (veja o texto para uma descrição dos estados iniciais). Os seguintes parâmetros são usados nos cálculos: $\delta = \delta_0 = 0.6\text{meV}$ (MOLAS et al., 2019; ROBERT et al., 2017), acoplamentos dos modos éxciton-cavidade $g_+ = g_- = 0.1\text{THz}$, e as taxas de decoerência $\Gamma_K = \Gamma_{K'} = 1\text{THz}$ (DE; LAKE, 2017), $\kappa = \kappa_0 = 0,243\text{THz}$ (DE; LAKE, 2017). Os pontos em cinzas no painel (b) representam os dois conjuntos de parâmetros de dessintonias $(\Delta_K, \Delta_{K'})$ usados na maioria dos cálculos.(BORGES H et al., 2022)

Quando o estado inicial é trocado de $|\Psi_A\rangle$ para $|\Psi_B\rangle$, porém, a concorrência apresenta uma evolução temporal e dependente de δ , veja os gráficos 5.34 (a) e (b).

O emaranhamento de qubits excitônicos decorrentes do estado inicial decai rapidamente nos primeiros picossegundos da dinâmica. Esse comportamento depende apenas ligeiramente de δ . Isso é atribuído à alta taxa de recombinação excitônica. Ao contrário do caso anterior mostrado na figura 5.33, a evolução temporal da concorrência depende fortemente das condições de dessintonia. Chama a atenção o comportamento da concorrência no caso mostrado na figura 5.34 (a). Aqui, o estado inicial dos éxcitons corresponde a uma superposição dos estados de Bell. O subespaço desses estados se comporta como um sistema de dois níveis acoplado pelo exchange (δ). Este subespaço é relevante para a dinâmica de todo o sistema, uma vez que os estágios iniciais da evolução temporal são governados

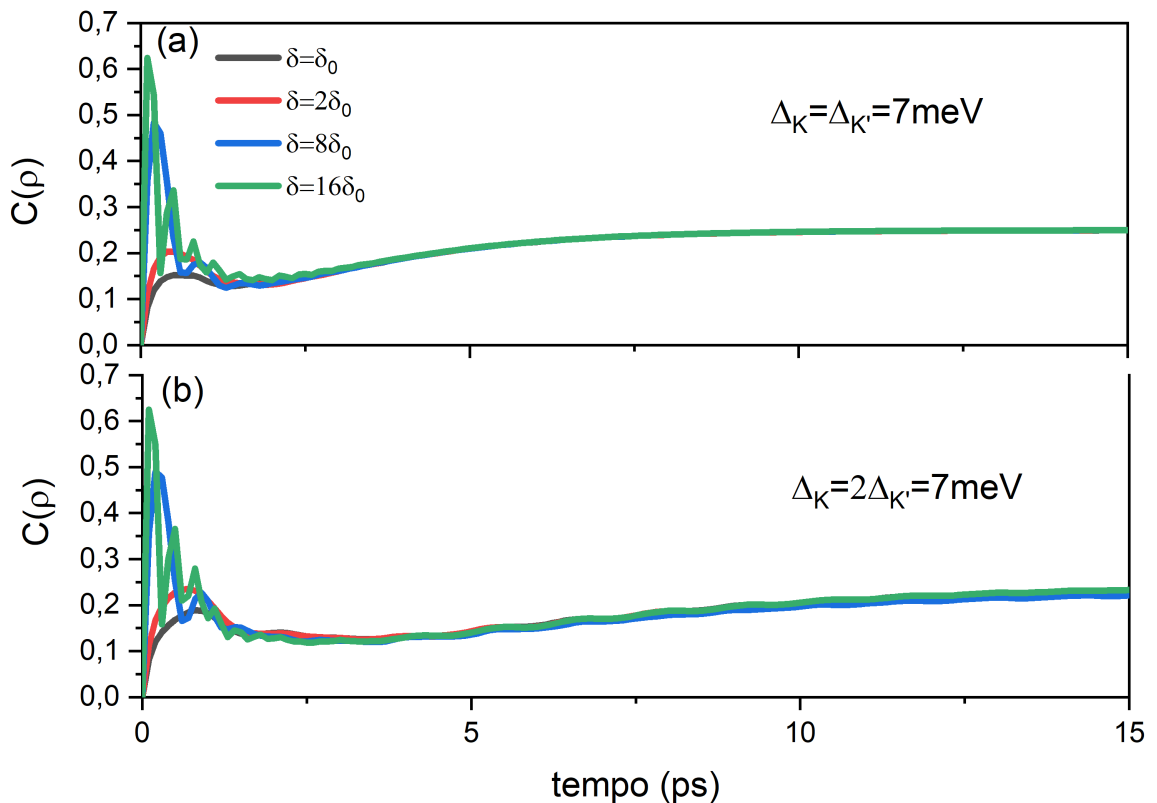


Figura 5.33 – Evolução temporal da concorrência excitônica em $B = 0T$ para diferentes δ . Em ambos os gráficos (a) e (b) usamos o estado inicial $|\Psi_A\rangle$. Na figura superior temos uma dessintonia ressonante ($\Delta_K = \Delta_{K'}$), enquanto na figura inferior corresponde à uma dessintonia não ressonante ($\Delta_K \neq \Delta_{K'}$).

pelo exchange e o estado inicial, que por sua vez está emaranhado, é essencialmente um autoestado desse subespaço. A recombinação do éxciton força a concorrência a diminuir rapidamente para 0,5, independente do valor do acoplamento do exchange. À medida que o tempo aumenta, o acoplamento óptico entra em dinâmica, o acoplamento efetivo entre o sistema excitônico e o campo agora inclui exchange como $\sim \sqrt{\delta^2 + g_{\pm}^2}$. Assim, aumentando o exchange, o acoplamento éxciton-campo efetivo aumenta e o sistema excitônico transfere uma fração de seu emaranhamento para o campo. Para $t > 5$ ps, entretanto, a concorrência $C(\rho)$ diminui linearmente com o tempo com uma inclinação muito pequena da ordem de 10^{-4} para $\delta < 2\delta_0$. Portanto, pode-se considerá-lo aproximadamente como uma concorrência estacionária. No entanto, para um exchange forte ($\delta > 2\delta_0$) altera-se esta situação, suprimindo o emaranhamento dos qubits (BORGES H et al., 2022).

No caso de $\Delta_K \neq \Delta_{K'}$, mostrado em Fig.5.34 (b), o acoplamento entre os éxcitons e o campo da cavidade é menos eficiente, o que desfavorece a transferência de emaranhamento dos éxcitons para o campo. Mas a interação desse mecanismo e a grande taxa de recombinação excitônica resulta em uma diminuição pronunciada do emaranhamento dos

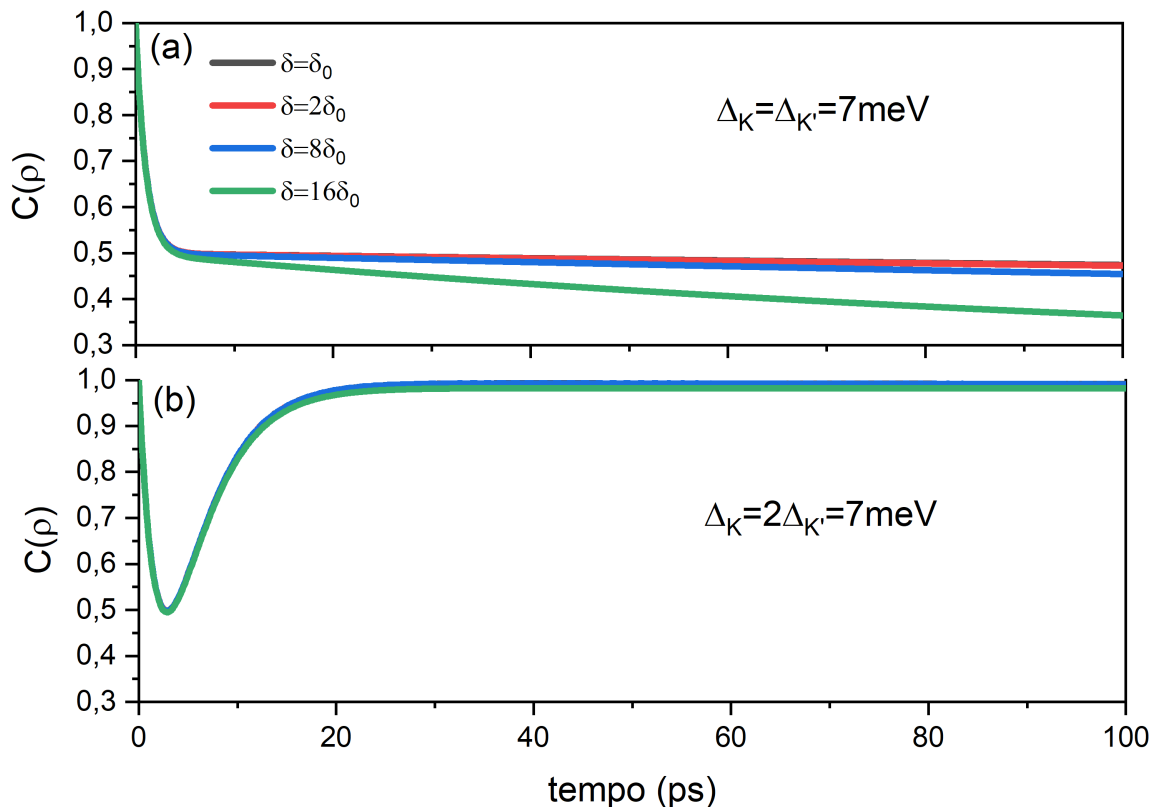


Figura 5.34 – Evolução temporal da concorrência excitônica em $B = 0T$ para diferentes δ . Em ambos os gráficos (a) e (b) usamos o estado inicial $|\Psi_B\rangle$. Na figura superior temos uma dessintonia ressonante ($\Delta_K = \Delta_{K'}$), enquanto na figura inferior corresponde à uma dessintonia não ressonante ($\Delta_K \neq \Delta_{K'}$).

éxcitons nos primeiros picossegundos. Curiosamente, com o passar do tempo, a interferência quântica governada pelo exchange cria uma superposição dos estados de Bell estacionários do éxciton que são autoestados do Hamiltoniano excitônico em $B = 0$. Conseqüentemente, o emaranhamento cresce e a concorrência pode atingir um valor muito alto, próximo a um. É interessante lembrar que a transferência de emaranhamento é amortecida pelos mecanismos de perda da cavidade. No entanto, em tempos curtos os processos dissipativos produzem uma diminuição acentuada da concorrência, o emaranhamento transferido para o campo é rapidamente amortecido devido à ação das perdas da cavidade, o subsistema excitônico é levado a um estado estacionário de concorrência quase que máxima.

Até agora, concentramos nossa atenção principalmente na concorrência dos qubits de éxcitons nos estados degenerados do vale, ou seja, $E_{0X}^K = E_{0X}^{K'}$, o que implica que $\hbar\omega_X = \hbar\omega_X'$. Como se sabe, um campo magnético externo pode aumentar a degenerescência do vale dos estados excitônicos em monocamadas de TMD devido à divisão do vale de Zeeman. Isso nos permite estudar o emaranhamento de dois estados excitônicos não degenerados nos vales K e K' , sujeito a um campo magnético externo $B = 0,5T$ ao longo do eixo z , que

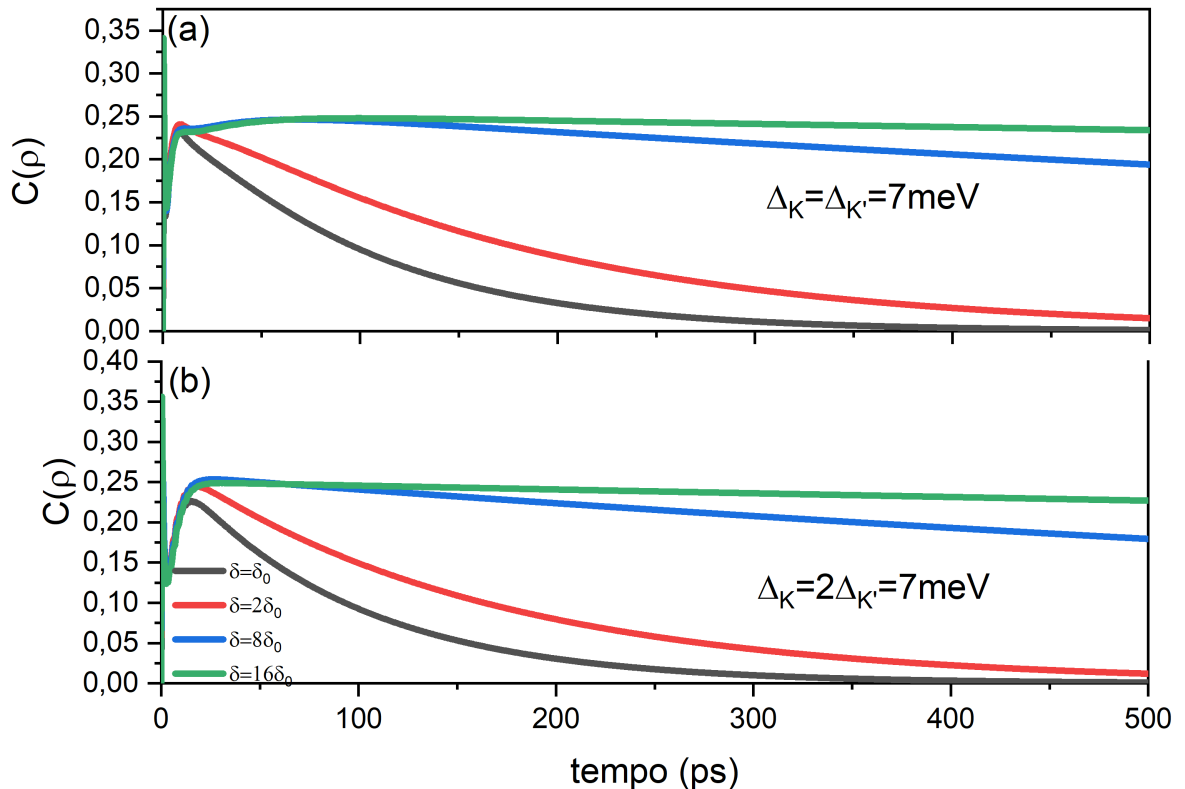


Figura 5.35 – Igual à Fig.5.33 mas para $B = 0.5T$. As curvas mostradas nos gráficos (a) e (b) são obtidas com o estado inicial $|\Psi_A\rangle$. Gráfico superior corresponde à dessintonia ressonante ($\Delta_K = \Delta_{K'}$), enquanto o gráfico inferior correspondem à dessintonia não ressonante ($\Delta_K \neq \Delta_{K'}$).

produz uma divisão do vale de Zeeman de 0,12 meV. Embora essa divisão seja pequena em comparação com outras escalas de energia do problema, ela pode induzir um impacto profundo no comportamento da concorrência. Nas figuras 5.35 e 5.36 mostram que para um valor moderado de δ ($\delta < 2\delta_0$), o levantamento da degenerescência do vale do éxciton suprime o emaranhamento. Além disso, esse comportamento ocorre para um parâmetro de exchange experimentalmente acessível. Para quebrar a degenerescência excitônica é necessário tornar sua dinâmica mais suscetível a efeitos incoerentes, portanto a correlação entre os éxcitons induzidos por um exchange fraco não é forte o suficiente para levar o sistema a um estado quase estacionário e manter o emaranhamento. Nos gráficos (a) e (b) da Fig. 5.35, mostramos a evolução temporal da concorrência dos éxcitons no sistema com um estado inicial $|\Psi_A\rangle$. Em contraste com as Figs. 5.33 (a) e (b), a concorrência é fortemente dependente do acoplamento de troca δ . Como mencionado anteriormente, para $\delta < 2\delta_0$, a concorrência diminui exponencialmente. Para $t > 300\text{ps}$, o grau de emaranhamento praticamente desaparece. Para valor de exchange ($\delta > 8\delta_0$), entretanto, a concorrência pode estabelecer seu valor quase estacionário. Além disso, o comportamento da concorrência

depende apenas ligeiramente da dessintonia . Nos casos de dessintonia ressonante e não ressonante, o valor assintótico de $C(\rho) \sim 0,25$ para $\delta = 16\delta_0$.

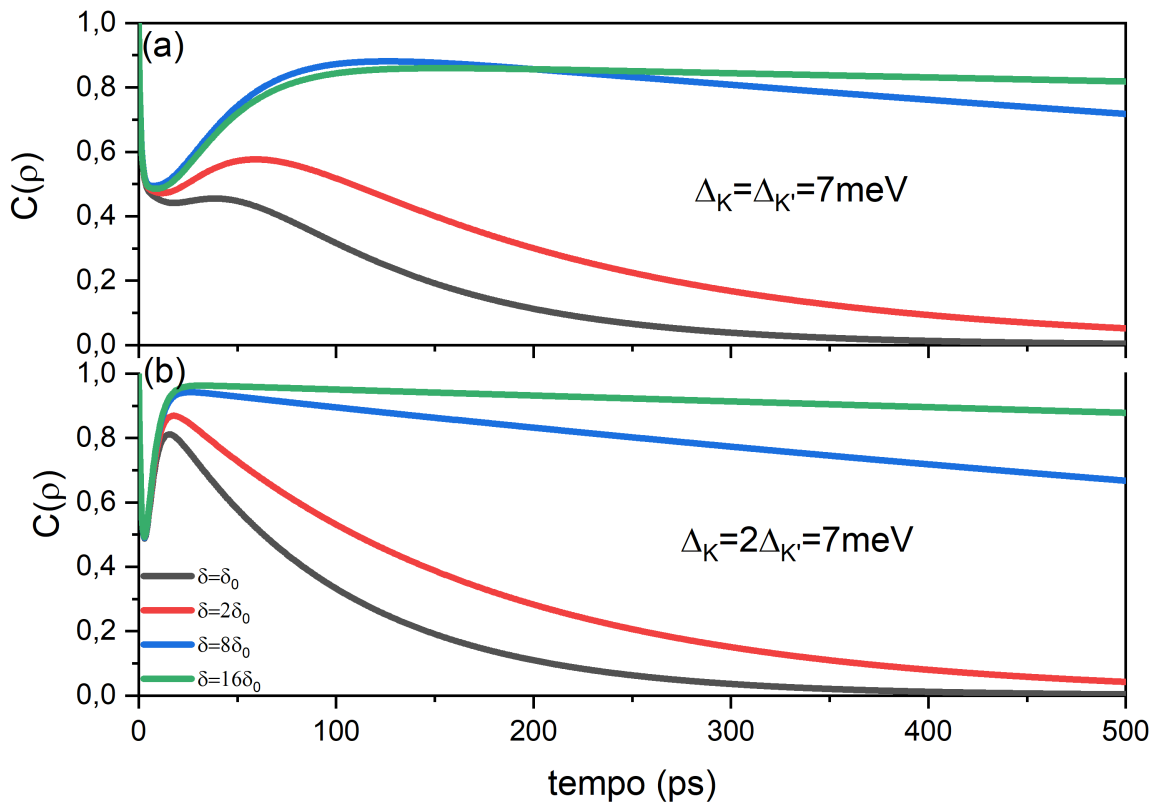


Figura 5.36 – Igual à Fig.5.34 mas para $B = 0.5T$. Os painéis (a) e (b) correspondem ao estado inicial $|\Psi_B\rangle$. Gráfico superior corresponde à dessintonia ressonante ($\Delta_K = \Delta_{K'}$), enquanto o Gráfico inferior correspondem à dessintonia não ressonante ($\Delta_K \neq \Delta_{K'}$).

Os gráficos (a) e (b) da Fig. 5.36 mostram a concorrência de qubits de éxcitons com o estado inicial $|\Psi_B\rangle$ para vários valores δ . Para $\delta < 2\delta_0$, o emaranhamento excitônico inicial é rapidamente amortecido. A transferência do emaranhamento para o subsistema de campo e as fontes dissipativas impedem que o sistema atinja seu estado estacionário. No entanto, um aumento da correlação excitônica mediada pelo exchange causa uma recuperação progressiva do comportamento quase estacionário da concorrência. Portanto, o exchange pode ser empregado para restaurar o emaranhamento excitônico, independentemente de sua condição de dessintonia. Por exemplo, para $\delta = 16\delta_0$, o valor estacionário da concorrência atinge quase 1. Uma vez que o campo magnético externo levanta a degenerescência excitônica nos vales K e K' devido à divisão do vale. As figuras mostradas na Fig. 5.36 são a concorrência dos éxcitons em condição de dessintonia essencialmente não ressonante. Portanto, a Fig. 5.35 (a) e (b) exibe um comportamento semelhante com Fig. 5.36 (a) e (b). Em comparação da Fig. 5.34 (a) com a Fig. 5.36 (a), a concorrência de dois estados não degenerados do éxciton é bem diferente daquela de dois estados degenerados (BORGES H et al., 2022).

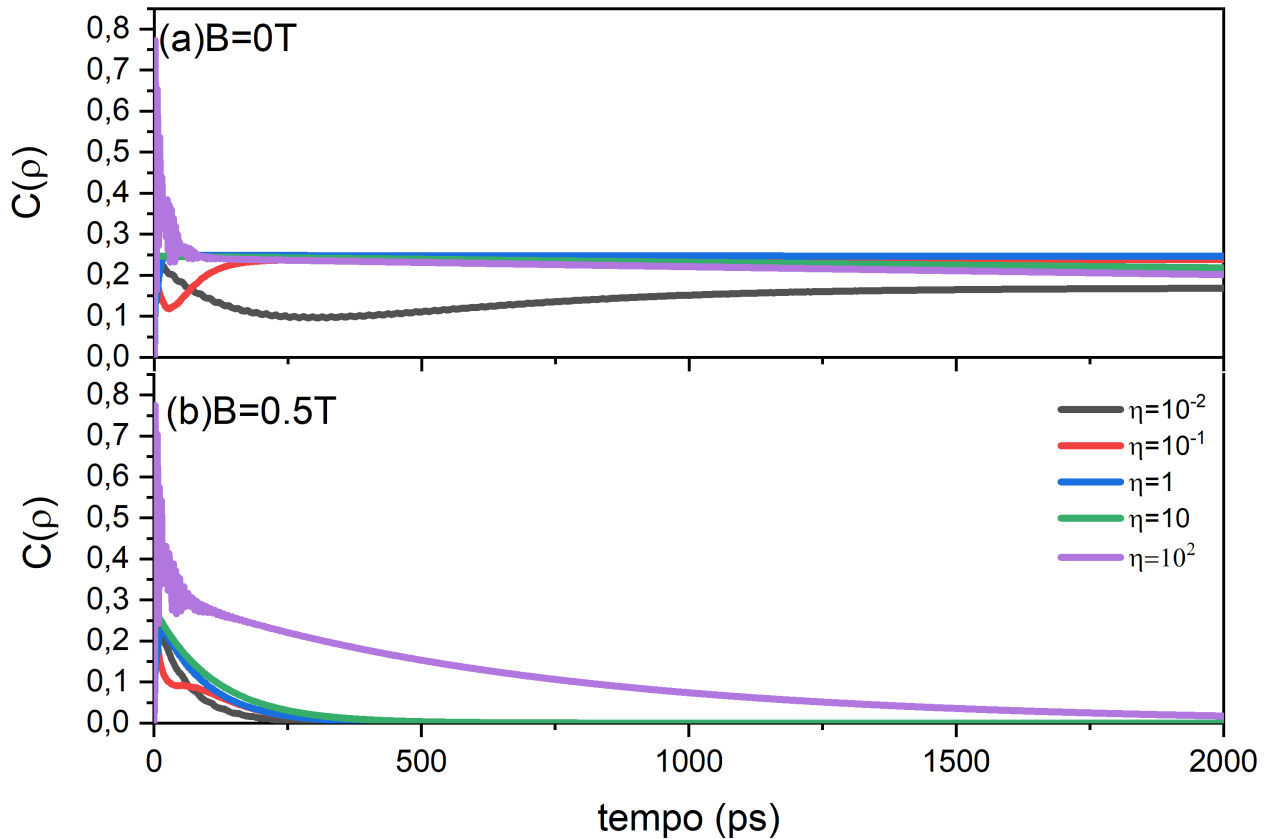


Figura 5.37 – Evolução temporal da concorrência excitônica em monocamada de WSe₂ monocamada integrada à cavidade em campo magnético vertical zero (gráfico superior(a)) e 0,5 T (gráfico inferior(b)) para cinco taxas de perda de cavidade, para $\Delta_K = 7 \text{ meV}$, $\Delta_{K'} = 3,5 \text{ meV}$, a taxa de perda de cavidade é dimensionada por $\kappa = \eta\kappa_0$ com $\kappa_0 = 0,234 \text{ THz}$ e acoplamento de troca $\delta = \delta_0 = 0,6 \text{ meV}$. Assumimos neste gráfico o estado inicial $|\Psi_A\rangle$.

Finalmente, as Figuras 5.38 e 5.37 mostram os efeitos da taxa de perda da cavidade κ na concorrência excitônica para $\delta = \delta_0$, $\Delta_K = 7 \text{ meV}$ e $\Delta_{K'} = 3,5 \text{ meV}$. Os resultados mostrados nos gráficos da Fig5.37 (a) e (b) são obtidos assumindo que o estado inicial é $|\Psi_A\rangle$, e nos gráficos da Fig5.38 (a) e (b) são obtidos assumindo que o estado inicial ($|\Psi_B\rangle$). Como a perda de campo da cavidade modifica significativamente a evolução temporal da concorrência, usamos uma escala de tempo maior nestas figuras do que a usada nas figuras anteriores. Por conveniência, κ é dimensionado com um parâmetro η , de modo que $\kappa = \eta\kappa_0$. Na ausência de campo magnético, os dois estados do éxciton são estados degenerados de vale. Com o passar do tempo, a concorrência estabelece seu valor estacionário que depende apenas ligeiramente de κ na faixa de aproximadamente $(0.1 - 1)\kappa_0$. No caso não degenerado, por exemplo, em $B = 0,5 \text{ T}$, no entanto, a concorrência inevitavelmente diminui para zero por tempos suficientemente longos. Além disso, quanto menor a taxa de perda da cavidade,

mais rápido a concorrência se aproxima de zero.

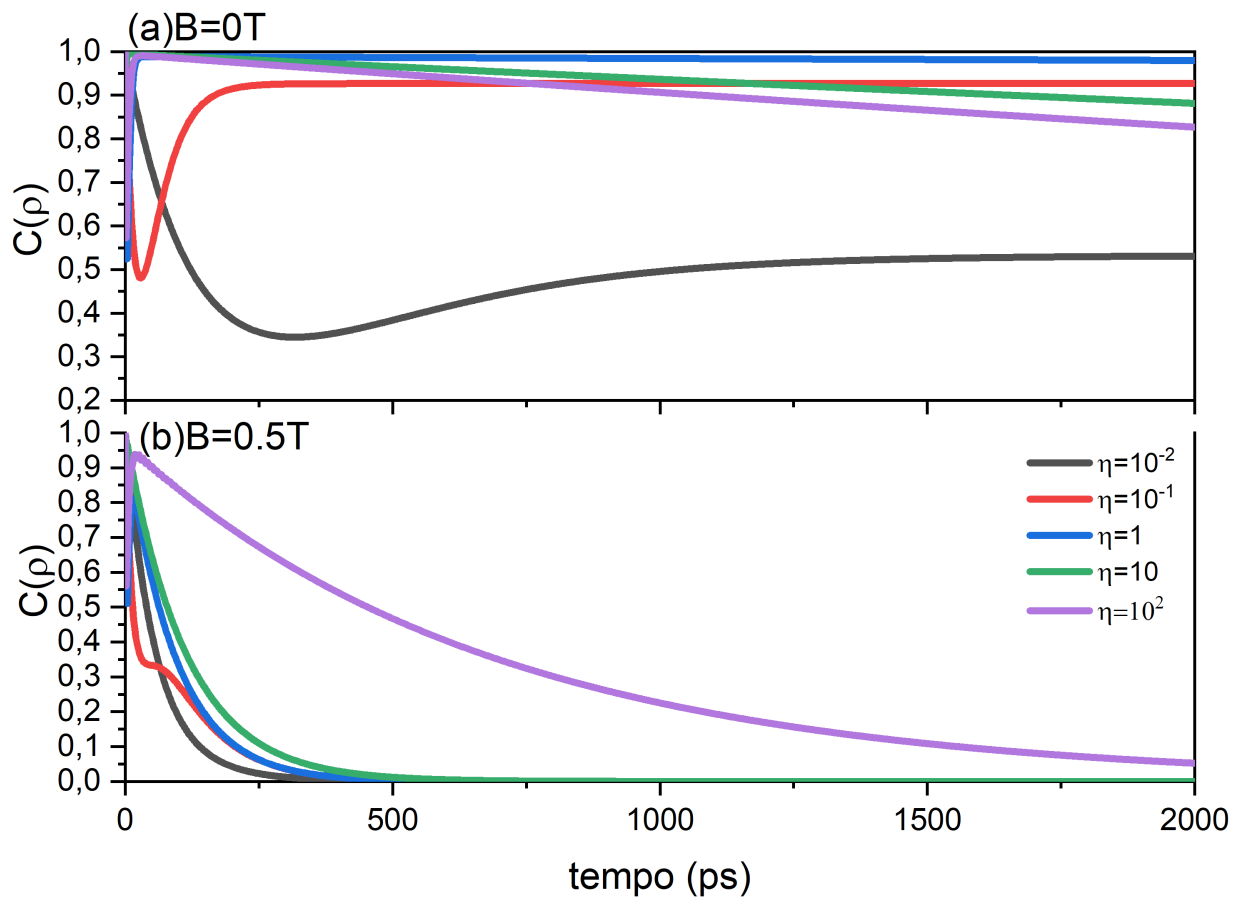


Figura 5.38 – Evolução temporal da concorrência excitônica em monocamada de WSe₂ integrada à cavidade em campo magnético vertical zero (gráfico superior (a)) e 0,5 T (gráfico inferior(b)) para cinco taxas de perda de cavidade, para $\Delta_K = 7$ meV, $\Delta_{K'} = 3,5$ meV, a taxa de perda de cavidade é dimensionada por $\kappa = \eta\kappa_0$ com $\kappa_0 = 0,234$ THz e acoplamento de troca $\delta = \delta_0 = 0,6$ meV. Esse gráfico foi obtido assumindo o estado inicial $|\Psi_B\rangle$.

É interessante lembrar que o rápido decaimento da concorrência pode ser contornado quando o acoplamento de troca é grande o suficiente, por exemplo, $\delta > 15\delta_0$, veja Fig.5.36. Portanto, a perda da cavidade desempenha um papel importante principalmente nos estágios iniciais da dinâmica da concorrência, enquanto seu valor estacionário é apenas ligeiramente alterado pela perda da cavidade (BORGES H et al., 2022).

5.2 Qubits de Éxcitons Escuros

Agora nesta seção estudaremos um novo sistema excitônico. Vimos nos capítulo 3 que os éxcitons podem se apresentar de duas formas: éxcitons claros, que foi estudado em

detalhes nas seções anteriores, e os éxcitons escuros, que será alvo do nosso estudo a partir de agora. Sabemos que o éxciton escuro não interage com a luz, e também que o seu tempo de vida é bem maior que do éxciton claro, fazendo com que esses sistemas excitônicos sejam bastante estudados por conta da suas aplicações em Computação Quântica. Nesse trabalho será estudado o sistema excitônico de três níveis, composto por um estado fundamental $|0\rangle$, um estado referente aos éxcitons escuros $|1\rangle$ e um estado referente aos éxcitons claros $|2\rangle$ conforme Fig.5.39. O Hamiltoniano que governa esse sistema, em sua forma matricial é

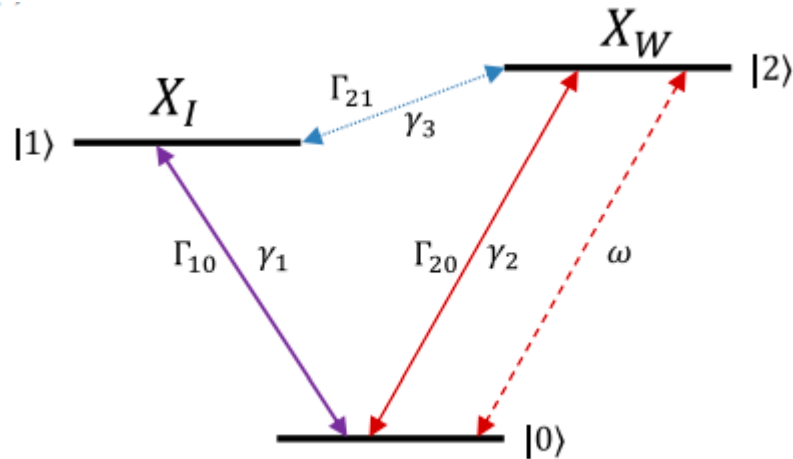


Figura 5.39 – Diagrama de estados do sistema excitônico de três níveis

Fonte: Rivera et al. (2015, p. 24)

$$H = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & \zeta_{02}^* \\ 0 & \omega_{10} & 0 \\ \zeta_{20} & 0 & \omega_{20} \end{pmatrix}, \quad (5.43)$$

com $\zeta_{02} = \vec{\mu}_{02} \cdot \vec{E} e^{-i\omega t}$, $\hbar\omega_{10}$ é a energia do estado $|1\rangle$ e $\hbar\omega_{20}$ é a energia do estado $|2\rangle$. Faremos uma transformação unitária em 5.43 no sentido de deixa-lo independente do tempo, pois sistemas governados por Hamiltonianos independentes do tempo são melhores de se solucionar, do ponto de vista computacional. Essa transformação que faremos em detalhes a seguir é chamada de transformação de onda girante (RWA)(RIVERA et al., 2015). Utilizando a equação de Schrödinger

$$H |\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t}, \quad (5.44)$$

iremos introduzir um operador unitário (rotação) U , tal que $UU^\dagger = 1$. Multiplicando U^\dagger do lado esquerdo e UU^\dagger do lado direito de ambos os lados da equação de Schrödinger temos

$$U^\dagger H U U^\dagger |\psi\rangle = i\hbar U^\dagger \frac{\partial U U^\dagger |\psi\rangle}{\partial t}. \quad (5.45)$$

Sabendo que

$$U^\dagger |\psi\rangle = |\psi'\rangle, \quad (5.46)$$

logo temos

$$U^\dagger H U |\psi'\rangle = i\hbar U^\dagger \frac{\partial U}{\partial t} |\psi'\rangle. \quad (5.47)$$

Usando a regra do produto para derivação podemos escrever

$$U^\dagger H U |\psi'\rangle = i\hbar U^\dagger \left(\frac{\partial U}{\partial t} |\psi'\rangle + U \frac{\partial |\psi'\rangle}{\partial t} \right). \quad (5.48)$$

Aplicando U^\dagger nos termos entre parênteses, temos

$$U^\dagger H U |\psi'\rangle = i\hbar U^\dagger \frac{\partial U}{\partial t} |\psi'\rangle + i\hbar U^\dagger U \frac{\partial |\psi'\rangle}{\partial t}, \quad (5.49)$$

logo obtemos

$$U^\dagger H U |\psi'\rangle - i\hbar U^\dagger \frac{\partial U}{\partial t} |\psi'\rangle = i\hbar \frac{\partial |\psi'\rangle}{\partial t}, \quad (5.50)$$

e concluímos que

$$\left(U^\dagger H U - i\hbar U^\dagger \frac{\partial U}{\partial t} \right) |\psi'\rangle = i\hbar \frac{\partial |\psi'\rangle}{\partial t}. \quad (5.51)$$

Se compararmos a equação acima com 5.44 vemos que o termo entre parênteses é uma espécie de Hamiltoniano transformado, é de fato podemos escrever esse novo Hamiltoniano H' como

$$H' = U^\dagger H U - i\hbar U^\dagger \frac{\partial U}{\partial t}. \quad (5.52)$$

Enunciaremos a forma geral para U , que é do tipo

$$U \equiv e^{iAt}, \quad (5.53)$$

onde

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega \end{pmatrix}. \quad (5.54)$$

Fazendo $\hbar = 1$ e substituindo U em 5.52 temos

$$H' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \Omega \\ 0 & \omega_{10} & 0 \\ \Omega & 0 & \delta \end{pmatrix}, \quad (5.55)$$

onde $\Omega = \vec{\mu}_{02} \cdot \vec{E}$ é chamada de frequência de Rabi, e $\delta = \omega_{20} - \omega$. Usando a equação mestre de Lindblad 5.10 onde, usaremos o seguinte Liouvilliano

$$\mathcal{L}(\rho) = \begin{pmatrix} \rho_{11}\Gamma_{10} + \rho_{22}\Gamma_{20} & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{22}\Gamma_{21} - \rho_{11}\Gamma_{10} & 0 \\ 0 & 0 & -\rho_{22}(\Gamma_{20} + \Gamma_{21}) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -\rho_{01}\gamma_1 & -\rho_{02}\gamma_2 \\ -\rho_{10}\gamma_1 & 0 & -\rho_{12}\gamma_3 \\ -\rho_{20}\gamma_2 & -\rho_{21}\gamma_3 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.56)$$

onde, diferentemente do sistema anterior, em que tínhamos 256 equações diferenciais acopladas, podemos para esse sistema expor as equações dinâmicas providas da equação mestra de Lindblad, que são:

$$\dot{\rho}_{00} = -\Omega i (\rho_{20} - \rho_{02}) + \rho_{11}\Gamma_{10} + \rho_{22}\Gamma_{20} \quad (5.57)$$

$$\dot{\rho}_{01} = -i(\Omega\rho_{21} - \rho_{01}\omega_{10}) - \rho_{01}\gamma_1 \quad (5.58)$$

$$\dot{\rho}_{02} = -i[\Omega\rho_{22} - \Omega\rho_{00} - \delta\rho_{02}] - \rho_{02}\gamma_2 \quad (5.59)$$

$$\dot{\rho}_{10} = -i(\rho_{10}\omega_{10} - \Omega\rho_{12}) - \rho_{10}\gamma_1 \quad (5.60)$$

$$\dot{\rho}_{11} = \rho_{22}\Gamma_{21} - \rho_{11}\Gamma_{10} \quad (5.61)$$

$$\dot{\rho}_{12} = -i[\omega_{10}\rho_{12} - \Omega\rho_{10} - \delta\rho_{12}] - \Gamma_3\rho_{12} \quad (5.62)$$

$$\dot{\rho}_{20} = -i[\Omega\rho_{00} + \delta\rho_{20} - \Omega\rho_{22}] - \gamma_2\rho_{20} \quad (5.63)$$

$$\dot{\rho}_{21} = -i[\Omega\rho_{01} + \delta\rho_{21} - \omega_{10}\rho_{21}] - \gamma_3\rho_{21} \quad (5.64)$$

$$\dot{\rho}_{22} = -\Omega i(\rho_{02} - \rho_{20}) - \rho_{22}(\Gamma_{20} + \Gamma_{21}). \quad (5.65)$$

Fazendo $\dot{\rho}_{ij} = 0$ podemos resolver o sistema de equações lineares, encontrando assim as soluções estacionárias, ou seja, as soluções onde não há variações nas populações no decorrer do tempo. As soluções estacionárias para o nosso sistema são

$$\rho_{00} = \frac{(\Gamma_{10}\Gamma_{20}\delta + \Gamma_{10}\Gamma_{21}\delta + \Gamma_{10}\Gamma_{20}\gamma_2^2 + \Gamma_{10}\Gamma_{21}\gamma_2^2 + 2\Gamma_{10}\gamma_2\Omega^2)}{\Gamma_{10}\Gamma_{20}\delta - \Gamma_{10}\Gamma_{21}\delta + \Gamma_{10}\Gamma_{20}\gamma_2^2 + \Gamma_{10}\Gamma_{21}\gamma_2^2 + 4\Gamma_{10}\gamma_2\Omega^2 + 2\Gamma_{21}\gamma_2\Omega^2} \quad (5.66)$$

$$\rho_{01} = \rho_{10} = 0 \quad (5.67)$$

$$\rho_{02} = \frac{-\Omega\Gamma_{10}\Gamma_{20}\delta + \Omega\Gamma_{10}\Gamma_{21}\delta + \Omega\Gamma_{10}\Gamma_{20}\gamma_2 i - \Omega i\Gamma_{10}\Gamma_{21}\gamma_2 i}{\Gamma_{10}\Gamma_{20}\delta^2 - \Gamma_{10}\Gamma_{21}\delta^2 + \Gamma_{10}\Gamma_{20}\gamma_2^2 - \Gamma_{10}\Gamma_{21}\gamma_2^2 + 4\Gamma_{10}\gamma_2\Omega^2 - 2\Gamma_{21}\gamma_2\Omega^2} \quad (5.68)$$

$$\rho_{20} = \rho_{02}^* \quad (5.69)$$

$$\rho_{11} = \frac{2\Gamma_{21}\gamma_2\Omega^2}{\Gamma_{10}\Gamma_{20}\delta - \Gamma_{10}\Gamma_{21}\delta + \Gamma_{10}\Gamma_{20}\gamma_2^2 + \Gamma_{10}\Gamma_{21}\gamma_2^2 + 4\Gamma_{10}\gamma_2\Omega^2 + 2\Gamma_{21}\gamma_2\Omega^2} \quad (5.70)$$

$$\rho_{12} = \rho_{21} = 0 \quad (5.71)$$

$$\rho_{22} = \frac{2\Gamma_{10}\gamma_2\Omega^2}{\Gamma_{10}\Gamma_{20}\delta^2 - \Gamma_{10}\Gamma_{21}\delta^2 + \Gamma_{10}\Gamma_{20}\gamma_2^2 - \Gamma_{10}\Gamma_{21}\gamma_2^2 + 4\Gamma_{10}\gamma_2\Omega^2 - 2\Gamma_{21}\gamma_2\Omega^2}, \quad (5.72)$$

onde $\rho_{ij} = \rho_{ji}^*$. Simplificando as equações da diagonal principal, ou seja, fazendo $\rho_{ii} = n_i$, temos

$$n_1\Gamma_{10} + n_2\Gamma_{20} + \alpha(n_2 - n_0) = 0 \quad (5.73)$$

$$n_2(\Gamma_{20} + \Gamma_{21}) + \alpha(n_2 - n_0) \quad (5.74)$$

$$n_0 + n_1 + n_2 = 1 \quad (5.75)$$

onde $\alpha = \frac{2|\Omega|^2\gamma_2}{\gamma_2^2\delta^2}$. Podemos também simplificar ρ_{20} como

$$\rho_{20} = \frac{\Omega}{(\gamma_2^2 + \delta^2) + (1 + \alpha\beta)} (i\gamma_2 - \delta), \quad (5.76)$$

onde $\beta = \frac{2\Gamma_{10} + \Gamma_{21}}{\Gamma_{10}(\Gamma_{20} + \Gamma_{21})}$. Na figura 5.40 notamos que as soluções analíticas para os estados estacionários coincidem com as soluções numéricas obtidas usando o sistema de equações diferenciais acopladas. Notamos ainda que quando usamos o sistema de equações diferenciais temos mais informação do sistema quântico nos instantes iniciais da dinâmica. Esse fato também ocorre quando se usa as equações de taxas (onde fazemos também as derivadas temporais iguais a zero), mostrando assim que o formalismo da matriz de densidade é um modelo que traz consigo mais informações do comportamento populacional do sistema em estudo. A absorção \mathcal{A} pode ser calculada como $Im\{\rho_{20}\}$, logo temos (RIVERA et al., 2015)

$$\mathcal{A} = \frac{\Omega\gamma_2}{(\gamma_2^2 + \delta^2) + (1 + \alpha\beta)}. \quad (5.77)$$

5.2.1 Relação Entre os Formalismos da Matriz de Densidade e das Equações de Taxas

Geralmente os operadores de colapso que são inseridos no Liouvilliano, levam em conta somente termos de espalhamento favorável (de um nível maior para um nível menor de energia), porém se adicionarmos os operadores de colapso também considerando espalhamento desfavorável (de um nível de energia menor para um nível de energia maior, tal como é feito usando o formalismo das equações de taxas) o Liouvilliano pode ser escrito, na sua forma matricial como:

$$\mathcal{L}[\rho(t)] = \begin{pmatrix} \Gamma_{10}\rho_{11} + \Gamma_{20}\rho_{22} - \Gamma_{01}\rho_{00} - \Gamma_{02}\rho_{00} & 0 & 0 \\ 0 & \Gamma_{21}\rho_{22} - \Gamma_{10}\rho_{11} + \Gamma_{01}\rho_{00} - \Gamma_{12}\rho_{11} & 0 \\ 0 & 0 & -\rho_{22}(\Gamma_{20} + \Gamma_{21}) + \Gamma_{02}\rho_{00} + \Gamma_{12}\rho_{11} \end{pmatrix} +$$

$$\begin{pmatrix} 0 & -\rho_{01}\frac{1}{2}\Gamma_{10} - \frac{1}{2}\Gamma_{01}\rho_{01} - \frac{1}{2}\Gamma_{02}\rho_{01} - \frac{1}{2}\Gamma_{12}\rho_{10} & -\rho_{02}\frac{1}{2}(\Gamma_{20} + \Gamma_{21}) - \frac{1}{2}\Gamma_{01}\rho_{02} - \frac{1}{2}\Gamma_{02}\rho_{02} \\ -\rho_{10}\frac{1}{2}\Gamma_{10} - \frac{1}{2}\Gamma_{01}\rho_{10} - \frac{1}{2}\Gamma_{02}\rho_{10} - \frac{1}{2}\Gamma_{12}\rho_{10} & 0 & -\rho_{12}\frac{1}{2}(\Gamma_{10} + \Gamma_{20} + \Gamma_{21}) - \frac{1}{2}\Gamma_{12}\rho_{12} \\ -\rho_{20}\frac{1}{2}(\Gamma_{20} + \Gamma_{21}) - \frac{1}{2}\Gamma_{01}\rho_{20} - \frac{1}{2}\Gamma_{02}\rho_{20} & -\rho_{21}\frac{1}{2}(\Gamma_{10} + \Gamma_{20} + \Gamma_{21}) - \frac{1}{2}\Gamma_{12}\rho_{21} & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.78)$$

Se nós fizermos $\frac{1}{2}(\Gamma_{10} + \Gamma_{01} + \Gamma_{02} + \Gamma_{12}) = \gamma_1$, $\frac{1}{2}(\Gamma_{20} + \Gamma_{21} + \Gamma_{01} + \Gamma_{02}) = \gamma_2$ e $\frac{1}{2}(\Gamma_{10} + \Gamma_{20} + \Gamma_{21} + \Gamma_{12}) = \gamma_3$, na segunda matriz, temos

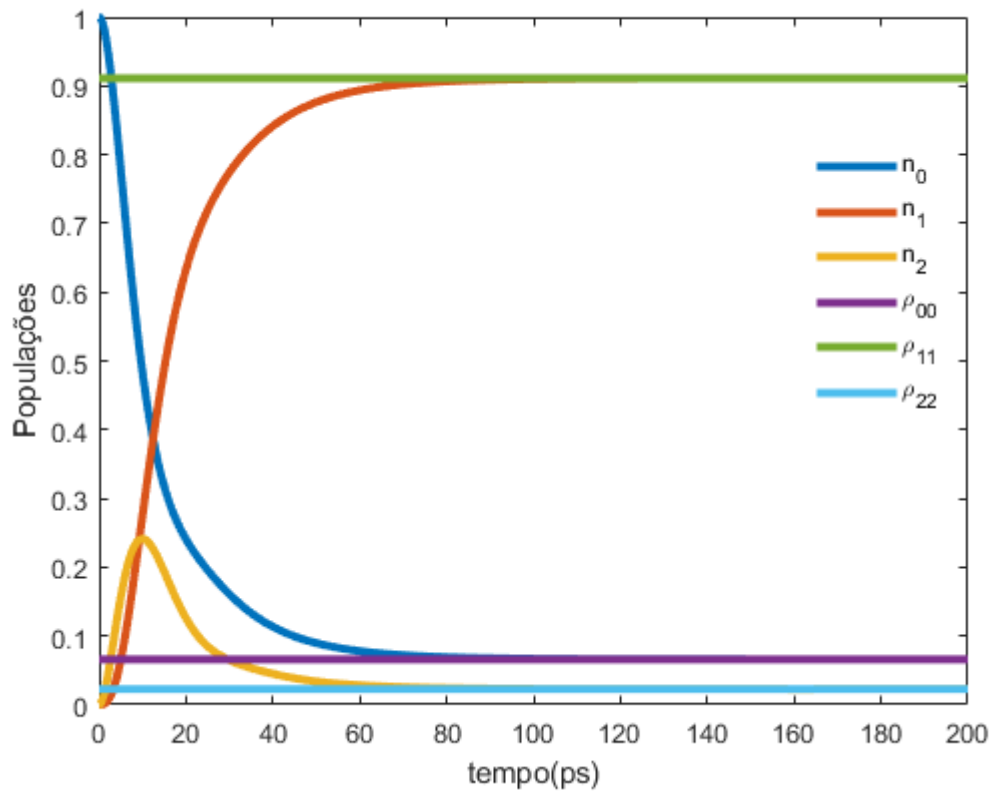


Figura 5.40 – Dinâmica excitônica do sistema de três níveis: Foram usados os seguintes parâmetros: $\Gamma_{20} = 0.1\mu eV$, $\Gamma_{10} = 0.005\mu eV$, $\Gamma_{21} = 0.2\mu eV$, $\omega_{20} = 2eV$, $\omega_{10} = 1.95eV$, $\omega = 1.93eV$ e $\Omega = 0.12eV$. Notamos que as soluções referentes à matriz de densidade tendem à um estado estacionário devido à relaxação provenientes do Liouvilliano coincidindo com as soluções estacionárias oriundas do sistema de equações homogêneas ($\frac{d\rho}{dt} = 0$). Notamos também que para qualquer intervalo de tempo temos $\rho_{00} + \rho_{11} + \rho_{22} = 1$ como também $n_0 + n_1 + n_2 = 1$. (GUPTA et al., 2021)

Fonte:Feito pelo autor

$$\mathcal{L}[\rho(t)] = \begin{pmatrix} \Gamma_{10}\rho_{11} + \Gamma_{20}\rho_{22} - \Gamma_{01}\rho_{00} - \Gamma_{02}\rho_{00} & 0 & 0 \\ 0 & \Gamma_{21}\rho_{22} - \Gamma_{10}\rho_{11} + \Gamma_{01}\rho_{00} - \Gamma_{12}\rho_{11} & 0 \\ 0 & 0 & -\rho_{22}(\Gamma_{20} + \Gamma_{21}) + \Gamma_{02}\rho_{00} + \Gamma_{12}\rho_{11} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -\rho_{01}\gamma_1 & -\rho\gamma_2 \\ -\rho_{10}\gamma_1 & 0 & -\rho_{12}\gamma_3 \\ -\rho_{20}\gamma_2 & -\rho_{21}\gamma_3 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.79)$$

onde a primeira é a matriz de decaimento e a segunda é a matriz de defasagem.

Vamos agora considerar um sistema de três níveis sob a perspectiva das equações de taxas. Estamos adotando $g = \frac{n_0}{\tau_{02}}$, onde (taxa de criação de éxcitons), onde $\Gamma_{ij} = \frac{1}{\tau_{ij}}$. As equações de taxas para esse sistema são

$$\frac{dn_2}{dt} = \frac{n_1}{\tau_{12}} + \frac{n_0}{\tau_{02}} - \frac{n_2}{\tau_{20}} - \frac{n_2}{\tau_{21}} \quad (5.80)$$

$$\frac{dn_1}{dt} = \frac{n_2}{\tau_{21}} + \frac{n_0}{\tau_{01}} - \frac{n_1}{\tau_{10}} - \frac{n_1}{\tau_{12}} \quad (5.81)$$

$$\frac{dn_0}{dt} = \frac{n_1}{\tau_{10}} + \frac{n_2}{\tau_{20}} - \frac{n_0}{\tau_{01}} - \frac{n_0}{\tau_{02}}. \quad (5.82)$$

Vamos analisar a matriz de decaimento, vamos chama-la de $\mathcal{D}(\rho(t))$

$$\mathcal{D}(\rho(t)) = \begin{pmatrix} \Gamma_{10}\rho_{11} + \Gamma_{20}\rho_{22} - \Gamma_{01}\rho_{00} - \Gamma_{02}\rho_{00} & 0 & 0 \\ 0 & \Gamma_{21}\rho_{22} - \Gamma_{10}\rho_{11} + \Gamma_{01}\rho_{00} - \Gamma_{12}\rho_{11} & 0 \\ 0 & 0 & -\rho_{22}(\Gamma_{20} + \Gamma_{21}) + \Gamma_{02}\rho_{00} + \Gamma_{12}\rho_{11} \end{pmatrix}. \quad (5.83)$$

Usando $\Gamma_{ij} = \frac{1}{\tau_{ij}}$ e fazendo $n_0 = \rho_{00}$, $n_1 = \rho_{11}$ e $n_2 = \rho_{22}$, e em seguida substituindo na matriz acima, podemos escrever

$$\mathcal{D}(\rho(t)) = \begin{pmatrix} \frac{n_1}{\tau_{10}} + \frac{n_2}{\tau_{20}} - \frac{n_0}{\tau_{01}} - \frac{n_0}{\tau_{02}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{n_2}{\tau_{21}} - \frac{n_1}{\tau_{10}} + \frac{n_0}{\tau_{01}} - \frac{n_1}{\tau_{12}} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{n_2}{\tau_{20}} - \frac{n_2}{\tau_{21}} + \frac{n_0}{\tau_{02}} + \frac{n_1}{\tau_{12}} \end{pmatrix}. \quad (5.84)$$

Vemos que o elementos da diagonal principal da matriz de decaimento são exatamente iguais ao lado direito das equações de taxas, portanto, as equações diferenciais provenientes da equação mestre de Lindblad que ficam na diagonal principal (referentes as populações) em que somente temos a contribuição da matriz de decaimento (pois as contribuições da matriz de defasagem só interfere nos elementos fora da diagonal principal) são do tipo

$$\frac{d\rho_{ii}}{dt} = i[H, \rho] + \text{decaimento} = i[H, \rho] + \frac{dn_i}{dt}, \quad (5.85)$$

com isso a equação 5.85 relaciona o formalismo da matriz de densidade com o formalismo das equações de taxas. Como exemplo a equação referente à ρ_{22} (Populações do estado $|2\rangle$, éxcitons claros) pode ser escrita como:

$$\dot{\rho}_{22} = i \langle 2 | H \rho | 2 \rangle - i \langle 2 | \rho H | 2 \rangle + \frac{dn_2}{dt}. \quad (5.86)$$

Substituindo pela equação de taxa correspondente temos

$$\dot{\rho}_{22} = i \langle 2 | H \rho | 2 \rangle - i \langle 2 | \rho H | 2 \rangle + \frac{n_1}{\tau_{12}} + \frac{n_0}{\tau_{02}} - \frac{n_2}{\tau_{20}} - \frac{n_2}{\tau_{21}}, \quad (5.87)$$

e usando novamente a relação $\Gamma_{ij} = \frac{1}{\tau_{ij}}$ temos

$$\dot{\rho}_{22} = i \langle 2 | H \rho | 2 \rangle - i \langle 2 | \rho H | 2 \rangle - \rho_{22}(\Gamma_{20} + \Gamma_{21}) + \Gamma_{02}\rho_{00} + \Gamma_{12}\rho_{11}. \quad (5.88)$$

5.2.2 Cálculo da Fotoluminescência de um Sistema formado por Qubits de Éxcitons

Ao sistema de três níveis tratado anteriormente, onde consideramos apenas o vale K , iremos adicionar o vale K' , analogamente como foi feito ao sistema descrito em 3.3.3. Com as soluções estacionárias das equações de taxas é possível calcular várias propriedades físicas importantes, como a fotoluminescência (PL), que consiste na emissão de luz de uma amostra, quando a mesma é submetida a um estímulo externo, que no nosso caso é a luz incidente. Como o sistema é composto por éxcitons claros e escuros, a motivação do nosso estudo consiste em fazer com que os éxcitons escuros fiquem brilhantes (medidos pela fotoluminescência) usando um mecanismo que não seja a incidência de luz, pois como já foi falado anteriormente, essas quasipartículas não interagem com os fótons de luz. Esse processo é importante tendo em vista que os éxcitons escuros tem um tempo de vida bem maior do que os éxcitons claros, sendo portanto mais estáveis e com isso o seu estudo é de extremo interesse para a Computação Quântica. O mecanismo que iremos utilizar para realizar esse processo é introduzir um campo magnético no plano da amostra. Com isso, tanto os éxcitons claros como os escuros terão seus estados misturados, assim (VASCONCELOS et al., 2018)

$$|X_c^\tau\rangle^{mix} = a_{cc} |X_c^\tau\rangle - a_{ce} e^{i\tau\theta} |X_e^\tau\rangle \quad (5.89)$$

$$|X_e^\tau\rangle^{mix} = a_{ee} |X_e^\tau\rangle + a_{ec} e^{-i\tau\theta} |X_c^\tau\rangle, \quad (5.90)$$

onde $|X_c^\tau\rangle$ e $|X_e^\tau\rangle$ são os estados dos éxcitons claros e escuros no vale τ , respectivamente, e θ é o ângulo do campo magnético no plano. O índice "mix" está sendo empregado para significar a mistura dos estados excitônicos. Nota-se que na ausência do campo $a_{ce} = a_{ec} = 0$. Definindo que a intensidade de fotoluminescência pode ser calculado, para o caso dos éxcitons escuros (\mathcal{P}_e) como

$$\mathcal{P}_e = |a_{ec}|^2 \Gamma_{10} n_1, \quad (5.91)$$

onde $|a_{ec}|^2$ é a fração da população dos éxcitons escuros que foram clareados. Para o caso do éxcitons claros (\mathcal{P}_c) podemos escrever

$$\mathcal{P}_c = |a_{cc}|^2 \Gamma_{20} n_2. \quad (5.92)$$

Como os vales K e K' são acessados por luz circularmente polarizada, as suas emissões também devem ter a mesma natureza (quando um elétron decai de um nível maior de

energia para um nível menor há emissão de um fóton). Com isso podemos definir o grau de polarização do vale para os éxcitons escuros como

$$\mathcal{P}_{PE} = \frac{\mathcal{P}_e - \mathcal{P}'_e}{\mathcal{P}_e + \mathcal{P}'_e}, \quad (5.93)$$

onde \mathcal{P}'_e é a intensidade de fotoluminescência referente aos éxcitons escuros no vale K' . Analogamente o grau de polarização do vale para os éxcitons claros é definido como

$$\mathcal{P}_{PC} = \frac{\mathcal{P}_c - \mathcal{P}'_c}{\mathcal{P}_c + \mathcal{P}'_c}, \quad (5.94)$$

onde \mathcal{P}'_c é a intensidade de fotoluminescência referente aos éxcitons claros no vale K' . Como

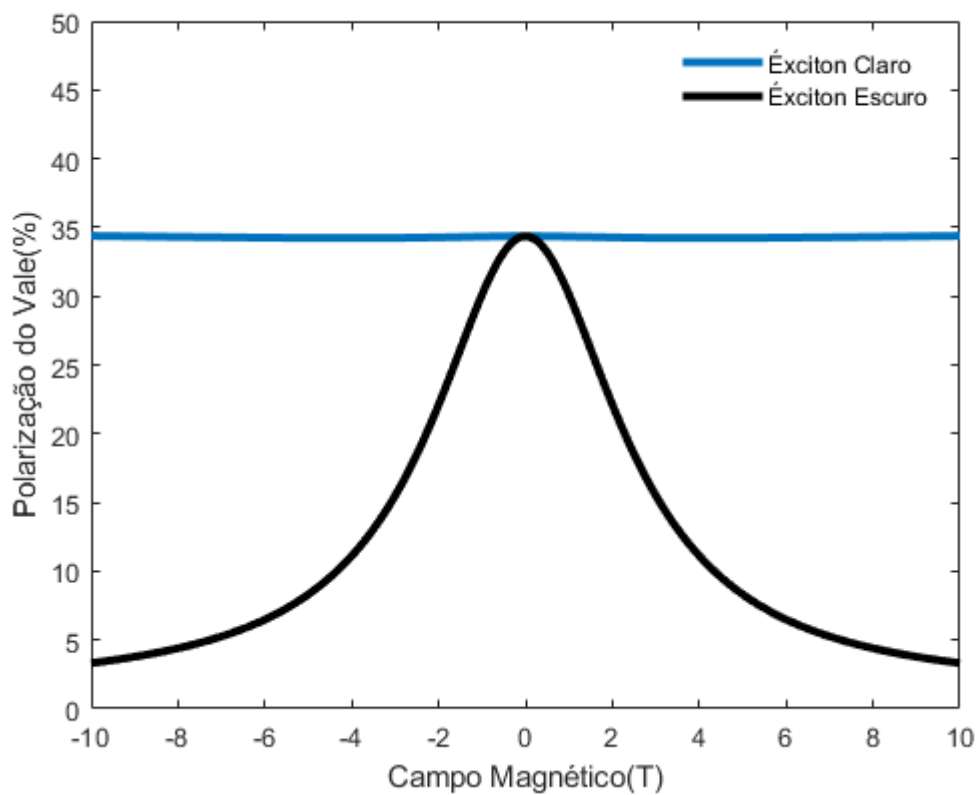


Figura 5.41 – Polarização do vale: Nota-se que a polarização do vale se mantém constante no caso dos estados referentes aos éxcitons claros. Isso se deve ao fato de termos aplicado um campo paralelo ao plano da amostra ($\theta = \frac{\pi}{2}$ rad), fazendo com que a polarização do vale referentes aos éxcitons escuros varie com o campo. Nota-se também que em $B = 0$ T não há há mistura dos estados excitônicos (os éxcitons escuros não brilham).

Fonte: Feito pelo autor

será analisado espalhamentos de um nível menor de energia para um de um nível maior, devemos, portanto, introduzir às equações dinâmicas o fator 3.37, como foi detalhado em 3.3.3. A diferença de energia que aparece em 3.37 é definida como

$$E_c^\tau - E_e^\tau = \Delta_c + \tau g_s \mu_B \vec{B}_\perp + \frac{g_s^2 \mu_B^2 \vec{B}_\parallel^2}{2\Delta_c}, \quad (5.95)$$

onde E_c^τ é a energia do éxciton claro no vale τ , E_c^τ é a energia do éxciton escuro no vale τ , $g_s = 2$ é o fator g do spin, μ_B é o magneton de Bohr, $\vec{B}_\perp = B\cos(\theta)$ é a intensidade do campo magnético perpendicular à amostra, $\vec{B}_\parallel = B\sin(\theta)$ é a intensidade do campo magnético paralelo à amostra e Δ_c é a diferença de energia que há entre as bandas de condução por conta da interação spin-órbita. Nos nossos cálculos estamos interessados na mistura que há entre os estados referentes aos éxcitons claros e escuros, e isso se dá quando o campo magnético aplicado é paralelo ao plano da amostra (VASCONCELOS et al., 2018).

Na figura 5.41 vemos que o efeito do campo aplicado no plano da amostra ($\theta = \frac{\pi}{2}$ rad) não altera a polarização do vale referente aos éxcitons claros. No ponto de interseção das duas curvas ($B = 0$ T) vemos que não há criação de éxcitons escuros brilhantes. Na figura

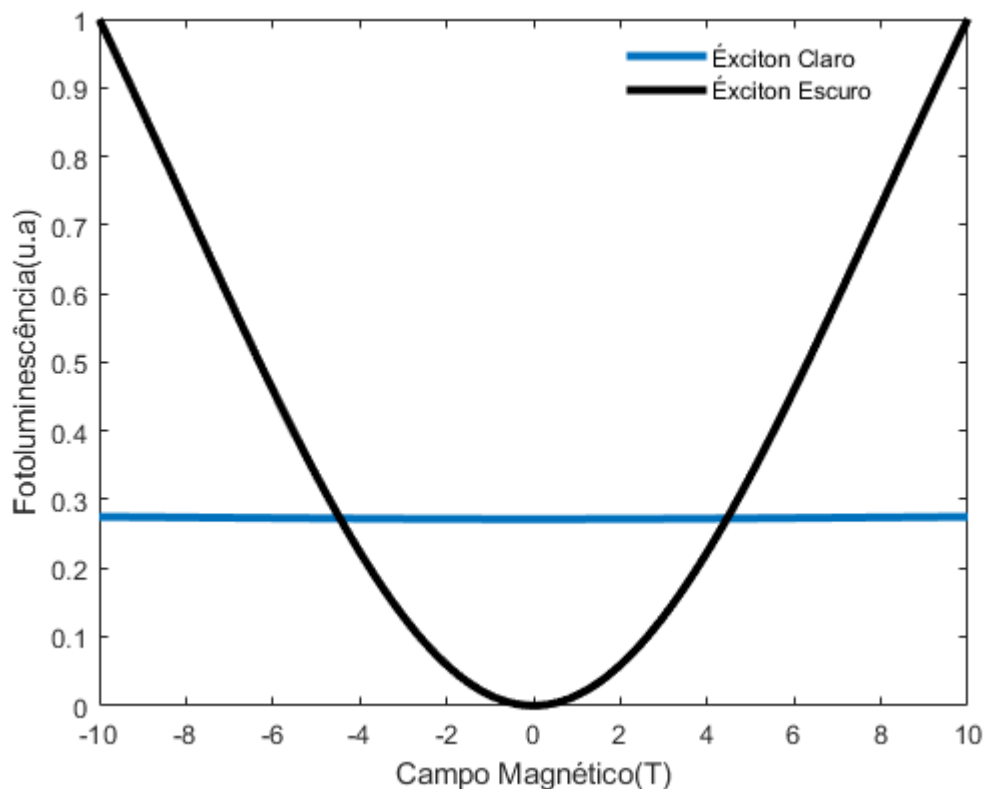


Figura 5.42 – Intensidade de fotoluminescência em função do campo magnético do plano: Nota-se que analogamente o que aconteceu com a polarização do vale, a alteração do campo magnético no plano não alterou a intensidade de fotoluminescência dos éxcitons claros, como era previsto.

Fonte: Feito pelo autor

5.42 temos a intensidade de fotoluminescência em função do campo magnético. Vemos que analogamente o que aconteceu em Fig. 5.41 não temos alteração da intensidade de fotoluminescência dos éxcitons claros, pois os estados dessa classe excitônica se mantêm inalterados com a mudança do campo magnético no plano da amostra, o que não acontece com os

éxcitons escuros, que tem seus estados alterados com o campo. Para calcularmos o espectro de fotoluminescência em função da energia, usaremos a seguinte Lorentziana:(RICHE, 2020)

$$\mathcal{P}(E) = \frac{\mathcal{P}(E_0)}{1 + \frac{E - \left[E_0 - S \langle \hbar \omega' \rangle \coth \left(\frac{\langle \hbar \omega' \rangle}{2k_B T} - 1 \right) \right]}{\Gamma^2}}, \quad (5.96)$$

onde Γ é a largura do pico a meia altura, $\mathcal{P}(E_0)$ é a intensidade de fotoluminescência (altura do pico), E_0 é a energia do éxciton em $T = 0$, $S = 2$ é um fator de acoplamento e $\langle \hbar \omega' \rangle = 30\text{meV}$ é o valor esperado para energia do fônon.

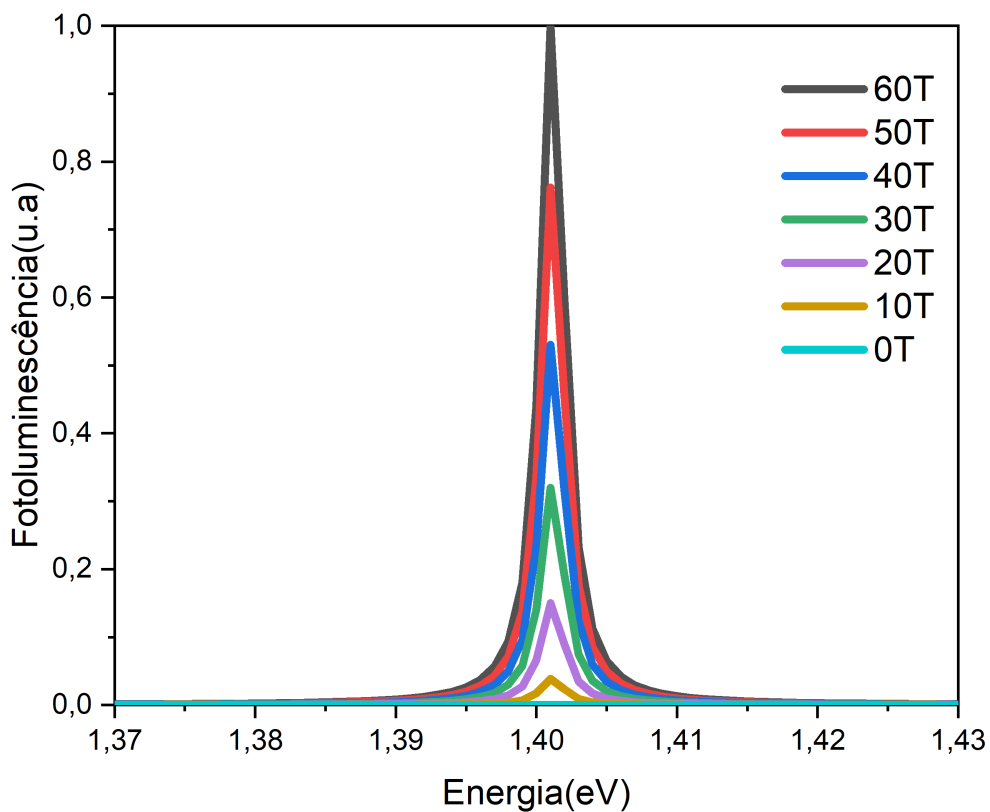


Figura 5.43 – Espectro de fotoluminescência à 50K dos éxcitons escuros em função da energia: É notado que a intensidade de fotoluminescência aumenta a medida que a intensidade do campo magnético no plano aumenta, como era previsto (SCHWARTZ et al., 2015)(SHAN et al., 2022).

Fonte:Feito pelo autor

Para os cálculos de fotoluminescência usamos os seguintes parâmetros: $\tau_{20} = 14\text{ps}$, $\tau_{10} = 28\text{ns}$, $\tau_{21} = 1\text{ps}$, $\tau_{22'} = -B\cos(\theta) + 1\text{ps}$, $\Delta_c = 36\text{meV}$, $E_c = E_g + \frac{\Delta_c}{2} - \frac{\Delta_v}{2} - V_{eb}$, $E_e = E_g + \frac{\Delta_c}{2} + \frac{\Delta_v}{2} - V_{eb}$, onde E_c e E_e são as energias dos éxcitons claros e escuros, respectivamente, $E_g = 2,5\text{eV}$ é a energia do gap, $\Delta_v = 460\text{meV}$ é a diferença de energia das bandas de valência por

conta da interação spin-órbita e $V_{eb} = 0.79\text{eV}$ é a interação elétron-buraco (VASCONCELOS et al., 2018). Na Figura 5.43 vemos como a intensidade de fotoluminescência dos éxcitons escuros no vale K se comporta com o aumento do campo magnético paralelo ao plano da amostra. Notamos o aumento significativo dos picos, demonstrando que o campo magnético com essas propriedades mistura os estados excitônicos, fazendo com que os éxcitons escuros fiquem brilhantes, podendo com isso serem operados como qubits excitônicos.

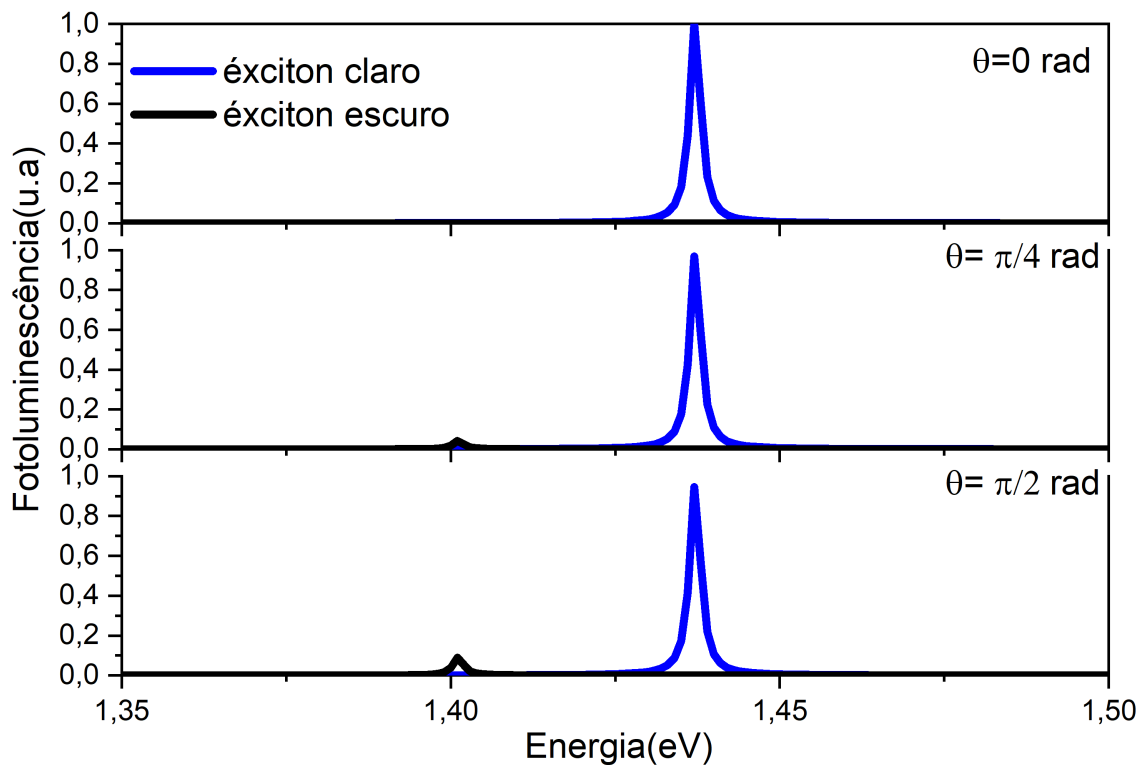


Figura 5.44 – Espectro de fotoluminescência dos éxcitons claros e escuros no vale K em função da energia à 50K: Nota-se que quando o ângulo é de 0 rad, significando que o campo magnético é perpendicular ao plano da amostra não há mistura nos estados excitônicos, fazendo com que não haja clareamento dos éxcitons escuros. Fazendo o ângulo igual à $\frac{\pi}{4}$ rad temos uma componente não nula do vetor campo magnético no plano da amostra fazendo com que haja clareamento de alguns éxcitons escuros. Em contrapartida quando o ângulo é de $\frac{\pi}{2}$ rad, ou seja quando o campo magnético está contido paralelamente ao plano da amostra temos mistura dos estados excitônicos, fazendo com que mais éxcitons escuros brilhem.

Fonte: Feito pelo autor

Já na figura 5.44 temos o espectro de fotoluminescência do vale K dos éxcitons claros e escuros, onde variamos o ângulo do campo magnético. Para $\theta = 0$ temos que o campo magnético está totalmente perpendicular ao plano da amostra, o que não faz com que os éxcitons escuros sejam clareados em virtude da mistura de estados. Para o ângulo de $\frac{\pi}{4}$ rad

temos uma componente do vetor campo magnético sobre o plano fazendo que alguns éxitons escuros sejam clareados. Já para $\theta = \frac{\pi}{2}$ temos que o campo está paralelo ao plano da amostra, fazendo com que haja uma fotoluminescência significativa com relação aos éxitons escuros.

6 Conclusão

No primeiro sistema do capítulo 5 foi verificado que a concorrência sempre decaía para valores nulos, o que faz com que ele não seja atraente para a Computação Quântica, porém, como foi visto anteriormente, ao introduzir uma cavidade bimodal à esse sistema foi conseguido valores significativos para a concorrência, fazendo sim, desse último, um sistema bastante atrativo para esse novo ramo da computação. Notamos também que a interação Coulombiana de exchange desempenhou um papel fundamental para que se obtivesse os estados estacionários para a concorrência (isso na verdade pode ser visto inclusive no primeiro sistema). No terceiro sistema que foi trabalhado conseguimos correlacionar o formalismo da matriz de densidade com o formalismo das equações de taxas, conseguimos encontrar as soluções analíticas para o estado estacionário das populações para um sistema de três níveis, o que pode ser expandido para sistemas maiores. Ainda em relação ao terceiro sistema, foi calculado o espectro de fotoluminescência, onde foi mostrado o efeito de um campo magnético projetado no plano da amostra que pode misturar os estados excitônicos, fazendo com que os éxcitons escuros, que não interagem com a luz, sejam clareados, fazendo com que haja a possibilidade de que essas quasipartículas sejam operáveis, do ponto de vista computacional, uma vez que seus tempo de vida são bastante apreciáveis, comparados com os éxcitons claros.

Concluimos que a cavidade, como intensificador da concorrência, é uma maneira eficaz de transformar um sistema sem emaranhamento (primeiro sistema), podendo ser testado em sistemas maiores, adicionando éxcitons escuros, por exemplo, ou seja, podemos alterar o terceiro sistema que foi analisado, introduzindo mais um vale e uma nanocavidade, e em seguida testar os efeitos dessa última sobre o sistema excitônico, o que motiva que o nosso trabalho continue nessa linha, pois a partir do estudo de algum sistema físico, sempre o modelo pode ser sofisticado para abranger uma maior quantidade de fenômenos. Para o cálculo da fotoluminescência, vimos a importância do campo magnético aplicado no plano da amostra. O obstáculo a ser superado em um próximo trabalho, seria o cálculo da fotoluminescência via equação mestra de Lindblad, pois como foi visto nos resultados obtidos, essa maneira de se calcular a dinâmica excitônica traz consigo mais informação do sistema físico do que via equações de taxas. Em um próximo trabalho também poderemos testar outros materiais do tipo TMD, como o MoTe_2 , que está sendo muito estudado atualmente por suas ótimas propriedades ópticas e eletrônicas.

O campo da Informação Quântica é extremamente rica em possibilidades e há muito trabalho para ser feito até que a humanidade possa desfrutar dessa nova tecnologia plenamente, pois essa área, tão nova e ao mesmo tempo essencial à evolução da tecnologia e até mesmo da própria humanidade, tendo em vista que atualmente os computadores são usados

todos os campos do conhecimento, faz com que cada vez mais pesquisadores voltem seus esforços para torná-la uma realidade para todas as pessoas.

Referências

- ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Solid state physics**. Saunders College Publishing, 1976. Citado na p. 42.
- BAISHYA, A.; SONKAR, S.; BEHERA, B. K.; PANIGRAHI, P. **Demonstration of quantum information splitting using a five-qubit cluster state: an IBM quantum experience**. DOI. Citado na p. 34.
- BORGES H, S.; JÚNIOR, C. A.; BRANDÃO, D. S.; LIU, F.; PEREIRA, V.; XIE, S.; QU, F.; ALCALDE, A. Persistent entanglement of valley exciton qubits in transition metal dichalcogenides integrated into a bimodal optical cavity. **arXiv e-prints**, arxiv-2209, 2022. Citado nas pp. 68, 73, 76, 78, 79, 82, 84.
- BRILLOUIN Zone construction. https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/brillouin_zones/zone_construction.php. acessado em 25/11/2022. Citado na p. 41.
- COOGAN, Á.; GUN'KO, Y. K. Solution-based “bottom-up” synthesis of group VI transition metal dichalcogenides and their applications. **Materials Advances**, Royal Society of Chemistry, v. 2, n. 1, p. 146–164, 2021. Citado na p. 44.
- DAMINELLI, L. M. **Obtenção e caracterização de Heteroestruturas Bidimensionais (2D/2D) construídas a partir de materiais Dicalcogenetos de metais de transição**. 2019. Diss. (Mestrado). Citado na p. 43.
- DE, A.; LAKE, R. K. Strong cavity-pseudospin coupling in monolayer transition metal dichalcogenides. **Physical Review B**, APS, v. 96, n. 3, p. 035436, 2017. Citado nas pp. 76, 78.
- DIAS, A. C. Estrutura eletrônica e propriedades magneto ópticas dos pontos quânticos de dissulfeto de molibdênio, 2016. Citado nas pp. 56, 60.
- DIAS, A. C. Estrutura eletrônica, propriedades ópticas, e dinâmica dos éxcitons no Vale dos dicalcogenetos de metais de transição 2H, 2019. Citado na p. 57.
- FERNÁNDEZ, F. M. The Kronecker product and some of its physical applications. **European Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 37, n. 6, p. 065403, 2016. Citado na p. 74.
- FÖRSTE, J.; TEPLIAKOV, N. V.; KRUCHININ, S. Y.; LINDLAU, J.; FUNK, V.; FÖRG, M.; WATANABE, K.; TANIGUCHI, T.; BAIMURATOV, A. S.; HÖGELE, A. Exciton g-factors in monolayer and bilayer WSe₂ from experiment and theory. **Nature Communications**, Nature Publishing Group, v. 11, n. 1, p. 1–8, 2020. Citado nas pp. 69, 74.

- FREIRE, R. L. H. **Estudos de primeiros princípios da adsorção de água e de etanol sobre ligas de superfície de metais de transição sob efeitos de deformação expansiva e compressiva**. 2017. Tese (Doutorado) – Universidade de São Paulo. Citado na p. 56.
- GUPTA, S. N.; BITTON, O.; NEUMAN, T.; ESTEBAN, R.; CHUNTONOV, L.; AIZPURUA, J.; HARAN, G. Complex plasmon-exciton dynamics revealed through quantum dot light emission in a nanocavity. **Nature communications**, Nature Publishing Group, v. 12, n. 1, p. 1–9, 2021. Citado na p. 89.
- KUMAR, A.; AHLUWALIA, P. Electronic structure of transition metal dichalcogenides monolayers 1H-MX₂ (M= Mo, W; X= S, Se, Te) from ab-initio theory: new direct band gap semiconductors. **The European Physical Journal B**, Springer, v. 85, n. 6, p. 1–7, 2012. Citado na p. 45.
- MATTIELO, F.; SILVA, G. G.; AMORIM, R. G. G. d.; SILVA, W. B. d. Decifrando a computação quântica, 2012. Citado na p. 19.
- MIRÓ, P.; AUDIFFRED, M.; HEINE, T. An atlas of two-dimensional materials. **Chemical Society Reviews**, Royal Society of Chemistry, v. 43, n. 18, p. 6537–6554, 2014. Citado na p. 39.
- MOLAS, M. R.; SLOBODENIUK, A. O.; KAZIMIERCZUK, T.; NOGAJEWSKI, K.; BARTOS, M.; KAPUŚCIŃSKI, P.; ORESZCZUK, K.; WATANABE, K.; TANIGUCHI, T.; FAUGERAS, C. et al. Probing and manipulating valley coherence of dark excitons in monolayer WSe₂. **Physical review letters**, APS, v. 123, n. 9, p. 096803, 2019. Citado nas pp. 76, 78.
- NAPOLITANO, J.; SAKURAI, J. **Mecânica Quântica Moderna, tradução técnica: Silvio Renato Dahmen**. Porto Alegre, 2013. Citado nas pp. 25, 63.
- NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. Quantum information and quantum computation. **Cambridge: Cambridge University Press**, v. 2, n. 8, p. 23, 2000. Citado na p. 76.
- OLIVEIRA, I. S. **Introdução à física do estado sólido**. Editora Livraria da Física, 2005. Citado nas pp. 22, 23, 39, 41.
- RICHE, F. E. Propriedades óticas e dinâmica de vale de estados excitônicos em monocamadas de dicalcogenetos de metais de transição, 2020. Citado nas pp. 44–49, 52, 94.
- RIVERA, P.; SCHAIBLEY, J. R.; JONES, A. M.; ROSS, J. S.; WU, S.; AIVAZIAN, G.; KLEMENT, P.; SEYLER, K.; CLARK, G.; GHIMIRE, N. J. et al. Observation of long-lived interlayer excitons in monolayer MoSe₂–WSe₂ heterostructures. **Nature communications**, Nature Publishing Group, v. 6, n. 1, p. 1–6, 2015. Citado nas pp. 85, 88.

- ROBERT, C.; AMAND, T.; CADIZ, F.; LAGARDE, D.; COURTADE, E.; MANCA, M.; TANIGUCHI, T.; WATANABE, K.; URBASZEK, B.; MARIE, X. Fine structure and lifetime of dark excitons in transition metal dichalcogenide monolayers. **Physical review B**, APS, v. 96, n. 15, p. 155423, 2017. Citado nas pp. 49, 76, 78.
- ROY, M. The tight binding method. **Rutgers University**, v. 5, 2015. Citado nas pp. 57, 60.
- RUAN, J.; LI, Z.; ONG, C. S.; LOUIE, S. G. Two-dimensional single-valley exciton qubit and optical spin magnetization generation. **arXiv preprint arXiv:2211.03334**, 2022. Citado na p. 73.
- SCHWARTZ, I.; SCHMIDGALL, E.; GANTZ, L.; COGAN, D.; BORDO, E.; DON, Y.; ZIELINSKI, M.; GERSHONI, D. Deterministic writing and control of the dark exciton spin using single short optical pulses. **Physical Review X**, APS, v. 5, n. 1, p. 011009, 2015. Citado na p. 94.
- SHAN, H.; IORSH, I.; HAN, B.; RUPPRECHT, C.; KNOPF, H.; EILENBERGER, F.; ESMANN, M.; YUMIGETA, K.; WATANABE, K.; TANIGUCHI, T. et al. Brightening of a dark monolayer semiconductor via strong light-matter coupling in a cavity. **Nature Communications**, Nature Publishing Group, v. 13, n. 1, p. 1–7, 2022. Citado na p. 94.
- SILVA, W. J. N. da. **Uma introdução à Computação Quântica**. 2018. Tese (Doutorado) – Universidade de São Paulo. Citado nas pp. 26, 32, 35, 36.
- TOKMAN, M.; WANG, Y.; BELYANIN, A. Valley entanglement of excitons in monolayers of transition-metal dichalcogenides. **Physical Review B**, APS, v. 92, n. 7, p. 075409, 2015. Citado na p. 75.
- TURING, A. M. et al. On computable numbers, with an application to the Entscheidungsproblem. **J. of Math**, v. 58, n. 345-363, p. 5, 1936. Citado na p. 19.
- UNIT cell and their types (sc, bcc, fcc). <https://totalecer.blogspot.com/2015/12/unit-cell-and-their-types.html>. acessado em 25/11/2022. Citado na p. 40.
- VASCONCELOS, R.; BRAGANCA, H.; QU, F.; FU, J. Dark exciton brightening and its engaged valley dynamics in monolayer wse 2. **Physical Review B**, APS, v. 98, n. 19, p. 195302, 2018. Citado nas pp. 91, 93, 95.
- WHEN was the first computer invented? <https://www.computerhope.com/issues/ch000984.htm>. acessado em 18/10/2022. Citado na p. 20.
- YANG, L.; SINITSYN, N. A.; CHEN, W.; YUAN, J.; ZHANG, J.; LOU, J.; CROOKER, S. A. Long-lived nanosecond spin relaxation and spin coherence of electrons in monolayer MoS₂ and WS₂. **Nature Physics**, Nature Publishing Group, v. 11, n. 10, p. 830–834, 2015. Citado nas pp. 49–51.