

Universidade Estadual de Campinas
Instituto de Física “Gleb Wataghin”

Um estudo sobre processos de descoerência em qubits de estado sólido

Frederico Borges de Brito

Tese apresentada como parte dos
requisitos para obtenção do Grau
de Doutor em Física.

Orientador:
Prof. Dr. Amir Ordacgi Caldeira

Campinas - SP

2006

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP**

B777e

Brito, Frederico Borges de

Um estudo sobre processos de descoerência em qubits de estado sólido / Frederico Borges de Brito. -- Campinas, SP : [s.n.], 2006.

Orientador: Amir Ordacgi Caldeira.

Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".

1. Computação quântica. 2. Sistemas dissipativos quânticos. 3. Caldeira-Leggett, Modelo de. 4. Bloch-Redfield, Teoria de. I. Caldeira, Amir Ordacgi. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". III. Título.

(vsv/ifgw)

- **Título em inglês:** A study of decoherence processes in solid state qubits
- **Palavras-chave em inglês (Keywords):**
 - 1. Quantum computation
 - 2. Quantum dissipative systems
 - 3. Caldeira-Leggett model
 - 4. Bloch-Redfield theory
- **Área de concentração:** Física da Matéria Condensada
- **Titulação:** Doutor em ciências
- **Banca examinadora:**
 - Prof. Amir Ordacgi Caldeira
 - Prof^a Maria Carolina Nemes
 - Prof. Antonio Fernando R. de Toledo Piza
 - Prof. Marcos Cesar de Oliveira
 - Prof. José Antonio Roversi
- **Data da defesa:** 20.02.2006

Para Graça, Euvaldo, Tiago e Ana, com
muito amor.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Amir Caldeira pela orientação, apoio e confiança durante todo este período.

A Harry Westfahl Jr. pelas frutíferas discussões sobre pontos quânticos.

A David P. DiVincenzo, Guido Burkard e Roger H. Koch pela oportunidade de visitá-los e de colaborar em tópicos tão interessantes.

Ao Prof. Antonio Hélio pela hospitalidade e suporte dispensados durante todo o meu estágio sanduíche.

Aos amigos de todas as horas: Fernando Parisio, Liliana Sanz, Maria Carolina, Marina Leite e Rodrigo Caetano, pelos bons momentos vividos ao longo desses quatro anos.

A Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pelo suporte financeiro do meu doutorado (Processo: 01/05748-6).

Um estudo sobre processos de descoerência em qubits de estado sólido

Frederico Brito

RESUMO

Esta tese teve como objetivo estudar processos de perda de coerência quântica, chamados de descoerência, em sistemas de matéria condensada eleitos pela literatura como possíveis implementações do bit quântico (qubit). Esta perda de coerência quântica ocorre devido ao inevitável acoplamento do sistema de interesse com o seu ambiente. Como os estados de superposição quântica são a chave para a realização de operações baseadas na lógica quântica, tem-se que tais processos limitam ou até mesmo impedem o uso de determinados sistemas na esperada realização física do computador quântico. Os sistemas de matéria condensada padecem de uma dificuldade maior para se isolar o qubit do seu ambiente, o que acarreta, em geral, na observação de tempos de coerência piores do que os encontrados em seus concorrentes. Por outro lado, a possibilidade de construção de vários qubits acoplados e de manipulação de cada um de modo individual, usando-se técnicas convencionais de engenharia, têm impulsionado esforços nestes tipos de dispositivos. Os sistemas abordados na tese foram: qubits supercondutores contendo junções Josephson; e qubits de pontos quânticos. Para a investigação completa do primeiro tipo tivemos que desenvolver o modelo Caldeira-Leggett para o caso de várias fontes de dissipação acopladas ao qubit. Com a prescrição apresentada aqui, pudemos determinar o número de banhos de osciladores necessários para a correta descrição das fontes, e verificar que as taxas totais de relaxação e de descoerência não são necessariamente as somas das taxas devido a cada fonte individualmente. Além disso, pudemos aplicar o formalismo desenvolvido no estudo de um qubit de fluxo em investigação. Para o sistema de pontos quânticos seguimos a linha de determinação do banho efetivo visto pelo grau de liberdade de spin do elétron aprisionado no ponto quântico. Determinada a função espectral efetiva, pudemos encontrar soluções analíticas para a dinâmica do valor esperado para cada uma das componentes de spin $\sigma_{x,y,z}$, o que permitiu uma análise completa dos efeitos de cada parâmetro físico do sistema. Em ambos os casos, fomos capazes de indicar os melhores regimes de operação de cada qubit, e dar estimativas dos tempos de relaxação e de descoerência.

A study of decoherence processes in solid state qubits

Frederico Brito

ABSTRACT

The purpose of this thesis was to study the process of loss of quantum coherence, named decoherence, in condensed matter systems cited in the literature as possible candidates for the implementation of a quantum bit (qubit). Decoherence occurs due to the inevitable coupling of the system of interest to its environment. Once the quantum superposition states are the key to perform operations based on quantum logic, these processes limit, or even hinder, the utilization of some of those systems in the physical realization of the quantum computer. Relatively to its competitors, condensed matter systems usually present a higher degree of difficulty as one tries to minimize the coupling between the qubit and its environment, which, generally, worsens its coherence time observations. On the other hand, these devices present advantages which stimulates its study, such as: the possibility of construction of several coupled qubits and the possibility of manipulating each one individually, using conventional engineering techniques. The systems studied in this thesis were: superconducting qubits with Josephson junctions; and electronic spins quantum dots. Aiming at a complete investigation of the first system, we developed the Caldeira-Leggett model for the case of several dissipation sources coupled to the qubit. With the prescription presented here, we determine the number of oscillator baths needed to the correct description of the noise sources, and verify that the total relaxation and decoherence rates are not necessarily the sum of the individual rates relative to each source. Moreover, we applied this formalism to the study of a flux qubit currently under investigation. For the quantum dot qubits, we employed the effective bath approach to treat the dynamics of the spin of the electron localized in the quantum dot. As a result, we found analytical solutions for the dynamics of the average value of each one of the spin components $\sigma_{x,y,z}$. In both cases, we indicated the best operational regime of each qubit and gave estimates of the relaxation and decoherence times.

CONTEÚDO

1	Introdução	1
2	Qubits Supercondutores	5
2.1	Introdução	5
2.1.1	Efeito Josephson	6
2.1.2	Qubits supercondutores de carga	8
2.1.3	Qubits supercondutores de fluxo	11
2.2	O modelo	13
2.2.1	Modelo Caldeira-Leggett para várias fontes de dissipação	16
2.2.2	Não-aditividade das taxas de relaxação em qubits supercondutores .	20
2.2.3	Aplicação da aproximação de Born-Oppenheimer	23
2.3	Resultados	25
2.3.1	Taxas	35
2.3.1.1	Não-aditividade das taxas	38
2.3.1.2	T_{1s}	40
2.3.1.3	T_{1l}	41
2.3.1.4	$T_{\phi s}$	43
2.3.1.5	$T_{\phi l}$	44
2.3.1.6	Capacitâncias “parasitas” vs. caso “limpo”	45
2.3.1.7	Taxas totais	47
2.4	Conclusão	49
3	Pontos quânticos	51
3.1	Introdução	51

3.2	Banho estruturado para spins de interação spin-órbita	52
3.3	Equações de Bloch-Redfield	55
3.3.1	$\epsilon(t) = 0$	57
3.3.2	Caso: $\epsilon(t) = \epsilon_0 \cos(\Omega t)$	59
3.3.3	Análise das soluções	64
3.4	Resultados	66
3.5	Conclusão	74
Bibliografia		75
Apêndice A – Matrizes da teoria dos grafos		79
A.1	Teoria dos grafos para circuitos	79
A.2	Matriz $\mathbf{L}_c$	84
Apêndice B – Integrais dos coeficientes das equações de Bloch-Redfield		85
B.1	$I_1^{(j)}[y; g(x), t]$	87
B.1.1	$\int_0^b dx g(x) \frac{\sin[t(x-y)]}{x-y}$	88
B.1.2	$\int_0^b dx g(x) \frac{\sin[t(x+y)]}{x+y}$	90
B.2	$I_2^{(j)}[y; g(x), t]$	90

LISTA DE FIGURAS

2.1	Modelo RSJ para uma junção Josephson.	8
2.2	(a) Qubit de carga mais simples contendo uma junção Josephson. (b) Qubit de carga com energia de acoplamento Josephson ajustável através do fluxo externo aplicado ao anel.	9
2.3	Potencial do SQUID em função do fluxo externo aplicado Φ_x , sob a condição de parâmetros $\beta_L = (2\pi/\Phi_0)^2 LE_J > 1$	12
2.4	Novo qubit da IBM. (a) Esquema da preparação experimental do qubit acoplado a um oscilador harmônico. (b) Foto do qubit. (c) Máscara usada para a confecção das junções. Figura gentilmente cedida por Roger H. Koch.	13
2.5	Novo qubit da IBM, desenhado como um grafo de rede.	27
2.6	Gráfico de contorno do potencial $U'(\mathbf{f})$, eq. (2.74), na linha de simetria, para os valores de fluxo $\Phi_c = 0.36\Phi_0$ e $\Phi = \Phi_0$	29
2.7	Gráficos do potencial U' , eq. (2.74), na vizinhança dos mínimos relevantes, para cada uma das componentes ortogonais de $\mathbf{f}$	30
2.8	Valores da fase associada à junção Josephson J_1 para os pontos de mínimo do potencial, como função do fluxo de controle Φ_c , na linha de simetria.	31
2.9	Valores da fase associada à junção Josephson J_2 para os pontos de mínimo do potencial, como função do fluxo de controle Φ_c , na linha de simetria.	32
2.10	Valores da fase associada à junção Josephson J_3 para os pontos de mínimo do potencial, como função do fluxo de controle Φ_c , na linha de simetria.	33
2.11	Valores da fase associada à capacitância parasita C_4 para os pontos de mínimo do potencial, como função do fluxo de controle Φ_c , na linha de simetria.	33
2.12	Valores da fase associada à capacitância parasita C_5 para os pontos de mínimo do potencial, como função do fluxo de controle Φ_c , na linha de simetria.	34
2.13	Valor da barreira de potencial na linha de simetria como função de Φ_c	34

2.14	Energia de separação entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado, $h\nu_{01} = \langle 1 \mathcal{H}_S 1\rangle - \langle 0 \mathcal{H}_S 0\rangle$, como função do fluxo de “controle” Φ_c na linha de simetria.	35
2.15	Simulação da corrente circulante no <i>loop</i> de aquisição de dados, como função do fluxo Φ , parametrizada pelo fluxo Φ_c	36
2.16	Tempo de relaxação como função de $\text{Re}Z_i$, para $M_{13} = 0.5\text{pH}$, na situação de acoplamento mais intenso.	39
2.17	Tempo de relaxação T_{1s} associado à fonte de dissipação Z_1 , para o caso contendo capacitâncias “parasitas”.	40
2.18	Tempo de relaxação T_{1l} associado à fonte de dissipação Z_2 , para o caso contendo capacitâncias “parasitas”.	42
2.19	Tempo de descoerência $T_{\phi s}$ associado à fonte de dissipação Z_1 , para o caso contendo capacitâncias “parasitas”.	43
2.20	Tempo de descoerência $T_{\phi l}$ associado à fonte de dissipação Z_2 , para o caso contendo capacitâncias “parasitas”.	45
2.21	Tempo de relaxação T_{1s} associado à fonte de dissipação Z_1 , para o caso sem capacitâncias “parasitas”.	46
2.22	Tempo de descoerência $T_{\phi l}$ associado à fonte de dissipação Z_2 , para o caso sem capacitâncias “parasitas”.	46
2.23	Potencial $U'(\mathbf{f})$, eq. (2.74), ao longo da coordenada “lenta” $f_{\parallel}$ para os casos contendo (linha sólida) e não contendo (linha tracejada) capacitâncias “parasitas”.	47
2.24	Gráficos das posições dos mínimos ($L_i - R_i$) na coordenada “lenta” $f_{\parallel}$ como função de Φ_c ao longo da linha de simetria.	48
2.25	Tempos T_1 , T_{ϕ} e T_2 , ao longo da linha de simetria, $\Phi = \Phi_0$	49
3.1	Função espectral efetiva para spins de interação spin-órbita.	56
3.2	Taxa de relaxação Γ como função da frequência do campo externo oscilante Ω	66
3.3	Taxa de relaxação Γ como função da intensidade do campo externo, ϵ_0	67
3.4	Evolução temporal do valor esperado da componente de spin $\sigma_x(t)$ para o caso da ressonância $\Omega \approx \Delta - \gamma$, usando-se valores de estrutura volumétrica para os parâmetros físicos do ponto quântico.	68

3.5	Evolução temporal do valor esperado da componente de spin $\sigma_z(t)$ para o caso da ressonância $\Omega \approx \Delta - \gamma$, usando-se valores de estrutura volumétrica para os parâmetros físicos do ponto quântico.	68
3.6	Evolução temporal do valor esperado da componente de spin $\sigma_x(t)$ para o caso fora da ressonância $\Omega \approx 0.8\Delta$, usando-se valores de estrutura volumétrica para os parâmetros físicos do ponto quântico.	69
3.7	Evolução temporal do valor esperado da componente de spin $\sigma_z(t)$ para o caso fora da ressonância $\Omega \approx 0.8\Delta$, usando-se valores de estrutura volumétrica para os parâmetros físicos do ponto quântico.	69
3.8	Evolução temporal do valor esperado da componente de spin $\sigma_x(t)$ para o caso fora da ressonância $\Omega \approx \Delta$, assumindo-se a interação spin-órbita aproximadamente 10^2 vezes mais intensa.	71
3.9	Detalhe das primeiras oscilações da evolução temporal do valor esperado da componente de spin $\sigma_x(t)$ para o caso fora da ressonância $\Omega \approx \Delta$, assumindo-se a interação spin-órbita aproximadamente 10^2 vezes mais intensa.	71
3.10	Evolução temporal do valor esperado da componente de spin $\sigma_z(t)$ para o caso fora da ressonância $\Omega \approx \Delta$, assumindo-se a interação spin-órbita aproximadamente 10^2 vezes mais intensa.	72
3.11	Regime de tempos longos para o valor esperado da componente de spin $\sigma_z(t)$ para o caso fora da ressonância $\Omega \approx \Delta$, assumindo-se a interação spin-órbita aproximadamente 10^2 mais intensa.	72
3.12	Evolução temporal completa do valor esperado da componente de spin $\sigma_x(t)$ para o caso na ressonância $\Omega \approx \Delta - \gamma$, assumindo-se a interação spin-órbita aproximadamente 10^2 vezes mais intensa.	73
3.13	Detalhe das primeiras oscilações da evolução temporal do valor esperado da componente de spin $\sigma_x(t)$ para o caso na ressonância $\Omega \approx \Delta - \gamma$, assumindo-se a interação spin-órbita aproximadamente 10^2 vezes mais intensa.	73
A.1	Exemplo de construção de um grafo. (a) Circuito contendo um SQUID com junção RSJ (elementos b_3 - b_6) acoplado à uma fonte de fluxo externa (elementos b_1 e b_2). (b) Um grafo orientado do circuito. (c) Árvore escolhida para o grafo, cujas cordas são os elementos b_1 , b_3 , b_4 e b_6	79
B.1	Contornos no plano complexo utilizados para calcular as integrais em frequência dos coeficientes das equações de Bloch-Redfield.	87

B.2	Integral $I_1^{(0)}$ calculada usando a solução analítica encontrada (curva sólida) e feita numericamente exata (curva tracejada).	91
B.3	Integral $I_2^{(0)}$ calculada usando a solução analítica encontrada (curva sólida) e feita numericamente exata (curva tracejada).	92

1 INTRODUÇÃO

Na última década houve um grande esforço para o entendimento e controle da perda de efeitos quânticos em sistemas nano-mesoscópicos. Essa perda dos efeitos quânticos decorre da interação desses sistemas, que nunca podem ser considerados sistemas isolados, com o meio externo [1, 2] (chamado genericamente de reservatório). A motivação principal para tal esforço se deu após a demonstração de que um computador baseado na lógica quântica seria capaz de implementar tarefas de maneira muito mais eficiente, quando comparado com o seu análogo clássico. O melhor exemplo dessa capacidade é o problema da fatoração de um número em seus fatores primos, demonstração dada por Peter Shor em 1994 [3] e realizada experimentalmente [4] em 2001, utilizando-se técnicas de Ressonância Nuclear Magnética (NMR) para fatorar o número $N = 15$. A chave dessa potencialização de eficiência está no “paralelismo” quântico, decorrente de estados de superposição quântica. Operar, linearmente, em estados deste tipo tem o mesmo “efeito” de uma computação paralela, porém efetuando-se apenas uma única operação. Contudo esse paralelismo natural dos sistemas quânticos só se revela com uma escolha adequada de operações lógicas (os algoritmos quânticos). Diversos sistemas foram lançados como possíveis candidatos à implementação do bit quântico (qubit), entre eles têm-se destacado [3, 5], por exemplo, experimentos em NMR, pontos quânticos, íons aprisionados, cavidades ópticas e junções Josephson. Um exemplo de que muito se avançou no entendimento dos mecanismos de perda de coerência quântica nestes dispositivos propostos está no fato de que, desde a primeira observação de oscilações coerentes em qubits Josephson [6], os tempos de coerência observados nestes dispositivos aumentaram três ordens de grandeza.

Um bom número de sistemas em estudo já possibilitam operações lógicas confiáveis e alcançam o número considerado necessário de operações realizadas dentro do tempo de coerência, a saber 10^4 [7], para a realização do computador quântico. Apesar desse sucesso, pouco se sabe como manter coerência quântica entre vários sistemas distintos acoplados (conhecido como emaranhamento quântico) por um tempo razoável. Resultados recentes [8] demonstram que os tempos de coerência devem diminuir exponencialmente à medida que o número de qubits do sistema é aumentado. Aliado a este problema, também existe a dificuldade experimental em se criar e controlar de modo adequado tal

acoplamento. Todos esses pontos associados, juntamente com a perda da fidelidade de acesso individual a cada qubit, levam à uma drástica redução da eficiência da computação quântica (uma vez que se espera que um bom computador quântico opere com pelo menos algumas centenas de qubits), não permitindo ainda vislumbrar com segurança, no horizonte próximo, a realização do esperado computador quântico de “mesa”.

Sob os aspectos de construção, controle e acesso à cada ente em dispositivos contendo vários qubits, os sistemas de matéria condensada, por herdarem todo um arcabouço de técnicas desenvolvidas até então, levam vantagem em relação as demais propostas de implementação física do computador quântico. Isto tem gerado um crescente interesse pelo estudo destes dispositivos. Por outro lado, a dificuldade maior em se isolar os qubits do acoplamento com o meio externo, faz com que os tempos de coerência observados nestes sistemas sejam, em geral, não muito bons. É neste contexto que se insere o trabalho desenvolvido desta tese. Estivemos interessados em estudar os processos de descoerência presentes em qubits de matéria condensada, procurando indicar meios e regimes de operação nos quais os efeitos do acoplamento com o meio externo sejam amenizados. Optamos por focar em dispositivos supercondutores contendo junções Josephson e em dispositivos de pontos quânticos. Cada qual apresenta seus pontos positivos e negativos. Para os qubits supercondutores, a necessidade de se operar no regime de baixas temperaturas, em geral da ordem de dezenas mK [9–11], de modo a suprimir a circulação de corrente normal, constitui a maior crítica a este tipo de dispositivo. Como pontos positivos tem-se a fácil construção e a alta fidelidade das operações e medições dos estados do qubit. Para os pontos quânticos, a observação de bons tempos de coerência, 1 – 20ms [12,13], conta a favor do uso destes. Já a dificuldade para a detecção do sinal do sistema conta desfavoravelmente.

O trabalho desenvolvido nesta tese está exposto do seguinte modo:

- O primeiro capítulo e o apêndice A versam sobre qubits supercondutores. Após uma breve introdução da física envolvida nestes dispositivos, introduzimos o modelo Caldeira-Leggett [2] para uma situação na qual o qubit encontra-se acoplado a várias fontes de dissipação conhecidas no problema, que no caso em questão, são as resistências e as impedâncias associadas às fontes de fluxo e/ou corrente externas. Vale ressaltar que o modelo apresentado é completamente geral, valendo para qualquer outro sistema (por exemplo, o sistema poderia ser um spin interagindo com fônons e mágnons). Com a prescrição adotada, pudemos determinar o número de banhos necessários para descrição do ambiente. Em seguida passamos a análise das contribuições das fontes de dissipação para a relaxação. Verificamos que, em geral, as taxas totais não são necessariamente a soma das taxas devido à cada fonte isoladamente. Encontramos um termo de interferência no cálculo das taxas totais que

representa a interação indireta entre as fontes mediada pelo qubit. A verificação da não-aditividade das taxas também tem sido observada em outras situações. de Ponte e colaboradores [14] verificaram que para o caso de acoplamento forte entre dois osciladores dissipativos, cada qual acoplado à uma fonte de dissipação, é possível encontrar uma assinatura da interferência entre as fontes de dissipação. Finalizando, aplicamos o formalismo desenvolvido para um caso de qubit de fluxo que vem sendo investigado experimentalmente [9, 15]. Ao apêndice A é deixada a apresentação dos elementos da teoria de grafos necessários para a dedução da equação de movimento (2.20) e a exposição das matrizes pertinentes a este cálculo.

- O segundo capítulo e o apêndice B discutem o caso de qubits de pontos quânticos. Após a apresentação do problema, passamos à análise do banho efetivo visto pelo grau de liberdade de spin do elétron aprisionado no ponto quântico, deduzida por Westfahl Jr. e colaboradores [16] para spins de interação spin-órbita. Determinada a função espectral efetiva que rege a dissipação do spin, estudamos a sua dinâmica através das soluções das equações de Bloch-Redfield. Pudemos encontrar soluções analíticas aproximadas para tais equações, e verificar quais parâmetros físicos desempenham papel importante para a dinâmica dissipativa. O apêndice B contém o cálculo dos coeficientes das equações de Bloch-Redfield. Para poder obter as soluções analíticas apresentadas, e devido à complexa estrutura da função espectral, tivemos que desenvolver uma aproximação para o cálculo das integrais em frequência.

2 QUBITS SUPERCONDUTORES

Esta parte da tese tratará da investigação dos processos de descoerência em qubits supercondutores na presença de diversas fontes de dissipação distintas. Para tal, consideraremos o modelo Caldeira-Leggett contendo vários banhos de osciladores. Deduz-se dos resultados que o número de banhos não é necessariamente igual ao de fontes de dissipação acopladas ao qubit, e que as taxas totais de relaxação e de descoerência não são as somas das taxas devidas a cada fonte individualmente. Além disso, desenvolvemos uma aplicação geral da aproximação de Born-Oppenheimer para reduzir o cálculo envolvido na solução da equação de Schrödinger e assim tornar mais palatável a interpretação dos resultados. Toda a formulação desenvolvida é aplicada ao estudo de um qubit de fluxo em investigação [9, 15], fornecendo uma análise completa da dissipação deste sistema.

2.1 Introdução

As primeiras propostas de utilização de dispositivos supercondutores como realizações físicas de um qubit ocorreram entre 1997 e 1999 [17, 18], e desde então esta área tem sido alvo de intensa pesquisa teórica e experimental [9, 15, 17–23]. Tais dispositivos consistem de circuitos elétricos feitos em uma base supercondutora. O elemento chave destes circuitos é a existência de junções Josephson em sua composição, cuja presença gera uma rica estrutura de mínimos na energia potencial eletromagnética (doravante, o potencial) destes sistemas. Os dispositivos são operados variando-se tensões, correntes ou fluxos magnéticos aplicados externamente. Sob condições adequadas, a estrutura do potencial do sistema pode ser modificada para ter a forma de poço duplo, cujos estados de cada poço correspondem a estados macroscopicamente distinguíveis de corrente e/ou fluxo. A baixas temperaturas a dinâmica do sistema fica restrita aos dois primeiros auto-estados de energia do sistema, permitindo a implementação destes dispositivos como qubits. Várias observações experimentais de efeitos quânticos, tais como tunelamento quântico macroscópico [24, 25] e espectroscopia dos auto-estados de energia [6], já foram realizadas nestes dispositivos, porém o estado da arte nestes experimentos envolvendo qubits supercondutores é a observação de oscilações coerentes quânticas entre dois estados do sistema. Tais

experimentos foram realizados recentemente para os dois principais qubits supercondutores, o qubit de carga [10, 11] e o de fluxo [20], dando grande impulso à área. Experimentos envolvendo dois qubits acoplados também têm sido apresentados [21, 26]. Os qubits de carga e de fluxo são diferenciados uns dos outros pela relação entre a energia de acoplamento Josephson, E_J , e a de carga, E_C , das junções utilizadas. Os qubits de carga têm $E_C \gg E_J$ e são adequadamente descritos por estados de carga. Já os qubits de fluxo encontram-se no outro regime, $E_J \gg E_C$. Antes de apresentarmos com mais detalhe cada um destes dispositivos, faremos primeiramente uma breve revisão do efeito Josephson [27].

2.1.1 Efeito Josephson

O efeito Josephson foi apresentado pela primeira vez em 1962, e previa a possibilidade de existir corrente supercondutora fluindo entre dois supercondutores separados por uma barreira fina de isolante. A predição apresentada mostrava que a diferença entre as fases das funções de onda de cada supercondutor pode se ajustar para permitir o transporte de corrente constante, cujo valor máximo que a junção pode suportar é chamado de corrente crítica, I_c . A famosa relação do efeito Josephson é dada por [27]

$$I = I_c \sin \varphi, \quad (2.1)$$

onde $\varphi \equiv \theta_2 - \theta_1$ é a diferença entre as fases das funções de onda do supercondutor 2 e 1. Hoje se sabe que o efeito Josephson é muito mais geral, ocorrendo não apenas para o caso de supercondutores separados por uma barreira isolante, mas em qualquer situação na qual dois supercondutores estejam conectados por um contato fraco [27]. O contato fraco pode ser uma barreira de isolante, uma camada de metal normal, ou pode ser uma constrição feita com outro material supercondutor. Além deste resultado, Josephson pôde prever que se uma tensão V for mantida através da junção, a diferença entre as fases tem a seguinte evolução temporal

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{2eV}{\hbar}. \quad (2.2)$$

Com as relações (2.1) e (2.2), podemos calcular a energia armazenada na junção como, a menos de uma constante, $\int IV dt = (\hbar/2e) \int I_c \sin \varphi d\varphi = -E_J \cos \varphi$, sendo $E_J \equiv (\Phi_0 I_c / 2\pi)$. $\Phi_0 \equiv h/2e \approx 2.07 \times 10^{-15}$ Wb é o quantum de fluxo.

A dedução do efeito Josephson pode ser feita de maneira simples (a derivação apresentada aqui foi dada por Feynman [28]), partindo-se da hipótese de que a função de onda do estado fundamental do supercondutor possa ser descrita como uma função de apenas uma variável (*single particle wave function*).^{*} Deste modo tem-se a função de onda do

^{*}Uma outra possível visão desta função de onda é considerá-la, para sistemas invariantes por translação, como sendo descrita pela variável do centro de massa do condensado [29].

supercondutor dada por

$$\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{n(\mathbf{r})}e^{i\theta(\mathbf{r})}. \quad (2.3)$$

Voltando ao problema de supercondutores separados por uma barreira de isolante, vamos assumir que a espessura da barreira é dada por d . Caso d seja pequeno de tal maneira que ainda permita uma sobreposição (*overlap*) apreciável entre as funções de onda dos supercondutores, as equações de Schrödinger dos supercondutores devem ser dadas aproximadamente por

$$i\hbar\dot{\psi}_1 = E_1\psi_1 + \Delta\psi_2, \quad (2.4)$$

$$i\hbar\dot{\psi}_2 = E_2\psi_2 + \Delta^*\psi_1. \quad (2.5)$$

Considerando Δ real e supondo que não há campo externo aplicado, $\mathbf{A} = 0$, obtemos o seguinte conjunto de equações usando (2.3)

$$-\hbar\dot{\theta}_1 = \Delta\sqrt{\frac{n_2}{n_1}}\cos(\theta_2 - \theta_1) + E_1, \quad (2.6)$$

$$-\hbar\dot{\theta}_2 = \Delta\sqrt{\frac{n_1}{n_2}}\cos(\theta_2 - \theta_1) + E_2, \quad (2.7)$$

$$\dot{n}_1 = \frac{2\Delta}{\hbar}\sqrt{n_1n_2}\sin(\theta_2 - \theta_1) = -\dot{n}_2. \quad (2.8)$$

Assumindo $n_1 \approx n_2 = n_s$, e como n_1 nos dá a corrente através da junção, obtemos as equações do efeito Josephson

$$I = I_c \sin \varphi \quad (2.9)$$

$$\dot{\varphi} = -\frac{2eV}{\hbar}, \quad (2.10)$$

com $\varphi \equiv \theta_2 - \theta_1$, $I_c \equiv 2n_s\Delta/\hbar$ e $(E_2 - E_1) = 2eV$.

Até então apresentamos o efeito Josephson considerando a junção ideal, porém um modelo mais real se faz necessário em situações envolvendo tensões finitas aplicadas ao circuito. O modelo usualmente adotado é o RSJ [27] (*resistively shunted junction*), no qual a junção Josephson real é modelada por uma ideal descrita por (2.1), com uma resistência R e uma capacitância C associadas em paralelo. A Fig. 2.1 apresenta a representação esquemática de uma junção RSJ. A corrente total que passa pela junção Josephson é composta agora de três componentes, a saber

$$I = I_c \sin \varphi + \frac{V}{R} + C\frac{dV}{dt}, \quad (2.11)$$

onde o primeiro termo representa o tunelamento de pares de Cooper através do contato fraco, o segundo termo (lei de Ohm) origina-se do movimento de corrente normal, onde

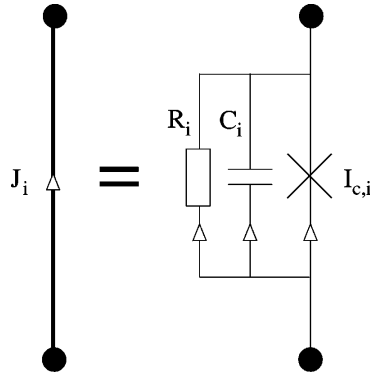


FIGURA 2.1 - Modelo RSJ para uma junção Josephson. Cada junção J_i tem associado em paralelo uma resistência R_i (devido à corrente normal) e um capacitor C_i .

V é a tensão aplicada através da junção e a resistência R , no modelo RSJ, é a resistência do estado normal. Por fim, o último termo, originado pela existência de uma capacitância finita na junção, representa o termo de carga do capacitor.

Com a introdução do modelo RSJ para tratar as junções, verificamos que os dispositivos contendo junções passam a ter duas escalas de energia distintas. Uma é dada pela energia de acoplamento Josephson $E_J \equiv \Phi_0 I_c / 2\pi$, e a outra é a energia de carga do capacitor $E_C \equiv e^2 / 2C$. Essas escalas de energia distinguem os atuais dispositivos supercondutores em duas categorias: os dispositivos contendo junções de capacitância baixa, de modo que $E_C \gg E_J$, chamados de qubits de carga; e aqueles nos quais a energia de acoplamento Josephson é a escala de energia relevante, $E_J \gg E_C$. Passaremos agora a apresentação de cada um destes dispositivos (para uma longa revisão destes qubits, vide [19]).

2.1.2 Qubits supercondutores de carga

Qubits de carga são constituídos de junções de capacitâncias baixas, tal que a energia de carga domine a energia de acoplamento Josephson, isto é $E_C \gg E_J$ (tipicamente E_C é da ordem de 10 vezes maior que E_J nestes dispositivos), tornando-se assim a escala de energia relevante do problema. O material escolhido para se construir o dispositivo deve ser tal que o *gap* supercondutor seja a maior escala de energia do problema. Deste modo, a baixas temperaturas, o tunelamento de quase-partículas através da junção é evitado, reduzindo-se a dissipação devido ao fluxo de elétrons normais e assegurando-se que apenas pares de Cooper tunelem. Os estados de carga são mais apropriados para descrever a dinâmica do dispositivo. Sob condições adequadas, tal dinâmica pode ficar restrita aos dois primeiros auto-estados do dispositivo (que diferem entre si por apenas um par de Cooper), servindo então como uma realização física de um qubit.

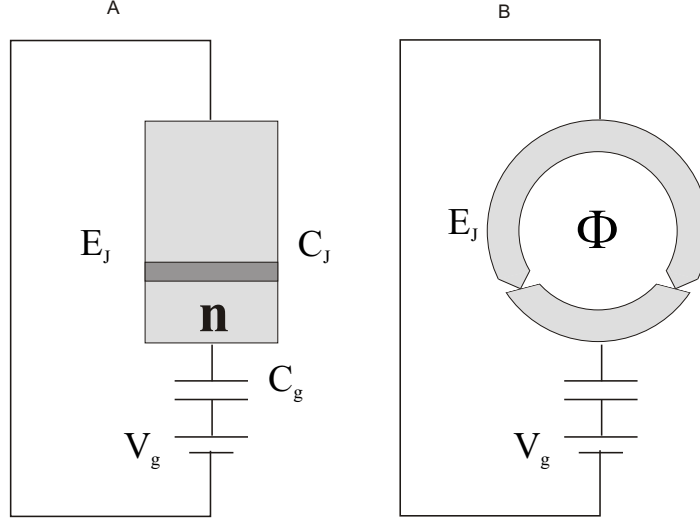


FIGURA 2.2 - (a) Qubit de carga mais simples contendo uma junção Josephson. (b) Qubit de carga com energia de acoplamento Josephson ajustável através do fluxo externo aplicado ao anel.

A Fig. 2.2(a) apresenta o qubit de carga mais simples possível. Ele consiste de uma pequena região supercondutora contendo um excesso de n pares de Cooper, conectado a um eletrodo supercondutor, que age como um reservatório de cargas, através de uma junção com energia de acoplamento Josephson E_J e capacitância C_J . O dispositivo é operado variando-se uma tensão de controle V_g . A energia de carga neste caso é dada por

$$E_C \equiv \frac{e^2}{2C_J} + \frac{e^2}{2C_g}. \quad (2.12)$$

O hamiltoniano do sistema pode ser então escrito como

$$\mathcal{H} = 4E_C(n - n_g)^2 - E_J \cos \varphi, \quad (2.13)$$

onde $n = -i\hbar\partial/\partial(\hbar\varphi)$ é o operador número de pares de Cooper em excesso na pequena região supercondutora, sendo canonicamente conjugado com a diferença de fase $\hbar\varphi$. O parâmetro adimensional $n_g \equiv C_g V_g / 2e$, determina o efeito da tensão de controle. Escrevendo o hamiltoniano na representação dos estados de carga teremos[†]

$$\mathcal{H} = \sum_n \left\{ 4E_C(n - n_g)^2 |n\rangle\langle n| - \frac{1}{2}E_J(|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|) \right\}. \quad (2.14)$$

[†]A passagem para a representação dos estados de cargas pode ser feita observando-se que $\langle\varphi|n\rangle = e^{in\varphi}/\sqrt{2\pi}$. Deste modo, tem-se que: $\cos \hat{\varphi} = \int d\varphi \cos \varphi |\varphi\rangle\langle\varphi| = \sum_{n,m} \int d\varphi \cos \varphi |n\rangle\langle n|\varphi\rangle\langle\varphi|m\rangle\langle m| = \frac{1}{2} \sum_{n,m} |n\rangle\langle m| \int d\varphi \left\{ \frac{e^{i\varphi(m-n+1)}}{2\pi} + \frac{e^{i\varphi(m-n-1)}}{2\pi} \right\} = \frac{1}{2} \sum_{n,m} |n\rangle\langle m| \{ \delta(m-n+1) + \delta(m-n-1) \}$. Obtendo assim a forma apresentada na eq. (2.14).

Observe que quando $n_g = 1/2$, os estados $n = 0$ e $n = 1$ seriam degenerados se $E_J = 0$, estando os demais estados bem afastados em energia. Assim, próximos ao ponto de degenerescência e no regime de baixas temperaturas, apenas os estados $n = 0$ e $n = 1$ desempenham papel importante na dinâmica. Com a presença do termo de acoplamento Josephson, os estados relevantes passam a se sobrepor de maneira apreciável, gerando a condição ideal para a implementação do dispositivo como um qubit. Neste regime de operação, o sistema pode ser mapeado como um hamiltoniano de spin $1/2$ dado por

$$\mathcal{H}_{deg} = -\frac{1}{2}B_z\sigma_z - \frac{1}{2}B_x\sigma_x, \quad (2.15)$$

onde $|\uparrow\rangle \equiv |n = 0\rangle$ e $|\downarrow\rangle \equiv |n = 1\rangle$. Também temos que a amplitude de tunelamento e o termo Zeeman são dados respectivamente por $B_x \equiv E_J$ e $B_z \equiv 4E_C(1 - 2n_g)$. Observe que com o arranjo experimental da Fig. 2.2(a) somos capazes de controlar a separação de energia de carga através da tensão externa aplicada, porém a amplitude de tunelamento é fixa neste dispositivo. Este fato representa uma limitação no controle do dispositivo apresentado. Apesar desta limitação, já se pode implementar operações de um qubit neste dispositivo [19].

Na busca do maior controle possível dos parâmetros que desempenham papel importante na dinâmica do qubit, os dispositivos propostos atualmente apresentam uma estrutura muito mais complexa, em geral contendo várias junções Josephson. A Fig. 2.2(b) apresenta um qubit contendo duas junções, no qual a amplitude de tunelamento entre os mínimos é um parâmetro controlado externamente. Isto é alcançado aplicando-se fluxo magnético externo no interior do *loop*. Neste caso, a condição de quantização do fluxo no interior do anel é modificada devido à presença das junções para: $\Phi + \frac{\Phi_0}{2\pi}\varphi_1 - \frac{\Phi_0}{2\pi}\varphi_2 = m\Phi_0$, onde φ_i representa a diferença da fase supercondutora através da junção i , e m é um número inteiro. Se a auto-indutância do *loop* for pequena, o qubit é descrito por um hamiltoniano da forma (2.2), com a energia de acoplamento Josephson dada por (assumindo que as junções são idênticas)

$$-E_J \cos \varphi_1 - E_J \cos \varphi_2 = -2E_J \cos \left(\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \right) \cos \varphi, \quad (2.16)$$

onde $\varphi \equiv \varphi_2 - \varphi_1$. Escolhendo o regime de parâmetros onde apenas dois estados de carga desempenham papel importante, obtém-se o hamiltoniano de spin (2.15), com o acoplamento Josephson efetivo

$$B_x = E_J(\Phi) = 2E_J \cos \left(\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \right), \quad (2.17)$$

que é uma função do fluxo externo. Assim, com a estrutura de duas junções apresentada, já somos capazes de manipular tanto a energia de separação entre os estados, quanto a

amplitude de tunelamento. Permitindo uma implementação mais simples e mais confiável de portas lógicas de um qubit.

2.1.3 Qubits supercondutores de fluxo

O outro regime de parâmetros dos dispositivos supercondutores contendo junções Josephson candidatos a qubit, é aquele no qual a energia de acoplamento Josephson é a escala de energia relevante do problema, $E_J \gg E_C$. Neste caso, os estados de fluxo são mais adequados para descrever a dinâmica do sistema. Estes dispositivos apresentam uma estrutura contendo *loops* que aprisionam fluxos magnéticos, tendo como consequência a existência de correntes circulantes persistentes. Como no caso dos qubits de carga, sob condições adequadas a dinâmica do sistema pode ficar restrita a apenas dois dos auto-estados do sistema, permitindo o uso do dispositivo como um qubit. Tais estados correspondem a correntes circulantes de sinais opostos, podendo ser detectados pela medição, feita através de um SQUID, dos fluxos gerados pela configuração de corrente circulante correspondente (o fluxo gerado pelas correntes circulantes é da ordem de $10^{-3}\Phi_0$ [18, 23]). Os estados podem ser manipulados com campos magnéticos externos aplicados aos *loops* do dispositivo, com tempos de operação da ordem de 1 – 10ns [9, 18].

O qubit de fluxo mais simples é um anel supercondutor fechado por uma junção Josephson (SQUID). A quantização do fluxo no interior do anel é modificada pela presença da junção, passando a ser dada por [27]

$$\Phi + \frac{\Phi_0}{2\pi}\varphi = n\Phi_0, \quad (2.18)$$

onde Φ é o fluxo total aprisionado no interior do anel, $\varphi \equiv \theta_2 - \theta_1$ é a diferença de fase através da junção e n é um inteiro qualquer. Deste modo o fluxo Φ e a diferença de fase φ estão relacionados nos qubits de fluxo, podendo qualquer uma dessas variáveis ser usada para descrever o estado do sistema. O hamiltoniano do SQUID pode ser escrito apenas em termos da variável de fluxo, sendo dado por

$$\mathcal{H} = -E_J \cos\left(2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right) + \frac{(\Phi - \Phi_x)^2}{2L} + \frac{Q^2}{2C_J}, \quad (2.19)$$

onde o primeiro termo constitui a energia de acoplamento Josephson, o segundo traz as contribuições magnéticas, sendo Φ_x o fluxo magnético externo aplicado e L a auto-indutância do anel. O terceiro termo é a energia de carga do capacitor C_J da junção. A carga $Q = -i\hbar\partial/\partial\Phi$ e o fluxo Φ são as variáveis canonicamente conjugadas do problema. A análise do potencial do sistema revela uma estrutura muito rica, graças a presença da junção, dependente dos parâmetros físico. Podemos observar que se $\beta_L = (2\pi/\Phi_0)^2 L E_J \leq 1$, o

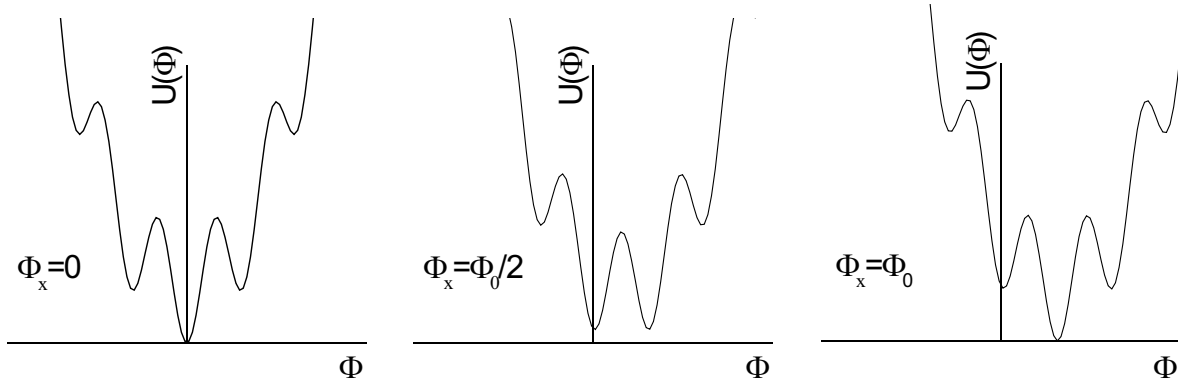


FIGURA 2.3 - Potencial do SQUID em função do fluxo externo aplicado Φ_x , sob a condição de parâmetros $\beta_L = (2\pi/\Phi_0)^2 L E_J > 1$. Para pontos de fluxo próximos a $\Phi_0/2$ o sistema apresenta uma dinâmica de poço duplo de potencial. Variando-se Φ_x consegue-se apenas modificar a diferença de energia dos poços.

potencial apresenta um único mínimo, não sendo assim interessante para a implementação do qubit. Já para o caso contrário, $\beta_L = (2\pi/\Phi_0)^2 L E_J > 1$, a estrutura do potencial apresenta vários mínimos. Variando-se o parâmetro externo do sistema, Φ_x , pode-se encontrar uma situação na qual o sistema apresenta uma estrutura de poço duplo de potencial. A Fig. 2.3 apresenta a dinâmica do potencial ao variarmos o fluxo externo Φ_x . Observamos que para o caso $\Phi_x = \Phi_0/2$, o potencial apresenta o referido poço duplo. A baixas temperaturas, apenas os menores auto-estados de energia dos poços contribuem para a dinâmica, podendo o sistema ser mapeado no problema de spin 1/2, com hamiltoniano dado por $\mathcal{H}_{deg} = -\frac{1}{2}B_z\sigma_z - \frac{1}{2}B_x\sigma_x$. Novamente, como no caso mais simples do qubit de carga, apenas a simetria do potencial duplo pode ser manipulada externamente (detalhe que pode ser observado na Fig. 2.3), sendo dada por $B_z(\Phi_x) = 4\pi E_J \sqrt{6(\beta_L - 1)}(\Phi_x/\Phi_0 - 1/2)$ (para $\beta_L - 1 \ll 1$).

Um exemplo de dispositivo no qual seja possível controlar a amplitude de tunelamento é o qubit apresentado na Fig. 2.4. A estrutura de várias junções permite maior controle sobre o qubit e mais confiança na implementação das portas lógicas. Este qubit vem sendo estudado pelo grupo da IBM [9], tendo sido alvo de uma análise completa nesta tese, exposta na seção 2.3.

Apresentados os qubits supercondutores, passaremos agora ao estudo da descrição quântica dos efeitos dissipativos gerados pelo acoplamento entre o qubit e o seu ambiente.

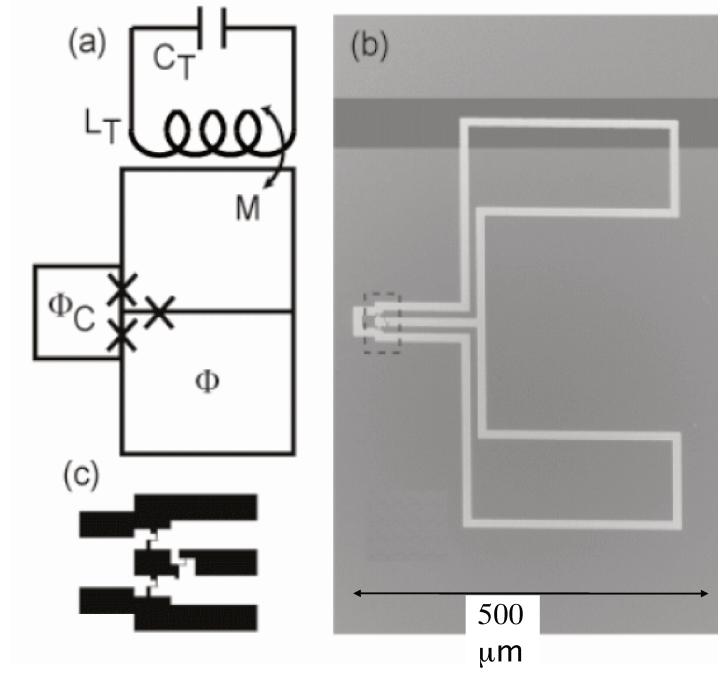


FIGURA 2.4 - Novo qubit da IBM. (a) Esquema da preparação experimental do qubit acoplado a um oscilador harmônico (representação equivalente de uma linha de transmissão). (b) Foto do qubit. Cada junção tem um tamanho de 250 por 250 nm^2 . Tarja mais escura próxima ao *loop* superior é uma microlinha de transmissão supercondutora responsável pela aquisição de dados do qubit. (c) Máscara usada para a confecção das junções (detalhe da caixa tracejada). Figura gentilmente cedida por Roger H. Koch.

2.2 O modelo

Nosso ponto de partida para a descrição quântica de qubits supercondutores é a equação de movimento clássica derivada por Burkard e colaboradores [30] para qualquer circuito supercondutor contendo junções Josephson (pequenas correções e uma extensão destes resultados foram encontrados mais recentemente [31], e serão expostos ao longo deste texto):

$$\mathbf{C}\ddot{\boldsymbol{\varphi}} = -\mathbf{L}_J^{-1}\sin\boldsymbol{\varphi} - \mathbf{M}_0\boldsymbol{\varphi} - \frac{2\pi}{\Phi_0}(\bar{\mathbf{N}} * \boldsymbol{\Phi}_x)(t) - \frac{2\pi}{\Phi_0}(\bar{\mathbf{S}} * \mathbf{I}_B)(t) - \mathbf{R}^{-1}\dot{\boldsymbol{\varphi}} - \mathbf{M}_d * \boldsymbol{\varphi}, \quad (2.20)$$

onde $\boldsymbol{\varphi}^T = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n)$ é a diferença da fase supercondutora através das junções J_i . $\mathbf{I}_B$ e $\boldsymbol{\Phi}_x$ são as correntes e os fluxos magnéticos externos aplicados ao circuito. Em (2.20), assume-se o modelo RSJ para cada junção Josephson, Fig. 2.1. Considera-se também que todas as capacitâncias do circuito têm uma junção Josephson em paralelo. Assim, neste formalismo, associa-se, sem perda de generalidade, a cada capacitância pura do circuito uma junção de corrente crítica nula e resistência infinita. A dedução da equação de movimento (2.20) foi feita utilizando-se teoria de grafos para rede, sendo bastante laboriosa

e longa. No apêndice A há um resumo dos elementos necessários para a sua dedução e o seu entendimento. O uso desta ferramenta tem possibilitado fazer considerações e tirar conclusões completamente gerais (não dependendo da topologia do circuito) a respeito dos qubits supercondutores. É importante salientar que a teoria dos grafos trata apenas da topologia do circuito, sendo a física do circuito determinada pelas leis de Kirchhoff e Faraday.

As matrizes diagonais $\mathbf{C}$, $\mathbf{L}_J^{-1} = 2\pi/\Phi_0 \mathbf{I}_c$ e $\mathbf{R}$ representam, respectivamente, os capacitores, as correntes críticas e as resistências de cada junção. As matrizes $\mathbf{M}_0$, $\mathbf{M}_d$, $\bar{\mathbf{N}}$ e $\bar{\mathbf{S}}$ (apresentadas no apêndice A) envolvem as auto e mútuas indutâncias associadas a cada *loop* do circuito. Além disso, são matrizes que dependem da topologia do circuito. Os termos dissipativos presentes na equação de movimento decorrem das resistências presentes em cada junção (tipicamente maiores do que $M\Omega$), representadas pelo termo $\mathbf{R}^{-1}\dot{\boldsymbol{\varphi}}$, e das impedâncias (com valores típicos entre 50Ω e $10k\Omega$) associadas a cada linha de transmissão externa, presentes no termo $\mathbf{M}_d * \boldsymbol{\varphi}$. As impedâncias são descritas pela relação entre as transformadas de Fourier da corrente e tensão

$$\mathbf{V}_Z(\omega) = \mathbf{Z}(\omega)\mathbf{I}_Z(\omega), \quad (2.21)$$

onde $\mathbf{Z}(\omega)$ é a matriz impedância de dimensão $n_Z \times n_Z$ (n_Z é o número de impedâncias externas). A convolução $(\mathbf{f} * \mathbf{g})(t)$ é definida como

$$(\mathbf{f} * \mathbf{g})(t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{f}(t - \tau)\mathbf{g}(\tau)d\tau, \quad (2.22)$$

assim podemos escrever (2.21) no domínio de tempo como

$$\mathbf{V}_Z(t) = (\mathbf{Z} * \mathbf{I}_Z)(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{Z}(t - \tau)\mathbf{I}_Z(\tau)d\tau = \int_{-\infty}^t \mathbf{Z}(t - \tau)\mathbf{I}_Z(\tau)d\tau, \quad (2.23)$$

onde no último passo usamos o fato de que a função resposta deve ser diferente de zero apenas para tempos positivos[‡], $\mathbf{Z}(t) = 0$ para $t < 0$. Finalmente, a transformada de Fourier é definida como[§]

$$\mathbf{Z}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{Z}(t)e^{-i\omega t}dt = \int_0^{\infty} \mathbf{Z}(t)e^{-i\omega t - \epsilon t}dt, \quad (2.24)$$

sendo $\epsilon > 0$ introduzido para assegurar a convergência da integral.

Trabalhando um pouco mais a equação de movimento (2.20), podemos agrupar os termos dissipativos como um único termo se definirmos a matriz dissipativa $\mathbf{M}(\omega) \equiv$

[‡]Evitando assim uma quebra da causalidade.

[§]A escolha da transformada de Fourier é tal que a impedância para um indutor L é dada por $Z(\omega) = -i\omega L$

$\mathbf{M}_d(\omega) + i\omega\mathbf{R}^{-1}$. Além disso, da propriedade de que a matriz $\mathbf{M}_0$ é simétrica [30], podemos escrever o termo $\mathbf{M}_0\boldsymbol{\varphi}$ como o gradiente de um potencial. Deste modo, a equação de movimento passa a ter a forma

$$\mathbf{C}\ddot{\boldsymbol{\varphi}} = -\frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{\varphi}} - \mathbf{M} * \boldsymbol{\varphi}, \quad (2.25)$$

$$U(\boldsymbol{\varphi}, t) = -\sum_i L_{J,i}^{-1} \cos \varphi_i + \frac{1}{2} \boldsymbol{\varphi}^T \mathbf{M}_0 \boldsymbol{\varphi} + \frac{2\pi}{\Phi_0} \boldsymbol{\varphi}^T [(\bar{\mathbf{N}} * \boldsymbol{\Phi}_x)(t) + (\bar{\mathbf{S}} * \mathbf{I}_B)(t)]. \quad (2.26)$$

O primeiro termo do potencial é a energia de acoplamento Josephson, o segundo é o termo devido às indutâncias do circuito e os dois últimos representam o acoplamento do qubit com possíveis fontes externas de correntes e de fluxos.

A matriz dissipativa $\mathbf{M}(t)$ é real, simétrica e causal, sendo dada no espaço de Fourier por [30]

$$\mathbf{M}(\omega) \equiv \mathbf{M}_d(\omega) + i\omega\mathbf{R}^{-1} = \bar{\mathbf{m}}\bar{\mathbf{L}}_Z^{-1}(\omega)\bar{\mathbf{m}}^T + i\omega\mathbf{R}^{-1}, \quad (2.27)$$

onde $\bar{\mathbf{m}}$ é uma matriz real $n \times n_Z$, eq. (A.18), e a matriz $\bar{\mathbf{L}}_Z(\omega)$ é definida como

$$\bar{\mathbf{L}}_Z(\omega) \equiv \mathbf{L}_Z(\omega) + \mathbf{L}_c, \quad (2.28)$$

sendo a matriz indutiva $\mathbf{L}_c$, dada por (A.33), real e independente de frequência, e $\mathbf{L}_Z(\omega) \equiv \mathbf{Z}(\omega)/i\omega$. É interessante notar que a dissipação é provocada apenas pela parte imaginária de matriz dissipativa, $\text{Im}\mathbf{M}(\omega)$. Isto pode ser visto ao tomarmos a transformada de Fourier de (2.25)

$$-\omega^2 \mathbf{C}\boldsymbol{\varphi}(\omega) = -\left(\frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{\varphi}}\right)(\omega) - (\text{Re}\mathbf{M}(\omega) + i\text{Im}\mathbf{M}(\omega))\boldsymbol{\varphi}(\omega), \quad (2.29)$$

além disso, a dinâmica só será dissipativa se a matriz $\text{Im}\mathbf{M}(\omega)$ for positiva[¶]. Esta restrição pode ser verificada da seguinte forma: suponha que $\mathbf{K}\text{Im}\mathbf{M}(\omega)\mathbf{K}^\dagger$ é diagonal, com $\mathbf{K}\mathbf{K}^\dagger = \mathbf{K}^\dagger\mathbf{K} = \mathbb{1}$, fazendo a mudança de base em (2.29) encontramos um conjunto de equações com a forma

$$-\omega^2 m_i y_i(\omega) = \sum_j \alpha_j(\omega) y_j(\omega) - i\gamma_i(\omega) y_i(\omega) + \beta_i(\omega) \quad (2.30)$$

onde $y_i \equiv (\mathbf{K}\boldsymbol{\varphi})_i$, m_i , α_i e β_i são funções reais. γ_i representam os autovalores de $\text{Im}\mathbf{M}(\omega)$, que são $\gamma_i \geq 0$ se $\text{Im}\mathbf{M}$ for positiva.

A positividade da parte imaginária de (2.27) pode ser constatada sabendo-se que [32]

$$\text{Im}\bar{\mathbf{L}}_Z^{-1}(\omega) = \omega\{\text{Re}\mathbf{Z}(\omega) + \omega^2\tilde{\mathbf{L}}_c(\omega)[\text{Re}\mathbf{Z}(\omega)]^{-1}\tilde{\mathbf{L}}_c(\omega)\}^{-1}, \quad (2.31)$$

[¶]Uma matriz $\mathbf{A}$ é dita positiva se, para qualquer vetor $|r\rangle$, $\langle r|\mathbf{A}|r\rangle$ for um número real, não-negativo. Toda matriz positiva é hermitiana, deste modo, pelo teorema da decomposição espectral, tem-se então que os autovalores de uma matriz positiva são reais, não-negativos.

onde $\tilde{\mathbf{L}}_c(\omega) = \mathbf{L}_c + \text{Im}\mathbf{Z}(\omega)/\omega$. Como $\text{Re}\mathbf{Z}(\omega) > 0$ (parte resistiva das impedâncias), tem-se que $\text{Im}\tilde{\mathbf{L}}_c^{-1}(\omega)$ e $\text{Im}\mathbf{M}(\omega)$ são matrizes positivas.

2.2.1 Modelo Caldeira-Leggett para várias fontes de dissipação

O objetivo desta seção é apresentar um modelo quântico que descreva os efeitos de várias fontes de dissipação distintas que estejam acopladas a um sistema de interesse, cuja equação de movimento clássica seja dada pela forma (2.25). Os casos nos quais estaremos interessados serão aqueles que apresentem uma dinâmica dissipativa. Deste modo devemos ter a condição de que a matriz $\text{Im}\mathbf{M}(\omega)$ deva ser real, simétrica e positiva. Vale frisar que a prescrição apresentada aqui pode ser aplicada a qualquer sistema, não se restringindo apenas aos casos de qubits supercondutores, cuja dinâmica clássica seja governada pela equação de movimento dissipativa (2.25). Assim, o problema a ser estudado pode ser apresentado de maneira geral como: o estudo de um sistema descrito por n coordenadas canônicas $\boldsymbol{\varphi}^T = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n)$, cujo potencial seja dado por $U(t)$, contendo n_f fontes de dissipação conhecidas e descritas pela matriz dissipativa $\mathbf{M}(t)$, com equação de movimento (2.25).

A idéia inicial para abordar este problema é usar o modelo Caldeira-Leggett [2], modelando as fontes de dissipação como vários banhos de osciladores. Em princípio tem-se a tendência de se esperar que para cada fonte de dissipação devemos associar um banho de osciladores. Para verificar se esta hipótese é correta ou não, partimos de um hamiltoniano dado por:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_S + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_{SB}; \quad (2.32)$$

$$\mathcal{H}_S = \frac{1}{2} \mathbf{Q}_C^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{Q}_C + \left(\frac{\Phi_0}{2\pi} \right)^2 U(\boldsymbol{\varphi}); \quad (2.33)$$

$$\mathcal{H}_B = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^m \sum_{\alpha} \left(\frac{p_{\alpha j}^2}{m_{\alpha j}} + m_{\alpha j} \omega_{\alpha j}^2 x_{\alpha j}^2 \right); \quad (2.34)$$

$$\mathcal{H}_{SB} = \sum_{\alpha} \boldsymbol{\varphi}^T \mathbf{c}_{\alpha} \mathbf{x}_{\alpha}, \quad (2.35)$$

onde $\mathcal{H}_S$ representa o hamiltoniano do sistema isolado, $\mathcal{H}_B$ é o hamiltoniano de $m \geq 1$ banhos de osciladores desacoplados, e o termo $\mathcal{H}_{SB}$ é o termo de acoplamento entre o sistema e os banhos de osciladores (sendo $\mathbf{c}_{\alpha}$ uma matriz real $n \times m$, e $\mathbf{x}_{\alpha}^T = (x_{\alpha 1}, \dots, x_{\alpha m})$). É importante destacar que não foi feita qualquer hipótese a respeito do número m de banhos que devemos utilizar para fazer a descrição correta das n_f fontes de dissipação.

A quantização do sistema ocorre ao conjugar as variáveis $\mathbf{Q}_C$ e $\boldsymbol{\varphi}$ através da relação de comutação canônica (no caso de qubits supercondutores, $\mathbf{Q}_C$ representa as variáveis de

carga, e φ as de fluxo)

$$\left[\frac{\Phi_0}{2\pi} \varphi_i, Q_{C;j} \right] = i\hbar \delta_{ij}. \quad (2.36)$$

As equações de movimento para as coordenadas do sistema e dos banhos derivadas do hamiltoniano (2.32) são dadas por:

$$\mathbf{C}\ddot{\boldsymbol{\varphi}} = -\frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{\varphi}} - \left(\frac{2\pi}{\Phi_0} \right)^2 \sum_{\alpha} \mathbf{c}_{\alpha} \mathbf{x}_{\alpha} \quad (2.37)$$

$$m_{\alpha j} \ddot{x}_{\alpha j} = -m_{\alpha j} \omega_{\alpha j}^2 x_{\alpha j} - \sum_{i=1}^n c_{\alpha ij} \varphi_i. \quad (2.38)$$

Tomando a transformada de Fourier de (2.38), obtemos a seguinte equação para as variáveis dos banhos

$$x_{\alpha j}(\omega) = \frac{\sum_{i=1}^n c_{\alpha ij} \varphi_i(\omega)}{m_{\alpha j}(\omega^2 - \omega_{\alpha j}^2)}. \quad (2.39)$$

Tomando a transformada de Fourier da equação (2.37), substituindo (2.39) e tomando a transformada de Fourier inversa, obtemos a equação de movimento (2.25) para $\boldsymbol{\varphi}$, com

$$\mathbf{M}(\omega) = \left(\frac{2\pi}{\Phi_0} \right)^2 \sum_{\alpha} \mathbf{c}_{\alpha} [\mathbf{m}_{\alpha}(\omega^2 - \boldsymbol{\omega}_{\alpha}^2)]^{-1} \mathbf{c}_{\alpha}^T, \quad (2.40)$$

onde $\mathbf{m}_{\alpha}$, $\boldsymbol{\omega}_{\alpha}$ e $\boldsymbol{\omega}$ são matrizes diagonais $m \times m$ com seus elementos dados respectivamente por $m_{\alpha j}$, $\omega_{\alpha j}$ e ω . Notadamente verifica-se de (2.40) que a matriz $\mathbf{M}(\omega)$ é simétrica, $\mathbf{M}(\omega) = \mathbf{M}(\omega)^T$.

Definindo a densidade espectral do ambiente como a função matricial

$$\mathbf{J}(\omega) \equiv \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} \mathbf{c}_{\alpha} \mathbf{m}_{\alpha}^{-1} \boldsymbol{\omega}_{\alpha}^{-1} \delta(\omega - \boldsymbol{\omega}_{\alpha}) \mathbf{c}_{\alpha}^T, \quad (2.41)$$

onde $\delta_{ij}(\mathbf{X}) \equiv \delta(X_{ij})$, e assumindo-a como uma função contínua, podemos obter a seguinte relação^{||}

$$\mathbf{J}(\omega) = \left(\frac{\Phi_0}{2\pi} \right)^2 \text{Im} \mathbf{M}(\omega) = \sum_{j=1}^m J_j(\omega) \mathbf{v}_j(\omega) \mathbf{v}_j(\omega)^T, \quad (2.42)$$

onde a decomposição espectral apresentada vale-se do fato de que a matriz $\text{Im} \mathbf{M}(\omega)$ é real e simétrica, com autovetores reais $\mathbf{v}_j(\omega)$ e autovalores $J_j(\omega) \geq 0$ (a positividade da matriz $\text{Im} \mathbf{M}(\omega)$ pode ser verificada usando-se a regularização $\omega \rightarrow \omega - i\epsilon$ em (2.40) e então

^{||}Dados os elementos de matriz $M_{ij}(\omega) = \sum_{k=1}^m \sum_{\alpha} c_{\alpha ik} c_{\alpha jk} m_{\alpha k}^{-1} (\omega^2 - \omega_{\alpha k}^2)^{-1}$ e $J_{ij}(\omega) = \sum_{k=1}^m \sum_{\alpha} c_{\alpha ik} c_{\alpha jk} m_{\alpha k}^{-1} \omega_{\alpha k}^{-1} \delta(\omega - \omega_{\alpha k})$, a prescrição para o contínuo nos fornece $M_{ij}(\omega) = \left(\frac{2\pi}{\Phi_0} \right)^2 \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega' \frac{\omega' J_{ij}(\omega')}{\omega^2 - \omega'^2 - i0^+} = \left(\frac{2\pi}{\Phi_0} \right)^2 \left[\frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} d\omega' \frac{\omega' J_{ij}(\omega')}{\omega^2 - \omega'^2} + i J_{ij}(\omega) \right]$, confirmando (2.42).

observando que podemos reescrevê-la como $\text{Im}\mathbf{M}(\omega) = \sum_{\alpha} \mathbf{A}_{\alpha}(\omega) \mathbf{A}_{\alpha}^{\dagger}(\omega)^{**}$. Até então o número de banhos acoplados ao sistema de interesse não estava determinado, sendo um parâmetro livre do nosso modelo, porém, com a relação entre $\mathbf{J}(\omega)$ e $\text{Im}\mathbf{M}(\omega)$, podemos determiná-lo como o posto máximo de $\text{Im}\mathbf{M}(\omega)$, isto é, $m = \max_{\omega}(\text{rank}[\text{Im}\mathbf{M}(\omega)])$, que é limitado pelo mínimo entre o número de fontes de dissipação, n_f , e o de variáveis distintas que descrevem o sistema, n , assim $m = \max_{\omega}(\text{rank}[\text{Im}\mathbf{M}(\omega)]) \leq \min(n, n_f)$. Observe que os casos nos quais se tem *necessariamente* apenas um único banho de osciladores descrevendo os efeitos de várias fontes são: quando há apenas uma única fonte acoplada ao sistema, $n_f = 1$ (caso trivial); e o caso quando a dinâmica do sistema de interesse é descrita por apenas uma única coordenada, $n = 1$. Finalmente podemos completar a descrição do ambiente visto pelo sistema de interesse ao associar os autovalores de (2.42) com a função espectral do j -ésimo banho de osciladores do ambiente

$$J_j(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} \frac{\gamma_{\alpha j}^2}{m_{\alpha j} \omega_{\alpha j}} \delta(\omega - \omega_{\alpha j}), \quad (2.43)$$

para tal, devemos usar a decomposição espectral (2.42) e fazer a seguinte identificação

$$c_{\alpha k j} c_{\alpha l j} = \gamma_{\alpha j}^2 (\mathbf{v}_j(\omega_{\alpha}) \mathbf{v}_j(\omega_{\alpha})^T)_{kl}. \quad (2.44)$$

Uma vez conhecida a descrição quântica do sistema de interesse, podemos estudar a sua dinâmica a partir da equação de movimento da matriz densidade do sistema total

$$i\hbar \dot{\rho}(t) = [\mathcal{H}, \rho(t)], \quad (2.45)$$

onde $\mathcal{H}$ é o hamiltoniano completo do sistema (2.32). O regime físico de real interesse experimental para a computação quântica é aquele no qual o acoplamento sistema-ambiente, $\mathcal{H}_{SB}$, é feito o mais fraco possível. Assim, nos problemas de interesse, podemos expandir (2.45) em uma série de potências do acoplamento sistema-banho e reter apenas os termos de primeira ordem (conhecida como aproximação de Born). A validade da expansão também é assegurada no caso de forte acoplamento, se a dissipação provocada pelo banho for pequena, isto é, $J(\omega_{ij})/\omega_{ij} \ll 1$. Além disso, também podemos assumir que os tempos de correlação no ambiente têm tempo de vida curto quando comparados com as escalas típicas do sistema de interesse (conhecida como aproximação de Markov). Assim, dentro da aproximação de Born-Markov, podemos escrever a equação mestra para a matriz densidade reduzida do sistema, $\rho_S = \text{Tr}_B \rho$, como a equação de Bloch-Redfield [33],

$$\dot{\rho}_{nm}(t) = -i\omega_{nm}\rho_{nm}(t) - \sum_{kl} R_{nmkl}\rho_{kl}(t), \quad (2.46)$$

**A prova de que dada uma matriz $\mathbf{A}$ qualquer, $\mathbf{A}\mathbf{A}^{\dagger}$ é positiva é dada por: Seja $|r\rangle$ um vetor qualquer, temos que $\langle r|\mathbf{A}\mathbf{A}^{\dagger}|r\rangle = \sum_n \langle r|\mathbf{A}|n\rangle \langle n|\mathbf{A}^{\dagger}|r\rangle = \sum_n |\langle r|\mathbf{A}|n\rangle|^2 \geq 0$, c.q.d.

onde $\rho_{nm} = \langle n | \rho_S | m \rangle$, $\omega_{nm} = \omega_n - \omega_m$, e $\mathcal{H}_S | n \rangle = \hbar \omega_n | n \rangle$. O tensor de Redfield tem a forma $R_{nmkl} = \delta_{lm} \sum_r \Gamma_{nrrk}^{(+)} + \delta_{nk} \sum_r \Gamma_{lrrm}^{(-)} - \Gamma_{lmmk}^{(+)} - \Gamma_{lmnk}^{(-)}$, com as taxas dadas por $\Gamma_{lmnk}^{(+)} = \int_0^\infty dt \exp(-i\omega_{nk}t) \text{Tr}_B \tilde{\mathcal{H}}_{SB}(t)_{lm} \tilde{\mathcal{H}}_{SB}(0)_{nk} \rho_B$, e $(\Gamma_{nmml}^{(-)})^* = \Gamma_{lmnk}^{(+)}$, onde $\tilde{\mathcal{H}}_{SB}(t)_{nm} = \langle n | e^{it\mathcal{H}_B} \mathcal{H}_{SB} e^{-it\mathcal{H}_B} | m \rangle$. O coeficiente $R_{\alpha\alpha\beta\beta}$ é a probabilidade de transição do estado β para o estado α . Para verificar quais processos de relaxação são mais efetivos na dinâmica do sistema, façamos $\rho_{nm}(t) = e^{-i\omega_{nm}t} G_{nm}(t)$ em (2.46), cujo resultado será

$$\dot{G}_{nm}(t) = - \sum_{kl} R_{nmkl} e^{-i(\omega_{kl} - \omega_{nm})t} G_{kl}(t) \quad (2.47)$$

$$G_{nm}(t) \approx G_{nm}(0) + \sum_{kl} \frac{e^{-i(\omega_{kl} - \omega_{nm})t} - 1}{i(\omega_k - \omega_l - \omega_n + \omega_m)} R_{nmkl} G_{kl}(t) + O(R^2), \quad (2.48)$$

onde (2.48) é a solução de (2.47) em primeira ordem de R (justificada no limite de acoplamento fraco). Podemos ver que os processos envolvendo as transições $|\omega_k - \omega_l - \omega_n + \omega_m| \ll 1$ desempenham papel mais importante na relaxação do sistema. Isto pode ser explicado observando que a ação efetiva esperada da perturbação $\mathcal{H}_{SB}$ é conectar apenas os auto-estados do hamiltoniano que possuam diferenças de energia da ordem da perturbação. Deste modo, passaremos a considerar apenas os processos nos quais $\omega_k - \omega_l - \omega_n + \omega_m = 0$.^{††}

Para o hamiltoniano de interação sistema banho (2.35), pode-se escrever

$$\text{Re}\Gamma_{lmnk}^{(+)} = \varphi_{lm}^T \mathbf{J}(|\omega_{nk}|) \varphi_{nk} \frac{e^{-\beta\omega_{nk}/2}}{\sinh(\beta|\omega_{nk}|/2)}, \quad (2.49)$$

$$\text{Im}\Gamma_{lmnk}^{(+)} = -\frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\varphi_{lm}^T \mathbf{J}(\omega) \varphi_{nk}}{\omega^2 - \omega_{nk}^2} \left(\omega - \omega_{nk} \coth \frac{\beta\omega}{2} \right), \quad (2.50)$$

onde $\varphi_{nk} = \langle n | \varphi | k \rangle$. Assumindo que a dinâmica do sistema de interesse é governada pelos estados de mais baixa energia, passaremos a restringir o espaço de Hilbert do sistema ao subespaço gerado pelo estado fundamental, $|0\rangle$, e primeiro estado excitado, $|1\rangle$, de $\mathcal{H}_S$.^{††} Dentro desse subespaço e usando a aproximação secular, podemos determinar as taxas de relaxação T_1^{-1} e de descoerência T_2^{-1} nas equações de Bloch como $T_1^{-1} = 2\text{Re}(\Gamma_{0110}^{(+)} + \Gamma_{1001}^{(+)})$ e $T_2^{-1} = (2T_1)^{-1} + T_\phi^{-1}$, onde $T_\phi^{-1} = \text{Re}(\Gamma_{0000}^{(+)} + \Gamma_{1111}^{(+)} - 2\Gamma_{0011}^{(+)})$ é a taxa de *dephasing* puro.

^{††}Esta aproximação é conhecida como *secular* [33].

^{††}Os efeitos devido a processos envolvendo os demais estados excitados são exponencialmente desprezíveis se a distância entre o primeiro estado excitado e os demais, $\hbar\eta$, for muito maior que a energia de ativação térmica $k_B T$, $k_B T \ll \hbar\eta$.

Assim encontramos para o nosso problema

$$T_2^{-1} = (2T_1)^{-1} + T_\phi^{-1} \quad (2.51)$$

$$T_1^{-1} = 4\boldsymbol{\varphi}_{01}^\dagger \mathbf{J}(\omega_{01}) \boldsymbol{\varphi}_{01} \coth\left(\frac{\beta\omega_{01}}{2}\right); \quad (2.52)$$

$$T_\phi^{-1} = \frac{2}{\beta} \lim_{\omega \rightarrow 0} (\boldsymbol{\varphi}_{00} - \boldsymbol{\varphi}_{11})^\dagger \frac{\mathbf{J}(\omega)}{\omega} (\boldsymbol{\varphi}_{00} - \boldsymbol{\varphi}_{11}), \quad (2.53)$$

onde $\beta = 1/k_B T$. Usando a decomposição espectral (2.42) obtemos

$$T_1^{-1} = 4 \sum_{j=1}^m |\boldsymbol{\varphi}_{01} \cdot \mathbf{v}_j(\omega_{01})|^2 J_j(\omega_{01}) \coth\left(\frac{\beta\omega_{01}}{2}\right); \quad (2.54)$$

$$T_\phi^{-1} = \frac{2}{\beta} \sum_{j=1}^m |(\boldsymbol{\varphi}_{00} - \boldsymbol{\varphi}_{11}) \cdot \mathbf{v}_j(0)|^2 \frac{J_j(\omega)}{\omega} \Big|_{\omega \rightarrow 0}. \quad (2.55)$$

Onde assumimos que o limite $\mathbf{v}_j(0) = \lim_{\omega \rightarrow 0} \mathbf{v}_j(\omega)$ existe, uma vez que $\mathbf{v}_j(\omega)$ é um vetor normalizado para qualquer valor de frequência.

2.2.2 Não-aditividade das taxas de relaxação em qubits supercondutores

A formulação introduzida na seção anterior nos permitiu descrever os efeitos de várias fontes de dissipação distintas acopladas a um sistema de interesse, cuja equação de movimento seja dada por (2.25). A obtenção de (2.52) e (2.53) nos permite quantificar esses efeitos, porém, no estágio atual, não é possível distinguir a contribuição individual de cada fonte. Caso pudéssemos identificar a origem de cada termo nas taxas de relação e de descoerência, teríamos a oportunidade de verificar se a hipótese da aditividade das taxas de relaxação, correntemente assumida na literatura [19], está correta ou se existe algum regime no qual tal hipótese falha. A resposta para essa questão está intimamente ligada ao estudo da matriz dissipativa $\mathbf{M}(\omega)$. Como conhecemos bem tal matriz para o caso de qubits supercondutores, eq. (2.27), passaremos a considerar especificamente esse tipo de caso para ilustrar a análise que se segue. Reescrevendo a parte imaginária de (2.27) como

$$\text{Im}\mathbf{M}(\omega) = \bar{\mathbf{m}} \text{Im}\bar{\mathbf{L}}_Z^{-1}(\omega) \bar{\mathbf{m}}^T + \omega \mathbf{R}^{-1}, \quad (2.56)$$

observamos que, se retirarmos as impedâncias externas acopladas ao qubit (isto significa fazer $\bar{\mathbf{L}}_Z^{-1} \rightarrow 0$), a matriz (2.56) torna-se diagonal, com seus elementos dados pelo o inverso das resistências R_i associadas a cada junção Josephson. Neste caso, o número de banhos é igual ao número de fontes (resistências), $m = n_f$, e as taxas de relaxação podem ser

escritas na forma

$$\frac{1}{T_X} = \sum_{j=1}^{n_f} \frac{1}{T_X^{(j)}}, \quad X = 1, 2, \phi \quad (\text{Im}\mathbf{M}(\omega) \text{ diagonal}) \quad (2.57)$$

onde $T_X^{(j)}$ representa a contribuição independente de cada resistência. Deste modo as taxas totais são dadas pela soma das taxas devido a cada fonte isoladamente. Observe que a situação na qual se verifica $\text{Im}\mathbf{M}(\omega)$ diagonal, é aquela em que as fontes não geram um acoplamento entre os graus de liberdade do sistema. Verificamos assim que a hipótese da aditividade das taxas é exata para este tipo de problema.

Consideremos agora a presença de impedâncias externas acopladas ao qubit. Como $R \gg Z$ em qubits supercondutores, podemos desprezar os efeitos dissipativos das resistências presentes nas junções, quando comparamos com os decorrentes das impedâncias externas. Sabemos que $\bar{\mathbf{L}}_Z(\omega) \equiv \mathbf{L}_Z(\omega) + \mathbf{L}_c$, eq.(2.28). Se considerarmos que as impedâncias são independentes, $\mathbf{L}_Z(\omega)$ é diagonal, o que nos permite tentar obter a seguinte forma para a inversa de $\bar{\mathbf{L}}_Z(\omega)$, $\bar{\mathbf{L}}_Z^{-1}(\omega) = \mathbf{L}_Z^{-1}(\omega) + \mathbf{Y}(\omega)$. Usando a identidade $\bar{\mathbf{L}}_Z(\omega)\bar{\mathbf{L}}_Z^{-1}(\omega) = \mathbb{1}$, obtemos a seguinte expressão formal

$$\bar{\mathbf{L}}_Z^{-1}(\omega) = \mathbf{L}_Z^{-1}(\omega) - \bar{\mathbf{L}}_Z^{-1}(\omega)\mathbf{L}_c\mathbf{L}_Z^{-1}(\omega), \quad (2.58)$$

iterando essa equação, podemos construir a série infinita

$$\bar{\mathbf{L}}_Z^{-1} = \mathbf{L}_Z^{-1} - \mathbf{L}_Z^{-1}\mathbf{L}_c\mathbf{L}_Z^{-1} + \mathbf{L}_Z^{-1}\mathbf{L}_c\mathbf{L}_Z^{-1}\mathbf{L}_c\mathbf{L}_Z^{-1} - \dots \quad (2.59)$$

Definindo $\mathbf{P}_j(\omega) \equiv L_{Zj}^{-1}(\omega)\boldsymbol{\alpha}_j\boldsymbol{\alpha}_j^T$, onde $L_{Zj}(\omega) = Z_j(\omega)/i\omega$, e $\boldsymbol{\alpha}_1^T = (10\cdots 0)$, $\boldsymbol{\alpha}_j^T = (00\cdots 1\cdots 0)$, $\boldsymbol{\alpha}_{n_Z}^T = (00\cdots 1)$, podemos escrever $\mathbf{L}_Z^{-1} = \sum_j^{n_Z} \mathbf{P}_j$ e por conseguinte

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{L}}_Z^{-1} &= (\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_1\mathbf{L}_c\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_1\mathbf{L}_c\mathbf{P}_1\mathbf{L}_c\mathbf{P}_1 - \cdots) + (\mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_2\mathbf{L}_c\mathbf{P}_2 + \mathbf{P}_2\mathbf{L}_c\mathbf{P}_2\mathbf{L}_c\mathbf{P}_2 - \cdots) + \\ &+ \cdots + (\mathbf{P}_{n_Z} - \mathbf{P}_{n_Z}\mathbf{L}_c\mathbf{P}_{n_Z} + \cdots) - \sum_{n \neq m}^{n_Z} \mathbf{P}_n\mathbf{L}_c\mathbf{P}_m + \sum_{n \neq m \neq t}^{n_Z} \mathbf{P}_n\mathbf{L}_c\mathbf{P}_m\mathbf{L}_c\mathbf{P}_t - \cdots, \end{aligned} \quad (2.60)$$

esta forma de série para $\bar{\mathbf{L}}_Z^{-1}(\omega)$ é bastante elucidativa, pois observe que os termos entre parênteses representam as contribuições de cada fonte isoladamente. Tais termos podem ser somados exatamente, resultando na matriz diagonal

$$\begin{aligned} &(\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_1\mathbf{L}_c\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_1\mathbf{L}_c\mathbf{P}_1\mathbf{L}_c\mathbf{P}_1 - \cdots) + \cdots + (\mathbf{P}_{n_Z} - \mathbf{P}_{n_Z}\mathbf{L}_c\mathbf{P}_{n_Z} + \cdots) = \\ &= \sum_{j=1}^{n_Z} \left(\frac{1}{L_{Zj}(\omega) + L_{c,jj}} \right) \boldsymbol{\alpha}_j\boldsymbol{\alpha}_j^T = \text{diag} \left(\frac{1}{L_{Zj}(\omega) + L_{c,jj}} \right), \end{aligned} \quad (2.61)$$

e que os termos restantes, série indicada pelos dois últimos termos de (2.60), são proporcionais a produtos da forma $L_{Zj}^{-1}L_{Zl}^{-1}$ (com $j \neq l$), isto é, são termos que representam o

acoplamento indireto entre as fontes, e que não podem ser separados em contribuições distintas de cada fonte, só existindo por conta dos termos fora da diagonal de $\mathbf{L}_c$. Deste modo verificamos que se as fontes gerarem um acoplamento entre diversos graus de liberdade do sistema, este mediará uma interação indireta entre elas, gerando termos não aditivos nas taxas. Definindo

$$\mathbf{L}_{\text{mix}}^{-1}(\omega) \equiv - \sum_{n \neq m}^{n_Z} \mathbf{P}_n \mathbf{L}_c \mathbf{P}_m + \sum_{n \neq m \neq t}^{n_Z} \mathbf{P}_n \mathbf{L}_c \mathbf{P}_m \mathbf{L}_c \mathbf{P}_t - \dots, \quad (2.62)$$

podemos escrever (2.60) como

$$\bar{\mathbf{L}}_Z^{-1}(\omega) = \text{diag} \left(\frac{1}{L_{Zj}(\omega) + L_{c,jj}} \right) + \mathbf{L}_{\text{mix}}^{-1}(\omega). \quad (2.63)$$

Passando as taxas a ter a forma geral

$$\frac{1}{T_X} = \sum_j \frac{1}{T_X^{(j)}} + \frac{1}{T_X^{(\text{mix})}}, \quad X = 1, 2, \phi, \quad (2.64)$$

onde, novamente, $1/T_X^{(j)}$ representa a contribuição isolada da j -ésima fonte de dissipação acoplada ao sistema, e o novo termo $1/T_X^{(\text{mix})}$ representa a não-aditividade das taxas. Vale ressaltar que temos assegurado a positividade dos tempos totais T_X e as contribuições individuais $T_X^{(j)}$, uma vez que provamos $\text{Im}\mathbf{M}(\omega)$ ser uma matriz positiva. Já as contribuições $1/T_X^{(\text{mix})}$ podem ser positivas ou até mesmo negativas (como veremos mais adiante), uma vez que $\text{Im}\mathbf{L}_{\text{mix}}^{-1}(\omega)$ não precisa ser necessariamente uma matriz positiva, constituindo assim um termo de interferência.

Para qubits supercondutores, $L_{Zj}(\omega) = Z_j(\omega)/i\omega$, podemos escrever

$$\frac{1}{T_1^{(j)}} = 4 \left(\frac{\Phi_0}{2\pi} \right)^2 |\boldsymbol{\alpha}_j^T \bar{\mathbf{m}}^T \boldsymbol{\varphi}_{01}|^2 \text{Re} \frac{\omega_{01} \coth(\beta\omega_{01}/2)}{Z_j(\omega_{01}) + i\omega_{01} L_{c,jj}} \quad (2.65)$$

$$\frac{1}{T_\phi^{(j)}} = \frac{2}{\beta} \left(\frac{\Phi_0}{2\pi} \right)^2 |\boldsymbol{\alpha}_j^T \bar{\mathbf{m}}^T (\boldsymbol{\varphi}_{00} - \boldsymbol{\varphi}_{11})|^2 \text{Re} \frac{1}{Z_j(0)} \quad (2.66)$$

$$\frac{1}{T_1^{(\text{mix})}} = 4 \left(\frac{\Phi_0}{2\pi} \right)^2 \boldsymbol{\varphi}_{01}^\dagger \bar{\mathbf{m}} \text{Im} \mathbf{L}_{\text{mix}}^{-1}(\omega_{01}) \bar{\mathbf{m}}^T \boldsymbol{\varphi}_{01} \coth \left(\frac{\beta\omega_{01}}{2} \right) \quad (2.67)$$

$$\frac{1}{T_\phi^{(\text{mix})}} = 0. \quad (2.68)$$

$1/T_\phi^{(\text{mix})}$ é nulo pois o termo de menor ordem em frequência ω em (2.62) é $L_{Zj}^{-1} L_{Zl}^{-1} \propto \omega^2$. Assim ao tomarmos o limite $\omega \rightarrow 0$ em (2.53) obtém-se (2.68).

2.2.3 Aplicação da aproximação de Born-Oppenheimer

Para calcular as taxas (2.65-2.68) precisamos determinar elementos de matriz do tipo

$$\alpha_j^T \bar{\mathbf{m}}^T \varphi_{\alpha\beta} = \int d\varphi (\alpha_j^T \bar{\mathbf{m}}^T \varphi) \langle \alpha | \varphi \rangle \langle \varphi | \beta \rangle, \quad (2.69)$$

onde $\alpha, \beta = 0, 1$.

Com o aumento da complexidade dos dispositivos supercondutores candidatos a qubit (muitas vezes tais dispositivos precisam ser descritos por vários graus de liberdade, o que acarreta em uma equação de Schrödinger multidimensional), o cálculo de tais elementos tem se tornado computacionalmente bastante dispendioso, e não revelando de forma clara a física do problema. Com o intuito de reduzir esse cálculo computacional e tornar mais palatável a análise física, desenvolveremos nesta seção uma aplicação da aproximação de Born-Oppenheimer para reduzir a dimensionalidade do sistema. Tal procedimento está baseado no fato de que, nos dispositivos em que estaremos interessados, espera-se que o comportamento de um dos graus de liberdade do sistema se destaque em relação aos outros. Isto porque, para operar como um bom qubit, precisamos encontrar uma região do potencial do dispositivo que tenha a forma de um poço duplo com barreira de potencial entre os mínimos não muito alta, e que nas direções transversais à direção de separação dos mínimos, o potencial cresça muito rapidamente quando nos deslocamos da posição destes, gerando assim um potencial de confinamento ao longo destas direções. Assim o procedimento aqui adotado pode ser resumido da seguinte forma:

- Primeiramente, determina-se a região de operação do qubit (poço duplo de potencial).
- Em seguida identifica-se a direção de separação entre os mínimos como a direção “lenta” do problema, $\mathbf{f}_{\parallel}$, e as demais como “rápidas”, $\mathbf{f}_{\perp}$.
- Trata-se adiabaticamente as coordenadas “rápidas”, tendo como consequência a modificação do potencial visto pela coordenada “lenta”.
- O problema reduz-se então a análise de um potencial unidimensional efetivo visto pela coordenada relevante para dinâmica, $\mathbf{f}_{\parallel}$.

Para realizar a aproximação de Born-Oppenheimer já descrita, é mais conveniente passar para um sistema de coordenadas no qual as massas (no caso, as capacitâncias) são

isotrópicas. Para tal, definimos a seguinte transformação

$$\mathbf{q} = c^{1/2} \mathbf{C}^{-1/2} \mathbf{Q}_C, \quad (2.70)$$

$$\mathbf{f} = c^{-1/2} \mathbf{C}^{1/2} \boldsymbol{\varphi}. \quad (2.71)$$

A introdução do fator c , alguma capacitância padrão do sistema, nos permite manter as mesmas unidades de Q_C e φ nas novas variáveis q e f . A relação de comutação também permanece inalterada para este conjunto de variáveis:

$$\frac{\Phi_0}{2\pi} (\varphi_i Q_{C,j} - Q_{C,j} \varphi_i) = i\hbar \delta_{ij} \rightarrow \frac{\Phi_0}{2\pi} (f_i q_j - q_j f_i) = i\hbar \delta_{ij}. \quad (2.72)$$

O hamiltoniano para esse sistema de coordenadas passa a ser escrito como

$$\mathcal{H}_S(t) = \frac{1}{2c} \mathbf{q}^T \mathbf{q} + \left(\frac{\Phi_0}{2\pi} \right) U'(\mathbf{f}, t), \quad (2.73)$$

$$\begin{aligned} U'(\mathbf{f}, t) = & - \sum_i L_{J,i}^{-1} \cos(c^{1/2} (\mathbf{C}^{-1/2} \mathbf{f})_i) + \frac{1}{2} \mathbf{f}^T (c \mathbf{C}^{-1/2} \mathbf{M}_0 \mathbf{C}^{-1/2}) \mathbf{f} \\ & + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{f}^T [c^{1/2} \mathbf{C}^{-1/2} (\bar{\mathbf{N}} * \boldsymbol{\Phi}_x)(t) + c^{1/2} \mathbf{C}^{-1/2} (\bar{\mathbf{S}} * \mathbf{I}_B)(t)]. \end{aligned} \quad (2.74)$$

onde passaremos a destacar a variável “lenta” das demais da seguinte maneira $\mathbf{f} = \{\mathbf{f}_{\parallel}, \mathbf{f}_{\perp}\}$.

Como já discutido anteriormente, as coordenadas “rápidas” são caracterizadas pela forte variação do potencial ao longo dessas direções, levando a um potencial de confinamento na região de cada mínimo relevante do problema, cujo efeito esperado deve ser a localização da função de onda ao longo dessas direções. Assim consideramos uma boa aproximação expandir $U'(\mathbf{f})$ até segunda ordem nessas variáveis

$$U'(\mathbf{f}) \approx V(\mathbf{f}_{\parallel}) + \sum a_i(\mathbf{f}_{\parallel}) \mathbf{f}_{\perp,i} + \sum b_{ij}(\mathbf{f}_{\parallel}) \mathbf{f}_{\perp,i} \mathbf{f}_{\perp,j}, \quad (2.75)$$

onde $\mathbf{b}$ pode ser feita uma matriz simétrica real. Nesta aproximação, as posições dos mínimos nas coordenadas $\mathbf{f}_{\perp}$, como função de $\mathbf{f}_{\parallel}$, são dadas por:

$$\mathbf{f}_{\perp}^{\min}(\mathbf{f}_{\parallel}) = -\frac{1}{2} \mathbf{b}^{-1}(\mathbf{f}_{\parallel}) \mathbf{a}(\mathbf{f}_{\parallel}). \quad (2.76)$$

A partir deste ponto, o procedimento da aproximação de Born-Oppenheimer [34] é solucionar a equação de Schrödinger para cada uma das variáveis rápidas, considerando-se fixa a variável lenta. Devido ao forte confinamento, espera-se que o sistema seja encontrado no estado fundamental nestas coordenadas, no caso, uma gaussiana centrada em (2.76), representada aqui como

$$\langle \mathbf{f}_{\perp} | 0, \mathbf{f}_{\parallel} \rangle = g(\mathbf{f}_{\perp} - \mathbf{f}_{\perp}^{\min}(\mathbf{f}_{\parallel})). \quad (2.77)$$

Assim, na aproximação de Born-Oppenheimer, a função de onda completa do sistema é assumida como

$$\langle \mathbf{f} | \alpha \rangle = \langle \mathbf{f}_{\parallel} | \alpha \rangle \langle \mathbf{f}_{\perp} | 0, \mathbf{f}_{\parallel} \rangle = \langle \mathbf{f}_{\parallel} | \alpha \rangle g(\mathbf{f}_{\perp} - \mathbf{f}_{\perp}^{\min}(\mathbf{f}_{\parallel})). \quad (2.78)$$

Onde $\langle \mathbf{f}_{\parallel} | \alpha \rangle$ é o α -ésimo auto-estado da equação de Schrödinger unidimensional na variável lenta $\mathbf{f}_{\parallel}$

$$\left[- \left(\frac{2\pi}{\Phi_0} \right)^2 \frac{\hbar^2}{2c} \frac{d^2}{d\mathbf{f}_{\parallel}^2} + u(\mathbf{f}_{\parallel}) \right] \langle \mathbf{f}_{\parallel} | \alpha \rangle = \lambda_{\alpha} \langle \mathbf{f}_{\parallel} | \alpha \rangle. \quad (2.79)$$

$$u(\mathbf{f}_{\parallel}) = \left(\frac{\Phi_0}{2\pi} \right)^2 V(\mathbf{f}_{\parallel}) - \left(\frac{\Phi_0}{2\pi} \right)^2 \frac{1}{4} \mathbf{a}^T \mathbf{b}^{-1} \mathbf{a} + \frac{\hbar}{\sqrt{2c}} \text{Tr} \sqrt{\mathbf{b}}. \quad (2.80)$$

Note que o potencial efetivo encontrado (2.80) tem dependência não trivial da variável $\mathbf{f}_{\parallel}$ devido aos dois últimos termos. O primeiro e o segundo termos representam o valor do potencial para os pontos (2.76), e o termo final representa a soma das energias de ponto zero $\frac{1}{2}\hbar\omega$ do potencial harmônico multidimensional.

Finalmente, os elementos de matriz que precisam ser computados, (2.69), podem ser escritos na aproximação de Born-Oppenheimer em uma parte devido à variável lenta e outra devido às contribuições das variáveis rápidas:

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{f}(\mathbf{r}_j \cdot \mathbf{f}) \langle \alpha | \mathbf{f} \rangle \langle \mathbf{f} | \beta \rangle &= \int d\mathbf{f}(\mathbf{r}_j^{\perp} \cdot \mathbf{f}_{\perp} + \mathbf{r}_j^{\parallel} \mathbf{f}_{\parallel}) \langle \alpha | \mathbf{f} \rangle \langle \mathbf{f} | \beta \rangle \\ &= \int d\mathbf{f}_{\parallel} d\mathbf{f}_{\perp} \mathbf{r}_j^{\perp} \cdot \mathbf{f}_{\perp} \langle \alpha | \mathbf{f}_{\parallel} \rangle \langle \mathbf{f}_{\parallel} | \beta \rangle g^2(\mathbf{f}_{\perp} - \mathbf{f}_{\perp}^{\min}(\mathbf{f}_{\parallel})) + \\ &\quad \int d\mathbf{f}_{\parallel} d\mathbf{f}_{\perp} \mathbf{r}_j^{\parallel} \mathbf{f}_{\parallel} \langle \alpha | \mathbf{f}_{\parallel} \rangle \langle \mathbf{f}_{\parallel} | \beta \rangle g^2(\mathbf{f}_{\perp} - \mathbf{f}_{\perp}^{\min}(\mathbf{f}_{\parallel})) \\ &= \int d\mathbf{f}_{\parallel} \langle \alpha | \mathbf{f}_{\parallel} \rangle \langle \mathbf{f}_{\parallel} | \beta \rangle \int d\mathbf{f}_{\perp} \mathbf{r}_j^{\perp} \cdot \mathbf{f}_{\perp} g^2(\mathbf{f}_{\perp} - \mathbf{f}_{\perp}^{\min}(\mathbf{f}_{\parallel})) + \\ &\quad \int d\mathbf{f}_{\parallel} \mathbf{r}_j^{\parallel} \mathbf{f}_{\parallel} \langle \alpha | \mathbf{f}_{\parallel} \rangle \langle \mathbf{f}_{\parallel} | \beta \rangle \int d\mathbf{f}_{\perp} g^2(\mathbf{f}_{\perp} - \mathbf{f}_{\perp}^{\min}(\mathbf{f}_{\parallel})) \\ &= \int d\mathbf{f}_{\parallel} (\mathbf{r}_j^{\perp} \cdot \mathbf{f}_{\perp}^{\min}(\mathbf{f}_{\parallel})) \langle \alpha | \mathbf{f}_{\parallel} \rangle \langle \mathbf{f}_{\parallel} | \beta \rangle + \int d\mathbf{f}_{\parallel} \mathbf{r}_j^{\parallel} \mathbf{f}_{\parallel} \langle \alpha | \mathbf{f}_{\parallel} \rangle \langle \mathbf{f}_{\parallel} | \beta \rangle. \end{aligned} \quad (2.81)$$

onde $\mathbf{r}_j \equiv c^{-1/2} \boldsymbol{\alpha}_j^T \bar{\mathbf{m}}^T \mathbf{C}^{1/2}$. No último passo usamos o fato de que uma gaussiana é uma função normalizada.

2.3 Resultados

Aplicamos toda a formulação desenvolvida nas seções anteriores para calcular as propriedades de um qubit que vem sendo alvo de estudos recentes [9]. O qubit em questão é apresentado na Fig. 2.4, consistindo de três junções Josephson e três *loops*: um pequeno e

dois grandes. O qubit é operado aplicando-se fluxos magnéticos em dois de seus *loops*: o fluxo aplicado ao *loop* menor é chamado de fluxo de controle, identificado por Φ_c ; o fluxo aplicado a um dos *loops* maiores é denominado de Φ . O terceiro *loop* é acoplado indutivamente à uma microlinha de transmissão supercondutora de alta qualidade (tarja escura no *loop* superior da Fig. 2.4), que por sua vez é acoplada indutivamente a um SQUID dc (não mostrado na figura) responsável pela aquisição de dados do experimento. A estrutura do dispositivo é tal que, com relação aos fluxos aplicados aos *loops* maiores, o qubit depende apenas da diferença entre eles (essa é uma característica conhecida de um “gradiômetro”). Outro ponto importante a se destacar é a pronunciada simetria do qubit. Como veremos mais adiante, essa simetria se manifesta no comportamento quântico do sistema, desempenhando papel fundamental nos resultados obtidos. Experimentalmente, o qubit é mantido a uma temperatura de $T = 30\text{mK}$, porém os circuitos externos acoplados ao qubit têm temperaturas efetivas da ordem de 1K. Os fluxos são variados em uma escala de tempo da ordem de 1ns [9]. Para o nosso conjunto de parâmetros, encontramos que o tempo de resposta dos circuitos externos é muito rápido, o que torna o intervalo de tempo do kernel $\bar{\mathbf{N}}(t)$ ($\bar{\mathbf{S}}(t)$ é nulo no nosso problema) na convolução (2.32) muito curto, sendo da ordem de 1ps. Por esta razão iremos ignorar os efeitos de retardo no nosso problema, assumindo então $\bar{\mathbf{N}}(\omega) = \bar{\mathbf{N}}(\omega = 0)$.

Para o cálculo que se segue, vamos considerar que o qubit está acoplado a dois circuitos dissipativos diferentes: um acoplado indutivamente ao *loop* menor, caracterizado por uma impedância Z_1 , e o outro acoplado indutivamente a um dos *loops* maiores, caracterizado por uma impedância Z_2 . Espera-se que os processos de dissipação e de descoerência do qubit sejam governados por esses dois circuitos dissipativos (em tempo, consideraremos apenas estas fontes de dissipação presentes no circuito, uma vez que, como já foi dito, as resistências das junções são muitas ordens de grandeza maiores do que as impedâncias das fontes de correntes externas).

A Fig. 2.5 apresenta um grafo orientado do circuito completo, contendo o qubit e os dois circuitos dissipativos. Cada ramo do grafo representa um determinado elemento do circuito, onde identificamos: L_i como a auto-indutância do indutor i ; M_{ij} como a indutância mútua entre os indutores i e j ; e J_i uma junção RSJ, contendo a junção Josephson J_i em paralelo à capacitância C_i e à resistência R_i . No cálculo que realizamos, também consideramos a possibilidade da presença de capacitâncias “parasitas”, identificadas como C_4 e C_5 , que surgiriam no circuito devido à grande proximidade dos ramos $L_{6,7}$ e L_c .

Os valores dos parâmetros físicos deste qubit são: $L_{Z_i} = Z_i(\omega)/i\omega$; $Z_1 = Z_2 = 50\Omega$, $I_c = \frac{\Phi_0}{2\pi L_J} = 0.8\mu\text{A}$, $C_i = 10\text{fF}$, $C_4 = C_5 = 50\text{fF}$, e $L_c = 106.27$, $L_1 = 32.18$, $L_3 = L_5 = 605.03$, $L_6 = L_7 = 81.46$, $L_2 = 32.18$, $L_4 = 605.03$, $M_{12} = 0.8$, $M_{13} = M_{15} = 0.18$, $M_{16} = M_{17} = -2.41$, $M_{3c} = -M_{5c} = 0.52$, $M_{34} = 0.5$, $M_{35} = 3.4$, $M_{36} =$

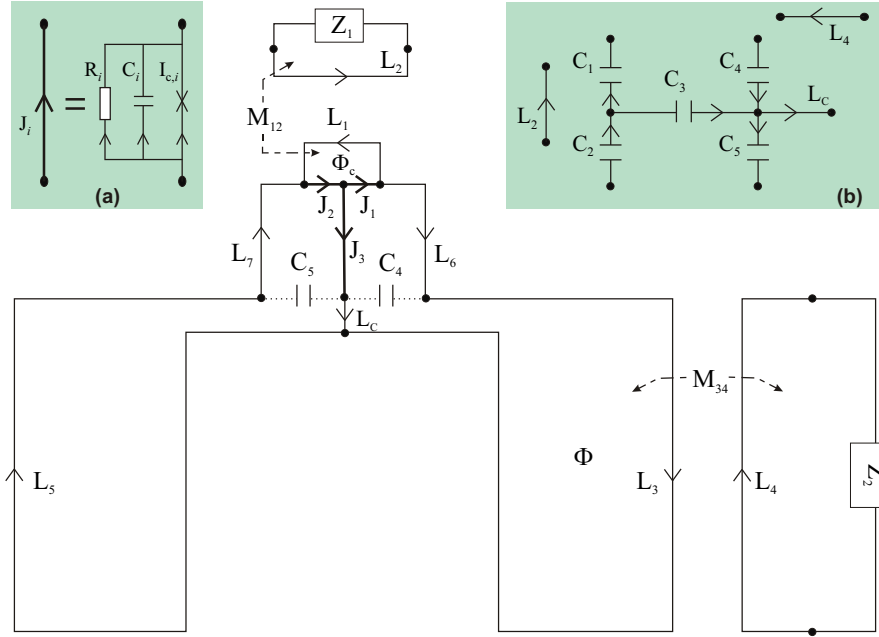


FIGURA 2.5 - Novo qubit da IBM, desenhado como um grafo de rede. Este é um grafo orientado do qubit acoplado, via as indutâncias mútuas M_{12} e M_{34} , à duas fontes de dissipação Z_1 e Z_2 . Os ramos do grafo representam as junções Josephson J_i , as indutâncias L_i e as impedâncias externas Z_i . Cada junção Josephson, Fig. (a), é modelada por uma junção do tipo RSJ. C_4 e C_5 representam as capacitâncias “parasitas” presentes no circuito. O qubit é operado ao variar-se os fluxos externos Φ_c e Φ aplicados ao menor e maior *loops*. A figura (b) mostra a árvore escolhida para o grafo.

$M_{57} = 0.22$, $M_{37} = M_{56} = -0.86$, $M_{1c} = 0$ (exato), $M_{6c} = -M_{7c} = 27.63$, $M_{67} = -13.93$ (todos em unidades de pH).

As matrizes de *loop* para o grafo apresentado são dadas por

$$F_{CL} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad F_{CZ} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.82)$$

$$F_{KL} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad F_{KZ} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.83)$$

Sendo as matrizes $\mathbf{L}$ escritas como:

$$L = \begin{pmatrix} L_1 & M_{13} & M_{15} & M_{16} & M_{17} \\ M_{13} & L_3 & M_{35} & M_{36} & M_{37} \\ M_{15} & M_{35} & L_3 & M_{56} & M_{57} \\ M_{16} & M_{36} & M_{56} & L_6 & M_{67} \\ M_{17} & M_{37} & M_{57} & M_{67} & L_6 \end{pmatrix}, \quad L_{LK} = \begin{pmatrix} M_{12} & 0 & M_{1c} \\ 0 & M_{34} & M_{3c} \\ 0 & 0 & M_{5c} \\ 0 & 0 & M_{6c} \\ 0 & 0 & M_{7c} \end{pmatrix}, \quad (2.84)$$

$$L_K = \begin{pmatrix} L_2 & 0 & 0 \\ 0 & L_4 & 0 \\ 0 & 0 & L_c \end{pmatrix}, \quad L_Z = \begin{pmatrix} L_{Z1} & 0 \\ 0 & L_{Z2} \end{pmatrix}. \quad (2.85)$$

Alguns pontos merecem destaque aqui:

- Apesar da quebra de simetria do sistema, provocada pelo acoplamento entre o *loop* maior e o circuito dissipativo Z_2 , os resultados observados ainda revelam um forte componente de simetria. Isto decorre do fato de que este acoplamento se dá de modo muito fraco.
- Os efeitos das capacitâncias “parasitas”, apesar de terem valores cinco vezes maiores do que os das capacitâncias das junções, levam apenas a mudanças quantitativas dos resultados. Isto pode ser explicado como uma consequência da posição destes elementos no circuito, pois preservam a simetria do dispositivo.

Com todos os elementos apresentados, podemos passar para a descrição quântica do sistema. O qubit é descrito por cinco graus de liberdade (três devidos às junções e dois devido às capacitâncias “parasitas”). A análise do potencial nos revelou que a região de interesse para a operação do qubit, região na qual encontramos um poço duplo de potencial, ocorre no espaço de fluxo para pontos em torno de $\Phi = \Phi_0$ e de Φ_c entre 0 e $0.39\Phi_0$. Além disso, observamos que ao longo da linha $\Phi_c = 0 - 0.39\Phi_0$, com $\Phi = \Phi_0$, o sistema é encontrado em um potencial de poço duplo simétrico. Denominaremos tal linha no espaço

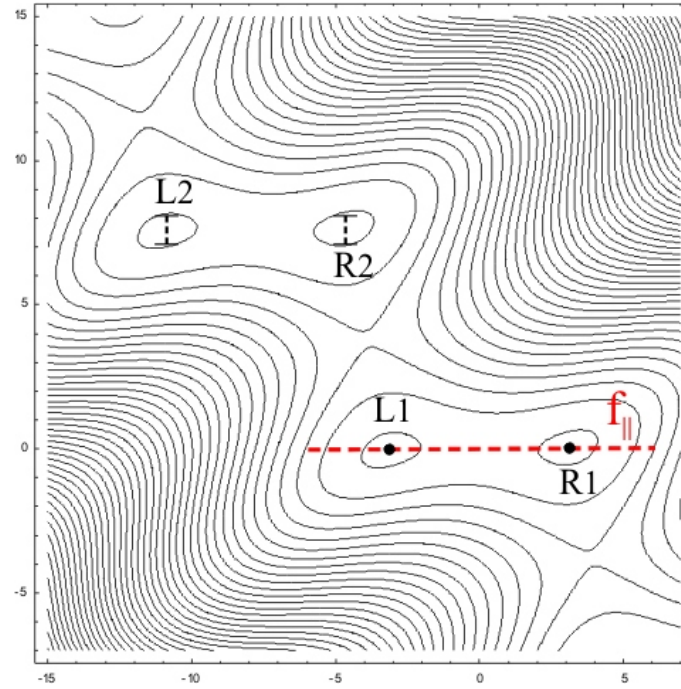


FIGURA 2.6 - Gráfico de contorno do potencial $U'(\mathbf{f})$, eq. (2.74), na linha de simetria, para os valores de fluxo $\Phi_c = 0.36\Phi_0$ e $\Phi = \Phi_0$. A linha tracejada em vermelho indica a direção da coordenada lenta $f_{||}$, na qual o potencial é um poço duplo simétrico. As barras indicam a extensão da função de onda, na vizinhança dos mínimos, na direção rápida $f_{\perp}$.

de fluxo como linha de simetria ou de degenerescência (*S line*). A Fig. 2.6 apresenta um corte no potencial U' , eq. (2.74), para um ponto dessa linha de simetria. O corte foi escolhido de tal modo a conter os dois autovetores da parte quadrática do potencial U' , $\mathbf{C}^{-1/2}\mathbf{M}_0\mathbf{C}^{-1/2}$, com menores autovalores. Um deles tem autovalor nulo, o que faz com que ao longo dessa direção a energia de acoplamento Josephson seja dominante, tornando a estrutura do potencial periódica ao longo da mesma (os mínimos L1-R1 e L2-R2, indicados na figura, são idênticos). Essa periodicidade é uma manifestação da periodicidade de 2π da fase supercondutora. Os pontos desenhados na Fig. 2.6 indicam a posição aproximada dos mínimos relevantes para o problema. A linha tracejada ligando L1 a R1 indica a coordenada assumida como “lenta” na aproximação de Born-oppenheimer, as demais serão consideradas como “rápidas”. Finalmente, ainda com respeito à Fig. 2.6, as barras de erro verticais próximas aos mínimos L2 e R2 indicam a extensão da função de onda do estado fundamental, nessas regiões, ao longo desta direção. Revelando o confinamento esperado ao longo das direções rápidas.

A Fig. 2.7 apresenta a estrutura do potencial, para um ponto da linha de simetria, quando “caminhamos” ao longo de cada uma das direções ortogonais. Como esperado, para a coordenada “lenta” verificamos uma estrutura suave de poço duplo simétrico. Já

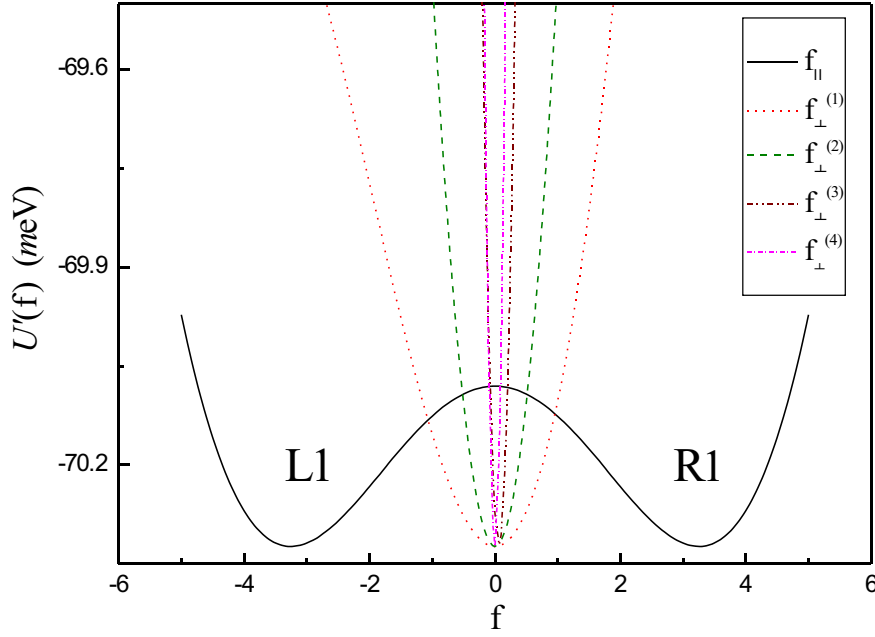


FIGURA 2.7 - Gráficos do potencial U' , eq. (2.74), na vizinhança dos mínimos relevantes, para cada uma das componentes ortogonais de $\mathbf{f}$. Cada gráfico foi feito fixando-se quatro coordenadas em seus pontos de mínimo e variando-se a variável restante. Para a coordenada “lenta” $f_{\parallel}$ (linha sólida), vê-se uma estrutura de poço duplo (simétrico na linha de simetria). Para as coordenadas “rápidas” $f_{\perp}^{(i)}$, aqui calculadas para o mínimo L1, encontra-se um potencial harmônico aproximado. Fluxos externos utilizados nesses gráficos: $\Phi_c = 0.36\Phi_0$ e $\Phi = \Phi_0$.

para as coordenadas “rápidas” o que se verifica é um rápido crescimento do potencial quando nos deslocamos da posição do mínimo. Notadamente a forma destes potenciais é aproximadamente harmônica, corroborando a expansão do potencial, eq. (2.75), utilizada na aproximação de Born-Oppenheimer.

A dependência do potencial com os fluxos externos é dada de maneira bem distinta. Por exemplo, mudanças em Φ_c acarretam em variações na distância de separação e na altura da barreira de potencial entre os mínimos. As Figs. 2.8-2.13 apresentam a dinâmica do potencial ao variarmos Φ_c na linha de simetria, $\Phi = \Phi_0$. Percebe-se que ao aumentar-se Φ_c , a distância entre os mínimos L_i - R_i diminui e que para L_i - R_{i+1} aumenta. Concomitantemente a barreira de potencial diminui entre o primeiro par de mínimos e aumenta para o segundo. Para valores de fluxo $\Phi_c \gtrsim 0.39\Phi_0$ o par L_i - R_i colapsa em um único mínimo, desaparecendo a barreira de potencial, passando o potencial a ter a forma harmônica nesse regime de fluxo. Observe que o par L_i - R_{i+1} tem uma barreira de potencial mínima não nula, e que é considerada bastante alta para o regime de operação do qubit (o que dificultaria criar estados de superposição quântica no sistema). Por isso,

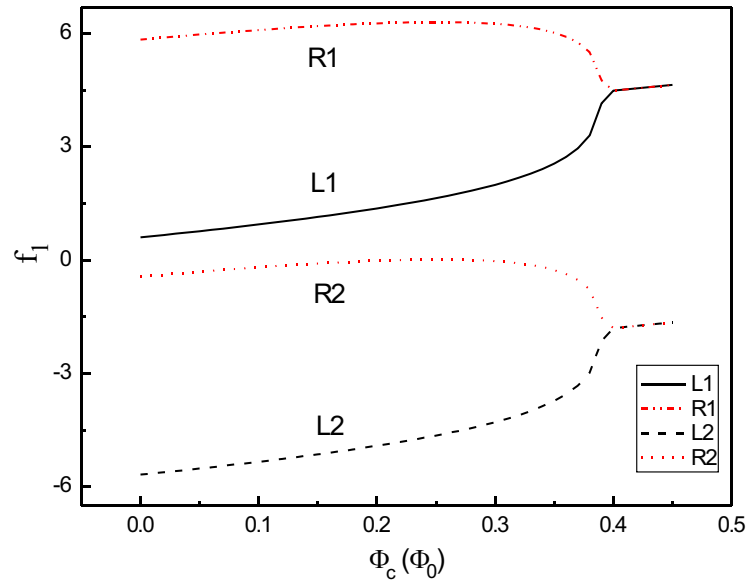


FIGURA 2.8 - Valores da fase associada à junção Josephson J_1 para os pontos de mínimo do potencial, como função do fluxo de controle Φ_c , na linha de simetria. São apresentado dois pares de mínimos (L_i - R_i) vizinhos. Próximo de $\Phi_c \gtrsim 0.39\Phi_0$, a estrutura de duplo mínimo colapsa em um único mínimo por período. Neste regime, a distância entre os mínimos simples (i)-($i + 1$) é de 2π

os mínimos considerados relevantes para a computação quântica são L_i e R_i , no regime de fluxo $\Phi_c > 0.36\Phi_0$. A Fig. 2.14 mostra o comportamento da distância de separação entre o estado fundamental, $|0\rangle$, e o primeiro estado excitado do sistema, $|1\rangle$. Observa-se um crescimento exponencial na região de interesse $0.36\Phi_0 < \Phi_c < 0.38\Phi_0$, revelando um rápido crescimento da amplitude de tunelamento entre os dois poços.

Para variações de Φ em torno de Φ_0 , a mudança ocorre no aparecimento de uma diferença de energia entre os dois mínimos, quebrando assim a simetria do poço duplo. Para grandes deslocamentos da linha de simetria (para este qubit, deslocamentos da ordem de $\Phi = \Phi_0 \pm \delta$, ($\delta \gtrsim 0.01\Phi_0$)), apenas um mínimo permanece estável (significa dizer que os dois menores auto-estados de energia estão confinados em apenas um único poço). Com a análise dos resultados obtidos até aqui, já somos capazes de explicar uma observação experimental [15]. A Fig. 2.15 apresenta uma simulação de uma sequência de medidas tais como são realizadas no experimento. As medidas são feitas varrendo-se Φ , para um dado valor de Φ_c , da esquerda para a direita, e em seguida retornando da direita para a esquerda. Para cada varredura determina-se o valor da supercorrente circulante em um dos *loops* maiores do qubit, gerando-se então o gráfico da Fig. 2.15. Como se pode observar, existem regiões nas quais essa varredura apresenta histerese. Este fenômeno pode ser explicado pela existência do poço duplo de potencial nesta região do espaço de

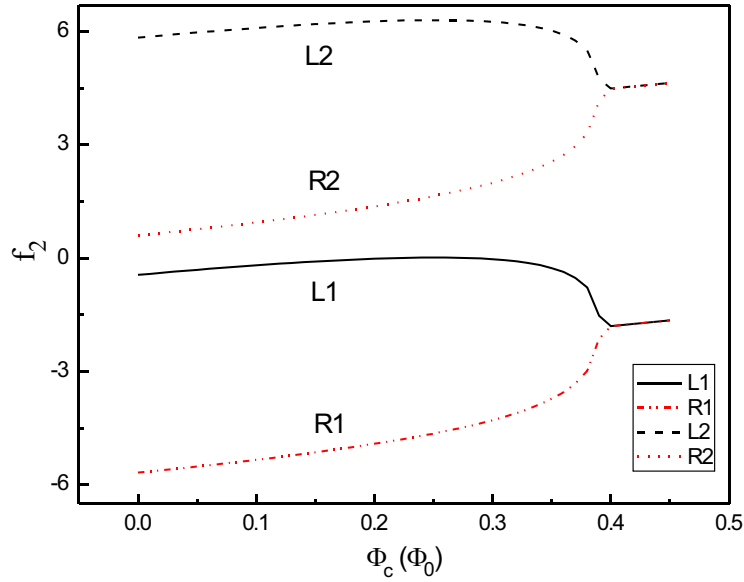


FIGURA 2.9 - Valores da fase associada à junção Josephson J_2 para os pontos de mínimo do potencial, como função do fluxo de controle Φ_c , na linha de simetria. São apresentados dois pares de mínimos (L_i - R_i) vizinhos. Próximo de $\Phi_c \gtrsim 0.39\Phi_0$, a estrutura de duplo mínimo colapsa em um único mínimo por período. Neste regime, a distância entre os mínimos simples $(i)-(i+1)$ é de 2π

fluxo, e pelo efeito que a variação do fluxo Φ tem para a forma do potencial. A explicação detalhada é dada por: partindo-se de um ponto distante da linha de simetria, $\Phi = \Phi_0$, o sistema apresenta um único poço estável, digamos L1, que corresponde à uma determinada configuração de corrente. À medida que nos aproximamos da linha de simetria, o outro poço vai se tornando mais estável, até que o potencial vira um poço duplo simétrico. Por conta da alta barreira de potencial, o sistema continua localizado apenas no poço L1. Porém, continuando a varredura, o poço L1 vai se tornando cada vez mais instável, até que chega um momento no qual o sistema tunela para a configuração mais estável do poço R1, que corresponde à outra configuração de corrente circulante. Ao retornar na varredura, o sistema permanecerá na configuração correspondente ao mínimo R1 até que se atravesse a linha de simetria e este mínimo passa a se tornar instável. Resultando no tunelamento para o mínimo L1. A forma da histerese também pode ser bem explicada através da Fig. 2.13. Olhando para $\Phi = \Phi_0$, percebemos que à medida que diminuimos Φ_c de $0.4\Phi_0$, a região de histerese cresce rapidamente, refletindo o crescimento exponencial da altura da barreira de potencial. No entanto, ao continuarmos diminuindo Φ_c , verificamos que a região de histerese pára de crescer e numa mudança repentina passa a diminuir até estabilizar-se num valor finito. Esta mudança abrupta reflete o fato de que, para valores baixos de Φ_c , a barreira entre os mínimos L1-R2 passa a ser menor do que a observada

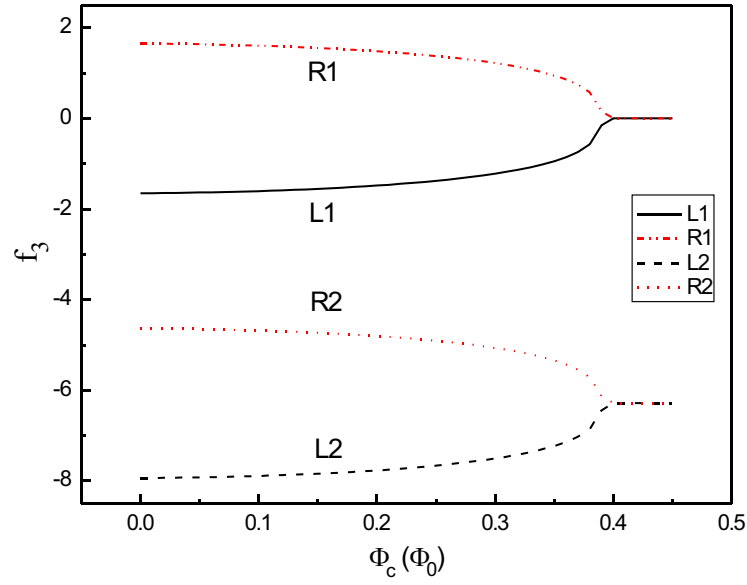


FIGURA 2.10 - Valores da fase associada à junção Josephson J_3 para os pontos de mínimo do potencial, como função do fluxo de controle Φ_c , na linha de simetria. São apresentado dois pares de mínimos ($Li-Ri$) vizinhos. Próximo de $\Phi_c \gtrsim 0.39\Phi_0$, a estrutura de duplo mínimo colapsa em um único mínimo por período. Neste regime, a distância entre os mínimos simples $(i)-(i+1)$ é de 2π

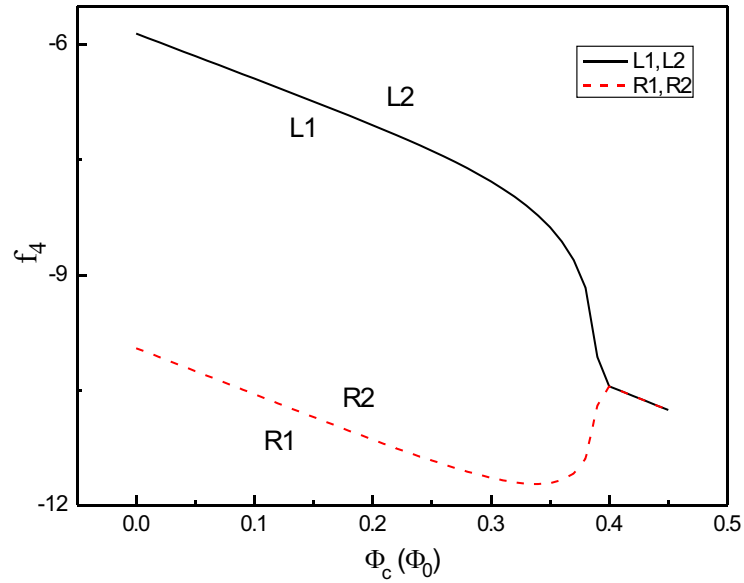


FIGURA 2.11 - Valores da fase associada à capacitância parasita C_4 para os pontos de mínimo do potencial, como função do fluxo de controle Φ_c , na linha de simetria. Para esta fase todos os pares de mínimos ($Li-Ri$) têm os mesmos valores. Isto ocorre devido à ausência de um termo de energia Josephson dependente desta fase.

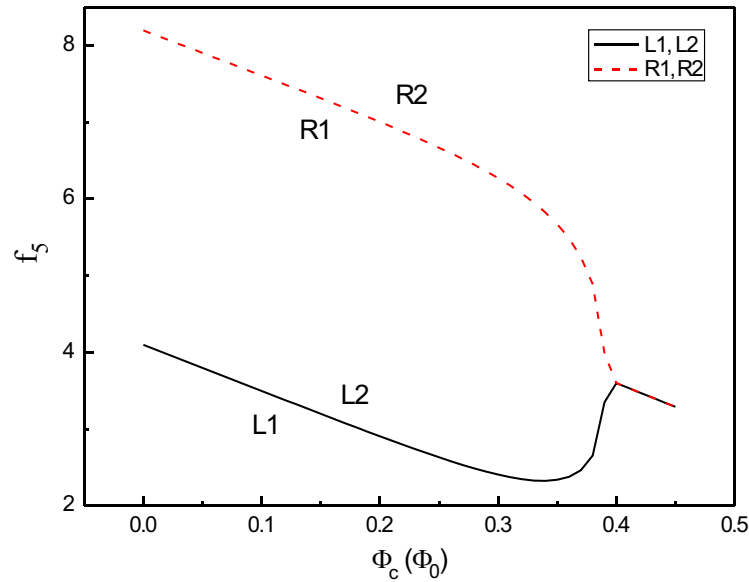


FIGURA 2.12 - Valores da fase associada à capacitância parasita C_5 para os pontos de mínimo do potencial, como função do fluxo de controle Φ_c , na linha de simetria. Para esta fase todos os pares de mínimos (L_i - R_i) têm os mesmos valores. Isto ocorre devido à ausência de um termo de energia Josephson dependente desta fase.

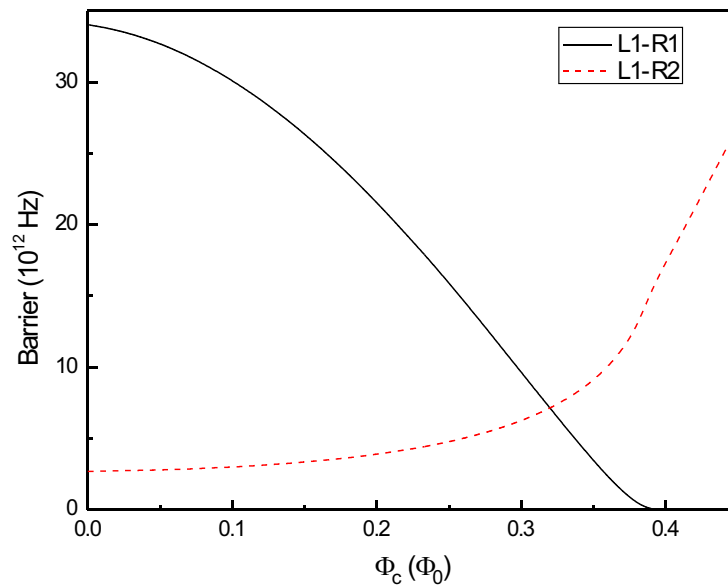


FIGURA 2.13 - Valor da barreira de potencial na linha de simetria como função de Φ_c . São apresentadas as alturas das barreiras entre os mínimos L1-R1 (linha sólida) e L1-R2 (linha tracejada). A barreira entre L1-R1 diminui rapidamente à medida que a distância entre eles diminui. Para $\Phi_c \gtrsim 0.39\Phi_0$, a barreira entre os mínimos L1 e R1 desaparece.

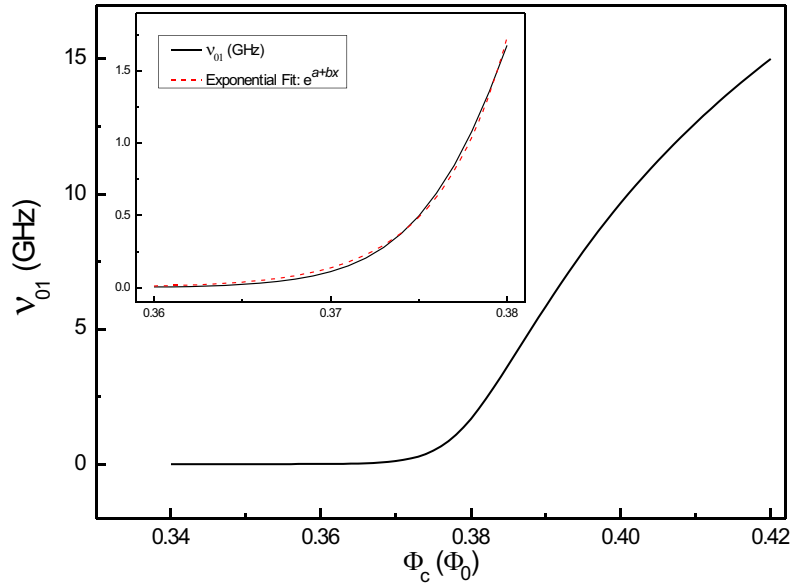


FIGURA 2.14 - Energia de separação entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado, $h\nu_{01} = \langle 1|\mathcal{H}_S|1\rangle - \langle 0|\mathcal{H}_S|0\rangle$, como função do fluxo de “controle” Φ_c na linha de simetria. Gráfico interno mostra em detalhe o regime $\Phi_c = 0.36 - 0.38$, a curva tracejada representa um ajuste exponencial dos dados.

entre L1-R1, passando o tunelamento entre os mínimos L1-R2 a ser mais provável. Esta mudança de comportamento é um ótimo meio de calibração dos fluxos aplicados.

2.3.1 Taxas

Tendo confirmado que a aproximação de Born-Oppenheimer para função de onda do sistema é confiável no nosso problema, procedemos com o cálculo das taxas de descoerência (2.51-2.53). A temperatura usada nos cálculos foi de $T = 5\text{K}$ (a temperatura real do qubit é de $T = 30\text{mK}$), o que representa uma estimativa da temperatura efetiva sentida pelo qubit, devido aos acoplamentos com os circuitos externos. As Figs. 2.17-2.20 apresentam os resultados encontrados considerando a presença de capacitâncias “parasitas”. Utilizaremos a seguinte notação para nos referirmos à cada uma das contribuições dos circuitos externos: o subíndice s denomina os efeitos do circuito que está acoplado ao *loop* menor, este circuito é caracterizado pela impedância Z_1 ; o subíndice l denota os efeitos do circuito acoplado ao *loop* maior, sendo aquele caracterizado pela impedância Z_2 . As curvas referentes ao *loop* menor, T_{1s} e $T_{\phi s}$, são perfeitamente simétricas, o que já não é observado em T_{1l} e $T_{\phi l}$. Isto pode ser explicado sabendo-se que o potencial efetivo (2.80) tem a seguinte propriedade no nosso problema:

$$u(f_{\parallel}, \Phi = \Phi_0 + \epsilon) = u(-f_{\parallel}, \Phi = \Phi_0 - \epsilon), \quad (2.86)$$

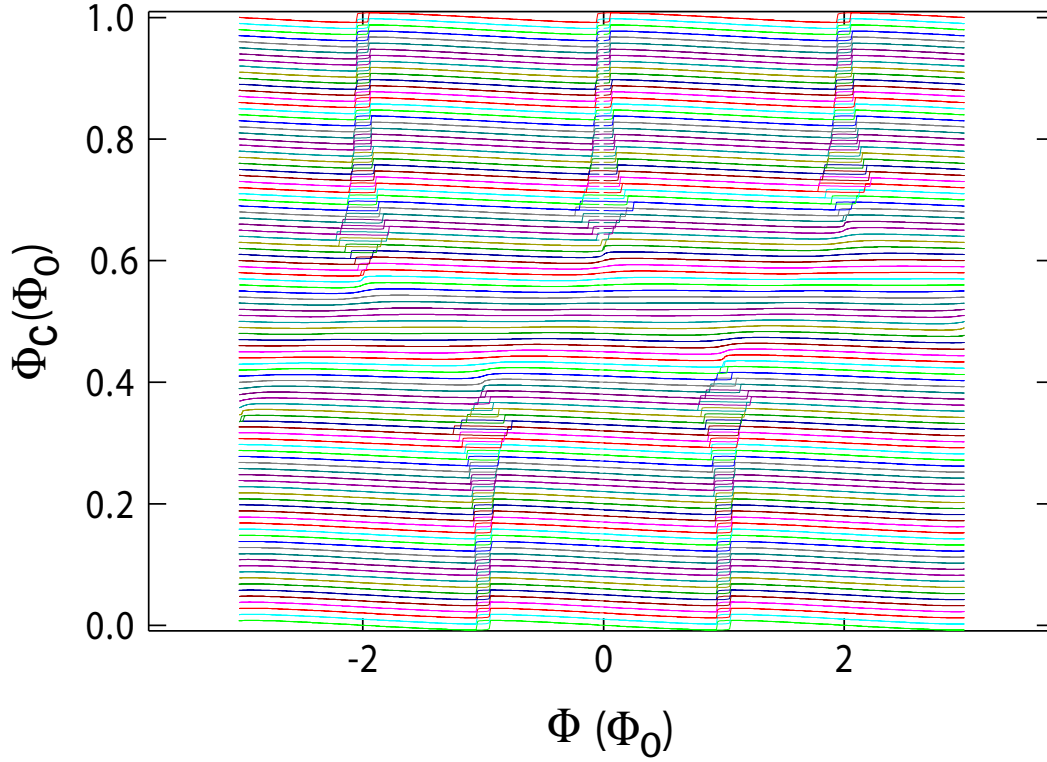


FIGURA 2.15 - Simulação da corrente circulante no *loop* de aquisição de dados, como função do fluxo Φ , parametrizada pelo fluxo Φ_c . A varredura nos fluxos mostra regiões verticais de histerese, indicando a presença de um potencial de poço duplo nessas regiões. Figura gentilmente cedida por Roger H. Koch

donde podemos concluir que os termos de $\mathbf{f}_{\perp}^{\min}(\mathbf{f}_{\parallel})$ ímpares em $\mathbf{f}_{\parallel}$ e em ϵ têm que ter a forma produto $\epsilon \mathbf{f}_{\parallel}$. Deste modo os primeiros termos da série de Taylor para $\mathbf{r}_j \cdot \mathbf{f}_{\perp}^{\min}(\mathbf{f}_{\parallel})$ devem ser dados por:

$$\mathbf{r}_j \cdot \mathbf{f}_{\perp}^{\min}(\mathbf{f}_{\parallel}) = a_j \mathbf{f}_{\parallel}^2 + b_j \epsilon \mathbf{f}_{\parallel} + \dots \quad (2.87)$$

além disso, eq. (2.86) implica na seguinte paridade da função de onda: $\langle \mathbf{f}_{\parallel} | \alpha, \epsilon \rangle = \langle -\mathbf{f}_{\parallel} | \alpha, -\epsilon \rangle$, onde $\langle \mathbf{f}_{\parallel} | \alpha, \epsilon \rangle$ significa a função de onda do α -ésimo auto-estado do sistema, calculado para o fluxo $\Phi = \Phi_0 + \epsilon$. Usando estas constatações e (2.87), podemos analisar a paridade dos termos do elemento de matriz (2.81):

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{f}_{\parallel} \mathbf{r}_j^{\parallel} \mathbf{f}_{\parallel} \langle \alpha, \epsilon | \mathbf{f}_{\parallel} \rangle \langle \mathbf{f}_{\parallel} | \beta, \epsilon \rangle &= \int d\mathbf{f}_{\parallel} \mathbf{r}_j^{\parallel} \mathbf{f}_{\parallel} \langle \alpha, -\epsilon | -\mathbf{f}_{\parallel} \rangle \langle -\mathbf{f}_{\parallel} | \beta, -\epsilon \rangle \\ &= \int d\mathbf{f}_{\parallel} \mathbf{r}_j^{\parallel} \mathbf{f}_{\parallel} \langle \alpha, -\epsilon | \mathbf{f}_{\parallel} \rangle \langle \mathbf{f}_{\parallel} | \beta, -\epsilon \rangle \end{aligned} \quad (2.88)$$

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{f}_{\parallel} (a_j \mathbf{f}_{\parallel}^2 + b_j \epsilon \mathbf{f}_{\parallel}) \langle \alpha, \epsilon | \mathbf{f}_{\parallel} \rangle \langle \mathbf{f}_{\parallel} | \beta, \epsilon \rangle &= \int d\mathbf{f}_{\parallel} (-a_j \mathbf{f}_{\parallel}^2 + b_j \epsilon \mathbf{f}_{\parallel}) \langle \alpha, -\epsilon | \mathbf{f}_{\parallel} \rangle \langle \mathbf{f}_{\parallel} | \beta, -\epsilon \rangle \\ &= - \int d\mathbf{f}_{\parallel} (a_j \mathbf{f}_{\parallel}^2 - b_j \epsilon \mathbf{f}_{\parallel}) \langle \alpha, -\epsilon | \mathbf{f}_{\parallel} \rangle \langle \mathbf{f}_{\parallel} | \beta, -\epsilon \rangle. \end{aligned} \quad (2.89)$$

Verificamos assim que o termo longitudinal do elemento de matriz 2.81 é uma função par de ϵ , e que o termo transverso é uma função ímpar. Tudo isto posto, podemos agora entender o porquê da perfeita simetria de T_{1s} e $T_{\phi s}$. Ela decorre por conta do fato que para essas grandezas $r_{\parallel} = 0$, fazendo com que $\langle \alpha | \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{f} | \beta \rangle$ tenha paridade definida com relação a ϵ . Esta perfeita simetria observada é uma consequência direta da forma como o qubit e o circuito Z_1 se acoplam, acoplamento este que não quebra a simetria do sistema. Para os termos T_{1l} e $T_{\phi l}$, a contribuição longitudinal é não-nula, $r_2^{\parallel} \neq 0$, assim as correções transversais tornam $\langle \alpha | \mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{f} | \beta \rangle$ sem paridade definida com respeito a ϵ .

Analisando os comportamentos das curvas nas Figs. 2.17-2.20, podemos verificar a existência de dois regimes distintos que iremos identificá-los como:

- um semiclássico, observado para valores de $\Phi_c \lesssim 0.39\Phi_0$, onde o potencial é descrito por um poço duplo com a posição do mínimo à esquerda e à direita dados respectivamente por:

$$\mathbf{f}_L = \{f_{\parallel L}, \mathbf{f}_{\perp}^{\min}(f_{\parallel L})\}, \quad (2.90)$$

$$\mathbf{f}_R = \{f_{\parallel R}, \mathbf{f}_{\perp}^{\min}(f_{\parallel R})\}. \quad (2.91)$$

Devido à alta barreira de potencial separando os mínimos, os estados fundamentais de cada poço simples, $|L\rangle$ e $|R\rangle$, podem ser aproximados como orbitais localizados centrados em $\mathbf{f}_{L,R}$, deste modo $\langle L | R \rangle \approx 0$. Assim os dois primeiros auto-estados do sistema podem ser escritos de maneira aproximada como combinações simétrica e anti-simétrica de $|R\rangle$ e $|L\rangle$

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{1 + \frac{\epsilon}{\omega_{01}}} |L\rangle + \sqrt{1 - \frac{\epsilon}{\omega_{01}}} |R\rangle \right), \quad (2.92)$$

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{1 - \frac{\epsilon}{\omega_{01}}} |L\rangle - \sqrt{1 + \frac{\epsilon}{\omega_{01}}} |R\rangle \right), \quad (2.93)$$

onde $\hbar\omega_{01} = \langle 1 | \mathcal{H}_S | 1 \rangle - \langle 0 | \mathcal{H}_S | 0 \rangle$, sendo $\omega_{01} = \sqrt{\Delta^2 + \epsilon^2}$. $\epsilon = \langle L | \mathcal{H}_S | L \rangle - \langle R | \mathcal{H}_S | R \rangle$ mensura a anti-simetria do poço duplo (determinada pela diferença $\Phi - \Phi_0$), e $\Delta = \langle L | \mathcal{H}_S | R \rangle$ é a amplitude de tunelamento entre os poços (função de Φ_c no nosso problema). Observe que Δ aumenta exponencialmente com Φ_c , Fig. 2.14, em acordo com a predição apontada pela aproximação WKB [34]. Uma vez que $|L\rangle$ e $|R\rangle$ são orbitais localizados, assumiremos a seguinte aproximação para os elementos de matriz:

$$\langle L | \mathbf{f} | R \rangle \approx 0, \quad \langle L | \mathbf{f} | L \rangle \approx \mathbf{f}_L, \quad \langle R | \mathbf{f} | R \rangle \approx \mathbf{f}_R. \quad (2.94)$$

Das eqs. (2.92)–(2.94) o elementos de matriz envolvendo os auto-estados de energia, eq. (2.81), passam a ser dados por

$$\langle 0 | \mathbf{r}_j \cdot \mathbf{f} | 1 \rangle \approx \frac{1}{2} \frac{\Delta}{\omega_{01}} \mathbf{r}_j \cdot \Delta \mathbf{f}, \quad (2.95)$$

$$\langle 0 | \mathbf{r}_j \cdot \mathbf{f} | 0 \rangle - \langle 1 | \mathbf{r}_j \cdot \mathbf{f} | 1 \rangle \approx \frac{\epsilon}{\omega_{01}} \mathbf{r}_j \cdot \Delta \mathbf{f}, \quad (2.96)$$

onde $\Delta \mathbf{f} = \mathbf{f}_L - \mathbf{f}_R$.

- o outro regime, chamado de “harmônico”, ocorre para $\Phi_c \gtrsim 0.39\Phi_0$. Dois pontos sobre a forma do potencial merecem ser destacados: primeiramente, como já foi comentado anteriormente, a estrutura de poço duplo do potencial colapsa em um poço simples para o regime de valores de Φ_c em questão. O potencial é perfeitamente harmônico para pontos da linha de simetria, deixando continuamente de sê-lo para valores de ϵ não-nulos; o outro ponto a ser relatado é que, ao aumentarmos Φ_c para um dado $\epsilon \neq 0$ fixo, observamos que o poço simples vai se tornando cada vez mais harmônico. Esta observação será capaz de explicar o comportamento das curvas obtidas nesse regime.

Além disso, algumas curvas apresentam uma mudança brusca de comportamento ao passarem pelo ponto $\Phi = (1 \pm \delta)\Phi_0$, $\delta \approx 0.01$, como discutido na seção anterior, neste regime de fluxo um dos poços passa a ser instável, sendo a dinâmica concentrada apenas no poço estável. Antes de discutirmos os resultados apresentados com mais detalhes, façamos uma discussão sobre o termo não-aditivo que ocorre neste problema.

2.3.1.1 Não-aditividade das taxas

Para o caso contendo apenas duas fontes de dissipação, conseguimos somar exatamente a série que gera $\mathbf{L}_{\text{mix}}^{-1}$, eq. (2.62). Sendo o resultado final dado por:

$$\mathbf{L}_{\text{mix}}^{-1}(\omega) = \frac{L_{c,12}}{[L_{Z_1}(\omega) + L_{c,11}][L_{Z_2}(\omega) + L_{c,22}] - L_{c,12}^2} \begin{pmatrix} \frac{L_{c,12}}{L_{Z_1}(\omega) + L_{c,11}} & -1 \\ -1 & \frac{L_{c,12}}{L_{Z_2}(\omega) + L_{c,22}} \end{pmatrix}$$

Usando os valores dos parâmetros físicos do qubit em estudo, encontramos que os elementos de $\mathbf{L}_c$ podem ser escritos aproximadamente por $L_{c,11} \approx L_2 = 32.18\text{pH}$, $L_{c,22} \approx L_4 = 605.03\text{pH}$ e $L_{c,12} \approx M_{13}M_{12}M_{34}/(L_1L_3) = -3.22 \cdot 10^{-6}\text{pH}$. Devido ao acoplamento fraco entre o qubit e o banho, o termo não-aditivo é completamente desprezível para esse arranjo

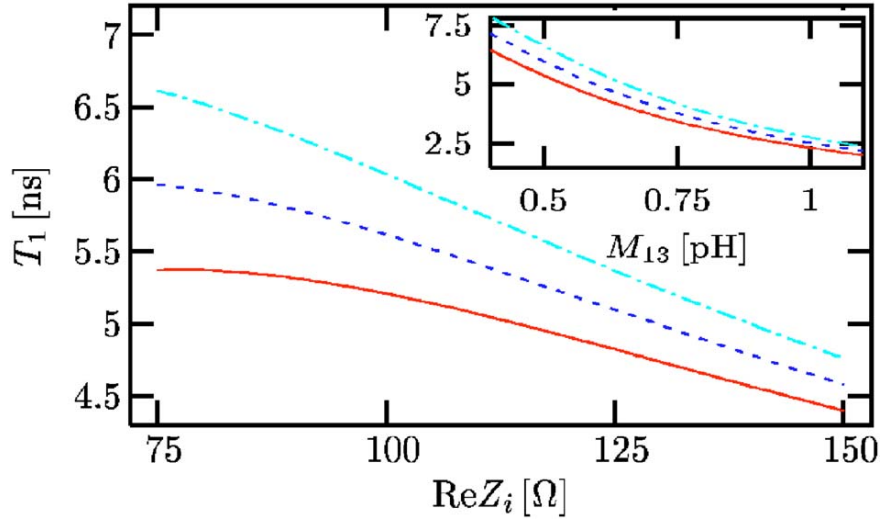


FIGURA 2.16 - Tempo de relaxação como função de $\text{Re}Z_i$, para $M_{13} = 0.5\text{pH}$, na situação de acoplamento mais intenso. A linha tracejada representa T_1 sem o termo não-aditivo, as curvas traço-ponto e sólida incluem $1/T_1^{\text{mix}}$ para os casos $R_{\text{im}} = -10\text{k}\Omega$ e $R_{\text{im}} = 10\text{k}\Omega$, respectivamente. A figura interna apresenta T_1 , para $R = \text{Re}Z_i = 75\Omega$, como função do acoplamento M_{13} entre os *loops* menor e maior do qubit

experimental, sendo da ordem de

$$\frac{1/T_1^{(\text{mix})}}{1/T_1^{(j)}} \approx \frac{\omega_{01}^2 L_{c,12} (L_{c,11} + L_{c,22})}{R^2} \approx 10^{-10} \quad (2.97)$$

onde consideramos as impedâncias puramente resistivas, $Z_j(\omega) = R = 50\Omega$.

Caso o arranjo experimental não fosse bom, de tal modo que os acoplamentos entre o qubit e os circuitos externos fossem mais intensos, o termo de não-aditividade passaria a dar contribuições relevantes para a dissipação. A Fig. 2.16 apresenta T_1 como função do valor da parte resistiva da impedância, e no gráfico interno como função da interação entre os *loops* menor e maior do qubit. As impedâncias são assumidas dadas por $Z_1 = R$, $Z_2 = R + iR_{\text{im}}$, onde $R = 75\Omega$ e $R_{\text{im}} = \pm 10\text{k}\Omega$ ($R_{\text{im}} > 0$ corresponde a um caráter indutivo, e $R_{\text{im}} < 0$ a um capacitivo). A curva tracejada apresenta T_1 sem se considerar o termo não-aditivo, as curvas sólida e traço-ponto computam o efeito de $1/T_1^{\text{mix}}$ para $R_{\text{im}} > 0$ e $R_{\text{im}} < 0$, respectivamente. Como esperado, as curvas indicam uma piora do tempo de relaxação à medida que aumentamos o valor da impedância externa ou a interação entre os *loops* do qubit. No que concerne a não-aditividade, podemos observar que desconsiderar o termo $1/T_1^{\text{mix}}$ pode levar a um erro de até 20% na estimativa da relaxação neste caso. Além disso, o conhecimento deste resultado poderia indicar o melhor arranjo experimental possível para a operação do qubit (no caso, impedâncias com caráter capacitivo), supondo que o acoplamento sistema-banho não pudesse ser diminuído. Assumimos que neste caso o

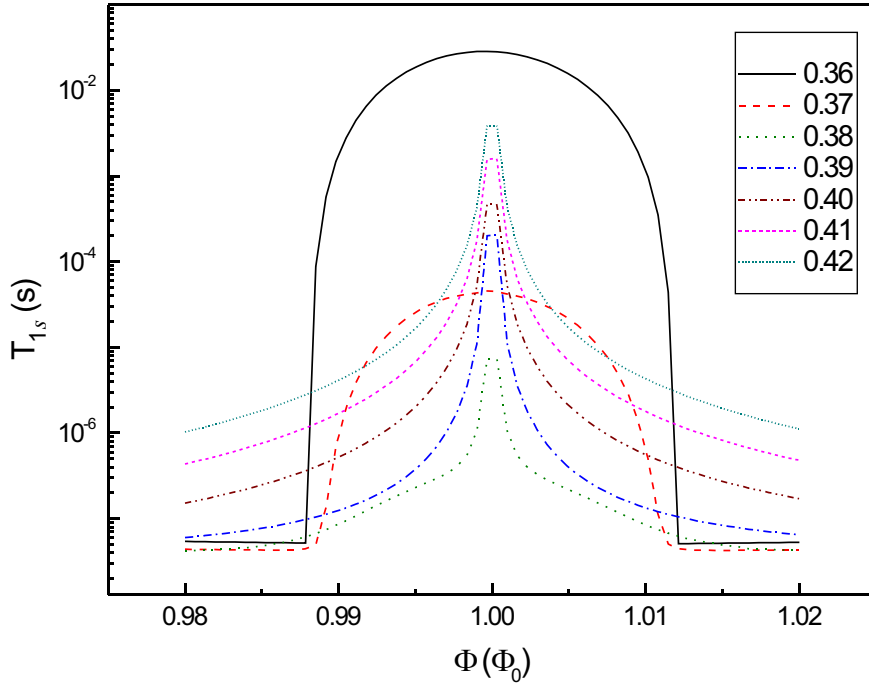


FIGURA 2.17 - Tempo de relaxação T_{1s} associado à fonte de dissipação Z_1 , para o caso contendo capacitâncias parasitas. Os vários gráficos de T_{1s} são apresentados como função dos fluxos Φ_c e Φ . A barreira de potencial permanece alta até pontos de $\Phi_c \approx 0.39\Phi_0$, como conseqüência, tem-se que o sistema pode ser bem descrito por um modelo semiclássico. Para $\Phi_c \gtrsim 0.39\Phi_0$, o comportamento é análogo ao do esperado para um potencial harmônico. A perfeita simetria com relação ao ponto $\Phi = \Phi_0$ ocorre como uma manifestação da simetria do qubit. Para grandes deslocamentos com relação a linha de simetria ($\Phi = (1 \pm \delta)\Phi_0$, com $\delta \geq 0.01$), os dois primeiros auto-estados encontram-se localizados em um único poço, o que explica a mudança de comportamento apresentada nas curvas.

arranjo experimental teria os novos valores dos parâmetros físicos: $L_2 = L_4 = 12\text{nH}$, $M_{12} \approx \sqrt{L_1 L_2}$ e $M_{34} \approx \sqrt{L_3 L_4}$ (acoplamento indutivo forte).^{§§} Como veremos nas próximas seções, o arranjo experimental “ruim” acarreta em tempos de coerência da ordem de 10^3 vezes menores do que os observados para o arranjo com acoplamento fraco, devendo assim ser prontamente evitado na implementação deste dispositivo como um qubit.

2.3.1.2 T_{1s}

A Fig. 2.17 mostra que T_{1s} é simétrico e apresenta uma forte divergência para $\Phi = \Phi_0$ (ponto evitado nos dados que geraram a Fig. 2.17). Além disso, à medida que aumentamos Φ_c , observamos que T_{1s} decresce exponencialmente, mudando repentinamente para um

^{§§}A hipótese feita do acoplamento sistema-banho mais intenso assumida ainda encontra-se no regime de validade da aproximação de Born-Markov, uma vez que a condição $J_i(\omega_{01})/\omega_{01} \ll 1$ é satisfeita se $|Z_i|^2 \gg e^2/h$. O que acontece no caso em consideração.

crescimento exponencial com Φ_c . Estes dois comportamentos podem ser explicados usando os limites semiclássico e harmônico.

Para os valores iniciais de Φ_c , $0.36\Phi_0 \leq \Phi_c < 0.39\Phi_0$, o comportamento das curvas pode ser bem explicado pela aproximação semiclássica. Como o termo longitudinal é nulo para a contribuição devida ao circuito acoplado ao *loop* menor, isto é $\mathbf{r}_1^\parallel = (\boldsymbol{\alpha}_1^T \bar{\mathbf{m}}^T \mathbf{C}^{1/2})_\parallel = 0$, o elemento de matriz (2.81) passa a ser dado por:

$$|\langle 0 | \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{f} | 1 \rangle|^2 = |\langle 0 | \mathbf{r}_1^\perp \cdot \mathbf{f}_\perp | 1 \rangle|^2 \approx \frac{1}{4} \frac{\Delta^2}{\omega_{01}^2} [\mathbf{r}_\perp \cdot (\mathbf{f}_\perp^{\min}(f_\parallel^L) - \mathbf{f}_\perp^{\min}(f_\parallel^R))]^2, \quad (2.98)$$

no último passo usamos a aproximação semiclássica (2.95). Usando a expansão (2.87) e $f_\parallel^R = -f_\parallel^L$ para $\epsilon = 0$, encontramos:

$$|\langle 0 | \mathbf{r}_j \cdot \mathbf{f} | 1 \rangle|^2 \approx \frac{1}{4} \frac{\Delta^2}{\omega_{01}^2} \times b^2 \epsilon^2 (f_\parallel^R)^2, \quad (2.99)$$

$$T_{1s} \propto \frac{\omega_{01}^2}{\Delta^2 \epsilon^2} = \frac{1}{\Delta^2} + \frac{1}{\epsilon^2}. \quad (2.100)$$

Este resultado está em pleno acordo com o comportamento observado nas curvas de T_{1s} . Há uma divergência evidente para pontos da linha de simetria, e como Δ cresce exponencialmente com o aumento de Φ_c , verificamos a razão pela qual T_{1s} diminui da mesma maneira com Φ_c .

Para os valores de fluxo $\Phi_c \gtrsim 0.39\Phi_0$, o potencial é um poço simples quase-harmônico (perfeitamente harmônico na linha de simetria), que vai se tornando cada vez mais harmônico à medida que aumentamos Φ_c . Assim observamos que o elemento de matriz

$$\langle 0 | \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{f} | 1 \rangle = \int df_\parallel (\mathbf{r}_1^\perp \cdot \mathbf{f}_\perp^{\min}(f_\parallel)) \langle 0 | f_\parallel \rangle \langle f_\parallel | 1 \rangle \approx \int df_\parallel (a_1 f_\parallel^2 + b_1 \epsilon f_\parallel) \langle 0 | f_\parallel \rangle \langle f_\parallel | 1 \rangle, \quad (2.101)$$

é nulo para $\epsilon = 0$, pois as funções de onda $\langle f_\parallel | 0 \rangle$ e $\langle f_\parallel | 1 \rangle$ do oscilador harmônico têm paridade opostas, explicando assim a divergência apresentada nas curvas de T_{1s} . Para pontos fora da linha de simetria, $\epsilon \neq 0$, o termo quadrático em $f_\parallel$ na integral vai se tornando exponencialmente nulo ao aumentarmos Φ_c , uma vez que as funções de onda $\langle f_\parallel | 0 \rangle$ e $\langle f_\parallel | 1 \rangle$ vão se tornando aquelas do oscilador harmônico. Explicando o crescimento de T_{1s} com Φ_c neste regime de fluxo.

2.3.1.3 T_{1l}

Ao contrário do que ocorre em T_{1s} , o termo longitudinal é não-nulo para T_{1l} , isto é, $\mathbf{r}_2^\parallel = (\boldsymbol{\alpha}_2^T \bar{\mathbf{m}}^T \mathbf{C}^{1/2})_\parallel \neq 0$, fazendo com que as curvas da Fig. 2.18 não sejam perfeitamente simétricas. A aproximada simetria observada decorre do fato que o termo longitudinal é

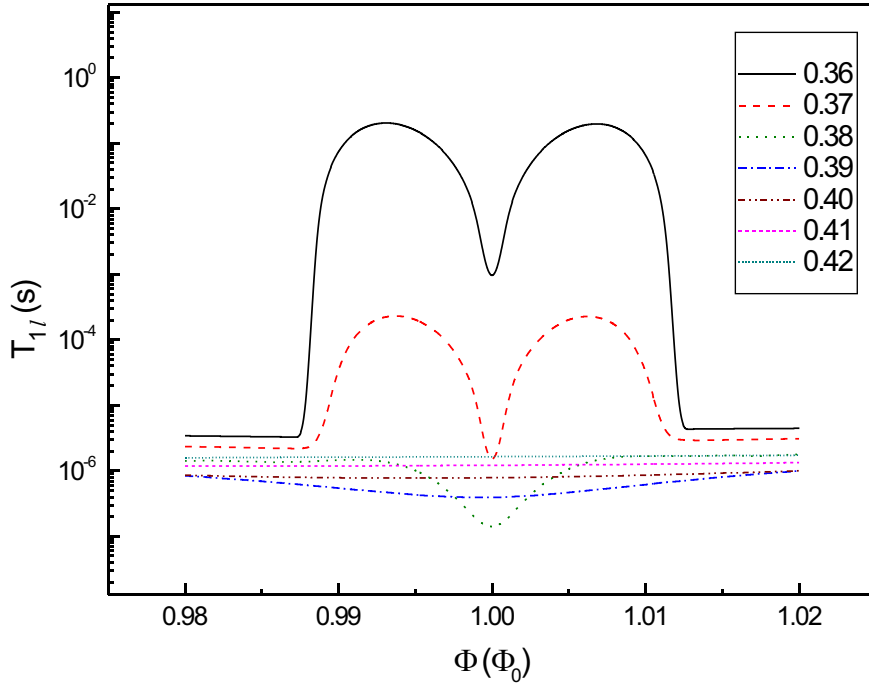


FIGURA 2.18 - Tempo de relaxação T_{1l} associado à fonte de dissipação Z_2 , para o caso contendo capacitâncias “parasitas”. Os vários gráficos de T_{1l} são apresentados como função dos fluxos Φ_c e Φ . Analogamente a T_{1s} , T_{1l} tem dois regimes distintos, um “semiclássico” $\Phi_c \lesssim 0.39\Phi_0$, e um “harmônico” $\Phi_c \gtrsim 0.39\Phi_0$. A simetria aproximada decorre das contribuições dominantes $||$ para os elementos de matriz (2.81)

dominante no cálculo do elemento de matriz (2.81). Procedendo analogamente ao caso anterior, temos que a aproximação semiclássica nos dá

$$T_{1l}^{-1} \propto |\langle 0 | \mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{f} | 1 \rangle|^2 \approx \frac{1}{4} \frac{\Delta^2}{\omega_{01}^2} [r_2^{\parallel} (f_{\parallel}^L - f_{\parallel}^R)]^2. \quad (2.102)$$

$$T_{1l} \propto 1 + \frac{\epsilon^2}{\Delta^2}. \quad (2.103)$$

Concordando com o comportamento observado nas curvas da Fig. 2.18: um mínimo na linha de simetria, e uma diminuição exponencial do tempo de relaxação quando aumentamos Φ_c .

Para o regime de poço simples, a componente longitudinal continua dominante, com o elemento de matriz dado por

$$\langle 0 | \mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{f} | 1 \rangle \approx \int df_{\parallel} (r_2^{\parallel} f_{\parallel} + a_2 f_{\parallel}^2 + b_2 \epsilon f_{\parallel}) \langle 0 | f_{\parallel} \rangle \langle f_{\parallel} | 1 \rangle \approx \int df_{\parallel} (r_2^{\parallel} f_{\parallel}) \langle 0 | f_{\parallel} \rangle \langle f_{\parallel} | 1 \rangle, \quad (2.104)$$

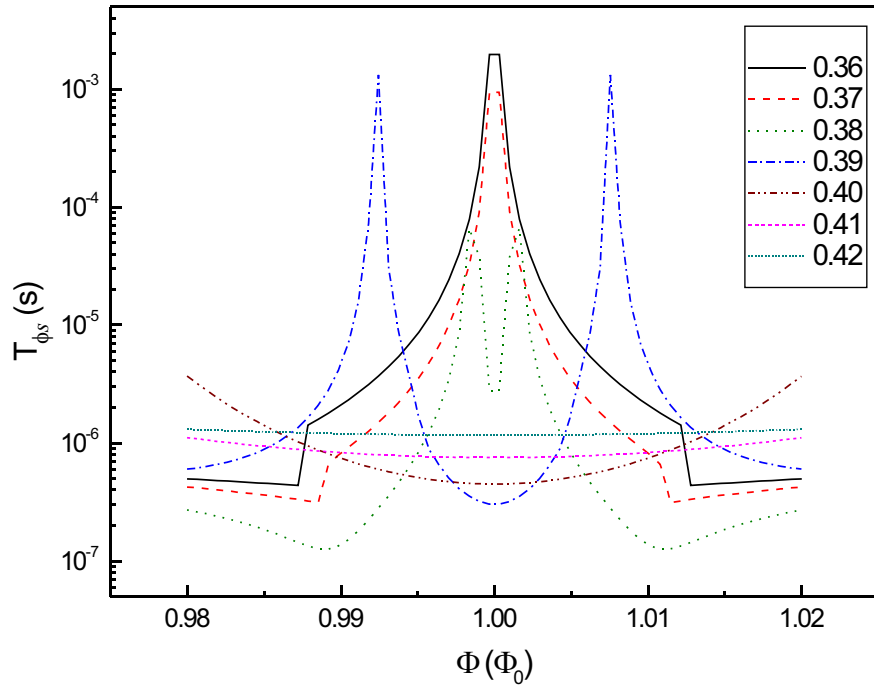


FIGURA 2.19 - Tempo de descoerência T_{ϕ_s} associado à fonte de dissipação Z_1 , para o caso contendo capacitâncias “parasitas”. Os vários gráficos de T_{ϕ_s} são apresentados como função dos fluxos Φ_c e Φ . A estrutura de dois picos é entendida como uma manifestação do peso diferente que os estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$ desempenham nos elementos de matriz (2.81). A simetria matemática ocorre devido a simetria do qubit.

como não temos problema de nulidade do elemento $\langle 0|\mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{f}|1\rangle$ (consequentemente, divergências em T_{1l}) neste caso, observamos de (2.104) que T_{1l} é uma função fracamente dependente de ϵ e Φ_c , em acordo com o que se verifica na Fig. 2.18.

2.3.1.4 T_{ϕ_s}

Do mesmo modo que T_{1s} , T_{ϕ_s} não contém contribuição do termo longitudinal. Usando (2.96), a aproximação semiclássica prediz

$$|\langle 0|\mathbf{v} \cdot \mathbf{f}|0\rangle - \langle 1|\mathbf{v} \cdot \mathbf{f}|1\rangle|^2 \approx \frac{\epsilon^2}{\omega_{01}^2} \times b^2 \epsilon^2 (f_{\parallel}^R)^2 \quad (2.105)$$

$$T_{\phi_s} \propto \frac{\omega_{01}^2}{\epsilon^4} = \frac{1}{\epsilon^2} + \frac{\Delta^2}{\epsilon^4} \quad (2.106)$$

Determinando uma forte divergência de T_{ϕ_s} para $\epsilon = 0$. Este comportamento pode ser observado para os valores iniciais de Φ_c na Fig. 2.19, porém para valores maiores de Φ_c essa predição não se encontra em acordo com o comportamento observado (uma estrutura de dois máximos que se distanciam rapidamente). Isto ocorre porque, na linha de simetria, a aproximação semiclássica nos diz que os elementos $|\langle 0|\mathbf{f}|0\rangle|^2$ e $|\langle 1|\mathbf{f}|1\rangle|^2$ são iguais, sendo

esta hipótese correta se as funções de onda dos estados fundamental e excitado forem muito bem localizadas na região dos poços (com amplitude tendendo a zero na região da barreira de potencial), fato este ocorrendo para os valores iniciais de Φ_c (a barreira de potencial é bastante alta nestes casos). No entanto, como vimos na Fig. 2.13, a barreira diminui rapidamente à medida que aumentamos Φ_c , tendo como consequência alargar a função de onda para além da região dos mínimos. Deste modo a diferença entre os elementos de matriz passa a ser não-nula.

Para $\Phi_c \gtrsim 0.39\Phi_0$, podemos entender o comportamento de $T_{\phi s}$ analisando em detalhe o elemento de matriz

$$\langle \alpha | \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{f} | \alpha \rangle = \int d\mathbf{f}_{\parallel} (\mathbf{r}_1^{\perp} \cdot \mathbf{f}_{\perp}^{min}(\mathbf{f}_{\parallel})) \langle \alpha | \mathbf{f}_{\parallel} \rangle \langle \mathbf{f}_{\parallel} | \alpha \rangle \approx \int d\mathbf{f}_{\parallel} (a_1 f_{\parallel}^2 + b_1 \epsilon f_{\parallel}) \langle \alpha | \mathbf{f}_{\parallel} \rangle \langle \mathbf{f}_{\parallel} | \alpha \rangle, \quad (2.107)$$

onde $\alpha = 0, 1$. Para $\epsilon = 0$, encontramos que $\langle 1 | f_{\parallel}^2 | 1 \rangle - \langle 0 | f_{\parallel}^2 | 0 \rangle = \hbar/m\omega_{01}$, uma vez que as funções de onda $\langle \mathbf{f}_{\parallel} | 0 \rangle$ e $\langle \mathbf{f}_{\parallel} | 1 \rangle$ são as dadas para o oscilador harmônico, isto explica o crescimento de $T_{\phi s}$ como função de Φ_c . Para pontos fora da linha de simetria, $\epsilon \neq 0$, o termo linear em $f_{\parallel}$ na integral vai se tornando exponencialmente nulo ao aumentarmos Φ_c , uma vez que as funções de onda $\langle \mathbf{f}_{\parallel} | 0 \rangle$ e $\langle \mathbf{f}_{\parallel} | 1 \rangle$ vão se tornando aquelas do oscilador harmônico, fazendo com que os picos ocorram para valores cada vez maiores de ϵ , justificando o movimento dos picos para pontos bem distantes de $\Phi = \Phi_0$.

2.3.1.5 $T_{\phi l}$

Finalmente, a Fig. 2.20 mostra $T_{\phi l}$. Assim como em T_{ll} , o termo longitudinal é dominante neste caso, e devido às correções transversais, $T_{\phi l}$ não é simétrico. No regime semiclássico temos

$$T_{\phi l}^{-1} \propto |\langle 0 | \mathbf{v} \cdot \mathbf{f} | 0 \rangle - \langle 1 | \mathbf{v} \cdot \mathbf{f} | 1 \rangle|^2 \approx \frac{\epsilon^2}{\omega_{01}^2} [\mathbf{v}_{\parallel} (f_{\parallel}^L - f_{\parallel}^R)]^2, \quad (2.108)$$

$$T_{\phi l} \propto \frac{\epsilon^2 + \Delta^2}{\epsilon^2}. \quad (2.109)$$

Vemos que $T_{\phi l}$ cresce com Δ , e que a divergência torna-se mais intensa também com o aumento de Φ_c .

Para o limite harmônico,

$$\langle \alpha | \mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{f} | \alpha \rangle \approx \int d\mathbf{f}_{\parallel} (\mathbf{r}_2^{\parallel} f_{\parallel} + a_2 f_{\parallel}^2 + b_2 \epsilon f_{\parallel}) \langle \alpha | \mathbf{f}_{\parallel} \rangle \langle \mathbf{f}_{\parallel} | \alpha \rangle, \quad (2.110)$$

onde $\alpha = 0, 1$. Para $\epsilon = 0$, encontramos novamente que $\langle 1 | f_{\parallel}^2 | 1 \rangle - \langle 0 | f_{\parallel}^2 | 0 \rangle = \hbar/m\omega_{01}$. Para pontos fora da linha de simetria os termos lineares em $f_{\parallel}$ tornam-se muito pequenos quando Φ_c aumenta. Por isso o deslocamento do pico para pontos distantes de $\epsilon = 0$.

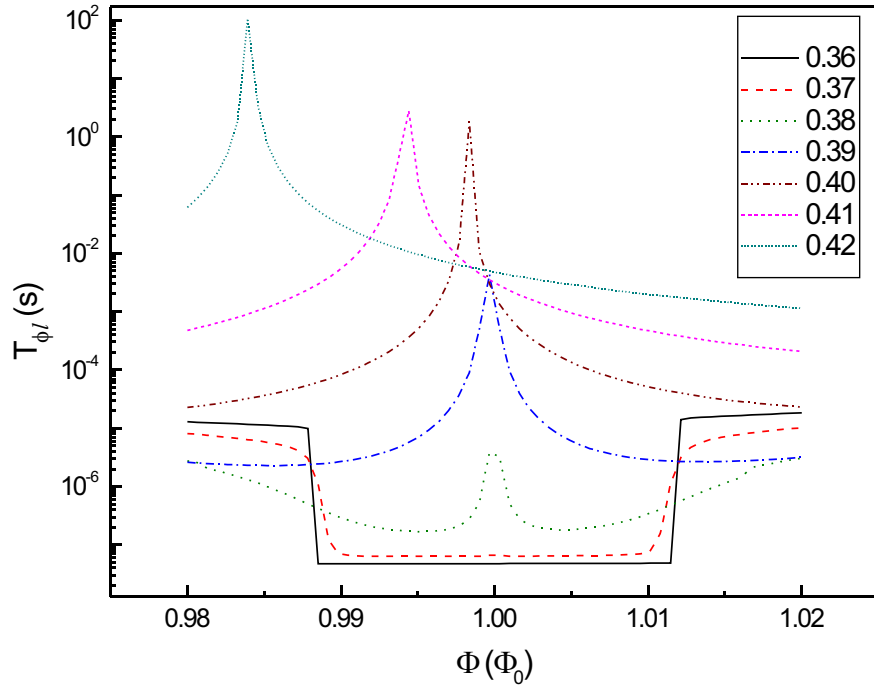


FIGURA 2.20 - Tempo de descoerência T_{ϕ_l} associado à fonte de dissipação Z_2 , para o caso contendo capacitâncias “parasitas”. Os vários gráficos de T_{ϕ_l} são apresentados como função dos fluxos Φ_c e Φ . A quebra de simetria das curvas ocorre devido às contribuições transversais para os elementos de matriz (2.81), e está associada à quebra de simetria do sistema provocada pelo acoplamento entre o qubit e a fonte Z_2 .

2.3.1.6 Capacitâncias “parasitas” vs. caso “limpo”

Até agora não tecemos comentário algum a respeito da presença das capacitâncias “parasitas”. As Figs. 2.21 e 2.22 apresentam resultados de T_{1s} e T_{ϕ_l} para o qubit da Fig. 2.5 sem as capacitâncias C_4 e C_5 , isto é, $C_4 = C_5 = 0$. Podemos observar que os mesmos comportamentos qualitativos vistos nas Figs. 2.17 e 2.20 são mantidos no caso “limpo”. Porém, quantitativamente os resultados variam apreciavelmente. Na região de poço duplo, T_1 é 10 vezes maior para o caso contendo as capacitâncias parasitas, já na região harmônica os valores são aproximadamente os mesmos.

Podemos entender esse comportamento através da análise das Figs. 2.23 e 2.24. Observa-se que o efeito das capacitâncias “parasitas” no potencial é aumentar a distância de separação entre os mínimos, sendo que a barreira de potencial permanece a mesma (a diferença calculada foi menor do que $10^{-6}\%$). Por conta destes fatos, espera-se que a taxa de tunelamento entre os poços seja maior no caso “limpo”, resultando em um tempo de relaxação menor. A Fig. 2.24 nos mostra que este comportamento persiste por todo regime de poço duplo. Na região harmônica os potenciais permanecem praticamente inalterados, o que faz com que as taxas sejam aproximadamente iguais.

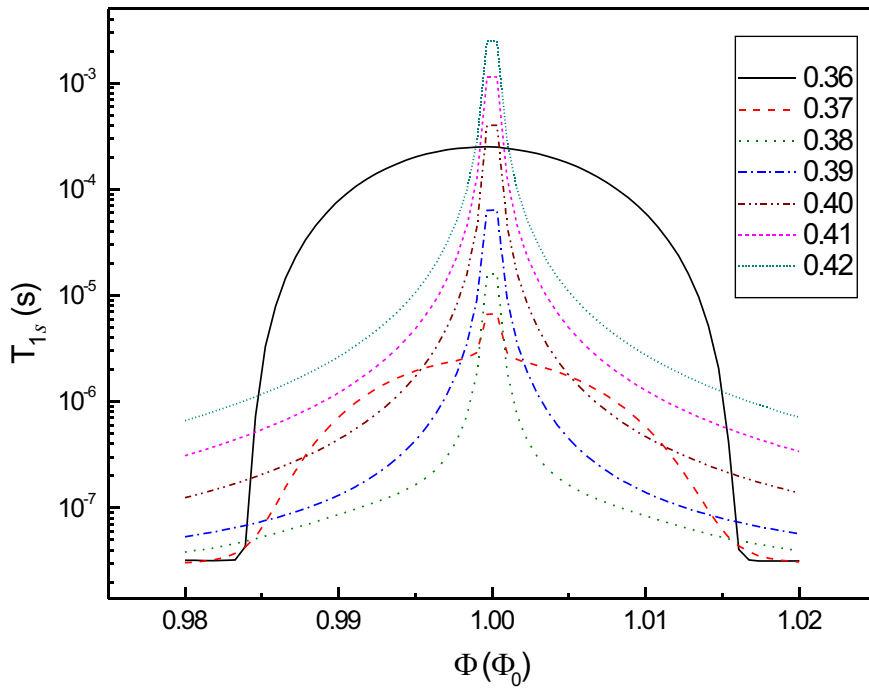


FIGURA 2.21 - Tempo de relaxação T_{1s} associado à fonte de dissipação Z_1 , para o caso sem capacitâncias “parasitas”. Observa-se o mesmo comportamento do apresentado na Fig. 2.17

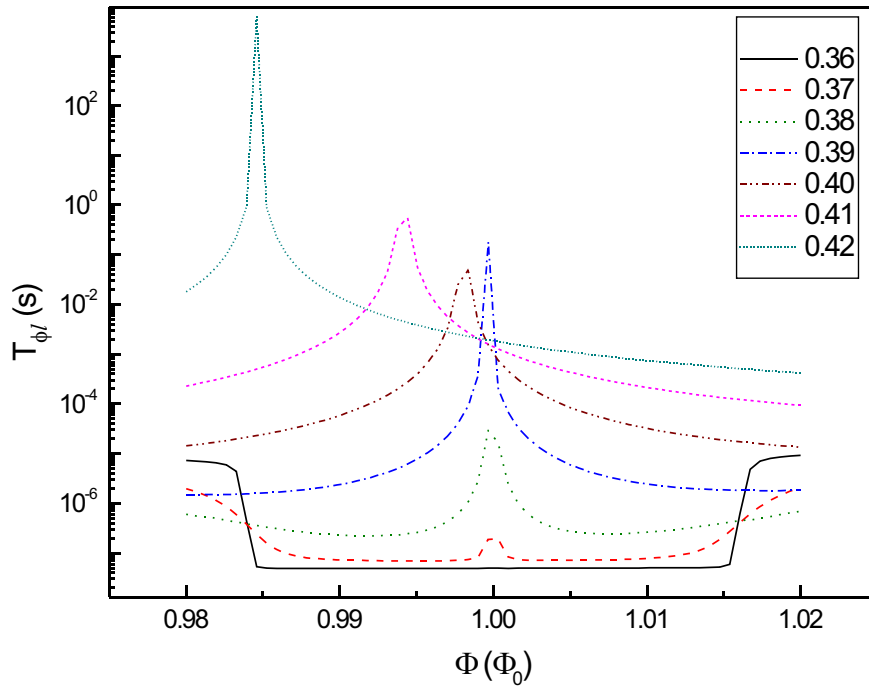


FIGURA 2.22 - Tempo de descoerência $T_{\phi l}$ associado à fonte de dissipação Z_2 , para o caso sem capacitâncias “parasitas”. Observa-se o mesmo comportamento do apresentado na Fig. 2.20

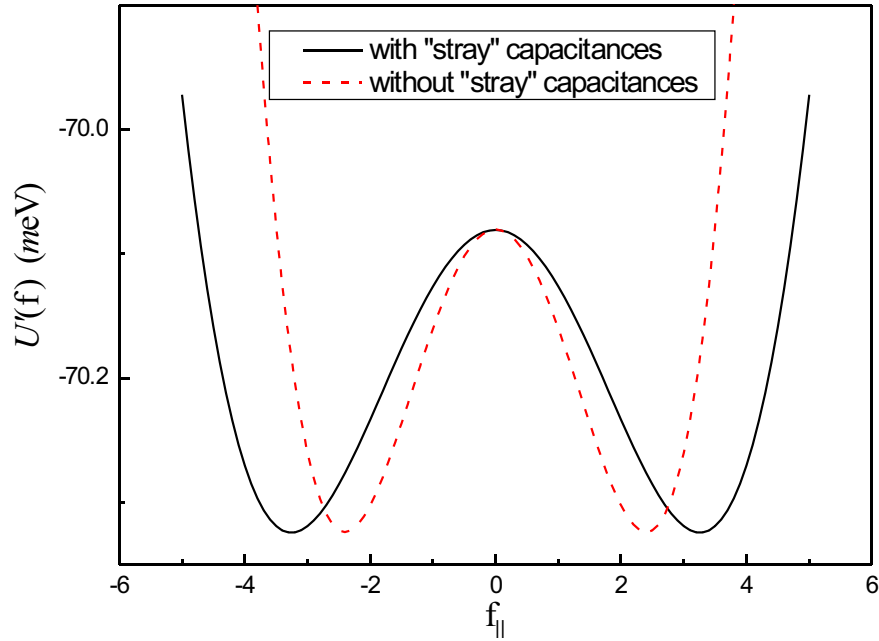


FIGURA 2.23 - Potencial $U'(\mathbf{f})$, eq. (2.74), ao longo da coordenada “lenta” $f_{\parallel}$ para os casos contendo (linha sólida) e não contendo (linha tracejada) capacitâncias “parasitas”. Observa-se que a altura da barreira de potencial que separa os mínimos é praticamente a mesma para ambos os casos (a diferença calculada é da ordem de $10^{-6}\%$), e que a distância entre eles muda consideravelmente. Por conta destes fatos, espera-se que a taxa de tunelamento seja maior para o caso que não contém capacitâncias parasitas, resultando em um menor tempo de relaxação T_1 . Esta conclusão pode ser confirmada comparando-se Figs. 2.17 e 2.21. Valores de fluxos usados nos gráficos: $\Phi_c = 0.36\Phi_0$ e $\Phi = \Phi_0$.

A nossa conjectura para este aumento de T_1 devido às capacitâncias “parasitas” é que, como esses elementos não são dissipativos e as suas posições no circuito mantêm a simetria do qubit, a introdução destes novos elementos tende a reforçar a simetria do qubit e deste modo a blindar o dispositivo contra possíveis flutuações introduzidas pelo acoplamento com os circuitos dissipativos externos.

2.3.1.7 Taxas totais

A Fig. 2.25 apresenta T_1 , T_ϕ e T_2 totais calculados desconsiderando-se os termos não-aditivos, isto é, $1/T_X = \sum_j 1/T_X^{(j)}$. Como esperado, as curvas apresentam dois comportamentos distintos, um para valores de $\Phi_c \lesssim 0.39\Phi_0$ (regime de poço duplo) e outro para $\Phi_c \gtrsim 0.39$ (regime harmônico), o que gera um mínimo em T_1 e um máximo em T_ϕ e T_2 . T_{1l} é dominante em todo o intervalo no cálculo de T_1 . Já T_ϕ é dominado por $T_{\phi l}$ para Φ_c pequeno, sendo que $T_{\phi s}$ passa a dominar para valores de $\Phi_c > 0.38\Phi_0$. Deste

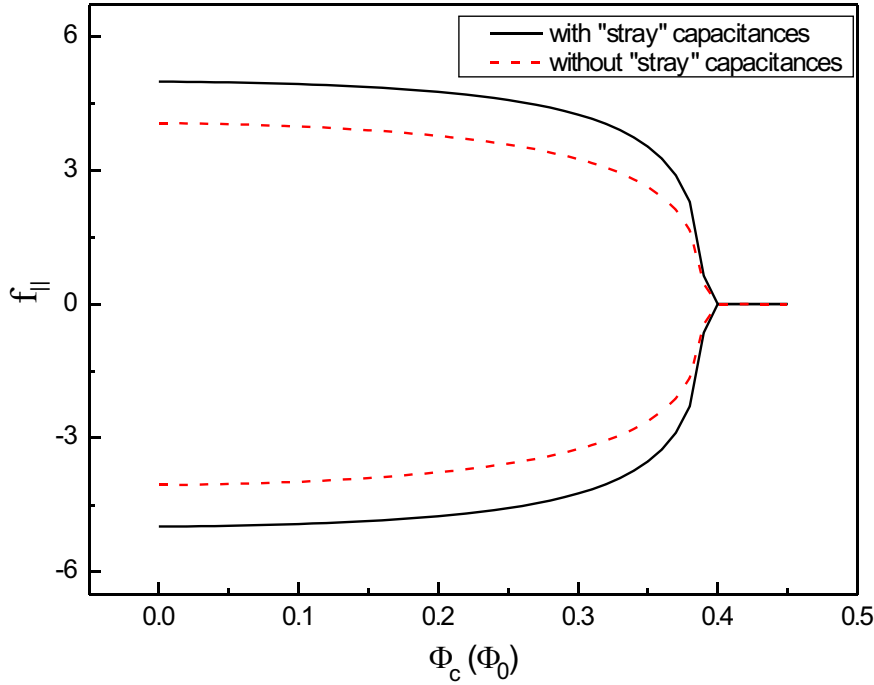


FIGURA 2.24 - Gráficos das posições dos mínimos ($L_i - R_i$) na coordenada “lenta” $f_{||}$ como função de Φ_c ao longo da linha de simetria. A curva sólida representa o caso contendo capacitâncias parasitas e a curva tracejada o caso que não contém.

modo pode-se atestar que ambos os circuitos dissipativos desempenham papel importante na dissipação do sistema.

Para a operação experimental do sistema, podemos observar que o tempo de relaxação é muito longo para valores baixos de Φ_c , o que indica a região preferencial para a iniciação do qubit (T_ϕ e consequentemente T_2 são pequenos nesse regime, porém estes não desempenham papel importante para esta operação). Os valores altos de T_1 nada mais são do que uma manifestação da grande barreira de potencial encontrada nesse regime de fluxo. À medida que aumentamos Φ_c a barreira vai diminuindo, até que se atinge as condições desejadas para a operação do qubit, a saber, uma estrutura de poço duplo com uma baixa barreira de potencial. Este é o caso do intervalo $0.37\Phi_0 \lesssim \Phi_c \lesssim 0.38\Phi_0$. Para este intervalo, T_1 tem um mínimo em torno de 200ns, e T_2 um máximo da ordem de 100ns. O que revela uma situação não muito confortável para a permanência do qubit neste regime por tempos muito longos. Porém, como é esperado [9] um tempo de operação total menor do que 10ns nesta região, tem-se que estes tempos são aceitáveis para a implementação deste dispositivo como um qubit.

O gráfico interno da Fig. 2.25 apresenta o que ocorreria no caso de um ajuste imperfeito de Φ , tirando o sistema da linha de simetria por uma variação de $1m\Phi_0$. O que se observa é que, mesmo para um deslocamento tão pequeno, as grandezas em questão já apresentam

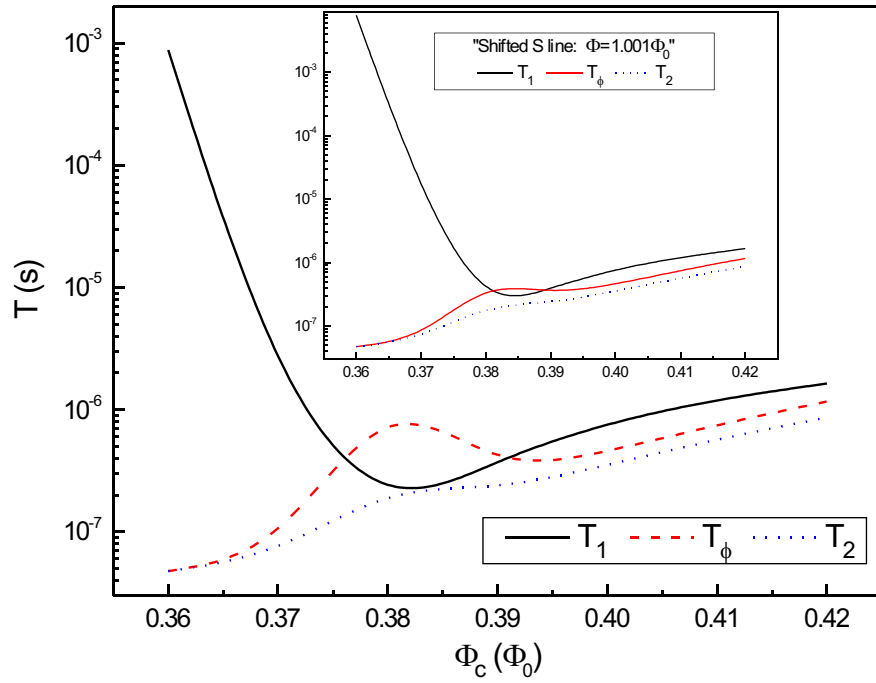


FIGURA 2.25 - Tempos T_1 , T_ϕ e T_2 , ao longo da linha de simetria, $\Phi = \Phi_0$. Verificamos uma janela desejável de operação do qubit no intervalo de fluxo $\Phi_c = 0.37 - 0.38\Phi_0$. Gráfico interno apresenta a situação para um deslocamento de $1m\Phi_0$ da linha de simetria.

variações perceptíveis. O que sinaliza que desvios muito grandes precisam ser evitados no experimento.

2.4 Conclusão

A formulação geral proposta neste capítulo para a descrição quântica de qubits supercondutores, via o modelo Caldeira-Leggett para várias fontes, juntamente com o desenvolvimento da aproximação de Born-Oppenheimer nos permitiu fazer um extenso estudo dos tempos de relaxação e descoerência de um qubit de fluxo, Fig. 2.5, em função dos campos externos aplicados. A análise dos resultados obtidos revelou que a simetria do dispositivo tem papel fundamental sobre as taxas de dissipação. Verificamos que os dois circuitos dissipativos acoplados ao qubit desempenham papel importante na dinâmica do mesmo, e que, apesar do regime de acoplamento fraco, os tempos de coerência ainda não são os ideais para o regime de operação do qubit.

3 PONTOS QUÂNTICOS

O problema de interesse é o estudo dos efeitos de fônons acústicos na dinâmica do grau de liberdade de spin do elétron aprisionado em um ponto quântico. Como o acoplamento entre o spin eletrônico e os fônons da rede é dado indiretamente, via interação spin-órbita, devemos determinar o banho efetivo visto pelo spin. Conhecendo a função espectral efetiva, podemos investigar a dinâmica dissipativa através das soluções das equações de Bloch-Redfield.

3.1 Introdução

Um ponto quântico é essencialmente uma região onde há a possibilidade de se confinar elétrons em todas as três dimensões espaciais. As dimensões dessa região, em geral da ordem [35] de 10 – 100nm, levam à quantização do espectro do movimento orbital, gerando uma estrutura muito similar a de átomos (muitas vezes os pontos quânticos são chamados de átomos artificiais ou superátomos). O confinamento pode ser obtido [35] através da utilização de portas elétricas e/ou gravando os pontos quânticos, através de técnicas de litografia de feixe de elétrons/íons, em uma heteroestrutura semicondutora contendo um gás de elétrons bidimensional. Tais pontos quânticos são chamados de “laterais” e “verticais”. Há outro método de fabricação conhecido como crescimento auto-organizado, que usa compostos com constante de rede apreciavelmente diferentes (cerca de 7% entre GaAs e InAs), para gerar a transição espontânea de uma estrutura de rede ordenada, para um arranjo aleatório de pequenas ilhas, transição esta conhecida como Stranski-Krastanow [35]. Os pontos quânticos auto-organizados apresentam formas mais regulares e uma distribuição de tamanhos bem homogênea quando comparados com os pontos quânticos laterais e verticais. Apesar dos grandes progressos das técnicas de fabricação e controle dos pontos quânticos, apenas recentemente conseguiu-se medir o spin de um elétron aprisionado [12, 13]. A possibilidade da utilização de tais dispositivos como qubits já é bem conhecida e explorada [36, 37]. Medidas experimentais da relaxação de spin entre estados separados por um campo Zeeman, têm revelado que a relaxação do spin eletrônico aprisionado em pontos quânticos ocorre mais lentamente do que em uma

estrutura volumétrica (*bulk*). Tendo sido observado tempos de relaxação de 0.85ms em pontos quânticos bidimensionais de GaAs [12], e de até 20ms em pontos quânticos auto-organizados de GaInAs [13]. Os principais processos envolvidos na relaxação de spin em pontos quânticos são esperados serem, para campos menores do que 0.5T, via interação hiperfina com os núcleos da rede [38] e, para campos da ordem ou maiores do que 1T, via interação spin-órbita [39, 40]. Estaremos interessados em analisar a relaxação para o segundo tipo de interação. Este é um processo de relaxação que ocorre de modo indireto, através de transições de fônons da rede que, acoplados ao movimento orbital, geram uma dinâmica dissipativa para o grau de liberdade de spin.

3.2 Banho estruturado para spins de interação spin-órbita

Estaremos interessados na dinâmica dissipativa de pontos quânticos bidimensionais isotrópicos, com potencial de confinamento lateral parabólico e interação Dresselhaus para o acoplamento spin-órbita. Além disso, para a interação elétron-fônon consideraremos apenas interações com fônons acústicos via potencial de deformação e efeito piezoelétrico. Trabalhos teóricos [39, 41] vêm abordando este sistema através de uma análise perturbativa do acoplamento spin-órbita. Dentre os principais achados está a previsão que a relaxação do grau de liberdade de spin do elétron aprisionado no ponto quântico é menos eficiente do que em uma estrutura volumétrica. Aqui seguiremos o desenvolvimento não perturbativo exposto por Westfahl Jr. e colaboradores [16] para o cálculo da função espectral do banho efetivo visto pelo spin eletrônico. Eles demonstram que, ao contrário da análise perturbativa, existe uma pronunciada ressonância no banho que pode ser facilmente ajustada à frequência Zeeman dos spins, delimitando dois regimes de dissipação diferentes: um super-ôhmico para baixas frequências; e um ôhmico ou sub-ôhmico para o regime de altas frequências. O ponto de partida para tal dedução é o hamiltoniano de spin

$$\mathcal{H}_{SO} = -\frac{\hbar\Delta}{2}\hat{\sigma}_x + \hbar\omega_0 \left(a_y^\dagger a_y + \frac{1}{2} \right) - \beta\hat{\sigma}_y P_y + \hbar\omega_0 \left(a_z^\dagger a_z + \frac{1}{2} \right) + \beta\hat{\sigma}_z P_z, \quad (3.1)$$

onde definimos $y - z$ como o plano que define o ponto quântico, $\hbar\Delta = g\mu_B B_x$ representa o campo Zeeman, β é a constante de acoplamento spin-órbita (para heteroestruturas de GaAs, $\beta \approx 3 \times 10^3 \text{m/s}$), $(a_y, a_y^\dagger)$ e $(a_z, a_z^\dagger)$ são os operadores bosônicos usuais do oscilador harmônico que representam o movimento orbital nas direções y e z , e ω_0 é a frequência natural do potencial lateral confinante.

Podemos escrever a interação elétron-fônon como [42]

$$\mathcal{H}_{el-fon} = \sum_{\mathbf{q}, \lambda} \left\{ \hbar\omega_{\mathbf{q}, \lambda} b_{\mathbf{q}, \lambda}^\dagger b_{\mathbf{q}, \lambda} + \frac{C_{\mathbf{q}, \lambda}}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \left(b_{\mathbf{q}, \lambda}^\dagger + b_{\mathbf{q}, \lambda} \right) \right\} \quad (3.2)$$

onde $C_{\mathbf{q},\lambda}$ é a constante de acoplamento elétron-fônon para fônons com polarização λ e frequência $\omega_{\mathbf{q},\lambda}$, e $\mathbf{r} = (x, y, z)$ é o operador posição do elétron. O acoplamento apresentado em (3.2) supõe que, uma vez sendo a massa do elétron muito menor do que as dos átomos, o potencial do elétron pode ser considerado independente das velocidades dos átomos da rede, dependendo apenas das suas posições (esta aproximação é conhecida como adiabática [42]). Neste caso, o campo visto pelo elétron é alterado pelos deslocamentos dos átomos das suas posições de equilíbrio na rede. Essas perturbações no campo podem ser divididas em contribuições devidas ao deslocamento dos átomos próximos ao elétron (chamadas de forças de curto alcance), e contribuições originadas pela polarização da rede devido à mudança de posição dos átomos (chamadas de forças de longo alcance). Para interação com fônons acústicos, o primeiro tipo de contribuição, na teoria do potencial de deformação, tem constante de acoplamento proporcional ao vetor de onda $\mathbf{q}$, e para o segundo tipo de contribuição, em cristais piezoelétricos, tem-se $C_{\mathbf{q}\lambda} \propto \sum_{ij} \hat{\mathbf{q}}_i \hat{\mathbf{q}}_j$ [42].

Considerando apenas a interação do elétron com os modos de fônons acústicos em estruturas de zinblende, Westfahl e colaboradores [16] mostraram que, dentro da aproximação de resposta linear para o sistema de fônons, o hamiltoniano elétron-fônon (3.2) é mapeado no modelo de banho de osciladores com função espectral dada por

$$J_S(\omega) = m^* \omega_D^2 \delta_S \left(\frac{\omega}{\omega_D} \right)^S \theta(\omega_D - \omega) \quad (3.3)$$

onde $s = 3$ para a interação piezoelétrica, com constante de acoplamento adimensional $\delta_3 = \frac{(e_m)_{14}^2 \omega_D}{35\pi m^* \rho} \left(\frac{4}{3v_l^5} + \frac{1}{v_t^5} \right)$, e $s = 5$ para o potencial de deformação, com $\delta_5 = \frac{a_{c\Gamma}^2 \omega_D^3}{2\pi \rho m^* v_l^7}$, onde ω_D é a frequência de Debye, v_l e v_t são respectivamente as velocidades do som longitudinais e transversa, ρ é a densidade do material, $(e_m)_{14}$ é o tensor eletromecânico para estruturas de zinblende, m^* é a massa efetiva do elétron, e $a_{c\Gamma}$ é o potencial de deformação no ponto Γ . θ é a função degrau. As constantes de acoplamento δ_3 e δ_5 são, em geral, da ordem de 10^2 e 10^6 respectivamente.

Uma vez conhecida a função espectral que mapeia o hamiltoniano elétron-fônon no modelo de banho de osciladores, podemos agora tentar determinar a função espectral do banho efetivo acoplado ao grau de liberdade de spin. Para tal, vamos assumir que o grau de liberdade de spin possa ser descrito por uma partícula de massa M_A com coordenadas canônicas $\{A, p_A\}$ e potencial $U(A)$. Um exemplo que corresponderia a esta hipótese é o caso de uma partícula sujeita a um potencial de poço duplo, cuja dinâmica a baixas temperaturas fica restrita aos dois primeiros auto-estados de energia. Neste exemplo, os estados de spin $\sigma_z = \pm 1$ corresponderiam à partícula M_A ser encontrada no poço do lado esquerdo ou direito [43]. Assim, sob esta hipótese, podemos escrever o hamiltoniano do

sistema spin-órbita-fônons de maneira geral como

$$H = \frac{p_A^2}{2M_A} + U(A) + \beta Ap + \frac{p^2}{2m^*} + \frac{1}{2}m^*\omega_0^2 q^2 + \sum_{\alpha} \left\{ \frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \frac{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2}{2} \left(q_{\alpha} + \frac{C_{\alpha}}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} q \right)^2 \right\}, \quad (3.4)$$

onde as variáveis $\{q, p\}$ correspondem às do movimento orbital e $\{q_{\alpha}, p_{\alpha}\}$ às dos fônons. Sendo a função espectral dos fônons, $J(\omega) \equiv \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \delta(\omega - \omega_{\alpha})$, dada no nosso problema por (3.3). As equações de movimento do sistema derivadas de (3.4) são dadas por

$$M_A \ddot{A} = -\partial_A U(A) - \beta m^* (\partial_t q - \beta A), \quad (3.5)$$

$$m^* \ddot{q} = m^* \beta \partial_t A - (m^* \omega_0^2 + \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2}) q - \sum_{\alpha} C_{\alpha} q_{\alpha}, \quad (3.6)$$

$$m_{\alpha} \ddot{q}_{\alpha} = -m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 q_{\alpha} - C_{\alpha} q. \quad (3.7)$$

Definindo a transformada de Fourier de $q(t)$ como

$$\tilde{q}(z) = \int_0^{\infty} q(t) e^{-izt} dt, \quad (3.8)$$

com $\text{Im} z < 0$, obtemos o seguinte conjunto de equações:

$$-\partial_A \tilde{U}(A) = -z^2 M_A \tilde{A} + iz m^* \beta \tilde{q} - m^* \beta^2 \tilde{A}, \quad (3.9)$$

$$-z^2 m^* \tilde{q} = iz m^* \beta \tilde{A} - (m^* \omega_0^2 + \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2}) \tilde{q} - \sum_{\alpha} C_{\alpha} \tilde{q}_{\alpha}, \quad (3.10)$$

$$-z^2 m_{\alpha} \tilde{q}_{\alpha} = -m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 \tilde{q}_{\alpha} - C_{\alpha} \tilde{q}. \quad (3.11)$$

Da última equação tiramos que

$$\tilde{q}_{\alpha} = - \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}}{m_{\alpha}(\omega_{\alpha}^2 - z^2)} \tilde{q}. \quad (3.12)$$

Substituindo (3.12) em (3.10), obtemos

$$\tilde{q} = \frac{iz m^* \beta}{m^* \omega_0^2 + L(z)} \tilde{A}, \quad (3.13)$$

onde

$$L(z) \equiv -z^2 \left\{ m^* + \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2(\omega_{\alpha}^2 - z^2)} \right\} \quad (3.14)$$

$$= -z^2 \left\{ m^* + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega(\omega^2 - z^2)} \right\}. \quad (3.15)$$

No último passo usamos a definição da função espectral $J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_a \frac{C_a^2}{m_a \omega_a^2} \delta(\omega - \omega_a)$. Substituindo (3.13) em (3.9), encontramos

$$\left\{ -z^2 M_A - \frac{z^2 m^{*2} \beta^2}{m^* \omega_0^2 + L(z)} - m^* \beta^2 \right\} \tilde{A} = -\partial_A \tilde{U}(A), \quad (3.16)$$

$$\implies K(z) \tilde{A}(z) = -\partial_A \tilde{U}(A). \quad (3.17)$$

Assim podemos definir a função espectral efetiva como

$$\begin{aligned} J_{ef}(\omega) &\equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \text{Im}(K(\omega - i\epsilon)), \quad \text{sendo nesse caso} \\ K(z) &= -z^2 M_A - \frac{z^2 m^{*2} \beta^2}{m^* \omega_0^2 + L(z)} - m^* \beta^2. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Tomando o limite de $L(z \rightarrow \omega - i0^+)$ de modo adequado, obtem-se a seguinte expressão para a densidade espectral efetiva [16]

$$J_{ef} = m^* \beta^2 \delta_s \frac{\left(\frac{\omega}{\omega_D}\right)^{s+2}}{\left(\left(\frac{\omega_0}{\omega_D}\right)^2 - \left(\frac{\omega}{\omega_D}\right)^2 (1 + f(\omega))\right)^2 + \delta_s^2 \left(\frac{\omega}{\omega_D}\right)^2}, \quad (3.19)$$

com

$$f(\omega) = -\frac{\delta_s}{\pi} \left(\frac{\omega}{\omega_D}\right)^{s-2} \left(B\left(\frac{\omega_D}{\omega}, s, 0\right) + (-1)^s B\left(-\frac{\omega_D}{\omega}, s, 0\right)\right),$$

onde B é a função beta incompleta generalizada. Como vimos anteriormente, para o nosso caso temos $s = 3$ para a interação piezoelétrica e $s = 5$ para o potencial de deformação. A Fig. 3.1 mostra a função espectral efetiva para o caso $s=3$.

A região próxima ao máximo de $J_{ef}(\omega)$, para o limite de baixas frequências, tem a forma aproximada de uma lorentziana dada por

$$J_{ef}(\omega \approx \Omega_s) \approx \omega^{s-1} \frac{(s-2)\omega_D \Omega_s}{2\omega_0^2} \left(\frac{\ell}{(\omega - \Omega_s)^2 + \ell^2} \right), \quad (3.20)$$

onde a posição e a largura do pico são determinadas por

$$\Omega_s \approx \omega_0 \sqrt{\frac{s-2}{(s-2) + \frac{2\delta_s}{\pi}}}, \quad \ell \approx \frac{\omega_D \pi (s-2)}{4} \left(\frac{\omega_0}{\omega_D} \sqrt{\frac{(s-2)\pi}{2\delta_s}} \right)^{s-1}. \quad (3.21)$$

3.3 Equações de Bloch-Redfield

Uma vez conhecida a função espectral efetiva que determina a dissipação sofrida pelo grau de liberdade de spin do elétron, podemos descrever a sua dinâmica dissipativa através

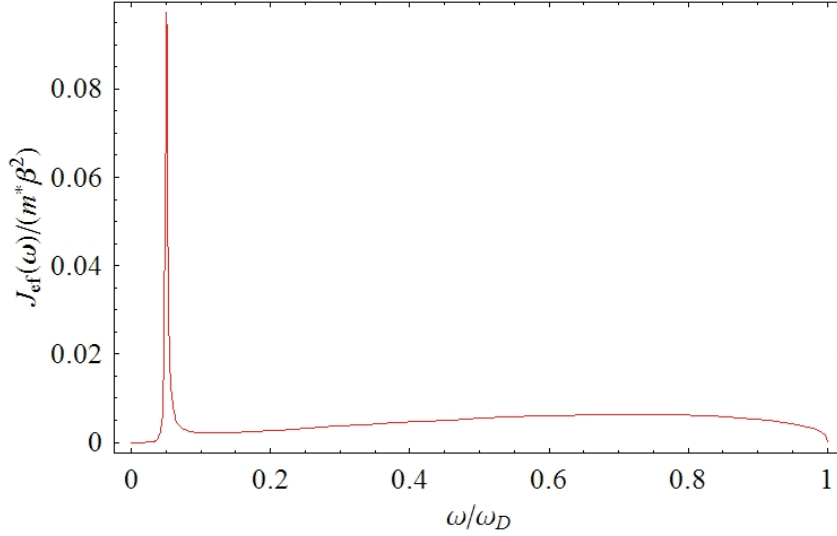


FIGURA 3.1 - Função espectral efetiva para spins de interação spin-órbita. A região próxima ao pico tem a forma aproximada de uma lorentziana de largura ℓ e posição do pico Ω_s . Nesta figura consideramos o caso $s = 3$

do seguinte hamiltoniano efetivo

$$\mathcal{H}_{ef}(t) = -\frac{\hbar\Delta}{2}\hat{\sigma}_x - \hbar\epsilon(t)\hat{\sigma}_z + \sum_{\alpha} \hbar\omega_{\alpha} \left(b_{\alpha}^{\dagger}b_{\alpha} + \frac{1}{2} \right) + \hat{\sigma}_z \sum_{\alpha} c_{\alpha}(b_{\alpha}^{\dagger} + b_{\alpha}), \quad (3.22)$$

onde o banho visto pelo grau de liberdade de spin agora tem uma função espectral $J(\omega)$ dada por (3.19). O termo Δ representa o acoplamento entre os estados $|\sigma_z = \pm 1\rangle$, e o novo termo $\epsilon(t)$ representa um possível campo de controle aplicado ao ponto quântico. Este é o hamiltoniano de spin-bóson com um termo forçante [43].

No limite de acoplamento sistema-banho e/ou dissipação fraca, as equações de movimento para os valores esperados das componentes de spin*, $\sigma_i(t) \equiv \text{Tr}\{\hat{\rho}(t)\hat{\sigma}_i\}$, podem ser escritas na forma das equações de Bloch-Redfield generalizadas [44]

$$\dot{\sigma}_x(t) = 2\epsilon(t)\sigma_y - \Gamma_{xx}(t)\sigma_x - \Gamma_{zz}(t)\sigma_z - A_x(t), \quad (3.23)$$

$$\dot{\sigma}_y(t) = -2\epsilon(t)\sigma_x + \Delta\sigma_z - \Gamma_{yy}(t)\sigma_y - \Gamma_{yz}(t)\sigma_z - A_y(t), \quad (3.24)$$

$$\dot{\sigma}_z(t) = -\Delta\sigma_y. \quad (3.25)$$

Os coeficientes destas equações são dados por: $A_x(t) = \text{Im}F(t)$, $A_y(t) = \text{Re}F(t)$, com $F(t) = 2 \int_0^t dt' \text{Im}M(t-t')U_{RR}(t,t')U_{RL}(t,t')$; $\Gamma_{ij}(t) = \int_0^t dt' \text{Re}M(t-t')b_{ij}(t,t')$. Sendo $U_{ij}(t,t') = \langle i|U(t,t')|j\rangle$ os elementos de matriz do operador evolução temporal $U(t,t')$ do

*Vale ressaltar que os valores esperados σ_i determinam completamente a dinâmica da matriz densidade reduzida do sistema, uma vez que podemos escrevê-la como $\hat{\rho}(t) = \hat{I}/2 + \sum_{i=x,y,z} \sigma_i(t)\hat{\sigma}_i/2$, onde I é a matriz identidade

sistema na ausência do banho (aqui seguimos a notação assumida na literatura do problema spin-bóson, onde $\sigma_z|R\rangle = +|R\rangle$ e $\sigma_z|L\rangle = -|L\rangle$), $b_{xx} = b_{yy} = |U_{RR}|^2 - |U_{RL}|^2$, $b_{xz} = 2\text{Re}U_{RR}U_{RL}$ e $b_{yz} = -2\text{Im}U_{RR}U_{RL}$, e finalmente, a função de correlação $M(t)$ é determinada por

$$M(t) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \frac{\cosh(\frac{\hbar\omega}{2k_B T} - i\omega t)}{\sinh(\frac{\hbar\omega}{2k_B T})}. \quad (3.26)$$

O regime de validade para o qual as eqs. (3.23-3.25) foram deduzidas é aquele em que se verifica que as correções das frequências da dinâmica do problema, devidos ao acoplamento com o banho, são pequenas. Como veremos mais adiante, o nosso problema de interesse encontra-se no regime de validade destas equações. Antes de partirmos para a solução do problema, façamos uma digressão ao caso sem a presença do campo forçante $\epsilon(t)$.

3.3.1 $\epsilon(t) = 0$

Com apenas o campo estático na direção perpendicular ao ponto quântico, espera-se que a ação do banho seja levar o sistema até o estado de equilíbrio termodinâmico, cujo valor esperado da projeção da variável de spin paralela ao campo é bem conhecido como dado por

$$\sigma_x(t \rightarrow \infty) = \frac{e^{\frac{\hbar\Delta}{2k_B T}} - e^{-\frac{\hbar\Delta}{2k_B T}}}{Z} = \tanh\left(\frac{\hbar\Delta}{2k_B T}\right), \quad (3.27)$$

note que este resultado deve ser independente da forma da função espectral $J(\omega)$ do banho.

A verificação de que as equações de Bloch-Redfield reproduzem o resultado esperado (3.27) para qualquer $J(\omega)$ é simples de ser realizada, sendo o “truque” deixar para fazer as integrações em frequência por último nos coeficientes das equações (3.23-3.25). O operador evolução temporal do sistema sem dissipação é facilmente calculável, $U(t, t_0) = e^{i\Delta\sigma_x(t-t_0)/2}$, resultando nos elementos de matriz: $U_{RR}(t, t_0) = U_{LL}(t, t_0) = \cos(\frac{\Delta(t-t_0)}{2})$ e $U_{RL}(t, t_0) = i\sin(\frac{\Delta(t-t_0)}{2})$. Deste modo, tem-se que $A_y(t) = 0$, $\Gamma_{xz}(t) = 0$. A equação de movimento para o valor esperado da componente paralela ao campo externo passa então a ter a forma simples

$$\dot{\sigma}_x(t) = -\Gamma_{xx}(t)\sigma_x - A_x(t).$$

Fazendo primeiramente a integração temporal dos coeficientes, obtemos

$$A_x(t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \frac{\sin[(\omega + \Delta)t]}{\omega + \Delta} - \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \frac{\sin[(\omega - \Delta)t]}{\omega - \Delta},$$

$$\begin{aligned}\Gamma_{xx}(t) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \frac{\sin[(\omega + \Delta)t]}{\omega + \Delta} \\ &\quad + \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \frac{\sin[(\omega - \Delta)t]}{\omega - \Delta}.\end{aligned}$$

Para $t \gg \Delta^{-1}, \omega_D^{-1}$, devido às fortes oscilações dos integrandos, os primeiros termos das expressões acima decrescem com $1/t$ (vide apêndice B), tornando-se desprezíveis rapidamente, enquanto nos outros termos, $\sin[(\omega - \Delta)t]/(\omega - \Delta) \rightarrow \pi\delta(\omega - \Delta)$, fazendo com que a integral convirja para o valor constante da função que está sendo integrada no ponto Δ , assim

$$\begin{aligned}\int_0^\infty d\omega J(\omega) \frac{\sin[(\omega + \Delta)t]}{\omega + \Delta} &\rightarrow 0, \\ \int_0^\infty d\omega J(\omega) \frac{\sin[(\omega - \Delta)t]}{\omega - \Delta} &\rightarrow \pi J(\Delta), \\ \Rightarrow A_x(t \gg 1) &= -\frac{1}{2}J(\Delta), \quad \Gamma_{xx}(t \gg 1) = \frac{1}{2}J(\Delta) \coth\left(\frac{\hbar\Delta}{2k_B T}\right).\end{aligned}$$

Deste modo, no regime de tempos muito longos, a equação de movimento para σ_x é dada por

$$\begin{aligned}\dot{\sigma}_x(t \gg 1) &= \frac{1}{2}J(\Delta) - \frac{1}{2}J(\Delta) \coth\left(\frac{\hbar\Delta}{2k_B T}\right) \sigma_x \\ \Rightarrow \sigma_x(t \gg 1) &= \tanh\left(\frac{\hbar\Delta}{2k_B T}\right) + ce^{-\frac{1}{2}J(\Delta) \coth\left(\frac{\hbar\Delta}{2k_B T}\right)t} \longrightarrow \tanh\left(\frac{\hbar\Delta}{2k_B T}\right).\end{aligned}\quad (3.28)$$

Da solução (3.28) podemos determinar o tempo de relaxação do sistema, sendo exatamente a famosa expressão [43]: $T_1^{-1} = \frac{1}{2}J(\Delta) \coth\left(\frac{\hbar\Delta}{2k_B T}\right)$.

Observando as outras componentes, temos o seguinte conjunto de equações

$$\begin{aligned}\dot{\sigma}_y(t) &= \Delta\sigma_z - \Gamma_{xx}(t)\sigma_y - \Gamma_{yz}(t)\sigma_z, \\ \dot{\sigma}_z(t) &= -\Delta\sigma_y,\end{aligned}$$

com o coeficiente $\Gamma_{yz}(t)$ sendo dado por

$$\begin{aligned}\Gamma_{yz}(t) &= -\frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \frac{\sin^2[\frac{t}{2}(\omega + \Delta)]}{\omega + \Delta} \\ &\quad + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \frac{\sin^2[\frac{t}{2}(\omega - \Delta)]}{\omega - \Delta}.\end{aligned}$$

Para tempos longos, $t \gg \Delta^{-1}$, ω_D^{-1} , o coeficiente $\Gamma_{yz}(t)$ converge para a constante no tempo (vide apêndice B)

$$\gamma \equiv \Gamma_{yz}(t \gg 1) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty d\omega \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) J(\omega) P\left[\frac{1}{\omega - \Omega} - \frac{1}{\omega + \Omega}\right].$$

Assim, encontramos

$$\begin{aligned} \ddot{\sigma}_z(t \gg 1) &= -\Delta(\Delta - \gamma)\sigma_z - \frac{1}{2}J(\Delta) \coth\left(\frac{\hbar\Delta}{2k_B T}\right) \dot{\sigma}_z, \\ \Rightarrow \sigma_z(t \gg 1) &\approx e^{-\frac{1}{4}J(\Delta) \coth\left(\frac{\hbar\Delta}{2k_B T}\right)t} \{Ae^{i(\Delta-\gamma)t} + Be^{-i(\Delta-\gamma)t}\}, \end{aligned}$$

donde podemos verificar que o tempo de descoerência e o tempo de relaxação se relacionam do seguinte modo: $T_2 = 2T_1$. Exatamente como esperado para esse problema. [43]

3.3.2 Caso: $\epsilon(t) = \epsilon_0 \cos(\Omega t)$

Voltando ao caso que estamos interessados, desejamos observar a evolução do sistema na presença de uma força externa de controle. Focaremos [46] no caso de um campo monocromático do tipo $\epsilon(t) = \epsilon_0 \cos(\Omega t)$. Nosso hamiltoniano de spin passa a ser escrito então como

$$\mathcal{H}_S(t) = -\frac{\hbar\Delta}{2}\hat{\sigma}_x - \hbar\epsilon_0 \cos(\Omega t)\hat{\sigma}_z. \quad (3.29)$$

O cálculo exato do operador evolução temporal $U(t, t_0)$ partindo de (3.29) é muito difícil de ser obtido, uma vez que o hamiltoniano não comuta para tempos diferentes. Podemos simplificar o cálculo se usarmos a aproximação da onda girante RWA (*rotating wave approximation*). Para tal, façamos a decomposição do campo linearmente polarizado em dois campos circularmente polarizados (um com rotação horária e o outro anti-horária)

$$\hat{\sigma}_z \cos(\Omega t) = \frac{1}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\mathbf{u}_H + \mathbf{u}_A) \quad (3.30)$$

onde $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{u}_H \equiv \hat{\sigma}_z \cos(\Omega t) - \hat{\sigma}_y \sin(\Omega t) = R_x(\Omega t)\hat{\sigma}_z R_x^\dagger(\Omega t)$, $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{u}_A \equiv \hat{\sigma}_z \cos(\Omega t) + \hat{\sigma}_y \sin(\Omega t) = R_x(-\Omega t)\hat{\sigma}_z R_x^\dagger(-\Omega t)$ e

$$R_x(\Omega t) = e^{-\frac{i}{2}\Omega t \sigma_x} = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\Omega t}{2}) & -i \sin(\frac{\Omega t}{2}) \\ -i \sin(\frac{\Omega t}{2}) & \cos(\frac{\Omega t}{2}) \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

Mudando para o referencial girante do spin eletrônico, a equação de Schrödinger passa a ser escrita como

$$i\frac{\partial|t\rangle}{\partial t} = \mathcal{H}_S(t)|t\rangle \Rightarrow i\frac{\partial|t\rangle_R}{\partial t} = -\epsilon_0 R_x(\Delta t) \{\cos(\Omega t) \hat{\sigma}_z\} R_x^\dagger(\Delta t) |t\rangle_R \quad (3.32)$$

$$\Rightarrow i\frac{\partial|t\rangle_R}{\partial t} = -\frac{\epsilon_0}{2} R_x(\Delta t) \{\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{u}_H + \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{u}_A\} R_x^\dagger(\Delta t) |t\rangle_R, \quad (3.33)$$

sendo $|t\rangle_R = R_x(\Delta t)|t\rangle$. Podemos observar então que as contribuições geradas pelo termo horário oscilam mais rapidamente que aquelas geradas pelo termo anti-horário. Assim, ao integrarmos as equações de movimento sob um intervalo de tempo mensurável, esperamos que as contribuições de $\mathbf{u}_H$ devam ser desprezíveis. Deste modo, para o cálculo do operador evolução temporal, passaremos a aproximar o hamiltoniano de spin (3.29) por

$$\mathcal{H}_S(t) \approx -\frac{\hbar\Delta}{2} \hat{\sigma}_x - \frac{\hbar\epsilon_0}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{u}_A. \quad (3.34)$$

O cálculo do propagador $U(t, t_0)$ passa a ser bastante simplificado nesta aproximação, podendo ser calculado exatamente como

$$U(t, t_0) = R_x^\dagger(\Omega t) e^{\frac{i}{2}\epsilon_1(t-t_0)\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n}} R_x(\Omega t_0), \quad (3.35)$$

sendo $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n} = \frac{\Delta-\Omega}{\epsilon_1} \hat{\sigma}_x + \frac{\epsilon_0}{\epsilon_1} \hat{\sigma}_z = \cos(\phi) \hat{\sigma}_z + \sin(\phi) \hat{\sigma}_x$, com as definições

$$\tan(\phi) \equiv \frac{\Delta - \Omega}{\epsilon_0}, \quad \epsilon_1 \equiv \sqrt{\epsilon_0^2 + (\Delta - \Omega)^2}, \quad (3.36)$$

onde ϕ representa a dessintonia entre a frequência de Larmor Δ e do campo externo Ω , e ϵ_1 é a frequência de Rabi do problema. Observe que se fizermos $\epsilon_0 = 0 \Rightarrow \phi = \pi/2$, recuperamos exatamente o resultado esperado para o operador evolução temporal sem o campo transversal $\epsilon(t)$.

Os elementos de matriz pertinentes para o cálculo das equações de Bloch-Redfield podem ser postos na forma

$$\begin{aligned} \text{Im} U_{RR}(t, t') U_{RL}(t, t') &= \frac{\cos^2(\phi)}{4} \left(\sin[(t-t')\Omega] + \sin[(t+t')\Omega] (1 - \cos[(t-t')\epsilon_1]) \right) \\ &+ \frac{(1 + \sin(\phi))^2}{8} \sin[(t-t')(\Omega + \epsilon_1)] + \frac{(1 - \sin(\phi))^2}{8} \sin[(t-t')(\Omega - \epsilon_1)], \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\begin{aligned} \text{Re} U_{RR}(t, t') U_{RL}(t, t') &= \frac{\cos(\phi)}{2} \sin(t'\Omega) \sin[(t-t')\epsilon_1] \\ &- \frac{\sin(2\phi)}{4} \cos(t'\Omega) (1 - \cos[(t-t')\epsilon_1]), \end{aligned} \quad (3.38)$$

$$\begin{aligned}
|U_{RR}(t, t')|^2 - |U_{RL}(t, t')|^2 &= \frac{\cos^2(\phi)}{2} \left(\cos[(t - t')\Omega] + \cos[(t + t')\Omega](1 - \cos[(t - t')\epsilon_1]) \right) \\
&+ \frac{(1 + \sin(\phi))^2}{4} \cos[(t - t')(\Omega + \epsilon_1)] - \frac{(1 - \sin(\phi))^2}{4} \cos[(t - t')(\Omega - \epsilon_1)]. \quad (3.39)
\end{aligned}$$

Convém notar que estes elementos de matriz são exatos dentro da aproximação da onda girante que estamos adotando.

No presente estágio já dispomos de todos os elementos para realizar o cálculo dos coeficientes das equações de Bloch-Redfield. Novamente, revelou-se muito mais conveniente fazer primeiro as integrações no tempo (integrais simples de funções seno e co-seno) para depois integrar em frequência. Devido à complexidade da função espectral, tivemos que implementar uma maneira de calcular aproximadamente as integrais em frequência, permitindo assim obter as soluções analíticas desejadas. A aproximação utilizada é assintoticamente exata quando $t \rightarrow \infty$, e consiste em se aproximar a contribuição de parte do contorno de integração no plano complexo pelos seus pontos finais. Todo o cálculo das integrais e o desenvolvimento da aproximação utilizada foram deixados no apêndice B. Para o prosseguimento da análise que se segue é suficiente saber os seguintes achados:

- A largura do pico da função espectral efetiva (3.19), ℓ , é o parâmetro que distingue as escalas de tempo do nosso problema: a forma lorentziana da função espectral (ou de maneira mais geral, o seu pólo no plano complexo) introduz um novo regime de relaxação no problema (o tempo de vida do pólo), dado por $1/\ell$.
- No regime de tempos curtos, $t < 1/\ell$, a dissipação é dominada pela região do pico da função espectral, Ω_s . Este regime de transiente ocorre devido ao fato de “ligarmos” abruptamente a interação sistema-banho em $t = 0$ e pelo forte peso do pico da função espectral.
- Já no regime de tempos longos, $t > 1/\ell$, a dissipação é completamente independente da região do pico, sendo determinada pelo regime de baixas frequências, em especial as regiões próximas as frequências externas Ω , Δ e ϵ_0 .

Prosseguindo com cálculo, é bastante útil escrever os coeficientes das equações de Bloch-Redfield na seguinte forma funcional (vide apêndice B)

$$\begin{aligned}
A_x(t) &= r_1(t) + m_1(t) \sin(2\Omega t) + n_1(t) \cos(2\Omega t), \\
A_y(t) &= m_2(t) \sin(\Omega t) + n_2(t) \cos(\Omega t), \\
\Gamma_{xx}(t) &= r_3(t) + m_3(t) \sin(2\Omega t) + n_3(t) \cos(2\Omega t), \\
\Gamma_{xz}(t) &= m_4(t) \sin(\Omega t) + n_4(t) \cos(\Omega t), \\
\Gamma_{yz}(t) &= r_5(t) + m_5(t) \sin(2\Omega t) + n_5(t) \cos(2\Omega t).
\end{aligned} \quad (3.40)$$

Como exposto no apêndice B, os coeficientes de (3.40) são compostos por dois termos distintos: um devido aos pólos de $J(x)$; e outro devido às contribuições dos contornos de integração. Os pólos de $J(x)$ que dão a principal contribuição ao primeiro termo são $z_0 = \Omega_s \pm i\ell$, sendo Ω_s a posição e ℓ a largura do máximo da função espectral (3.19). O tempo de vida destes pólos é de apenas $t \approx 1/\ell$. Como veremos mais adiante, esta é uma escala de tempo curta no nosso problema. Neste regime, um destes coeficientes merece destaque, trata-se de $r_1(t)$, que pode ser escrito explicitamente como

$$r_1(t) \approx \ell J(\Omega_s) e^{-\ell t} \sum_{i=0}^2 C_i \frac{\sin[(\Omega_s - \Omega^{(i)})t]}{\Omega_s - \Omega^{(i)}} + \tilde{r}_1(t), \quad (3.41)$$

sendo $\Omega^{(0)} \equiv \Omega$, $\Omega^{(1)} \equiv \Omega + \epsilon_1$ e $\Omega^{(2)} \equiv \Omega - \epsilon_1$; $C_0 \equiv \cos(\phi)^2/2$, $C_1 \equiv (1 + \sin(\phi))^2/4$ e $C_2 \equiv (1 - \sin(\phi))^2/4$, lembrando que $\tan(\phi) = (\Delta - \Omega)/\epsilon_0$. O primeiro termo do lado direito de (3.41) traz todas as contribuições dos pólos da função espectral (observe que para $t \gg 1/\ell$ tem-se $r_1(t) \rightarrow \tilde{r}_1(t)$). É deste termo que surge uma solução particular de $\sigma_x(t)$ para o regime de tempos curtos

$$\sigma_x(t) \approx \ell J(\Omega_s) e^{-\ell t} \left[\sum_{i=0}^2 C_i \frac{(1 - \cos[(\Omega_s - \Omega^{(i)})t])}{(\Omega_s - \Omega^{(i)})^2} \right] + \tilde{\sigma}_x(t) \quad (3.42)$$

Note que as amplitudes das oscilações observadas são proporcionais ao valor da função espectral no ponto Ω_s . Assim, este termo deve ser praticamente desprezível para dissipações muito fracas. Para as demais componentes de spin, verificamos que as contribuições dos pólos são desprezíveis frente aos outros termos.

Para $t > 1/\ell$, observa-se que os coeficientes $r_i(t)$, $m_i(t)$, $n_i(t)$ convergem rapidamente para valores constantes no tempo, que iremos identificá-los como: $r_i(t > 1/\ell) \approx r_i$, $m_i(t > 1/\ell) \approx m_i$, $n_i(t > 1/\ell) \approx n_i$. Além disso, para os parâmetros físicos que utilizamos, ainda podemos aproximar os coeficientes por (para $t > 1/\ell$, os termos desprezados são duas ordens em ϵ_0 maiores do que os termos considerados): $A_x(t) \approx r_1$, $A_y(t) \approx m_2(t) \sin(\Omega t) + n_2(t) \cos(\Omega t)$, $\Gamma_{xx}(t) \approx r_3$, $\Gamma_{xz}(t) \approx m_4 \sin(\Omega t) + n_4 \cos(\Omega t)$ e $\Gamma_{yz} \approx r_5$. Deste modo, para o regime $t > 1/\ell$ podemos aproximar as equações de Bloch-Redfield por

$$\dot{\sigma}_x(t) \approx 2\epsilon_0 \cos(\Omega t) \sigma_y - r_3 \sigma_x - (m_4 \sin(\Omega t) + n_4 \cos(\Omega t)) \sigma_z - r_1, \quad (3.43)$$

$$\dot{\sigma}_y(t) \approx -2\epsilon_0 \cos(\Omega t) \sigma_x + (\Delta - r_5) \sigma_z - r_3 \sigma_y - m_2 \sin(\Omega t) + n_2 \cos(\Omega t), \quad (3.44)$$

$$\dot{\sigma}_z(t) = -\Delta \sigma_y. \quad (3.45)$$

Tomando a transformada de Laplace desse conjunto de equações obtemos

$$(s + r_3)\sigma_x(s) = \tilde{\sigma}_x(0) - \frac{r_1}{s} - K_4(s)\tilde{\sigma}_z(0) + Z_-(s + i\Omega)\sigma_y(s + i\Omega) + Z_+(s - i\Omega)\sigma_y(s - i\Omega), \quad (3.46)$$

$$\left(s + \frac{\Delta(\Delta - r_5)}{s}\right)\sigma_y(s) = \tilde{\sigma}_y(0) + \frac{\Delta - r_5}{s}\tilde{\sigma}_z(0) - K_2(s) - \epsilon_0 \{ \sigma_x(s + i\Omega) + \sigma_x(s - i\Omega) \}, \quad (3.47)$$

onde usamos que $s\sigma_z(s) = \tilde{\sigma}_z(0) - \Delta\sigma_y(s)$, e tendo definido a transformada de Laplace e a sua inversa como

$$f(s) = \int_0^\infty e^{-st} f(t) dt, \quad f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon - i\infty}^{\epsilon + i\infty} e^{st} f(s) ds. \quad (3.48)$$

Substituindo (3.47) em (3.46), encontramos a seguinte equação para a transformada da componente σ_x

$$h(s)\sigma_x(s) = d_x(s) + \frac{Z_-(s + i\Omega)}{g(s + i\Omega)}d_y(s + i\Omega) + \frac{Z_+(s - i\Omega)}{g(s - i\Omega)}d_y(s - i\Omega) - \epsilon_0 \left\{ \frac{Z_-(s + i\Omega)}{g(s + i\Omega)}\sigma_x(s + 2i\Omega) + \frac{Z_+(s - i\Omega)}{g(s - i\Omega)}\sigma_x(s - 2i\Omega) \right\}, \quad (3.49)$$

com as definições

$$g(s) \equiv s + r_3 + \frac{\Delta(\Delta - r_5)}{s} \quad (3.50)$$

$$K_i(s) \equiv \frac{1}{s + i\Omega} \left(\frac{n_i}{2} - \frac{m_i}{2i} \right) + \frac{1}{s - i\Omega} \left(\frac{n_i}{2} + \frac{m_i}{2i} \right) \quad (3.51)$$

$$d_x(s) \equiv \tilde{\sigma}_x(0) - \frac{r_1}{s} - \tilde{\sigma}_z(0)K_4(s) \quad (3.52)$$

$$d_y(s) \equiv \tilde{\sigma}_y(0) + \frac{\Delta - r_5}{s}\tilde{\sigma}_z(0) - K_2(s) \quad (3.53)$$

$$Z_\pm(s) \equiv \epsilon_0 + \frac{\Delta}{s} \left(\frac{n_4}{2} \pm \frac{m_4}{2i} \right) \quad (3.54)$$

$$h(s) \equiv s + r_3 + \frac{\epsilon_0}{g(s + i\Omega)}Z_-(s + i\Omega) + \frac{\epsilon_0}{g(s - i\Omega)}Z_+(s - i\Omega) \quad (3.55)$$

Analisando (3.49) percebemos que ao iterar a equação *ad infinitum*, obtém-se independentemente das condições iniciais do problema, por conta dos termos r_1/s e $K_2(s)$, um família de pólos não dissipativa $\pm 2ni\Omega$, isto é, os harmônicos pares da frequência de oscilação do campo de controle externo estão presentes na decomposição espectral de σ_x . Já os harmônicos ímpares dependem da condição inicial de σ_z . Para $\sigma_{y,z}$ observa-se justamente o contrário, os harmônicos ímpares independem das condições iniciais e os pares

da condição inicial $\sigma_z(0)$. Além disso, pode-se observar que apenas a componente σ_x tem um pólo $s = 0$.

No regime físico que estamos interessados, $\epsilon_0/\Delta \ll 1$, precisamos iterar apenas uma vez a eq. (3.49) para obter bons resultados, uma vez que $Z_{\pm}/g \approx \epsilon_0/\Delta$. Procedendo deste modo, encontramos que a evolução temporal de um estado inicial de superposição equiprovável dos estados $|\sigma_z = \pm 1\rangle$ ($\sigma_x(0) = \pm 1$, $\sigma_y(0) = 0$, $\sigma_z(0) = 0$) é dada aproximadamente pelas seguintes soluções das equações de Bloch-Redfield

$$\begin{aligned} \sigma_x(t) \approx & \sigma_x(\infty) + G \cos(2\Omega t) + \ell J(\Omega_s) e^{-\ell t} \left[\sum_{i=0}^2 C_i \frac{(1 - \cos([\Omega_s - \Omega^{(i)}]t))}{(\Omega_s - \Omega^{(i)})^2} \right] \\ & + \left(\sigma_x(0) - \sigma_x(\infty) - G - \sum_{i=0}^2 H_i \right) e^{-\Gamma_R t} + \sum_{i=0}^2 H_i e^{-\frac{\Gamma_i}{2} t} \cos(\omega_i t), \end{aligned} \quad (3.56)$$

$$\begin{aligned} \sigma_z(t) \approx & \frac{2\Delta}{\Omega} f(\epsilon_0, \Omega) (1 - \cos(\Omega t)) \left\{ \left(\sigma_x(0) - \sigma_x(\infty) - G - \sum_{i=0}^2 H_i \right) e^{-\Gamma_R t} \right. \\ & + \sigma_x(\infty) + \frac{G}{2} \left. \right\} + \Delta \sum_{i=0}^2 H_i e^{-\frac{\Gamma_i}{2} t} \left\{ \frac{f(\epsilon_0, \Omega - \omega_i)}{\Omega - \omega_i} (1 - \cos([\Omega - \omega_i]t)) \right. \\ & \left. + \frac{f(\epsilon_0, \Omega + \omega_i)}{\Omega + \omega_i} (1 - \cos([\Omega + \omega_i]t)) \right\}. \end{aligned} \quad (3.57)$$

3.3.3 Análise das soluções

Vários pontos merecem ser destacados nas soluções encontradas. Começemos pelas taxas de relaxação que aparecem em (3.56-3.57). Estas foram encontradas como dadas aproximadamente pelas expressões

$$\Gamma \approx \frac{1}{2} \sum_{i=0}^2 C_i J(\Omega^{(i)}) \coth \left(\frac{\hbar \Omega^{(i)}}{2k_B T} \right); \quad (3.58)$$

$$\Gamma_R \approx \left(1 - \frac{2f^2(\epsilon_0, \Omega)}{1 + 2f^2(\epsilon_0, \Omega)} \frac{\Delta(\Delta - 2\gamma)}{\Omega^2} \right) \Gamma, \quad \Gamma_0 = 2\Gamma_1 = 2\Gamma_2 = 2\Gamma. \quad (3.59)$$

Para o caso em consideração, tem-se que $\Gamma \ll \ell$. Deste modo, para σ_x , verificamos que a relaxação está dividida em dois regimes, um de tempos curtos, $t < 1/\ell$, cuja taxa não depende da temperatura, e um de tempos longos $t > 1/\ell$, com taxa dependente da temperatura. Observe também que para $\epsilon_0 = 0$ recuperamos o resultado esperado $\Gamma = \frac{1}{2} J(\Delta) \coth \left(\frac{\hbar \Delta}{2k_B T} \right)$ [43].

A função

$$f(\epsilon_0, \Omega) = \epsilon_0 \frac{\Omega}{\Omega^2 - \Delta(\Delta - 2\gamma)} \quad (3.60)$$

dá uma medida real da força do campo oscilante $\epsilon(t)$ sobre a dinâmica do spin. Há dois elementos importantes aqui, um é a intensidade $\hbar\epsilon_0$ do campo e outro é uma medida de quão afastados estamos da frequência natural de ressonância do sistema $\sqrt{\Delta(\Delta - 2\gamma)} \approx \Delta - \gamma$.

O deslocamento γ na frequência natural de ressonância pode ser identificada como um termo de Lamb *shift*, sendo dada aproximadamente pela fórmula

$$\gamma \equiv r_5 \approx \sum_{i=0}^2 \frac{C_i}{2\pi} \int_0^{\omega_D} d\omega \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) J(\omega) P \left[\frac{1}{\omega - \Omega^{(i)}} - \frac{1}{\omega + \Omega^{(i)}} \right]. \quad (3.61)$$

Esta expressão é muito similar à encontrada no tratamento não-perturbativo da interação campo-átomo [45]. Perceba que a fórmula deduzida para γ é dependente da temperatura e que a presença da função espectral no integrando deixa nítido que tal correção decorre da interação spin-banho. Outro ponto a se destacar é que, na dedução das soluções analíticas encontradas aqui, esse termo surge naturalmente da solução, o que não se verifica no procedimento proposto por [44] (onde se faz necessário impor o deslocamento da frequência).

Dada a função $f(\epsilon_0, \Omega)$, podemos escrever os coeficientes de (3.56-3.57) como

$$\sigma_x(\infty) \approx \left(\frac{1}{1 + 2f^2(\epsilon_0, \Omega)} \right) \tanh\left(\frac{\hbar\Delta}{2k_B T}\right), \quad (3.62)$$

$$G \approx \frac{\epsilon_0}{\Omega} f(\epsilon_0, \Omega) \sigma_x(\infty) \quad (3.63)$$

$$H_0 \approx -2H_2 \approx -2G \quad (3.64)$$

$$H_1 \approx \left(\frac{\epsilon_0}{\omega_1} \right)^2 \sigma_x(0). \quad (3.65)$$

As frequências dominantes observadas para o regime de tempos longos são

$$\omega_0 \approx 2\Omega, \quad (3.66)$$

$$\omega_1 \approx \sqrt{\epsilon_0^2 + (\Omega - \sqrt{\Delta(\Delta - 2\gamma)})^2} \approx \sqrt{\epsilon_0^2 + (\Omega - \Delta + \gamma)^2}, \quad (3.67)$$

$$\omega_2 \approx \sqrt{\epsilon_0^2 + (\Omega + \sqrt{\Delta(\Delta - 2\gamma)})^2} \approx \sqrt{\epsilon_0^2 + (\Omega + \Delta - \gamma)^2}. \quad (3.68)$$

Encontramos para o nosso problema que o peso maior para dinâmica do spin, está no termo da frequência baixa ω_1 . É interessante notar que essa frequência é exatamente (no caso de $\gamma = 0$) igual à que aparece no problema de como um átomo responde a um campo externo, fenômeno conhecido como oscilação de Rabi ou *optical nutation* [45].

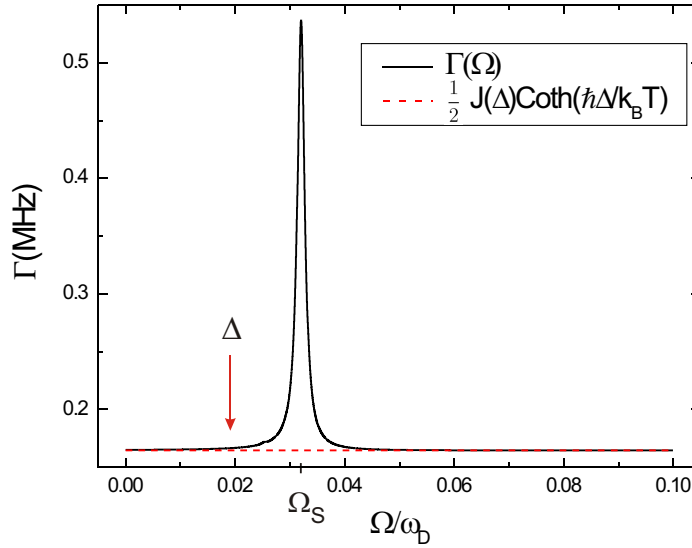


FIGURA 3.2 - Taxa de relaxação Γ como função da frequência do campo externo oscilante Ω . Curva sólida representa o caso com campo externo ligado, $\epsilon_0 = 5 \times 10^{-3}\omega_D$. O máximo da taxa ocorre próximo a posição do pico da função espectral, $\Omega \approx \Omega_s$. Curva tracejada mostra o caso sem campo externo oscilante. Temperatura assumida para esses gráficos $T \approx 1K$.

Para $\epsilon_0 = 0$, obtém-se a solução esperada $\sigma_x(t \rightarrow \infty) \rightarrow \tanh(\frac{\hbar\Delta}{2k_B T})$. Já na ressonância, $f(\epsilon_0, \Omega)$ diverge, e tem-se da solução encontrada que a componente σ_x oscilará com frequência $\omega_1 \approx \epsilon_0$ entre os valores ± 1 (mesmo comportamento observado no problema de Rabi [45]).

Assim, não de modo surpreendente, verificamos que em vários aspectos a dinâmica do spin eletrônico aprisionado em um ponto quântico se assemelha à de um átomo sob a ação de campos externos.

3.4 Resultados

Aplicamos [46] os resultados encontrados na seção anterior para o caso de interação piezoelétrica, $s = 3$, em pontos quânticos de dimensão $\omega_0 = 0.483\omega_D \equiv 15\text{meV}$, submetidos a campos externos de $B_x = 10\text{T}$ e $B_z = 0.3\text{T}$, o que nos dá $\hbar\Delta/k_B = 6\text{K}$ e $\hbar\epsilon_0/k_B = 0.2\text{K}$. A frequência de Debye assumida foi de $\omega_D = 4.7 \times 10^{13}\text{Hz} \equiv 360\text{K}$. As Figs. 3.2-3.7 apresentam os resultados assumindo-se os valores de estrutura volumétrica [42]: $\beta = 3000\text{m/s}$, $m^* = 0.063m_e$, $\delta_3 = 355$. Em toda a análise que se segue, a temperatura escolhida foi de $T \approx 1\text{K}$.

As Figs. 3.2 e 3.3 mostram uma análise do comportamento de Γ em função da frequência Ω e da amplitude ϵ_0 do campo oscilante. Em ambos os gráficos nota-se uma assinatura

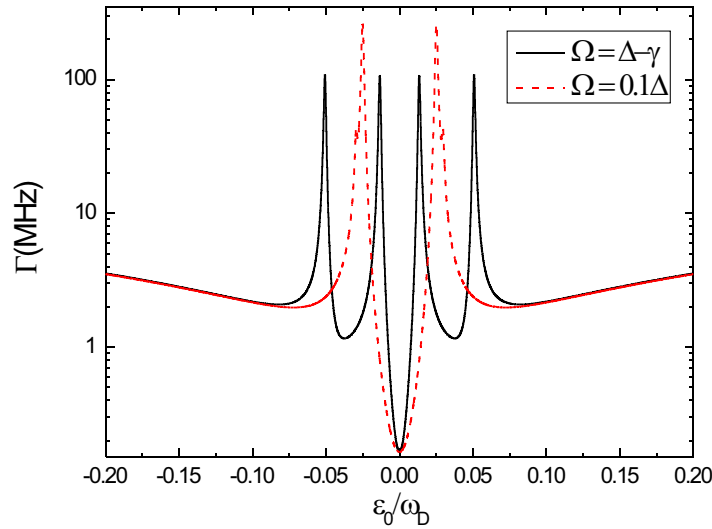


FIGURA 3.3 - Taxa de relaxação Γ como função da intensidade do campo externo, ϵ_0 . A curva sólida apresenta o caso da ressonância $\Omega = \Delta - \gamma$ e a tracejada o caso fora da ressonância $\Omega = 0.1\Delta$. A estrutura de máximos observados ocorre devido à existência do pico na função espectral. A distância entre os máximos é da ordem de 2Ω . Nestes gráficos $T \approx 1K$.

da existência do pico na função espectral. Na Fig. 3.2, observa-se um máximo pronunciado próximo à frequência Ω_s , no qual a taxa de relaxação pode assumir valores cerca de cinco vezes maior do que o menor valor observado. Na Fig. 3.3 observamos que esse aumento pode chegar a ser duas ordens de grandeza maior nos pontos $\pm|\Omega \pm \Omega_s|$. Deste modo, temos claro quais regimes de operação do qubit devem ser evitados para obter-se uma otimização dos tempos de relaxação.

A dinâmica dos valores esperados das componentes σ_x e σ_z é apresentada nas Figs. 3.4 e 3.5 para o caso na ressonância $\Omega \approx \Delta - \gamma$. Tem-se que σ_x oscila entre os valores ± 1 com frequência característica $\omega_1 = \epsilon_0$. Apenas se constata um regime de relaxação, o que ocorre devido à fraca dissipação sofrida pelo spin, isto é, $J(\Omega_s) \ll 1$. O tempo de relaxação estimado é da ordem de $T_1 = 20\mu s$. Para a componente σ_z observa-se uma estrutura de batimentos entre os valores ± 1 , com frequências angular e de batimento dadas respectivamente por $\Omega - \omega_1/2$ e ω_1 . Já nas Figs. 3.6 e 3.7 mostra-se um caso fora da ressonância, $\Omega = 0.8\Delta$. A principal frequência de oscilação da componente σ_x continua sendo ω_1 dada por (3.67), porém a amplitude de oscilação diminuiu consideravelmente, sendo perceptível a presença das demais frequências, ω_0 e ω_2 . Novamente, só é possível identificar um regime de relaxação na dinâmica, sendo o argumento para tal exatamente o mesmo do caso na ressonância. Para a componente σ_z a amplitude do batimento diminui e novas frequências começam a participar da dinâmica. A frequência de batimento continua sendo ω_1 e a frequência angular é dada aproximadamente por $\Omega + \omega_1/2$.

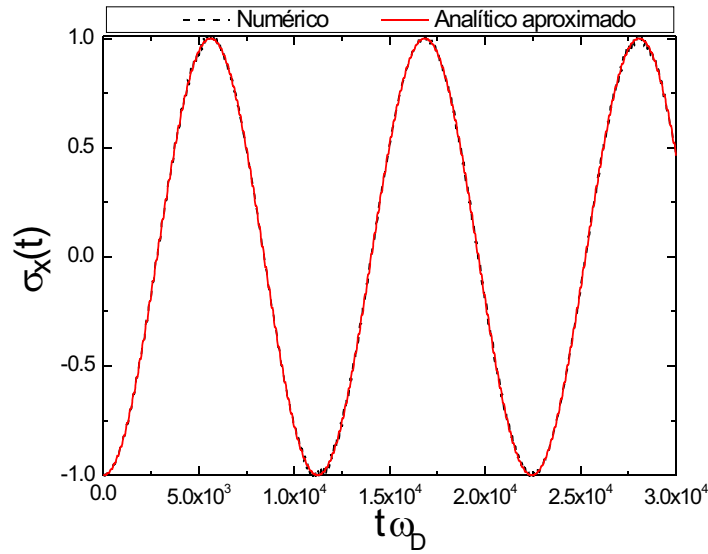


FIGURA 3.4 - Evolução temporal do valor esperado da componente de spin $\sigma_x(t)$ para o caso da ressonância $\Omega \approx \Delta - \gamma$, usando-se valores de estrutura volumétrica para os parâmetros físicos do ponto quântico. Curva sólida apresenta a solução analítica e a tracejada o numérico exato das equações de Bloch-Redfield. A frequência de oscilação observada é $\omega_1 \approx \epsilon_0$. Tempo de relaxação estimado $T_1 = 20\mu s$. Neste gráfico $T \approx 1K$.

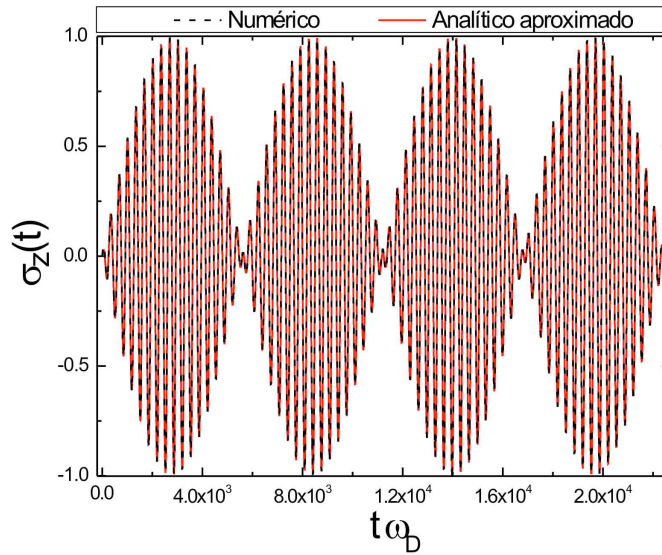


FIGURA 3.5 - Evolução temporal do valor esperado da componente de spin $\sigma_z(t)$ para o caso da ressonância $\Omega \approx \Delta - \gamma$, usando-se valores de estrutura volumétrica para os parâmetros físicos do ponto quântico. Curva sólida apresenta a solução analítica e a tracejada o numérico exato das equações de Bloch-Redfield. ω_1 e $\Omega - \omega_1/2$ são respectivamente as frequências de batimento e angular do problema. Neste gráfico $T \approx 1K$.

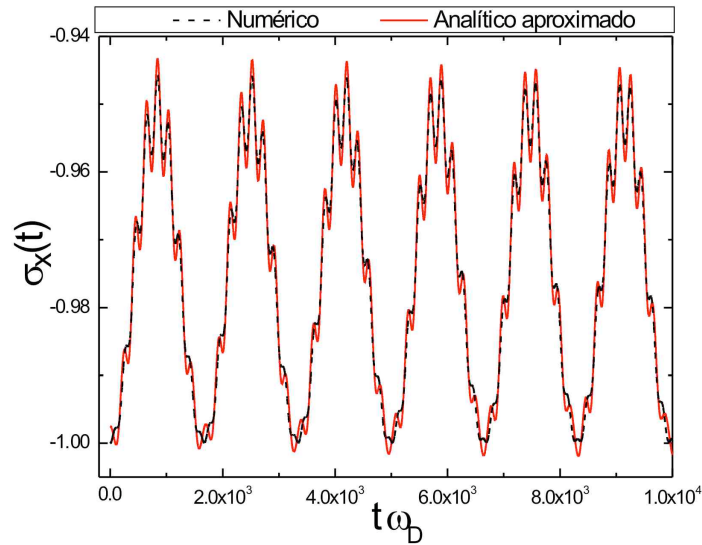


FIGURA 3.6 - Evolução temporal do valor esperado da componente de spin $\sigma_x(t)$ para o caso fora da ressonância $\Omega \approx 0.8\Delta$, usando-se valores de estrutura volumétrica para os parâmetros físicos do ponto quântico. Curva sólida apresenta a solução analítica e a tracejada o numérico exato das equações de Bloch-Redfield. A principal frequência de oscilação observada é ω_1 . Tempo de relaxação estimado $T_1 = 20\mu s$. Neste gráfico $T \approx 1K$.

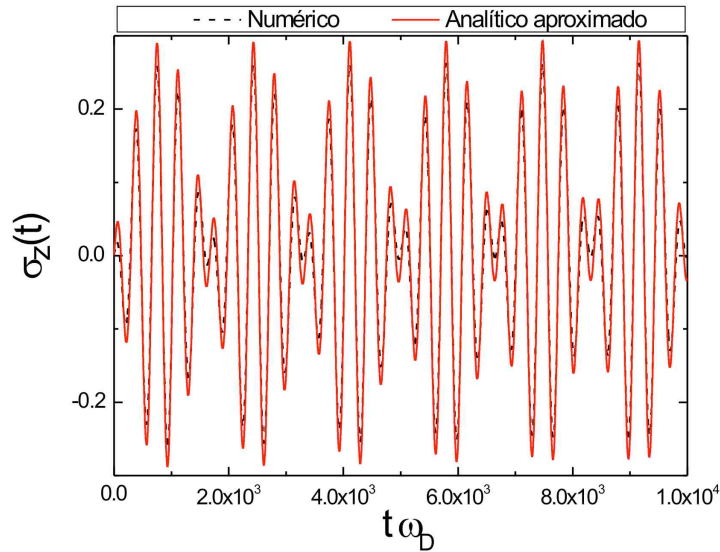


FIGURA 3.7 - Evolução temporal do valor esperado da componente de spin $\sigma_z(t)$ para o caso fora da ressonância $\Omega \approx 0.8\Delta$, usando-se valores de estrutura volumétrica para os parâmetros físicos do ponto quântico. Curva sólida apresenta a solução analítica e a tracejada o numérico exato das equações de Bloch-Redfield. ω_1 e $\Omega + \omega_1/2$ são respectivamente as frequências de batimento e angular do problema. Neste gráfico $T \approx 1K$.

Como pudemos constatar, para os valores dos parâmetros que temos utilizado, a relaxação introduzida pelos pólos da função espectral efetiva, terceiro termo de (3.56), é desprezível quando comparado aos demais. Apenas para ilustrar a presença deste regime, consideraremos o caso em que o acoplamento entre o sistema-banho seja mais forte, porém ainda no regime de que as correções nas frequências, introduzidas pelo acoplamento sistema-banho, sejam pequenas. As Fig. (3.8-3.13) apresentam este caso, onde fizemos β , cerca de 100 vezes maior. O tempo de relaxação estimado para este regime de parâmetros é de $T_1 \approx 10\text{ns}$, ou seja, mil vezes menor do que o estimado usando-se valores de estrutura de volume para os parâmetros.

As Figs. 3.8-3.11 apresentam a dinâmica dos valores esperados de σ_x e σ_z para o caso fora da ressonância $\Omega = \Delta$. Neste caso pudemos acompanhar todo o processo de relaxação do sistema. Para o regime de tempos muito longos, $t > 1/\Gamma$, o sistema alcança o estado estacionário com o valor esperado de σ_x oscilando com frequência 2Ω em torno do valor $\sigma_x(\infty) \approx \left(\frac{1}{1+2f^2(\epsilon_0, \Omega)} \right) \tanh \left(\frac{\hbar\Delta}{2k_B T} \right)$, já a componente σ_z oscila com frequência Ω em torno da origem. Para o regime inicial da dinâmica, Figs 3.9-3.10, observa-se claramente dois regimes de relaxação para a componente σ_x : um para tempos da ordem de $t \approx 1/\ell$; e outro para $t > 1/\ell$. Os dois regimes têm frequências características bem distintas. Para o regime de tempos curtos, a decomposição espectral é formada pelas frequências dominantes $\Omega^{(i)}$ e para tempos longos encontra-se as frequências ω_i . Para σ_z observamos uma estrutura de batimentos, Fig. 3.10, com frequências de batimento e angular bem definidas por ω_1 e $\Omega - \omega_1/2$, respectivamente. Para tempos longos, o batimento começa a cessar, Fig. 3.11, sobrevivendo apenas as oscilações com frequência Ω no regime de tempos muito longos.

Finalmente, as Figs. 3.12 e 3.13 mostram a dinâmica da componente σ_x para o caso da ressonância $\Omega \approx \Delta - \gamma$. O mesmo tipo de comportamento observado no caso anterior está presente. O valor médio de σ_x , para o regime de tempos muito longos, diminui substancialmente quando comparado com o caso fora de ressonância. Porém, as oscilações para $t > 1/\ell$, passam a ter amplitudes bem maiores no caso em consideração. Apesar disso, o regime de relaxação de tempos curtos ainda é perceptível.

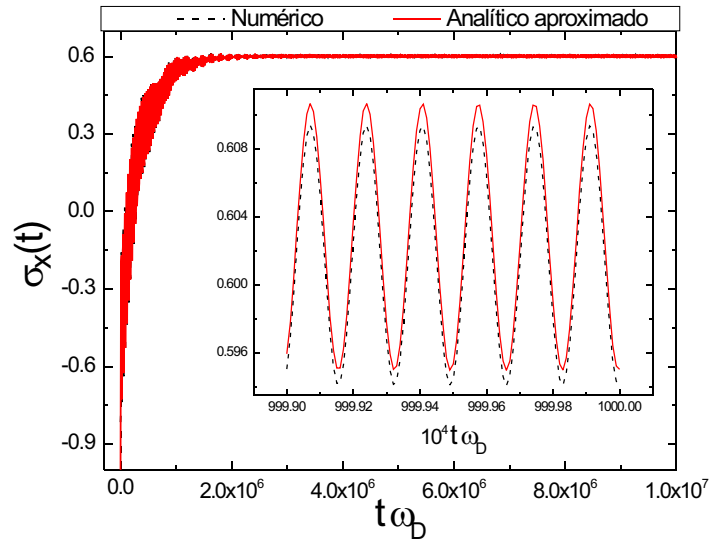


FIGURA 3.8 - Evolução temporal do valor esperado da componente de spin $\sigma_x(t)$ para o caso fora da ressonância $\Omega \approx \Delta$, assumindo-se a interação spin-órbita aproximadamente 10^2 vezes mais intensa. Curva sólida apresenta a solução analítica e a tracejada o numérico exato das equações de Bloch-Redfield. Tempo de relaxação estimado $T_1 = 10\text{ns}$. Gráfico interno apresenta em detalhe o regime de tempos muito longos, $t \approx 10^7 \omega_D$. A oscilação observada tem frequência dada por 2Ω (exato). Neste gráfico $T \approx 1K$.

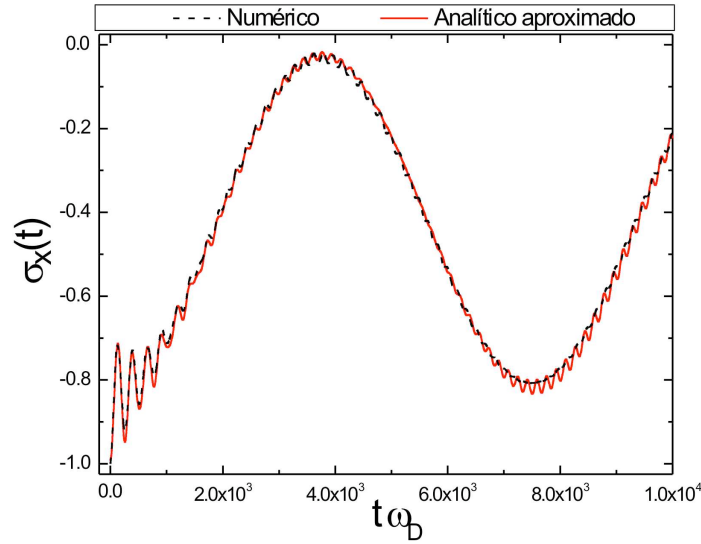


FIGURA 3.9 - Detalhe das primeiras oscilações da evolução temporal do valor esperado da componente de spin $\sigma_x(t)$ para o caso fora da ressonância $\Omega \approx \Delta$, assumindo-se a interação spin-órbita aproximadamente 10^2 vezes mais intensa. Curva sólida apresenta a solução analítica e a tracejada o numérico exato das equações de Bloch-Redfield. Dois regimes de relaxação são observados: um para tempos curtos, $t < 1/\ell$; e outro para tempos longos, $t > 1/\ell$. A principal frequência de oscilação observada para tempos longos é ω_1 . Neste gráfico $T \approx 1K$.

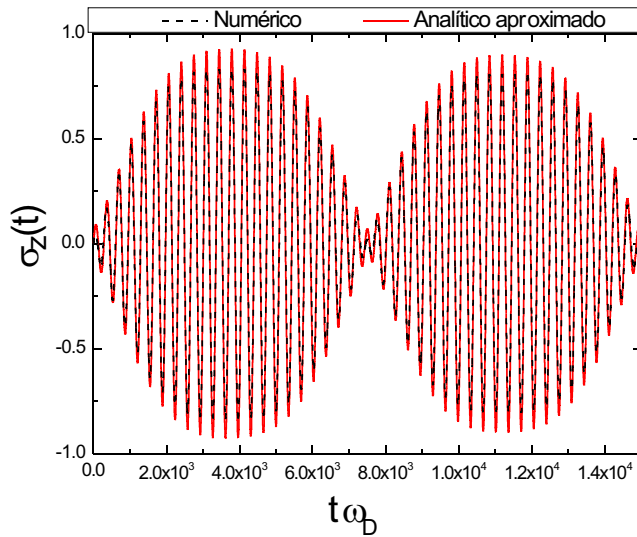


FIGURA 3.10 - Evolução temporal do valor esperado da componente de spin $\sigma_z(t)$ para o caso fora da ressonância $\Omega \approx \Delta$, assumindo-se a interação spin-órbita aproximadamente 10^2 vezes mais intensa. Curva sólida apresenta a solução analítica e a tracejada o numérico exato das equações de Bloch-Redfield. ω_1 e $\Omega - \omega_1/2$ são respectivamente as frequências de batimento e angular do problema. Neste gráfico $T \approx 1K$.

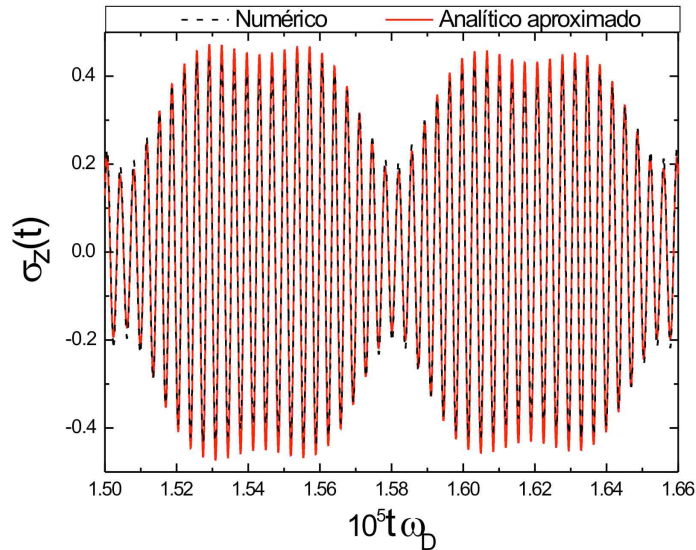


FIGURA 3.11 - Regime de tempos longos para o valor esperado da componente de spin $\sigma_z(t)$ para o caso fora da ressonância $\Omega \approx \Delta$, assumindo-se a interação spin-órbita aproximadamente 10^2 vezes mais intensa. As componentes $\Omega \pm \omega_i$ vão evanescendo, fazendo com que o batimento observado nas primeiras oscilações cesse. No regime de tempos muito longos, $t > 1/\Gamma$, apenas a frequência Ω (exato) é observada. Curva sólida apresenta a solução analítica e a tracejada o numérico exato das equações de Bloch-Redfield. Neste gráfico $T \approx 1K$.

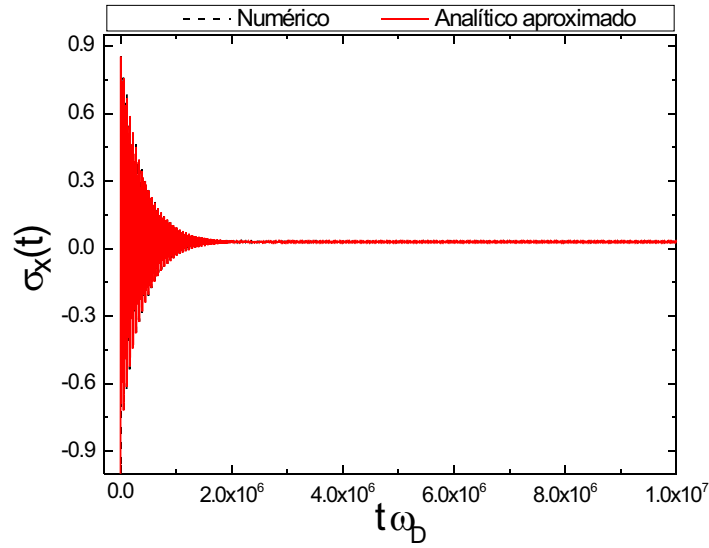


FIGURA 3.12 - Evolução temporal completa do valor esperado da componente de spin $\sigma_x(t)$ para o caso na ressonância $\Omega \approx \Delta - \gamma$, assumindo-se a interação spin-órbita aproximadamente 10^2 vezes mais intensa. Curva sólida apresenta a solução analítica e a tracejada o numérico exato das equações de Bloch-Redfield. Tempo de relaxação estimado $T_1 = 10\text{ns}$. Nestes gráficos $T \approx 1K$.

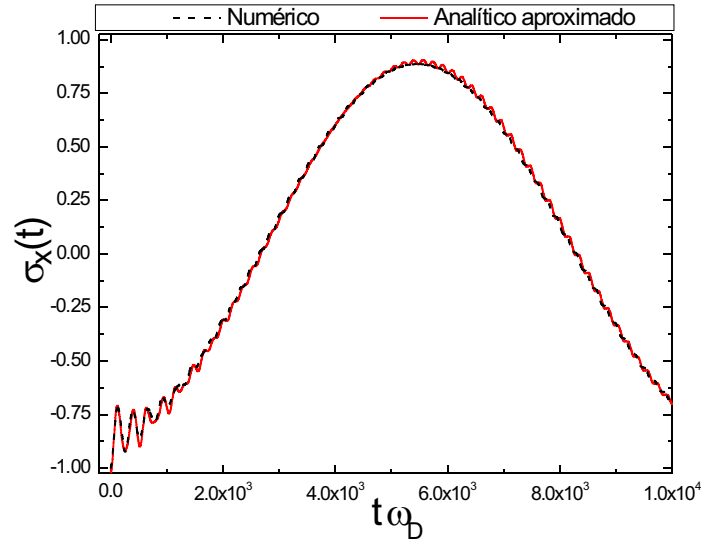


FIGURA 3.13 - Detalhe das primeiras oscilações da evolução temporal do valor esperado da componente de spin $\sigma_x(t)$ para o caso na ressonância $\Omega \approx \Delta - \gamma$, assumindo-se a interação spin-órbita aproximadamente 10^2 vezes mais intensa. Curva sólida apresenta a solução analítica e a tracejada o numérico exato das equações de Bloch-Redfield. Dois regimes de relaxação são observados: um para tempos curtos, $t < 1/\ell$; e outro para tempos longos, $t > 1/\ell$. A principal frequência de oscilação observada para tempos longos é ω_1 . Nestes gráficos $T \approx 1K$.

3.5 Conclusão

Através das soluções analíticas das equações de Bloch-Redfield pudemos identificar claramente quais características da função espectral efetiva, determinada para spins de interação spin-órbita [16], desempenham papel importante para a dinâmica dissipativa do sistema. Da análise dos resultados determinamos quais regimes dos parâmetros externos são mais favoráveis para a implementação deste dispositivo como um qubit. Além disso, conseguimos verificar que, para diversas situações, o comportamento do spin eletrônico aprisionado no ponto quântico se assemelha ao de um átomo sob a ação de campos externos. Os tempos determinados para a relaxação do spin revelaram-se menores do que os observados experimentalmente [12], o que pode indicar que o uso de valores de estrutura volumétrica para os parâmetros físicos do ponto quântico, pode levar a tempos de descoerência subestimados.

BIBLIOGRAFIA

- [1] W. H. Zurek: *Decoherence and the transition from the quantum to the classical*, Phys. Today **44**, 36 (1991).
- [2] A. O. Caldeira & A. J. Leggett: *Influence of damping on quantum interference: an exactly soluble model*, Phys. Rev. A **31**, 1059 (1985).
- [3] M. A. Nielsen & I. L. Chuang, *Quantum computation and quantum information*, (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2000).
- [4] L. M. K. Vandersypen, M. Steffen, G. Breyta, C. S. Yannoni, M. H. Sherwood & I. L. Chuang: *Experimental realization of Shor's quantum factoring algorithm using nuclear magnetic resonance*, Nature, **414** 883 (2001).
- [5] D. Bouwmeester, A. Ekert & A. Zeilinger, *The physics of quantum information*, (Springer, Berlin, 2000).
- [6] Y. Nakamura, C. D. Chen & J. S. Tsai: *Spectroscopy of energy-level splitting between two macroscopic quantum states of charge coherently superposed by Josephson Coupling*, Phys. Rev. Lett. **79**, 2328 (1997).
- [7] D. P. DiVincenzo: *The Physical Implementation of Quantum Computation*, quant-ph/0002077, 13 abril 2000.
- [8] G. M. Palma, Kalle-Antti Suominen & A. K. Ekert: *Quantum computers and dissipation*, Proc. R. Soc. Lond. A **452**, 567 (1996). Uma correção do resultados é apresentada em J. H. Reina, L. Quiroga & N. F. Johnson: *Decoherence of quantum registers*, Phys. Rev. A **65** 032326 (2002).
- [9] R. H. Koch, J. R. Rozen, G. A. Keefe, F. M. Milliken, C. C. Tsuei, J. R. Kirtley & D. P. DiVincenzo: *Low-bandwidth control scheme for an oscillator-stabilized Josephson qubit*, Phys. Rev. B **72**, 092512 (2005).
- [10] D. Vion, A. Aassime, A. Cottet, P. Joyez, H. Pothier, C. Urbina, D. Esteve & M. H. Devoret: *Manipulating the quantum state of an electrical circuit*, Science **296**, 886 (2002).
- [11] Y. Nakamura, Y. A. Pashkin & J. S. Tsai: *Coherent control of macroscopic quantum states in a single-Cooper-pair box*, Nature **398**, 786 (1999).
- [12] J. M. Elzerman, R. Hanson, L. H. W. van Beveren, B. Witkamp, L. M. K. Vandersypen & L. P. Kouwenhoven: *Single-shot read-out of an individual electron spin in a quantum dot*, Nature **430**, 431 (2004).

- [13] M. Kroutvar, Y. Ducommun, D. Heiss, M. Bichler, D. Schuh, G. Abstreiter & J. J. Finley: *Optically programmable electron spin memory using semiconductor quantum dots*, Nature **432**, 81 (2004).
- [14] M. A. de Ponte, M. C. de Oliveira & M. H. Y. Moussa: *Decoherence in strongly coupled quantum oscillators*, Ann. Phys. **317**, 72 (2005).
- [15] R. H. Koch *et al.*: *Experimental demonstration of an oscillator stabilized Josephson flux qubit*, em preparação.
- [16] H. Westfahl Jr., A. O. Caldeira, G. Medeiros-Ribeiro & M. Cerro: *Dissipative dynamics of spins in quantum dots*, Phys. Rev. B **70** 195320 (2004).
- [17] A. Shnirman, G. Schön & Z. Hermon: *Quantum manipulations of small Josephson junctions*, Phys. Rev. Lett. **79**, 2371 (1997).
- [18] J. E. Mooij, T. P. Orlando, L. Levitov, L. Tian, C. H. van der Wal & S. Lloyd: *Josephson persistent-current qubit*, Science **285**, 1036 (1999).
- [19] Y. Makhlin, G. Schön & A. Shnirman: *Quantum-state engineering with Josephson-junction devices*, Rev. Mod. Phys. **73** 357 (2001).
- [20] I. Chiorescu, Y. Nakamura, C. J. P. M. Harmans & J. E. Mooij: *Coherent quantum dynamics of a superconducting flux qubit*, Science **299** 1869 (2003).
- [21] Yu. A. Pashkin, T. Yamamoto, O. Astafiev, Y. Nakamura, D. V. Averin & J. S. Tsai: *Quantum oscillations in two coupled charge qubits*, Nature **421**, 823 (2003).
- [22] C. H. van der Wal, A. C. J. ter Haar, F. K. Wilhelm, R. N. Schouten, C. J. P. M. Harmans, T. P. Orlando, S. Lloyd & J. E. Mooij: *Quantum superposition of macroscopic persistent-current states*, Science **290**, 773 (2000).
- [23] T. P. Orlando, J. E. Mooij, L. Tian, C. H. van der Wal, L. S. Levitov, S. Lloyd & J. J. Mazo: *A superconducting persistent current qubit*, Phys. Rev. B **60**, 15398 (1999).
- [24] R. F. Voss & R. A. Webb: *Macroscopic quantum tunneling in $1\mu\text{m}$ Nb Josephson junctions*, Phys. Rev. Lett. **47**, 265 (1981).
- [25] J. M. Martinis, M. H. Devoret & J. Clarke: *Experimental tests for quantum behavior of a macroscopic degree of freedom: the phase difference across a Josephson junction*, Phys. Rev. B **35**, 4682 (1987).
- [26] Y. Makhlin, G. Schön & A. Shnirman: *Josephson-junctions qubits with controlled couplings*, Nature **398**, 305 (1999).
- [27] M. Tinkhan, *Introduction to superconductivity* (2nd Edition, dover, New York, 2004).
- [28] R. P. Feynman, *Statistical mechanics - a set of lectures* (1st Edition, Addison-Wesley, 1995).
- [29] A. O. Caldeira, *From macroscopic quantum phenomena to superconducting qubits*, (notas de aulas, Búzios, 2002).

- [30] G. Burkard, R. H. Koch & D. P. DiVincenzo: *Multi-level quantum description of decoherence in superconducting qubits*, Phys. Rev. B **69** 064503 (2004).
- [31] D. P. DiVincenzo, F. Brito & R. H. Koch: *Efficient evaluation of decoherence rates in complex Josephson circuits*, submetido a PRB, cond-mat/0510843.
- [32] G. Burkard & F. Brito: *Non-additivity of decoherence in superconducting qubits*, Phys. Rev. B **72** (2005) 054528.
- [33] A. G. Redfield: *On the theory of relaxation processes*, IBM J. Res. Dev. **1**, 19 (1957).
- [34] E. Mertzbacher, *Quantum Mechanics* (2nd Edition, Wiley, New York, 1970).
- [35] L. Jacak, P. Hawrylak & A. Wójs, *Quantum dots*, (Springer, Berlin, 1998).
- [36] D. Loss & D. P. DiVincenzo: *Quantum computation with quantum dots*, Phys. Rev. A **57**, 120 (1998).
- [37] G. Burkard, D. Loss & D. P. DiVincenzo: *Coupled quantum dots as quantum gates*, Phys. Rev B **59**, 2070 (1999)
- [38] S. I. Erlingsson & Y. V. Nazarov: *Hyperfine-mediated transitions between a Zeeman split doublet in GaAs quantum dots: The role of the internal field*, Phys. Rev. B **66**, 155327 (2002).
- [39] A. V. Khaetskii & Y. V. Nazarov: *Spin relaxation in semiconductor quantum dots*, Phys. Rev. B **61**, 12639 (2000)
- [40] V. N. Golovach, A. Khaetskii & D. Loss: *Phonon-Induced decay of the electron spin in quantum dots*, Phys. Rev. Lett. **93**, 016601 (2004).
- [41] A. V. Khaetskii & Y. V. Nazarov: *Spin-flip transitions between Zeeman sublevels in semiconductor quantum dots*, Phys. Rev. B **64**, 125316 (2001).
- [42] E. L. Ivchenko & G. E. Pikus, *Superlattices and other heterostructures* (2nd Edition, Springer, Berlin, 1997)
- [43] A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, M. P. A. Fisher, A. Garg, W. Zwerger: *Dynamics of the dissipative two-state system*, Rev. Mod. Phys. **59** 1 (1987) .
- [44] Ludwig Hartmann *et al.*: *Driven Tunneling Dynamics: Bloch-Redfield Theory versus Path Integral Approach*, Phys. Rev. E **61** R4687 (2000).
- [45] L. Mandel & E. Wolf, *Optical Coherence and Quantum Optics* (Cambridge, New york, 1995).
- [46] F. Brito, H. Westfahl Jr., A. O. Caldeira & G. Medeiros-Ribeiro: *Effective dissipative environment for spins from the spin-orbit interaction*, em preparação.
- [47] B. Peikari, *Fundamentals of Network Analysis and Synthesis*, Prentice-Hall (Englewood Cliffs, NJ 1974).
- [48] P. Dennery & A. Krzywicki, *Mathematics for physicists*, Dover (Mineola, NY 1996).

APÊNDICE A – Matrizes da teoria dos grafos

Neste apêndice apresentamos um resumo dos elementos da teoria de grafos necessários para a dedução da equação de movimento (2.25). Também são apresentadas as matrizes definidas ao longo do texto principal.

A.1 Teoria dos grafos para circuitos

O objetivo desta seção é definir as matrizes da teoria dos grafos usadas para escrever as leis de Kirchhoff (lei das malhas e dos nós) e a lei da indução de Faraday. Um grafo de um circuito (uma exposição mais rigorosa pode ser encontrada em [47]) é um diagrama onde estão representadas todas as conexões entre os elementos do mesmo. Cada elemento de dois terminais (resistor, capacitor, indutor, fontes de corrente e tensão, etc.), independentemente da sua natureza, é representado num grafo como um segmento de linha, chamado de ramo (*branch*), e cada um de seus terminais é apresentado como um ponto, chamado de nó (*node*). A Fig. A.1 mostra um grafo de um circuito contendo um SQUID com junção RSJ, acoplado à uma fonte de fluxo externa. Observe que a orientação do grafo assumida não precisa ser necessariamente igual a real configuração de correntes no circuito.

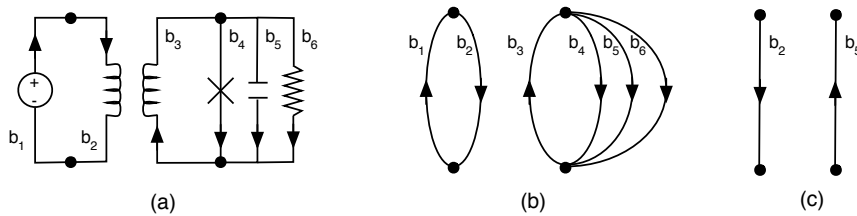


FIGURA A.1 - Exemplo de construção de um grafo. (a) Circuito contendo um SQUID com junção RSJ (elementos b_3 - b_6) acoplado à uma fonte de fluxo externa (elementos b_1 e b_2). (b) Um grafo orientado do circuito. (c) Árvore escolhida para o grafo, cujas cordas são os elementos b_1 , b_3 , b_4 e b_6 .

Assim, dada a idéia do que é um grafo, podemos passar às definições dos termos usados na teoria.

Definição 1 Um grafo orientado $\mathcal{G} = (\mathcal{N}, \mathcal{B})$ é uma coleção de N nós $\mathcal{N} = \{n_1, \dots, n_N\}$ e B ramos orientados $\mathcal{B} = \{b_1, \dots, b_B\}$, com a condição de que os ramos se interceptam apenas nos nós.

A Fig. A.1(b) é um grafo orientado do circuito Fig. A.1(a).

Definição 2 Um grafo é dito conectado se existir ao menos um caminho conectando dois de seus nós.

O grafo apresentado na Fig. A.1 não é conectado.

Definição 3 Um subgrafo de $\mathcal{G}$ é um grafo $\mathcal{G}_i = (\mathcal{N}_i, \mathcal{B}_i)$ tal que $\mathcal{N}_i$ e $\mathcal{B}_i$ são subconjuntos de $\mathcal{N}$ e $\mathcal{B}$.

O grafo formado pelos ramos b_3 - b_6 e os nós n_3 - n_4 é um subgrafo conectado do grafo da Fig. A.1.

Definição 4 Um loop em $\mathcal{G}$ é um subgrafo conectado de $\mathcal{G}$ no qual todos os nós têm grau dois - o grau de um nó é o número de ramos conectados a ele.

O subgrafo da Fig. A.1 formado pelos ramos b_1 e b_2 e nós n_1 e n_2 é um exemplo de um loop.

Definição 5 Uma árvore T de um grafo conectado $\mathcal{G}$ é um subgrafo conectado de $\mathcal{G}$ com as condições de que T não contenha qualquer loop e possua todos os nós de $\mathcal{G}$.

Os ramos que não pertencem a árvore são chamados de cordas (*chords*). A Fig. A.1(c) apresenta possíveis árvores dos subgrafos de Fig. A.1. As cordas de cada árvore são respectivamente (b_1) e (b_4, b_5, b_6) .

Definição 6 Um loop fundamental $\mathcal{F}_i$ de um grafo $\mathcal{G}$ é um loop que contém uma única corda f_i associada à árvore T do grafo $\mathcal{G}$.

Uma descrição completa da topologia do circuito é dada pela matriz de *loop* fundamental (*fundamental loop matrix*), definida como

$$\mathbf{F}_{ij}^{(L)} = \begin{cases} 1, & \text{se } b_j \in \mathcal{F}_i \text{ (mesma direção da corda } f_i), \\ -1, & \text{se } b_j \in \mathcal{F}_i \text{ (direção contrária à da corda } f_i), \\ 0, & \text{se } b_j \notin \mathcal{F}_i, \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

onde $i = 1, \dots, F$ and $j = 1, \dots, B$. Ordenando o ramos do grafo $\mathcal{G}$ de modo que os primeiros $N - P$ ramos pertençam à árvore T , onde P é o número de subgrafos desconectados de $\mathcal{G}$, obtemos que

$$\mathbf{F}^{(L)} = (-\mathbf{F}^T \mid \mathbb{1}), \quad (\text{A.2})$$

onde $\mathbf{F}$, a matriz de *loop*, é uma matriz $(N - P) \times (B - N + P)$.

Agora estamos aptos a apresentar as leis de Kirchhoff através do uso da teoria de grafos. Para tal, escrevamos as correntes dos ramos como $\mathbf{I} = (I_1, \dots, I_B)$, onde I_i representa a corrente elétrica que flui no ramo b_i , e as tensões do ramos como $\mathbf{V} = (V_1, \dots, V_B)$, onde V_i representa a tensão entre os terminais do ramo b_i . Se agruparmos as correntes e tensões dos ramos da árvore e da corda,

$$\mathbf{I} = (\mathbf{I}_{\text{arv}}, \mathbf{I}_{\text{cor}}), \quad (\text{A.3})$$

$$\mathbf{V} = (\mathbf{V}_{\text{arv}}, \mathbf{V}_{\text{cor}}), \quad (\text{A.4})$$

Podemos escrever as leis de Kirchhoff como

$$\mathbf{F}\mathbf{I}_{\text{cor}} = -\mathbf{I}_{\text{arv}}, \quad (\text{A.5})$$

$$\mathbf{F}^T \mathbf{V}_{\text{arv}} = \mathbf{V}_{\text{cor}} - \dot{\Phi}_x. \quad (\text{A.6})$$

Onde Φ_x são os fluxos magnéticos externos aplicados aos *loops*.

Para a dedução da equação de movimento de qubits supercondutores, se faz necessário agora distinguir os diferentes tipos de elementos do circuito elétrico no grafo. Para tal escrevemos

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{CJ} & \mathbf{F}_{CL} & \mathbf{F}_{CR} & \mathbf{F}_{CZ} & \mathbf{F}_{CB} \\ \mathbf{F}_{KJ} & \mathbf{F}_{KL} & \mathbf{F}_{KR} & \mathbf{F}_{KZ} & \mathbf{F}_{KB} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.7})$$

onde as submatrizes $\mathbf{F}_{XY}$ serão chamadas de submatrizes de *loop*. Para montar a estrutura apresentada em (A.7), assumimos, sem perda de generalidade, que a *árvore escolhida para o grafo deva conter todos os capacitores (C) e o mínimo necessário de indutores (K)*. Assim, as diferentes cordas podem ser agrupadas em junções Josephson (J), indutores lineares (L), resistores (R) (associada a cada junção), impedâncias externas (Z) e fontes de corrente (B).

Para a completa descrição do problema, precisamos definir as relações corrente-tensão para os diversos tipos de elementos

$$\mathbf{I}_J = \mathbf{I}_c \sin \boldsymbol{\varphi}, \quad (\text{A.8})$$

$$\mathbf{Q}_C = \mathbf{C} \mathbf{V}_C, \quad (\text{A.9})$$

$$\mathbf{V}_R = \mathbf{R} \mathbf{I}_R, \quad (\text{A.10})$$

$$\mathbf{V}_Z(\omega) = \mathbf{Z}(\omega) \mathbf{I}_Z(\omega), \quad (\text{A.11})$$

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\Phi}_L \\ \boldsymbol{\Phi}_K \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{L} & \mathbf{L}_{LK} \\ \mathbf{L}_{LK}^T & \mathbf{L}_K \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_L \\ \mathbf{I}_K \end{pmatrix}. \quad (\text{A.12})$$

Aqui as matrizes diagonais $\mathbf{I}_c$, $\mathbf{C}$ e $\mathbf{R}$ contêm as correntes críticas $I_{c,i}$ das junções, as capacitâncias e as resistências. $\sin \boldsymbol{\varphi}$ é o vetor $(\sin \varphi_1, \sin \varphi_2, \dots, \sin \varphi_{N_J})$. Eq. (A.12) identifica os indutores de árvore e corda. No formalismo apresentado em [30] assume-se que todas as capacitâncias do circuito tem uma junção Josephson associada em paralelo. Assim, para cada capacitância pura do circuito associa-se uma junção de corrente crítica I_c nula e resistência infinita. Deste modo, cada capacitância do circuito, seguindo este modelo, tem associada uma fase φ seguindo a relação $\dot{\varphi} = \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{C}^{-1} \mathbf{Q}_C$.

Exemplo 1 Para o circuito da Fig. A.1, seguindo a prescrição apresentada neste apêndice, temos que a árvore a ser escolhida deve conter apenas os ramos b_2 (indutor) e b_5 (capacitor), com as submatrizes das por $F_{CJ} = 1$, $F_{CL} = -1$, $F_{KB} = -1$, $F_{CZ} = F_{CB} = F_{KJ} = F_{KL} = F_{KR} = F_{KZ} = 0$. Obtemos a relação

$$I_C = I_L - I_J - I_R \quad \rightarrow \quad C\dot{V} = \frac{\Phi - \Phi_x}{L} - I_c \sin \varphi - \frac{V}{R}$$

$$C\ddot{\Phi} + \frac{\dot{\Phi}}{R} + \frac{dU(\Phi)}{d\Phi} = 0 \quad \rightarrow \quad U(\Phi) = -E_J \cos \left(2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \right) + \frac{(\Phi - \Phi_x)^2}{2L}$$

no último passo usamos que $\Phi + \frac{\Phi_0}{2\pi} \varphi = n\Phi_0$, e $\dot{\varphi} = -\frac{2eV}{\hbar}$.

Finalmente, com todas essas definições, pode-se chegar a uma equação de movimento universal para qubits supercondutores dada por [31]

$$\mathbf{C}\ddot{\boldsymbol{\varphi}} = -\mathbf{L}_J^{-1} \sin \boldsymbol{\varphi} - \mathbf{M}_0 \boldsymbol{\varphi} - \frac{2\pi}{\Phi_0} (\bar{\mathbf{N}} * \boldsymbol{\Phi}_x)(t) - \frac{2\pi}{\Phi_0} (\bar{\mathbf{S}} * \mathbf{I}_B)(t) - \mathbf{R}^{-1} \dot{\boldsymbol{\varphi}} - \mathbf{M}_d * \boldsymbol{\varphi}. \quad (\text{A.13})$$

Esta expressão representa um extensão da apresentada em [30], uma vez que $\boldsymbol{\Phi}_x$ and $\mathbf{I}_B$ podem variar no tempo.

Os coeficientes desta equação são dados por

$$\mathbf{M}_d(\omega) = \bar{\mathbf{m}}\bar{\mathbf{L}}_Z(\omega)^{-1}\bar{\mathbf{m}}^T, \quad (\text{A.14})$$

$$\mathbf{M}_0 = \bar{\mathbf{N}}(\omega = 0)\mathbf{F}_{\text{CL}}^T, \quad (\text{A.15})$$

$$\bar{\mathbf{N}}(\omega = 0) = \mathbf{F}_{\text{CL}}\tilde{\mathbf{L}}_{\text{L}}^{-1}\bar{\mathbf{L}}\mathbf{L}_{\text{LL}}^{-1}. \quad (\text{A.16})$$

$$\bar{\mathbf{S}}(\omega = 0) = \mathbf{F}_{\text{CB}} - \mathbf{F}_{\text{CL}}(\mathbf{L}_{\text{LL}}^{-1})^T\bar{\mathbf{F}}_{\text{KL}}^T\tilde{\mathbf{L}}_{\text{K}}^T\mathbf{F}_{\text{KB}}, \quad (\text{A.17})$$

$$\bar{\mathbf{m}} = \mathbf{F}_{\text{CZ}} - \mathbf{F}_{\text{CL}}(\mathbf{L}_{\text{LL}}^{-1})^T\bar{\mathbf{F}}_{\text{KL}}^T\tilde{\mathbf{L}}_{\text{K}}^T\mathbf{F}_{\text{KZ}}. \quad (\text{A.18})$$

Com as definições das em [30]:

$$\bar{\mathbf{L}}_Z = \mathbf{L}_{\text{ZZ}} - \mathbf{L}_{\text{ZL}}\mathbf{L}_{\text{LL}}^{-1}\mathbf{L}_{\text{LZ}}, \quad (\text{A.19})$$

$$\bar{\mathbf{L}}_L(\omega) = \mathbf{L}_{\text{LL}} - \mathbf{L}_{\text{LZ}}\mathbf{L}_{\text{ZZ}}(\omega)^{-1}\mathbf{L}_{\text{ZL}}, \quad (\text{A.20})$$

$$\mathbf{L}_{\text{ZL}} = \mathbf{F}_{\text{KZ}}^T\tilde{\mathbf{L}}_{\text{K}}\bar{\mathbf{F}}_{\text{KL}}, \quad (\text{A.21})$$

$$\mathbf{L}_{\text{LZ}} = \mathbf{F}_{\text{KL}}^T\tilde{\mathbf{L}}_{\text{K}}\mathbf{F}_{\text{KZ}}, \quad (\text{A.22})$$

$$\mathbf{L}_{\text{ZZ}} = \mathbf{L}_Z + \mathbf{F}_{\text{KZ}}^T\tilde{\mathbf{L}}_{\text{K}}\mathbf{F}_{\text{KZ}}, \quad (\text{A.23})$$

$$\mathbf{L}_{\text{LL}} = \bar{\mathbf{L}} + \mathbf{F}_{\text{KL}}^T\tilde{\mathbf{L}}_{\text{K}}\bar{\mathbf{F}}_{\text{KL}}, \quad (\text{A.24})$$

$$\bar{\mathbf{F}}_{\text{CY}} = \mathbf{F}_{\text{CY}} + \mathbf{F}_{\text{CL}}\mathbf{L}^{-1}\mathbf{L}_{\text{LK}}\bar{\mathbf{L}}_{\text{K}}^{-1}\tilde{\mathbf{L}}_{\text{K}}\mathbf{F}_{\text{KY}}, \quad Y = Z, B, \quad (\text{A.25})$$

$$\bar{\mathbf{F}}_{\text{KL}} = \mathbf{F}_{\text{KL}} - \mathbf{L}_{\text{K}}^{-1}\mathbf{L}_{\text{LK}}^T, \quad (\text{A.26})$$

$$\tilde{\mathbf{L}}_{\text{L}} = \bar{\mathbf{L}} \left(\mathbf{1}_{\text{L}} + \mathbf{L}^{-1}\mathbf{L}_{\text{LK}}\bar{\mathbf{L}}_{\text{K}}^{-1}\tilde{\mathbf{L}}_{\text{K}}\bar{\mathbf{F}}_{\text{KL}} \right)^{-1}, \quad (\text{A.27})$$

$$\tilde{\mathbf{L}}_{\text{K}} = \bar{\mathbf{L}}_{\text{K}} \left(\mathbf{1}_{\text{K}} - \mathbf{L}_{\text{K}}\bar{\mathbf{F}}_{\text{KL}}\mathbf{L}^{-1}\mathbf{L}_{\text{LK}}\bar{\mathbf{L}}_{\text{K}}^{-1} \right)^{-1}, \quad (\text{A.28})$$

$$\bar{\mathbf{L}}_{\text{K}} = \mathbf{L}_{\text{K}} - \mathbf{L}_{\text{LK}}^T\mathbf{L}^{-1}\mathbf{L}_{\text{LK}}, \quad (\text{A.29})$$

$$\bar{\mathbf{L}} = \mathbf{L} - \mathbf{L}_{\text{LK}}\mathbf{L}_{\text{K}}^{-1}\mathbf{L}_{\text{LK}}^T. \quad (\text{A.30})$$

As expressões completas para $\bar{\mathbf{S}}$ e $\bar{\mathbf{N}}$ são [31]:

$$\bar{\mathbf{S}}(\omega) = \bar{\mathbf{F}}_{\text{CB}} - \quad (\text{A.31})$$

$$\left[\bar{\mathbf{F}}_{\text{CZ}}\bar{\mathbf{L}}_Z^{-1}(\omega) \left(\mathbf{F}_{\text{KZ}}^T - \mathbf{L}_{\text{ZL}}\mathbf{L}_{\text{LL}}^{-1}\mathbf{F}_{\text{KL}}^T \right) + \mathbf{F}_{\text{CL}}\tilde{\mathbf{L}}_{\text{L}}^{-1}\bar{\mathbf{L}}\bar{\mathbf{L}}_{\text{L}}^{-1} \left(\mathbf{F}_{\text{KL}}^T - \mathbf{L}_{\text{LZ}}\mathbf{L}_{\text{ZZ}}^{-1}(\omega)\mathbf{F}_{\text{KZ}}^T \right) \right] \tilde{\mathbf{L}}_{\text{K}}\mathbf{F}_{\text{KB}},$$

$$\bar{\mathbf{N}}(\omega) = \mathbf{F}_{\text{CL}}\tilde{\mathbf{L}}_{\text{L}}^{-1}\bar{\mathbf{L}}\mathbf{L}_{\text{L}}^{-1}(\omega) - \bar{\mathbf{F}}_{\text{CZ}}\bar{\mathbf{L}}_Z^{-1}(\omega)\mathbf{L}_{\text{ZL}}\mathbf{L}_{\text{LL}}^{-1}. \quad (\text{A.32})$$

A.2 Matriz $\mathbf{L}_c$

Da Eq. (A.19) tiramos que

$$\mathbf{L}_c \equiv \mathbf{L}_{ZL} \mathbf{L}_{LL}^{-1} \mathbf{L}_{LZ} = \mathbf{F}_{KZ}^T \tilde{\mathbf{L}}_K \mathbf{F}_{KZ} - \mathbf{L}_{ZL} \mathbf{L}_{LL}^{-1} \mathbf{L}_{LZ}. \quad (\text{A.33})$$

APÊNDICE B – Integrais dos coeficientes das equações de Bloch-Redfield

Como já comentado no texto principal, para calcular os coeficientes das equações de Bloch-Redfield optamos por primeiro realizar as integrações no tempo. Tais integrais são bem elementares envolvendo integrandos de funções seno e co-seno. Usando a forma apresentada para os elementos de matriz (3.37-3.39), podemos agrupar as integrais em frequência em dois tipos, a saber

$$I_1^{(j)}[y; g(x), t] \equiv \int_0^\infty dx g(x) S_1[y, j; x, t], \quad (\text{B.1})$$

$$I_2^{(j)}[y; g(x), t] \equiv \int_0^\infty dx g(x) S_2[y, j; x, t], \quad (\text{B.2})$$

sendo,

$$S_1[y, j; x, t] \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\sin[(x-y)t]}{x-y} - (-1)^j \frac{\sin[(x+y)t]}{x+y} \right) \quad (\text{B.3})$$

$$S_2[y, j; x, t] \equiv \frac{\sin^2[(x-y)\frac{t}{2}]}{x-y} + (-1)^j \frac{\sin^2[(x+y)\frac{t}{2}]}{x+y}. \quad (\text{B.4})$$

Usando as definições apresentadas, podemos escrever os coeficientes como

$$\begin{aligned} A_x(t) = & -\frac{\cos^2(\phi)}{2\pi} \left(1 - \cos(2\Omega t) \right) I_1^{(0)}[\Omega; J(x), t] \\ & - \left(\frac{\cos^2(\phi) \cos(2\Omega t) + (1 + \sin(\phi))^2}{4\pi} \right) I_1^{(0)}[\Omega + \epsilon_1; J(x), t] \\ & - \left(\frac{\cos^2(\phi) \cos(2\Omega t) + (1 - \sin(\phi))^2}{4\pi} \right) I_1^{(0)}[\Omega - \epsilon_1; J(x), t] \\ & - \frac{\cos^2(\phi)}{2\pi} \sin(2\Omega t) \left(I_2^{(0)}[\Omega; J(x), t] - \frac{1}{2} (I_2^{(0)}[\Omega + \epsilon_1; J(x), t] + I_2^{(0)}[\Omega - \epsilon_1; J(x), t]) \right) \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

$$\begin{aligned}
A_y(t) = & \frac{\sin(2\phi)}{2\pi} \left(\sin(\Omega t) I_1^{(0)}[\Omega; J(x), t] + \cos(\Omega t) I_2^{(0)}[\Omega; J(x), t] \right) \\
& - \frac{\cos(\phi)}{2\pi} \sin(\Omega t) \left((1 + \sin(\phi)) I_1^{(0)}[\Omega + \epsilon_1; J(x), t] - (1 - \sin(\phi)) I_1^{(0)}[\Omega - \epsilon_1; J(x), t] \right) \\
& - \frac{\cos(\phi)}{2\pi} \cos(\Omega t) \left((1 + \sin(\phi)) I_2^{(0)}[\Omega + \epsilon_1; J(x), t] - (1 - \sin(\phi)) I_2^{(0)}[\Omega - \epsilon_1; J(x), t] \right)
\end{aligned} \tag{B.6}$$

$$\begin{aligned}
\Gamma_{xx}(t) = & \frac{\cos^2(\phi)}{2\pi} \left(1 + \cos(2\Omega t) \right) I_1^{(1)}[\Omega; J(x) \coth\left(\frac{\hbar x}{2k_B T}\right), t] \\
& - \left(\frac{\cos^2(\phi) \cos(2\Omega t) - (1 + \sin(\phi))^2}{4\pi} \right) I_1^{(1)}[\Omega + \epsilon_1; J(x) \coth\left(\frac{\hbar x}{2k_B T}\right), t] \\
& - \left(\frac{\cos^2(\phi) \cos(2\Omega t) - (1 - \sin(\phi))^2}{4\pi} \right) I_1^{(1)}[\Omega - \epsilon_1; J(x) \coth\left(\frac{\hbar x}{2k_B T}\right), t] \\
& - \frac{\cos^2(\phi)}{2\pi} \sin(2\Omega t) \left(I_2^{(1)}[\Omega; J(x) \coth(x), t] \right. \\
& \left. - \frac{1}{2} (I_2^{(1)}[\Omega + \epsilon_1; J(x) \coth(x), t] + I_2^{(1)}[\Omega - \epsilon_1; J(x) \coth(x), t]) \right)
\end{aligned} \tag{B.7}$$

$$\begin{aligned}
\Gamma_{xz}(t) = & -\frac{\sin(2\phi)}{2\pi} \left(\cos(\Omega t) I_1^{(1)}[\Omega; J(x) \coth\left(\frac{\hbar x}{2k_B T}\right), t] \right. \\
& \left. - \sin(\Omega t) I_2^{(1)}[\Omega; J(x) \coth\left(\frac{\hbar x}{2k_B T}\right), t] \right) \\
& - \frac{\cos(\phi)}{2\pi} \sin(\Omega t) \left((1 + \sin(\phi)) I_2^{(1)}[\Omega - \epsilon_1; J(x) \coth\left(\frac{\hbar x}{2k_B T}\right), t] \right. \\
& \left. - (1 - \sin(\phi)) I_2^{(1)}[\Omega + \epsilon_1; J(x), t] \right) \\
& - \frac{\cos(\phi)}{2\pi} \cos(\Omega t) \left((1 - \sin(\phi)) I_1^{(1)}[\Omega + \epsilon_1; J(x) \coth\left(\frac{\hbar x}{2k_B T}\right), t] \right. \\
& \left. - (1 + \sin(\phi)) I_2^{(1)}[\Omega - \epsilon_1; J(x) \coth\left(\frac{\hbar x}{2k_B T}\right), t] \right)
\end{aligned} \tag{B.8}$$

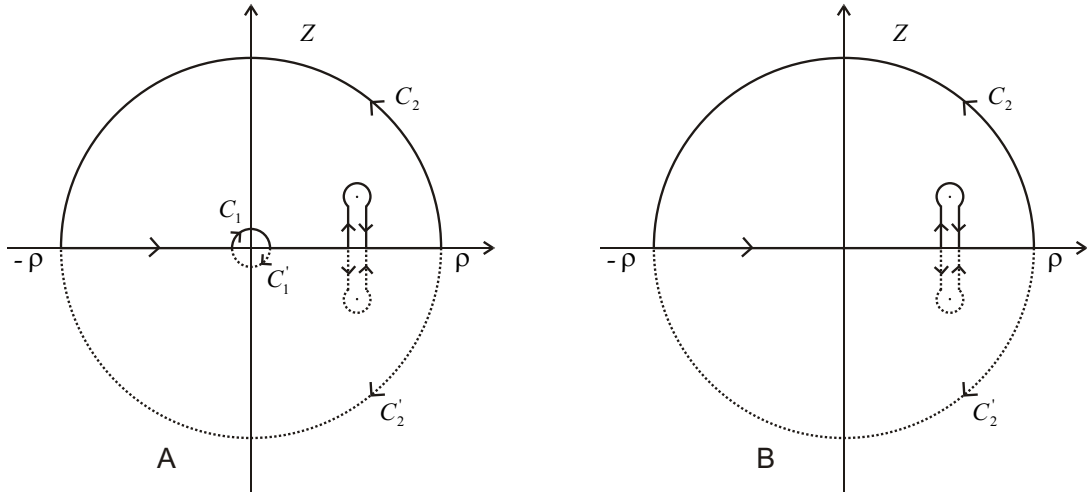


FIGURA B.1 - Contornos no plano complexo utilizados para calcular as integrais em frequência dos coeficientes das equações de Bloch-Redfield.

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{yz}(t) = & -\frac{\cos^2(\phi)}{2\pi} \sin(2\Omega t) \left(I_1^{(1)}[\Omega; J(x) \coth\left(\frac{\hbar x}{2k_B T}\right), t] \right. \\
 & \left. - \frac{1}{2} \left(I_1^{(1)}[\Omega - \epsilon_1; J(x) \coth\left(\frac{\hbar x}{2k_B T}\right), t] + I_1^{(1)}[\Omega + \epsilon_1; J(x) \coth\left(\frac{\hbar x}{2k_B T}\right), t] \right) \right) \\
 & + \frac{\cos^2(\phi)}{2\pi} (1 - \cos(2\Omega t)) I_2^{(1)}[\Omega; J(x) \coth\left(\frac{\hbar x}{2k_B T}\right), t] \\
 & + \left(\frac{\cos^2(\phi) \cos(2\Omega t) + (1 - \sin(\phi))^2}{4\pi} \right) I_2^{(1)}[\Omega - \epsilon_1; J(x) \coth\left(\frac{\hbar x}{2k_B T}\right), t] \\
 & + \left(\frac{\cos^2(\phi) \cos(2\Omega t) + (1 + \sin(\phi))^2}{4\pi} \right) I_2^{(1)}[\Omega + \epsilon_1; J(x) \coth\left(\frac{\hbar x}{2k_B T}\right), t]
 \end{aligned} \tag{B.9}$$

Esta é a forma funcional apresentada em (3.40).

B.1 $I_1^{(j)}[y; g(x), t]$

O cálculo das integrais I_1 passa pelo cálculo de integrais do tipo $\int_0^b g(x) \frac{\sin[t(x \pm y)]}{x \pm y}$, sendo $g(x)$ uma função analítica no eixo dos reais e $0 \leq y < b$. Podemos calculá-las aproximadamente usando o teorema dos resíduos e o lema de Jordan [48]. Passemos à análise de cada integral.

B.1.1 $\int_0^b dx g(x) \frac{\sin[t(x-y)]}{x-y}$

Para esta integral é conveniente fazer a seguinte mudança de variável

$$\begin{aligned} \int_0^b dx g(x) \frac{\sin[t(x-y)]}{x-y} &= \int_{-yt}^{t(b-y)} dx' g\left(\frac{x'}{t} + y\right) \frac{\sin(x')}{x'} \\ &= \int_{-yt}^{yt} dx' g\left(\frac{x'}{t} + y\right) \frac{\sin(x')}{x'} + \int_{yt}^{t(b-y)} dx' g\left(\frac{x'}{t} + y\right) \frac{\sin(x')}{x'} \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

- $\int_{-yt}^{yt} dx g\left(\frac{x}{t} + y\right) \frac{\sin(x)}{x}$: Para o primeiro termo de (B.10) escolhemos os contornos fechados C (semiplano superior) e C' (semiplano inferior) apresentados na Fig. B.1(a). Pelo teorema dos resíduos sabemos que

$$\begin{aligned} \int_C dz g\left(\frac{z}{t} + y\right) \frac{e^{iz}}{z} &= \int_{-\rho}^{0^-} dx g\left(\frac{x}{t} + y\right) \frac{e^{ix}}{x} + \int_{C_1} dz g\left(\frac{z}{t} + y\right) \frac{e^{iz}}{z} \\ &+ \int_{0^+}^{\rho} dx g\left(\frac{x}{t} + y\right) \frac{e^{ix}}{x} + \int_{C_2} dz g\left(\frac{z}{t} + y\right) \frac{e^{iz}}{z} = 2\pi i \text{Res} \left[g(z_0) \frac{e^{it(z_0-y)}}{z_0 - y} \right], \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

onde $\rho = yt$, e z_0 representa os pólos da função $g(z)$ no semiplano superior contidos pelo contorno C . A integral do contorno C_1 é facilmente calculável

$$\int_{C_1} dz g\left(\frac{z}{t} + y\right) \frac{e^{iz}}{z} = \lim_{r \rightarrow 0} \int_{\pi}^0 d\theta g\left(\frac{re^{i\theta}}{t} + y\right) e^{iz} = -i\pi g(y). \quad (\text{B.12})$$

Um fato muito interessante a respeito do contorno C_2 é que o seu raio aumenta com o tempo. Como nesse circuito de integração podemos escrever $z = \rho(\cos(\theta) + i\sin(\theta))$, esperamos que para tempos tais que $t \gg 1/y \rightarrow \rho \gg 1$, as principais contribuições para integral venham dos pontos $\theta \approx 0$ e $\theta \approx \pi$ (supondo que $\lim_{\rho \rightarrow \infty} g(z) \rightarrow 0$). Utilizando esta aproximação passamos a ter

$$\begin{aligned} \int_{C_2} dz g\left(\frac{z}{t} + y\right) \frac{e^{iz}}{z} &= -i \int_0^{\pi} d\theta g(y[1 + e^{i\theta}]) e^{i\rho \cos(\theta)} e^{-\rho \sin(\theta)} \\ &\approx \int_0^{\epsilon} d\theta g(2y) e^{i\rho} e^{-\rho\theta} + \int_{\pi-\epsilon}^{\pi} d\theta g(0) e^{-i\rho} e^{-\rho \sin(\theta)} \\ &= i \{ g(2y) e^{iyt} + g(0) e^{-iyt} \} \frac{1 - e^{-yt\epsilon}}{yt} \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

onde $\epsilon < 1$ é um parâmetro adimensional. No limite de $t \rightarrow \infty$ encontramos que a integral feita sob o contorno C_2 é nula. Sendo exatamente o resultado esperado pelo lema de Jordan.

Deste modo obtemos o resultado aproximado

$$\int_{-yt}^{yt} dx g\left(\frac{x}{t} + y\right) \frac{e^{ix}}{x} \approx i\pi g(y) + 2\pi i \text{Res} \left[g(z_0) \frac{e^{it(z_0-y)}}{(z_0-y)} \right] - i \left\{ g(2y)e^{iyt} + g(0)e^{-iyt} \right\} \frac{(1 - e^{-yt\epsilon})}{yt} \quad (\text{B.14})$$

Procedendo de modo análogo para o semiplano inferior, obtemos então

$$\int_{-yt}^{yt} g\left(\frac{x}{t} + y\right) \frac{\sin(x)}{x} \approx \pi g(y) + \pi \text{Res}^{(I)} \left[g(z_0) \frac{e^{it(z_0-y)}}{(z_0-y)} \right] + \pi \text{Res}^{(I)} \left[g(z_0) \frac{e^{-it(z_0-y)}}{(z_0-y)} \right] - \{g(0) + g(2y)\} \cos(yt) \frac{(1 - e^{-yt\epsilon})}{yt} \quad (\text{B.15})$$

onde $\text{Res}^{(I)}$ indica que apenas os pólos com $|z_0| < 2y$ são considerados no cálculo dos resíduos. Lembrando que o último termo da expressão acima foi calculado aproximadamente considerando-se a hipótese $t \gg 1/y$.

- $\int_{yt}^{t(b-y)} dx g\left(\frac{x}{t} + y\right) \frac{\sin x}{x}$: Para o segundo termo de (B.10) trabalharemos com os contornos apresentados na Fig. B.10(b). Novamente é mais conveniente uma mudança de variável dada por

$$\int_{yt}^{t(b-y)} dx g\left(\frac{x}{t} + y\right) \frac{\sin x}{x} = \int_{-t(\frac{b}{2}-y)}^{t(\frac{b}{2}-y)} g\left(\frac{x}{t} + \frac{b}{2} + y\right) \frac{\sin(x + tb/2)}{x + tb/2}. \quad (\text{B.16})$$

Usando a mesma aproximação anteriormente adotada, encontramos o seguinte resultado aproximado

$$\int_{yt}^{t(b-y)} dx g\left(\frac{x}{t} + y\right) \frac{\sin x}{x} \approx \pi \text{Res}^{(II)} \left[g(z_0) \frac{e^{it(z_0-y)}}{(z_0-y)} \right] + \pi \text{Res}^{(II)} \left[g(z_0) \frac{e^{-it(z_0-y)}}{(z_0-y)} \right] - \left\{ g(b) \frac{\cos[t(b-y)]}{t(b-y)} - g(2y) \frac{\cos(yt)}{yt} \right\} \left(1 - e^{-(b/2-y)\epsilon t} \right) \quad (\text{B.17})$$

onde o resíduo $\text{Res}^{(II)}$ é calculado para os pólos z_0 de $g(z)$ nos quais $2y < |z_0| < b$. O último termo foi calculado sob a hipótese $t \gg 1/(b/2 - y)$.

Assim, somando todos os termos de (B.15-B.17), obtemos

$$\begin{aligned} \int_0^b g(x) \frac{\sin[t(x-y)]}{x-y} &\approx \pi g(y) + \pi \text{Res} \left[g(z_0) \frac{e^{it(z_0+y)}}{(z_0-y)} \right] \\ &+ \pi \text{Res} \left[g(z_0) \frac{e^{-it(z_0-y)}}{(z_0-y)} \right] - \{g(0) + g(2y)\} \cos(yt) \left(\frac{1 - e^{-yt\epsilon}}{yt} \right) \\ &- \left\{ g(b) \frac{\cos[t(b-y)]}{t(b-y)} - g(2y) \frac{\cos(yt)}{yt} \right\} \left(1 - e^{-(b/2-y)\epsilon t} \right), \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

onde o resíduo é calculado para todos os pólos de $g(z)$ tais que $|z_0| < b$ e $\text{Re}z_0 \geq 0$.

$$\text{B.1.2} \quad \int_0^b dx g(x) \frac{\sin[t(x+y)]}{x+y}$$

Trabalhando com a variável

$$\int_0^b dx g(x) \frac{\sin[t(x+y)]}{x+y} = \int_{-b/2}^{b/2} dx' g(x' + b/2) \frac{\sin[t(x' + b/2 + y)]}{x' + b/2 + y}, \quad (\text{B.19})$$

e escolhendo os contornos de integração da Fig. B.1(b), podemos proceder com o cálculo de modo análogo ao da subseção anterior, encontrando assim o resultado final

$$\begin{aligned} \int_0^b g(x) \frac{\sin[t(x+y)]}{x+y} &\approx \pi \text{Res} \left[g(z_0) \frac{e^{it(z_0+y)}}{(z_0-y)} \right] + \pi \text{Res} \left[g(z_0) \frac{e^{-it(z_0-y)}}{(z_0-y)} \right] \\ &\quad - \left\{ g(b) \frac{\cos[t(b-y)]}{t(b-y)} - g(0) \frac{\cos(yt)}{yt} \right\} \left(1 - e^{-(b/2)et} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

onde o resíduo é calculado para todos os pólos de $g(z)$ tais que $|z_0| < b$ e $\text{Re}z_0 \geq 0$.

A Fig. B.2 apresenta os resultados numérico exato e o analítico aproximado desenvolvido nesta seção, para $g(x) = 0.05xe^{-x/20}$ (gráfico à esquerda) e $g(x)$ dado pela função espectral efetiva encontrada para spins de interação spin-órbita, eq. (3.19). Para garantir que $I_1(t \rightarrow 0) \rightarrow 0$ nos cálculos analíticos, multiplicamos os termos oriundos dos contornos C_2 e C'_2 por uma função envelope $(1 - e^{-yt})$ (lembrando que para tais termos, a aproximação adotada deve dar resultados bons apenas para $t \gg 1/y$), e para os demais multiplicamos por $(1 - e^{-t})$. Usamos $y = \Delta\omega_D = 0.0186\omega_D$. Podemos observar que para a função $g(x)$ ôhmica o resultado analítico só é bom para tempos $t\omega_D > 1/\Delta$. Já para o segundo caso, temos uma excelente concordância também para tempos $t\omega_D < 1/\Delta$, isto ocorre porque, ao contrário da função ôhmica, a função espectral efetiva tem pólos no plano complexo que dominam o regime de tempos curtos.

O tempo de vida de um pólo é dado pela sua parte imaginária. Assim, verificamos que no regime de $t > 1/\text{Im}z_0$, a integral $I_1^{(j)}[y; g(x), t]$ converge rapidamente para o valor constante

$$I_1^{(j)}[y; g(x), t \gg 1] \rightarrow \pi g(y) \quad (\text{B.21})$$

B.2 $I_2^{(j)}[y; g(x), t]$

Para I_2 devemos calcular integrais do tipo $\int_0^b dx g(x) \frac{\sin^2[t(x \pm y)]}{x \pm y}$, onde novamente $g(x)$ é assumida uma função analítica no eixo dos reais e $0 \leq y < b$. O cálculo segue um

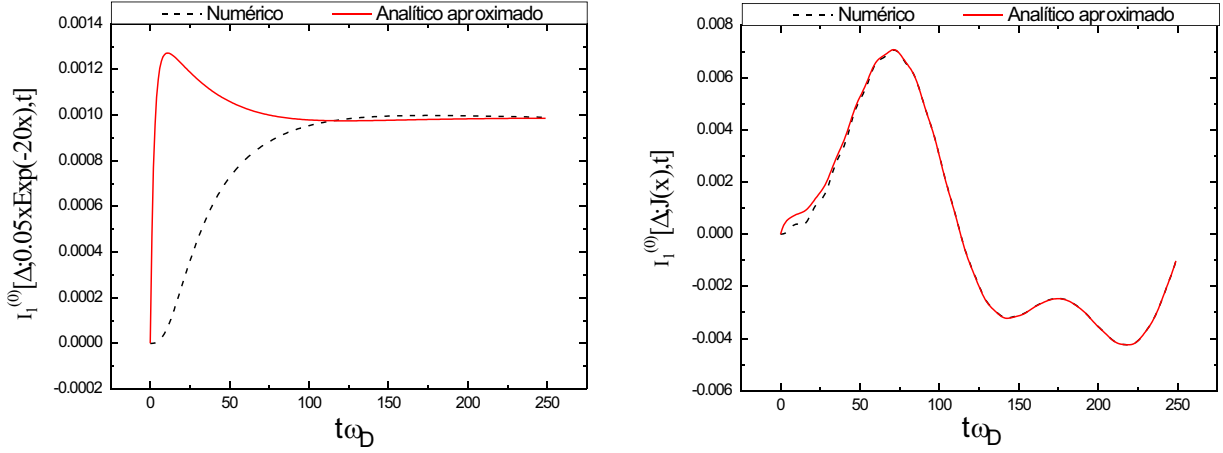


FIGURA B.2 - Integral $I_1^{(0)}$ calculada usando a solução analítica encontrada (curva sólida) e feita numericamente exata (curva tracejada). O gráfico à esquerda apresenta um exemplo de função sem pólos $g(x) = 0.05xe^{-20x}$, e o à direita $g(x)$ é assumida a função espectral efetiva (3.19).

procedimento inteiramente análogo ao das integrais I_1 . Os resultados encontrados foram então

$$\begin{aligned} \int_0^b dx g(x) \frac{\sin^2[t(x-y)]}{x-y} &\approx \frac{1}{2} P \int_0^b dx \frac{g(x)}{(x-y)} - \frac{i\pi}{2} \left\{ \text{Res} \left[g(z_0) \frac{e^{2it(z_0-y)}}{z_0-y} \right] \right. \\ &\quad \left. - \text{Res} \left[g(z_0) \frac{e^{-2it(z_0-y)}}{z_0-y} \right] \right\} - \frac{1}{2} \{ g(2y) - g(0) \} \sin(2yt) \left(\frac{1 - e^{-2yt\epsilon}}{2yt} \right) \\ &\quad - \frac{1}{2} \left\{ g(b) \frac{\sin[2t(b-y)]}{2t(b-y)} - g(2y) \frac{\sin[2yt]}{2ty} \right\} (1 - e^{-t(b-2y)\epsilon}) \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

$$\begin{aligned} \int_0^b dx g(x) \frac{\sin^2[t(x+y)]}{x+y} &\approx \frac{1}{2} \int_0^b dx \frac{g(x)}{2(x+y)} - \frac{i\pi}{2} \left\{ \text{Res} \left[g(z_0) \frac{e^{2it(z_0+y)}}{z_0+y} \right] \right. \\ &\quad \left. + \text{Res} \left[g(z_0) \frac{e^{-2it(z_0+y)}}{z_0+y} \right] \right\} - \frac{1}{2} \left\{ g(b) \frac{\sin[2t(b+y)]}{2t(b+y)} - g(0) \frac{\sin[2yt]}{2ty} \right\} (1 - e^{-tb\epsilon}) \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

A Fig. B.3 apresenta os resultados numérico exato e o analítico aproximado desenvolvido nesta seção, para os mesmos casos expostos na Fig. (B.2). Para garantir que $I_2(t \rightarrow 0) \rightarrow 0$ nos cálculos analíticos, multiplicamos os termos oriundos dos contornos C_2 e C'_2 por uma função envelope $(1 - e^{-yt})$ (lembrando que para tais termos, a aproximação adotada deve dar resultados bons apenas para $t \gg 1/y$), e para os demais multiplicamos por $(1 - e^{-t})$. Novamente, podemos observar que para a função $g(x)$ ôhmica o resultado analítico só é bom para tempos $t\omega_D > 1/\Delta$. Já para o segundo caso, obtemos uma

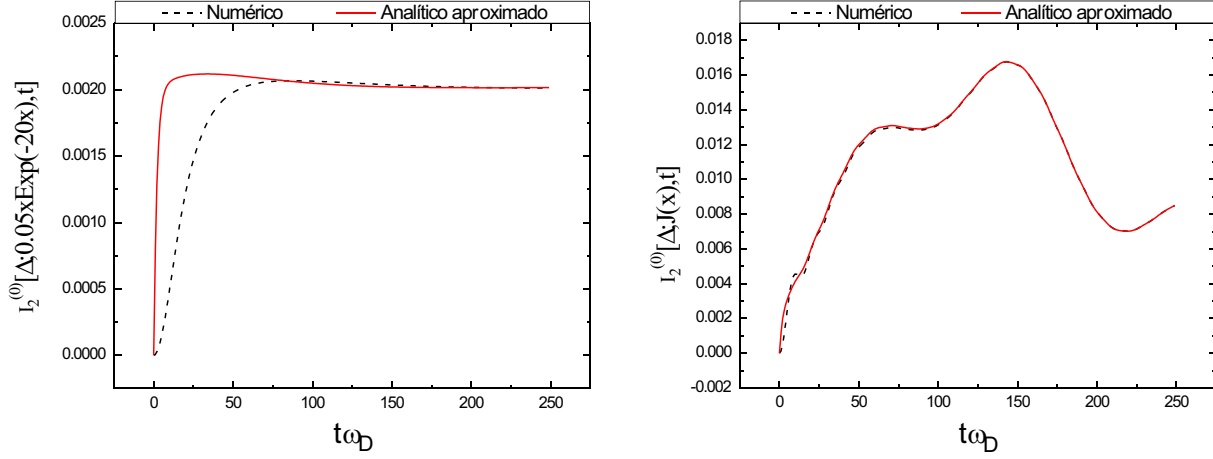


FIGURA B.3 - Integral $I_2^{(0)}$ calculada usando a solução analítica encontrada (curva sólida) e feita numericamente exata (curva tracejada). O gráfico à esquerda apresenta um exemplo de função sem pólos $g(x) = 0.05xe^{-20x}$, e o à direita $g(x)$ é assumida a função espectral efetiva (3.19).

excelente concordância também para tempos $t\omega_D < 1/\Delta$, isto ocorre por conta dos pólos da função espectral efetiva.

Para tempos $t\omega_D > 1/\text{Im}z_0$, a integral $I_2^{(j)}[y; g(x), t]$ converge rapidamente para o valor constante

$$I_2^{(j)}[y; g(x), t \gg 1] \rightarrow \frac{1}{2} \int_0^b dx g(x) P \left[\frac{1}{(x-y)} + (-1)^j \frac{1}{(x+y)} \right] \quad (\text{B.24})$$