
Decoherencia en puntos cuánticos vía fonones ópticos y acústicos

Decoherence in quantum dots via optical and acoustic phonons

J. P. Hoyos-Daza, L. E. Bolívar- Marínez, S. T. Pérez Merchancano *

Departamento de Física, Universidad del Cauca, Calle 5 N° 4-70 Popayán, Cauca, Colombia

Recibido: 3/04/2015; revisado: 14/05/2015; aceptado: 22/06/2015

J. P. Hoyos-Daza, L. E. Bolívar- Marínez, S. T. Pérez-Merchancano: Decoherencia en puntos cuánticos vía fonones ópticos y acústicos. *Jou.Cie.Ing.* **7** (1): 37-42, 2015. ISSN 2145-2628.

Resumen

El surgimiento de técnicas capaces de crecer y manipular nanoestructuras que involucran efectos cuánticos, ha permitido diferentes aplicaciones en switches, cavidades cuánticas, láseres de respuesta en diferentes espectros, memorias cuánticas, etc, donde los puntos cuánticos son los protagonistas. Estas estructuras capaces de almacenar electrones, presentan fenómenos cuánticos como la decoherencia que surge del hecho de que el espín del electrón inmerso en el punto cuántico interactúa con un baño de energía el cual está conformado por los fonones de la red cristalina. En este trabajo se estudia la decoherencia de espín electrónico en puntos cuánticos, a través de la interacción con fonones ópticos y acústicos. El esquema adoptado para el estudio de estos sistemas es el modelo fenomenológico de Caldeira-Leggett, que permite enfocar el problema y mostrar como el espín electrónico actúa como un sistema disipativo debido a las interacciones electrón-fonón, las cuales se presentan como un baño efectivo en la interacción espín órbita electrónica.

Palabras Clave: Puntos cuánticos, decoherencia cuántica, interacción fonón.

Abstract

The rise of new techniques to grow and manipulate nano structures that involve quantum effects has enable the creation of switches, quantum cavities, wide spectrum lasers, quantum memories and a wide array of devices were quantum dots are a principal feature. These structures are able to store electrons and exhibit quantum phenomena such as decoherence that suggests that the spin of the electron immersed into the quantum dot interacts with the energy bath made from the crystalline grid phonons. In this work we have studied the electron spin decoherence in quantum dots by mean of their interaction with optical and acoustic phonons. The approach taken for this study is the Caldeira-Leggett phenomenological model that allow us to show how the electron spin acts as a dissipative system due to the electron-phonon interaction, which presents as an effective bath in the spin orbital interaction.

Keywords: Quantum dots, quantum decoherence, phonon interaction.

* sperez@unicauca.edu.co

1. Introducción

En el ámbito de la nanotecnología y la nanociencia es inevitable referirnos a los llamados puntos cuánticos [1–4]. Estas son estructuras capaces de almacenar electrones, lo cual abre una gran posibilidad tecnológica particularmente en la construcción y desempeño de dispositivos electrónicos avanzados. Para dar uso a estos sistemas es necesario un conocimiento de los fenómenos cuánticos que son importantes, tales como el acoplamiento espín-orbita, interacciones entre los electrones y los iones de la red cristalina, la decoherencia, entre otros.

En mecánica cuántica, el medio que cubre a un sistema cuántico puede “determina” el comportamiento del mismo. Como resultado, los estados propios observables del sistema pierden coherencia y se convierten en sistemas clásicos [5–8]. Los efectos de la decoherencia dependen del acoplamiento entre el sistema cuántico y los grados de libertad del resto del universo donde está inmerso el sistema. Entonces al hablar de decoherencia de espín en puntos cuánticos necesariamente se tratará con el medio del cual hacen parte esos puntos cuánticos. Entretanto, la propuesta de la computación cuántica [9, 10], surge como una posible aplicación, que requiere sistemas de dos niveles preparados a partir de la superposición de estados cuánticos donde el espín electrónico y el espín del núcleo se consideran como la mejor posibilidad para la fabricación de puntos cuánticos capaces de almacenar un único electrón que hará posible el uso del espín electrónico en el campo de la información cuántica. El aprovechamiento del espín como “qubit” (o estado lógico en información cuántica, que pueden tener infinitos grados de libertad, al superponer sus dos niveles base [10]), es preciso que cumpla con un límite de tiempo de coherencia, lo que lleva a indagar específicamente sobre la decoherencia del espín electrónico en estos sistemas.

En este trabajo se estudia la decoherencia de espín electrónico en puntos cuánticos, a través de la interacción con fonones ópticos y acústicos. Aquí la decoherencia surge del hecho de que el espín del electrón inmerso en el punto cuántico interactúa con un baño de energía, el cual está conformado por los fonones de la red cristalina. El acoplamiento ocurre a través de la interacción espín-orbita y en puntos cuánticos “grandes” (cuya frecuencia característica es mucho menor que la frecuencia de los modos ópticos) y el reservorio es de fonones acústicos. Para el caso de puntos cuánticos con frecuencia próxima a la frecuencia de los fonones ópticos, el acoplamiento electrón-fonón óptico será el más

conveniente en los procesos de relajación del electrón y por lo tanto, la decoherencia del espín estará muy ligada a este tipo de interacción. El modelo fenomenológico de Caldeira-Leggett adoptado para el estudio de estos sistemas, permite enfocar el problema, y conduce a la función espectral, la cual se usa para describir la decoherencia del espín electrónico en puntos cuánticos.

2. Marco teórico

Dentro del contexto de sistemas disipativos y en particular de aquellos que involucran la acción de puntos cuánticos acoplados, el introducir la descripción de la dinámica de la decoherencia en términos de la ecuación maestra, juega un papel fundamental debido a que esta produce la evolución temporal de la matriz de densidad reducida $\rho_s(t)$ para el sistema cuántico abiertos que interactúa con un ambiente ϵ . Este sistema s , requiere que primero se determine las dinámicas $\rho(t)$ del sistema total $s+\epsilon$ antes de que se pueda llegar a la descripción reducida a través de la operación traza. Esta tarea no es sencilla y en términos generales, es imposible llevarla a la práctica. En contraste, haciendo uso del formalismo de la ecuación maestra, se puede calcular $\rho_s(t)$ directamente de una expresión de la forma:

$$\rho_s(t) = V(t)\rho_s(0) \quad (1)$$

Donde el operador $V(t)$ es el llamado mapa dinámico que genera la evolución de $\rho_s(t)$. Así mismo, para la descripción del sistema, se imponen ciertas suposiciones sobre los estados y la dinámica del sistema-medio. Tales suposiciones permitirán determinar la evolución temporal aproximada de $\rho_s(t)$, la cual se describe a través de la siguiente ecuación:

$$\frac{d}{dt}\rho_s(t) = L[\rho_s(t)] = -i[H'_s, \rho_s(t)] + D[\rho_s(t)]. \quad (2)$$

Esta ecuación es local en el tiempo, en el sentido que el cambio de $\rho_s(t)$ para un tiempo t depende solamente sobre $\rho_s(t)$ evaluada para dicho tiempo y no para cualquier otro tiempo $t' \neq t$. El súper operador L actúa sobre $\rho_s(t)$ y típicamente depende de los estados iniciales del medio y los diferentes términos del Hamiltoniano. Para expresar la idea física detrás de este súper operador L se considera dos cosas: primero, que en principio una parte unitaria del mismo, se analiza a través del el conmutador de Liouville-Von Neumann teniendo en cuenta el Hamiltoniano H'_s , que de manera general difiere del Hamiltoniano libre sin perturbar H'_s el cual permite el estudio de la evolución de s en ausencia del medio, ya

que la presencia del medio a menudo perturba al Hamiltoniano libre, produciendo una renormalización de los niveles de energía del sistema. Segundo, la otra parte no unitaria $D[\rho_s(t)]$, representa la decoherencia (y posiblemente también disipación) debido al medio.

La ecuación 2 permite la exposición de los sistemas cuánticos abiertos y su decoherencia. En nuestro caso, se hará uso de dos aproximaciones: la aproximación de Born, la cual tiene en cuenta el acoplamiento sistema-medio que es suficientemente débil, debido a que dicho medio es razonablemente grande en comparación al sistema, de esta forma, los cambios del operador de densidad del medio son insignificantes y el estado del sistema-medio permanece aproximadamente en un producto de estado todo el tiempo:

$$\rho(t) \approx \rho_s(t) \otimes \rho_\epsilon \quad (3)$$

Como en nuestro caso, ρ_ϵ aproximadamente constante todo el tiempo, y dado que la aproximación de Markov, establece que los “Efectos de memoria” del medio son insignificantes, en el sentido de que cualquier autocorrelación del ambiente creado por el acoplamiento al sistema decae rápidamente comparado con las escalas de tiempo, el modelo aplicado hasta el momento brinda todas características sobre el cual el estado del sistema varía notablemente.

En nuestro modelo mecánico cuántico, el sistema s tiene un Hamiltoniano propio H_s y su acoplamiento al medio está descrito por el Hamiltoniano de interacción H_{int} , que se puede escribir en la forma diagonal:

$$H_{int} = \sum_{\alpha} S_{\alpha} \otimes E_{\alpha} \quad (4)$$

Por otra parte, la evolución del operador de matriz de densidad reducida esta dado por la ecuación maestra de Born-Markov:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_S(t) = & -i[H_S, \rho_S(t)] \\ & - \sum_{\alpha} \{[S_{\alpha}, B_{\alpha} \rho_S(t)] + [\rho_S(t) C_{\alpha}, S_{\alpha}]\}, \end{aligned} \quad (5)$$

donde los operadores del sistema B_{α} y C_{α} que aparecen en esta ecuación son definidos como:

$$B_{\alpha} \equiv \int_0^{\infty} \sum_{\beta} C_{\alpha\beta}(\tau) S_{\beta}^{(1)}(\tau) d\tau \quad (6)$$

y

$$C_{\alpha} \equiv \int_0^{\infty} \sum_{\beta} C_{\alpha\beta}(-\tau) S_{\beta}^{(1)}(-\tau) d\tau. \quad (7)$$

Aquí, $S_{\beta}^{(1)}(-\tau)$ denota el operador del sistema S_{α} en la representación de interacción. La cantidad $C_{\alpha\beta}(\tau)$ está dada por:

$$C_{\alpha\beta}(\tau) \equiv \langle E_{\alpha}(\tau) E_{\beta} \rangle_{\rho_{\epsilon}}. \quad (8)$$

Donde el promedio es tomado sobre el estado inicial ρ_{ϵ} del medio (recordando que la aproximación de Born dice que ρ_{ϵ} permanece aproximadamente constante todo el tiempo).

Como nuestro sistema en estudio involucra muchas variables debido a la complejidad del medio donde se encuentra el punto cuántico, es importante anotar que cuando se estudian sistemas cuánticos disipativos (como puntos cuánticos acoplados) la dificultad radica en cómo cuantizar sistemas que no están aislados, es decir, que interactúan con el medio que los rodea [11–18]. Este tipo de sistemas no permite la aplicación de la formulación de cuantización canónica. Dicha formulación, es una manera analítica de proceder la cual consiste en el estudio de la dinámica de subsistemas, o sea, una aproximación del punto cuántico en contacto con un reservorio. En nuestro modelo de punto cuántico es factible dividir nuestro análisis en dos clases: primero a través de la representación de Schrödinger, donde la dinámica es descrita en términos de la ecuación maestra para la matriz de densidad reducida u operador densidad, y el segundo a través de la representación de Heisenberg, donde el análisis se realiza a través de la ecuación de Langevin para el conjunto de los operadores importantes del sistema reducido [14]. En el modelo en cuestión, se considerará la representación de Schrödinger y se tomará como referencia el movimiento Browniano cuántico, a partir del cual se obtendrá la ecuación maestra de Born-Markov, con el propósito de estudiar el sistema a través de la teoría de la función de densidad espectral.

3. Discusión y resultados

3.1. Modelo de espín bosón

La energía de confinamiento depende del inverso al cuadrado del tamaño del punto cuántico: entre mayor tamaño, menor la energía de confinamiento, es decir, menor energía de espaciamento entre niveles. Esto lleva a un problema reportado en la literatura, que se conoce como “phonon bottleneck” [11–15] en el cual se reporta escasa dispersión de los modos ópticos. Para que en nuestro modelo tenga lugar el acoplamiento electrón-fonón óptico (LO) es necesario que la energía de confinamiento del electrón corresponda a la energía de los fonones ópticos, se cumpla el principio de con-

servación de la energía y del momento y que en puntos cuánticos, mayores que 25 nm en adelante con energías menores a 50 meV (puntos cuánticos llamado “grandes” ($\omega_0 < \omega_{L0}$)) se pueda estudiar el acoplamiento del electrón con los fonones acústicos, como baño efectivo para el espín.

El Hamiltoniano global del universo compuesto por: el electrón dentro del punto cuántico, el espín del electrón, el campo magnético externo (constante), los modos acústicos, y las formas de interacción de los elementos mencionados es el siguiente:

$$H = H_e + H_{spin} + H_{SO} + H_{AC} + H_{e-AC}. \quad (9)$$

El confinamiento al cual está sujeto el electrón en el punto cuántico y el campo magnético externo definen los autoestados, los cuales se conocen como estados de Fock-Darwin [13]. H_e se define como $H_e = \frac{p^2}{2m_e} + \frac{m_e}{2}\tilde{\omega}^2(x^2 + y^2)$, la interacción del espín con el campo magnético se describe por $H_{Spin} = -\mu \cdot B$, $H_S = -\frac{\hbar}{2}\Delta\sigma_x$ y la interacción espín-orbita será descrita por $H_{so} = \gamma_c \langle K_z^2 \rangle (-\sigma_x K_x + \sigma_y K_y)$.

La forma para el Hamiltoniano de los modos acústicos es:

$$H_{Ac} = \sum_{q\lambda} \omega_{q\lambda} \left(a_{q\lambda}^\dagger a_{q\lambda} + \frac{1}{2} \right) \quad (10)$$

Si se considera que $qr \ll 1$, se puede aplicar la aproximación dipolar, es decir, se restringe el estudio a fonones con comprensibilidad de onda larga. El resultado de la aproximación es:

$$H_{ep} = \sum_{q\lambda} \left(\frac{\hbar}{2NV\rho\omega_{q\lambda}} \right)^{1/2} (1 + iq \cdot r) (a_{q\lambda} + a_{-q\lambda}^\dagger) b_q. \quad (11)$$

En el caso del movimiento Brawniano, los efectos del medio son encapsulados en la función espectral:

$$J(\omega) = n_s \omega_{ph}^{1-s} e^{(-\omega/\omega_c)}. \quad (12)$$

La dinámica que sigue el sistema para cada tipo de acoplamiento se encuentra en la siguiente tabla:

Disipación	s	T	Comportamiento
Sub-ohmica	$0 < s < 1$	$T = 0$	Localizado
		$T \neq 0$	Súper-amortiguado
Óhmica	$s = 1$	$T = 0$	Amortiguado
		$T \neq 0$	Súper-amortiguado
Super-ohmica	$s > 1$	$T = 0$	Sub-amortiguado
		$T = T^*$	Súper-Amortiguado

Tabla 1. Comportamiento de un sistema de dos niveles según el tipo de disipación.

En este modelo de análisis, se llama caso óhmico a $s = 1$; caso súper-ohmico a $s > 1$ y caso sub-ohmico para $0 < s < 1$. Para disipación sub-ohmica el sistema es localizado para temperatura $T = 0$. A temperatura finita se determinó que el proceso de relajación es no coherente. Para disipación óhmica se dieron varios regímenes dependiendo de las constantes del problema y de la temperatura, que se resumen en tres posibles comportamientos: amortiguado, sub-amortiguado, súper-amortiguado o localizado.

La atención en nuestro modelo, se focalizara en el caso súper-ohmico, el cual restringe las posibilidades al caso sub o súper-amortiguado. Un comportamiento súper-amortiguado aparece solamente a partir de una temperatura que depende de la función espectral.

3.2. Función espectral de la interacción con fonones ópticos

En el caso de puntos cuánticos grandes lo suficiente como para que la energía entre niveles sea mucho menor a la energía de los fonones ópticos (en Arsenuro de Galio, GaAs), la posibilidad del acoplamiento no se considera. Sin embargo, cuando se reduce el tamaño del punto cuántico de manera de que dichas energías se aproximen, queda abierta la posibilidad del acoplamiento electrón-fonón óptico como fuente de relajación para el electrón y por lo tanto se puede considerar al electrón acoplado con los modos ópticos [15, 16] (además de los mecanismos de amortiguamiento como los fonones acústicos) como un nuevo baño efectivo para el espín.

Se determinó que solamente existe una forma de interacción electrón-fonón óptico para un electrón localizado en la banda de conducción (de puntos cuánticos de Arsenuro de galio, GaAs), ella es la interacción de Fröhlich.

$$J(\omega) = \frac{\alpha^2}{4i\rho NVL^2} \left[\frac{1}{\omega^2 - \omega_{LO}^2 - 2i\gamma\omega} - \frac{1}{\omega^2 - \omega_{LO}^2 + 2i\gamma\omega} \right] \quad (13)$$

donde, $\alpha = -i \left[\frac{2\pi e^2 \hbar \omega_{LO}^2}{V} \left[\frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right] \right]^{1/2}$ es la constante de acoplamiento de Fröhlich, L^2 el comprimento eléctrico y γ es la constante de amortiguamiento de los fonones ópticos ($\gamma \sim 1.4 \times 10^{11} \text{s}^{-1}$ para el GaAs).

3.3. Función espectral de la interacción con fonones acústicos

A través de los modelos matemáticos anteriormente adoptados se encontró que la función espectral que describe caso específico de $\omega \sim \omega_{LO}$, considerando que la disipación del baño efectivo para el electrón tiene la forma:

$$J(\omega) = \frac{\alpha^2}{4i\rho NVL^2} \left(\frac{\zeta}{\omega_0} \right)^2 \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 \frac{\gamma\omega}{(\omega^2 - \omega_{LO}^2)^2 + 4(\gamma\omega)^2}. \quad (14)$$

Para bajas frecuencias, esta función espectral efectiva corresponde a disipación súper-ohmica, así el sistema presenta nuevamente un comportamiento oscilatorio cuya amplitud decae con el tiempo. En este contexto, se mostró que la rata de amortiguamiento en este caso depende de Δ^3 y el tiempo de decoherencia como Δ^{-3} .

4. Conclusiones

El espín electrónico en puntos cuánticos acoplados actúa como un sistema disipativo debido a las interacciones electrón-fonón (interacción de Fröhlich y la interacción piezoeléctrica), las cuales se presentan como un baño efectivo para el espín al interactuar con la órbita electrónica. Se mostró que en una molécula diatómica constituida por puntos cuánticos grandes (mayores que 25 nm en adelante y energías menores a 50 meV) la principal fuente de decoherencia es la interacción piezoeléctrica (causantes de los fonones acústicos), que por sí misma es una fuente de disipación súper-ohmica para el electrón, esto se traduce en una dinámica sub amortiguada para el espín, dentro de la aproximación dipolar, la cual permite determinar que se retenga información cuántica en base al espín hasta tiempos del orden de

ω^{-5} , resultado óptimo para la transferencia masiva de información.

En los resultados del análisis del electrón y los fonones ópticos (o sea puntos cuánticos pequeños menores a 25 nm y energías mayores a 50 meV) se muestra que un acoplamiento óhmico entre los fonones ópticos y acústicos genera un baño óhmico para el electrón, que corresponde en la aproximación dipolar a la interacción de dos osciladores armónicos bidimensionales desacoplados en las direcciones que es analizado a través de la interacción de Fröhlich. Lo cual se traduce en una dependencia de la función espectral de ω^3 lo que resulta en tiempos del orden de ω^{-3} , esto conduce a un sistema más estable y de más tiempo para la transferencia de información que en el caso anterior.

Dentro del tratamiento fenomenológico dado a las interacciones del electrón con el baño o reservorio, se nota que tanto para puntos cuánticos grandes como para puntos pequeños el modelo de Caldeira- Leggett es apropiado para describir este tipo de sistemas disipativos sin enfascarse en primeros principios y cálculos complicados.

Agradecimientos

Los autores agradecen el soporte parcial dado por la vicerrectoría de investigaciones de la Universidad del Cauca (VRI) en la realización de este trabajo, a través del proyecto con ID 4027.

Referencias

- [1] L Jacak, P Hawrylak, and A Wojs. Quantum dots, 1998.
- [2] Katarzyna Roszak, Łukasz Marcinowski, and Paweł Machnikowski. Decoherence-enhanced quantum measurement of a quantum-dot spin qubit. *Physical Review A*, 91(3):032118, 2015.
- [3] H.E. Caicedo-Ortiz, S.T. Pérez-Merchancano, and E. Santiago-Cortés. Modelando un punto cuántico: una aproximación pedagógica. *Revista mexicana de física E*, 61(1):35–40, 2015.
- [4] H.E. Caicedo-Ortiz and Pérez-Merchancano. Interacción espín-órbita en átomos artificiales. *Jou.Cie.Ing.*, 4(1):54–58, Agosto 2012.
- [5] Wojciech Zurek. The environment surrounding a quantum system can, in effect, monitor some of the system's observables. as a result, the eigenstates of those observables continuously decohere and can behave like classical states. wojciech h. zurek. *PHYSICS TODAY*, page 36, 1991.
- [6] Wojciech H Zurek. Environment-induced superselection rules. *Physical Review D*, 26(8):1862, 1982.
- [7] H Dieter Zeh. On the interpretation of measurement in quantum theory. *Foundations of Physics*, 1(1):69–76, 1970.
- [8] Maximilian A Schlosshauer. *Decoherence: and the quantum-to-classical transition*. Springer Science & Business Media, 2007.

- [9] Daniel Loss and David P DiVincenzo. Quantum computation with quantum dots. *Physical Review A*, 57(1):120, 1998.
- [10] David P DiVincenzo. Two-bit gates are universal for quantum computation. *Physical Review A*, 51(2):1015, 1995.
- [11] AO Caldeira and AJ Leggett. Influence of damping on quantum interference: An exactly soluble model. *Physical Review A*, 31(2):1059, 1985.
- [12] AO Caldeira and AJ Leggett. *Physica (amsterdam)* 121a, 587 (1983). *Phys. Rev. A*, 31:1059, 1985.
- [13] AO Caldeira. Interference and coherent tunnelling in dissipative quantum systems. *Helvetica Physica Acta*, 61(5):611–621, 1988.
- [14] Anthony J Leggett, SDAFMGA Chakravarty, AT Dorsey, Matthew PA Fisher, Anupam Garg, and W Zwerger. Dynamics of the dissipative two-state system. *Reviews of Modern Physics*, 59(1):1, 1987.
- [15] Amir O Caldeira. *An introduction to macroscopic quantum phenomena and quantum dissipation*. Cambridge University Press, 2014.
- [16] Junji Urayama, Theodore B Norris, Jasprit Singh, and Pallab Bhattacharya. Observation of phonon bottleneck in quantum dot electronic relaxation. *Physical Review Letters*, 86(21):4930, 2001.
- [17] P Kaer and Jesper Mørk. Decoherence in semiconductor cavity qed systems due to phonon couplings. *Physical Review B*, 90(3):035312, 2014.
- [18] Fernando Domínguez, Sigmund Kohler, and Gloria Platero. Phonon-mediated decoherence in triple quantum dot interferometers. *Physical Review B*, 83(23):235319, 2011.