

Scuola di Scienze
Dipartimento di Fisica e Astronomia
Corso di Laurea in Fisica

Il grafene e le sue applicazioni in computazione quantistica

Relatore:

**Dott. Cristian Degli Esposti
Boschi**

Presentata da:

Lia Giulia D'Amico

Sommario

Il grafene è un materiale estremamente promettente per lo sviluppo di nano-dispositivi e nano-strutture, date le sue sorprendenti proprietà elettriche e strutturali. In questo lavoro è stata studiata la realizzazione di un sistema per la computazione quantistica con un doppio quantum dot ibrido spin-valle, adoperando *Graphene Nanoribbons* con *armchair edges* (A-GNRs).

Nel primo capitolo vengono esposte le proprietà strutturali del reticolo esagonale del grafene e le proprietà elettriche, derivate dalla particolare struttura a bande di uno strato isolato di grafene. Vengono inoltre approfondite le due tipologie principali di GNRs, con *zigzag* o *armchair edges*.

Nel secondo capitolo viene introdotta la teoria alla base della computazione quantistica, definendo quali siano i criteri per ottenere la computazione universale.

Nel terzo capitolo si affronta il problema dell'effettiva realizzazione fisica di dispositivi per la computazione quantistica. In particolare viene mostrata la possibile implementazione di un quantum register, ovvero un sistema simile al classico shift register, ma con proprietà quantistiche, formato da doppi quantum dots (DQDs) ibridi. L'interesse è focalizzato sul realizzare un set universale di *single-qubit gates* e *two-qubit gates* per i DQDs, sfruttando un materiale come il grafene, in cui è possibile utilizzare come grado di libertà quello di valle, oltre quello di spin. Vengono mostrati i principali punti di forza dei DQDs con A-GNRs per la realizzazione di questa categoria di dispositivi e le fonti di rumore, nocive per la computazione quantistica.

Indice

Indice	ii
1 Proprietà del grafene	1
1.1 Reticolo cristallino	2
1.1.1 Struttura cristallina del grafene	6
1.2 Struttura elettronica	7
1.2.1 Approssimazione di tight-binding	8
1.2.2 Metodo tight-binding nel grafene	10
1.3 Proprietà elettriche del grafene	12
1.3.1 Chiralità degli elettroni	13
1.3.2 Confinamento e paradosso di Klein	16
1.3.3 Grado di libertà di valle	17
1.4 Graphene Nanoribbons	19
2 Introduzione alla computazione quantistica	22
2.1 Qubit	23
2.1.1 Principio di sovrapposizione e <i>entanglement</i>	25
2.1.2 Operatore densità e definizione dello stato misto	27
2.2 Porte logiche quantistiche	28
2.2.1 Operazioni ad un qubit	28
2.2.2 Operazioni a due qubit	29
2.2.3 Universalità	31
3 Computazione quantistica ibrida spin-valle	34
3.1 Realizzazione fisica dei quantum computer	34
3.1.1 Singolo e doppio quantum dot	35

3.2 Doppio quantum-dot ibrido spin-valle	36
3.2.1 Implementazione di operazioni logiche quantistiche nel quantum register	37
3.2.2 Modello di Hubbard per la descrizione di doppi quantum-dot ibridi spin-valle	39
3.3 Utilizzo del grafene per la realizzazione di QD	44
Conclusioni	48
A Seconda quantizzazione	50
B Operatore densità	53
Bibliografia	55

Capitolo 1

Proprietà del grafene

Il carbonio è l'elemento fondamentale della chimica organica e si presenta in un numero elevato di differenti strutture e forme, grazie alla flessibilità dei suoi legami, e ognuna di queste differenti strutture mostra peculiari proprietà fisiche, principalmente dovute alla loro dimensionalità. La particolarità di poter esistere in differenti forme viene chiamata allotropia.

Il grafene è uno dei più importanti allotropi del carbonio: è formato da atomi di carbonio disposti in un reticolo a nido d'ape bidimensionale.

Dal momento che la configurazione elettronica del carbonio è $1s^2 2s^2 2p^2$ si verifica l'ibridazione di un orbitale $2s$ con due orbitali $2p$ e si ottengono tre orbitali sp^2 , i quali si dispongono sullo stesso piano e permettono la formazione di legami σ tra gli atomi di carbonio; in questo modo si realizza la tipica struttura a nido d'ape in cui ogni atomo è legato ad altri tre con una distanza interatomica $a = 1.42 \text{ \AA}$. I legami σ sono responsabili della robustezza del reticolo.

Il restante orbitale $2p$ si dispone lungo la direzione ortogonale al piano in cui si trovano gli orbitali sp^2 e può formare legami π . Si introduce il concetto di legami *non-localizzati* [4]: a causa della simmetria della struttura esagonale del reticolo non vi è un modo unico di accoppiare gli orbitali $2p$ rimanenti, formando dei legami π localizzati, ma è possibile rappresentare ogni elettrone come se fosse in moto in un potenziale dovuto a tutti e sei gli atomi di carbonio, formando legami π *non-localizzati*.

Il grafene è stato prodotto in laboratorio soltanto nel 2004 [18] e prima di questa scoperta si credeva che fosse impossibile ottenerlo isolato. Tuttavia alcuni allotropi del carbonio si possono pensare come ottenuti a partire da uno o più piani di grafene,

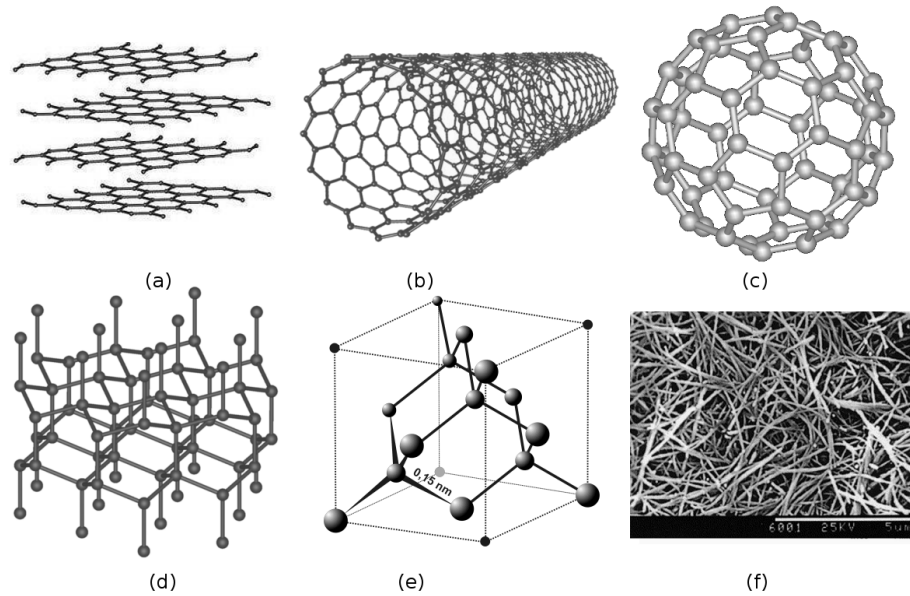


Figura 1.1: Struttura degli allotropi del carbonio: (a) grafite formata da strati di grafene impilati, (b) nanotubi di carbonio, (c) fullerene, (d) lonsdaleite, (e) diamante, (f) nanorod di carbonio.

opportunamente modificati (Fig.1.1): impilando diversi strati di grafene otteniamo la grafite, in questa struttura a tre dimensioni gli strati sono debolmente accoppiati dalle forze di van der Waals; arrotolando lo strato di grafene lungo una data direzione e riconnettendo i legami del carbonio otteniamo i nanotubi in carbonio, con struttura cilindrica; inserendo dei pentagoni all'interno del reticolo lo strato di grafene si avvolge a formare una sfera e si ottengono i fullereni.

Infine citiamo alcune strutture in carbonio che non sono concettualmente ottenibili a partire da uno strato di grafene: diamante e lonsdaleite sono due allotropi del carbonio; i nanorods di carbonio sono particelle allungate che misurano dai 10 nm ai 120 nm [30].

1.1 Reticolo cristallino

In generale la struttura di un materiale cristallino, come il grafene, può essere descritta adoperando il *reticolo di Bravais*, che specifica l'arrangiamento periodico con il quale sono disposte le unità ripetute nel cristallo; queste unità possono essere atomi, gruppi di atomi, molecole, ioni, *etc...* Adoperando questo strumento matematico non ci

si cura della natura delle unità del cristallo, ma solamente della disposizione periodica all'interno del reticolo.

Il reticolo di Bravais è definito in modo equivalente come [3]:

- un arrangiamento di punti discreti che, indipendentemente da quale punto del reticolo venga osservato, appare esattamente con la stessa forma e orientazione;
- il reticolo formato da tutti i punti con vettore posizione \mathbf{R} nella forma

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, \quad (1.1)$$

dove \mathbf{a}_i ($i=1,2,3$) è una terna di vettori non appartenenti allo stesso piano e n_i sono numeri interi. La base formata dai vettori \mathbf{a}_i , detti *vettori primitivi*, genera il reticolo.

Al fine di definire un reticolo di Bravais non è sufficiente avere un insieme di punti disposti periodicamente, ma è necessario avere anche la stessa orientazione. Come esempio esaminiamo una struttura a nido d'ape: se consideriamo i vertici degli esagoni, individuati da vettori coincidenti con i lati, si nota che l'arrangiamento dei punti è identico soltanto se il piano viene ruotato di 180° ogni volta che ci spostiamo, sebbene le relazioni strutturali siano le stesse; di conseguenza i vertici degli esagoni definiti da tali vettori di base non sono punti di un reticolo di Bravais.

Reticolo reciproco

Il reticolo reciproco è definito come l'insieme dei vettori d'onda \mathbf{k} di onde piane nella forma $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ che hanno la periodicità di un dato reticolo di Bravais; la relazione che lega il reticolo di Bravais con il suo reciproco è la seguente

$$e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (1.2)$$

la quale è soddisfatta per ogni \mathbf{r} e per ogni \mathbf{R} del reticolo di Bravais considerato. Quindi si può affermare che il reticolo reciproco è formato da quei vettori d'onda \mathbf{k} tali che

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = 1, \quad \forall \mathbf{R}. \quad (1.3)$$

Si può dimostrare che il reticolo reciproco è a sua volta un reticolo di Bravais.

Se consideriamo il reticolo diretto definito da Eq.(1.1), allora i vettori primitivi del

reticolo reciproco sono

$$\begin{aligned}\mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \\ \mathbf{b}_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \\ \mathbf{b}_3 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)},\end{aligned}\tag{1.4}$$

ovvero i vettori tali che $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_i = 2\pi\delta_{ij}$, dove δ_{ij} è la delta di Kronecker. Allora possiamo definire il reticolo reciproco come:

$$\mathbf{G} = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2 + m_3\mathbf{b}_3,\tag{1.5}$$

dove m_1 , m_2 e m_3 sono coefficienti interi.

Con questa definizione si ha: $\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi(n_1m_1 + n_2m_2 + n_3m_3)$.

La definizione del reticolo reciproco deriva dallo studio del fenomeno della diffrazione nei cristalli. Adoperiamo in questo contesto la formulazione di Laue, la quale prevede che ciascuno dei siti atomici irradia la radiazione incidente con la stessa frequenza in tutte le direzioni; si osservano quindi picchi di diffrazione solo nelle direzioni e con lunghezze d'onda per le quali i raggi diffratti dai punti del reticolo producono interferenza costruttiva [3].

Consideriamo due siti reticolari, distanti \mathbf{d} , su cui incide un raggio X con vettore d'onda \mathbf{k} e lunghezza d'onda λ ; si avrà un raggio diffratto con vettore d'onda \mathbf{k}' se la differenza di cammino ottico è un numero intero della lunghezza d'onda incidente. Se le direzioni di diffrazione sono \mathbf{n} e \mathbf{n}' , allora i vettori d'onda sono dati da:

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi\mathbf{n}}{\lambda}, \quad \mathbf{k}' = \frac{2\pi\mathbf{n}'}{\lambda}.\tag{1.6}$$

La differenza di cammino ottico sarà quindi data da un multiplo intero della lunghezza d'onda della radiazione incidente e si avranno le seguenti relazioni:

$$\mathbf{d} \cdot (\mathbf{n} - \mathbf{n}') = m\lambda \quad \mathbf{d} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2\pi m,\tag{1.7}$$

dove m è un numero intero.

Se consideriamo più di due siti reticolari, i quali sono individuati dal vettore del reticolo di Bravais \mathbf{R} in Eq.(1.1), allora la condizione di interferenza costruttiva in Eq.(1.7) vale per ogni vettore \mathbf{d} che è vettore del reticolo di Bravais:

$$\mathbf{R} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2\pi m.\tag{1.8}$$

La condizione di Laue per l'interferenza costruttiva si ottiene riscrivendo l'equazione precedente come $e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}} = 1$, valida per ogni \mathbf{R} del reticolo reciproco e definendo il vettore d'onda $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$; se questo vettore \mathbf{K} è un vettore del reticolo reciproco, ovvero soddisfa Eq.(1.3), allora si ha interferenza costruttiva.

Cella primitiva e unitaria

La cella primitiva tridimensionale è il volume che contiene un solo punto del reticolo e riempie completamente lo spazio attraverso le sue traslazioni, senza lasciare vacanze e senza che vi siano sovrapposizioni [3]. Per un dato reticolo di Bravais non vi è un'unica scelta per la cella primitiva. La cella unitaria, o cella non primitiva, è il volume che riempie tutto lo spazio attraverso sue traslazioni, ma contiene più di un punto appartenente al reticolo di Bravais.

La scelta più comune per la cella primitiva è la cella di Wigner-Seitz, ovvero la regione di spazio, costruita intorno ad un nodo reticolare del reticolo di Bravais, formata da quei punti che sono più vicini a quel nodo rispetto a qualunque altro. Questa cella viene ottenuta bisecando con un piano ogni linea che connette un punto del reticolo ai suoi primi vicini e successivamente prendendo il più piccolo poliedro che contiene il punto. Se adoperiamo la stessa procedura nello spazio reciproco otteniamo la prima zona di Brillouin.

La prima zona di Brillouin è definita come il luogo dei punti nello spazio reciproco per i quali non si ha alcun piano di Bragg tra questi e l'origine del reticolo; in pratica si ottiene considerando i coefficienti che definiscono il reticolo reciproco in Eq.(1.5) nell'intervallo $0 \leq m_1, m_2 < 1$.

Senza entrare nei dettagli tecnici definiamo i piani di Bragg nel seguente modo [31]: ogni vettore d'onda \mathbf{k} che dall'origine del reticolo viene tracciato fino ad un punto che appartiene al piano di Bragg soddisfa la condizione di diffrazione di Bragg $\lambda = 2d \sin \theta$, dove λ è la lunghezza d'onda della radiazione incidente, d è la distanza interplanare tra due piani di diffrazione e θ è l'angolo tra la radiazione incidente e il piano di diffrazione. Le successive zone di Brillouin si ottengono a partire dalla precedente ripetendo il procedimento di costruzione della cella di Wigner-Seitz nel reticolo reciproco. Ogni zona contiene ogni singolo punto che sia fisicamente distinguibile e tutte le zone hanno lo stesso volume, o area nel caso bidimensionale. Questa proprietà è dovuta alla periodi-

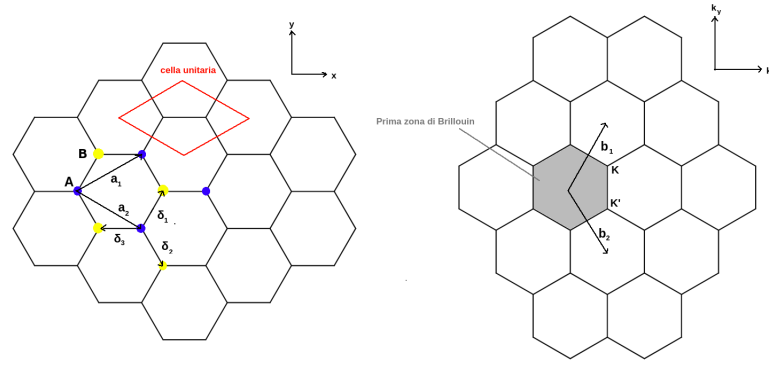


Figura 1.2: Reticolo cristallino del grafene. A sinistra, nello spazio reale, i due sotto-reticoli A (blu) e B (giallo), la cella unitaria (rosso), i vettori di base (\mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2) e i vettori primi vicini ($\delta_1, \delta_2, \delta_3$). A destra, nello spazio reciproco, la prima zona di Brillouin con indicati i punti di Dirac \mathbf{K} e \mathbf{K}' e i vettori di base del reticolo reciproco (\mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2).

cità del reticolo, a causa della quale per ogni punto fuori dalla prima zona di Brillouin esiste un vettore unico del reticolo reciproco che trasla quel punto dentro la prima zona di Brillouin [31].

Ai fini della nostra trattazione identificare la prima zona di Brillouin ci permetterà di definire le funzioni d'onda degli elettroni nel grafene tramite la definizione di onde piane di Bloch con vettori d'onda appartenenti alla prima zona di Brillouin. Potremo quindi ridurre lo studio della struttura a bande energetiche di tutto il reticolo bidimensionale alla sola trattazione in questa prima zona del reticolo reciproco.

1.1.1 Struttura cristallina del grafene

Il grafene può essere descritto con un reticolo bidimensionale, in cui la cella unitaria è composta da due atomi di carbonio non equivalenti, i quali appartengono a due sotto-reticoli differenti A e B e l'uno appare ruotato di π rispetto all'altro; i due sotto-reticoli A e B sono triangolari e si compenetrano per formare la struttura a nido d'ape (vedi Fig.1.2).

Definiamo i vettori primi vicini δ_1 , δ_2 e δ_3 con i quali, a partire da uno dei due

sotto-reticoli, si individuano i tre atomi primi vicini appartenenti all'altro sotto-reticolo:

$$\begin{aligned}\delta_1 &= \frac{a}{2} (1, \sqrt{3}), \\ \delta_2 &= \frac{a}{2} (1, -\sqrt{3}), \\ \delta_3 &= \frac{a}{2} (-1, 0),\end{aligned}\tag{1.9}$$

dove a è pari alla distanza carbonio-carbonio (≈ 1.42 Å) [7].

I vettori primitivi del reticolo di Bravais hanno allora la seguente espressione:

$$\mathbf{a}_1 = \delta_1 - \delta_2 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}), \quad \mathbf{a}_2 = \delta_2 - \delta_3 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}).\tag{1.10}$$

Se assumiamo come origine della cella unitaria $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2$, allora l'altro atomo si troverà in $\mathbf{R}' = \mathbf{R} + \frac{1}{3}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$.

I vettori del reticolo reciproco si ottengono tramite Eq.(1.4):

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}).\tag{1.11}$$

La prima zona di Brillouin è definita da:

$$\mathbf{k} = k_1\mathbf{b}_1 + k_2\mathbf{b}_2, \quad 0 \leq k_{1,2} < 1.\tag{1.12}$$

In questo caso è importante ricavare le posizioni nello spazio dei momenti dei punti \mathbf{K} e \mathbf{K}' , ovvero i due punti che sono ai vertici della prima zona di Brillouin, denominati punti di Dirac:

$$\mathbf{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right), \quad \mathbf{K}' = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right).\tag{1.13}$$

Il reticolo di Bravais, il reticolo reciproco e la prima zona di Brillouin sono mostrati in Fig.(1.2).

1.2 Struttura elettronica

La struttura elettronica del grafene si può ricavare adoperando il formalismo della seconda quantizzazione, il quale si basa sull'utilizzo dei cosiddetti *operatori ladder* e permette di rappresentare in modo compatto lo spazio delle eccitazioni di un sistema; gli operatori ladder hanno proprietà codificate in un insieme di regole di commutazione, tramite cui non è necessario conoscere i dettagli della rappresentazione esplicita dello

spazio di Hilbert degli stati [19].

Il formalismo della seconda quantizzazione risolve alcuni problemi del formalismo della prima quantizzazione, ovvero permette di trattare problemi in cui il numero di particelle non è fissato e prevede la possibilità che si crei o si distrugga una particella in una data posizione e istante.

Utilizziamo quindi il formalismo della seconda quantizzazione, esposto in Appendice A, e il metodo tight-binding per ricavare la struttura energetica a bande per gli elettroni negli orbitali $2p_z$ del grafene.

1.2.1 Approssimazione di tight-binding

L'approssimazione di *tight-binding* viene applicata nel caso in cui gli elettroni possono essere considerati come fortemente legati agli ioni del reticolo. Questa condizione si ha nel limite quasi atomico [19]: gli ioni del reticolo cristallino sono separati da una distanza maggiore del tipico raggio di Bohr e quindi la funzione d'onda degli elettroni è concentrata sui siti reticolari.

L'approssimazione che ci avviciniamo ad applicare è quindi opposta all'approssimazione di elettroni praticamente liberi che si ha nei metalli; in questo caso la dinamica degli elettroni di conduzione è sostanzialmente priva di interazioni tra elettroni e tra un elettrone e lo ione del reticolo.

Limitiamoci innanzitutto alla dinamica degli elettroni leggeri, il cui moto è molto più veloce del moto dei nuclei, e applichiamo l'approssimazione di Born-Oppenheimer, in cui si considerano i nuclei come praticamente fermi.

Descriviamo il sistema con una dinamica puramente elettronica:

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}_{ee} \quad (1.14)$$

dove abbiamo definito due Hamiltoniane, una di singola particella e una di interazione tra gli elettroni (a due corpi):

$$\widehat{H}_0 = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \widehat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] \widehat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}), \quad (1.15)$$

$$\widehat{V}_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \widehat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \widehat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \widehat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \widehat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (1.16)$$

dove il potenziale di singola particella $V(\mathbf{r})$ è dato dalla somma di tutte le interazioni dell'elettrone con gli ioni, le cui coordinate sono fisse:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_I v_{ei}(\mathbf{R}_I - \mathbf{r}).$$

Si usa quindi un campo quantistico fermionico $\hat{\psi}_\sigma$ con un indice di spin σ per l'elettrone ($\sigma = \uparrow, \downarrow$), il quale non viene alterato dalle operazioni di creazione e distruzione nelle posizioni \mathbf{r} e \mathbf{r}' .

In generale gli autostati dell'Hamiltoniana di singola particella in un solido cristallino sono espressi nella forma di onde di Bloch:

$$\psi_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}), \quad (1.17)$$

dove \mathbf{k} è il vettore impulso cristallino variabile nella zona di Brillouin e n indica eventuali numeri quantici che caratterizzano le diverse bande elettroniche. Questa particolare forma degli autostati riflette la periodicità dell'Hamiltoniana e quindi della struttura degli ioni nel solido, infatti la funzione $u_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})$ ha la stessa periodicità della struttura cristallina.

Definiamo allora una base di stati localizzati trasformando la base degli stati di Bloch in una base di stati di Wannier:

$$|\phi_{\mathbf{R}n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\psi_{\mathbf{k}n}\rangle, \quad (1.18)$$

$$|\psi_{\mathbf{k}n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{R}} e^{+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\phi_{\mathbf{R}n}\rangle, \quad (1.19)$$

dove \mathbf{R} denota i punti del reticolo di Bravais, \mathbf{k} varia in una zona di Brillouin (Eq.1.12) e N_c è il numero di celle unitarie del reticolo.

Usando Eq.(1.17) e sfruttando la periodicità delle onde di Bloch otteniamo:

$$\phi_{\mathbf{R}n} = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}} e^{+i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{R})} u_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = w_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad (1.20)$$

e di conseguenza le funzioni di Wannier si ottengono traslando le funzioni d'onda riferite a un sito assunto come origine:

$$w_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}} e^{+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}). \quad (1.21)$$

Le funzioni di Wannier diventano orbitali atomici centrati in \mathbf{R} quando le interazioni interatomiche sono praticamente nulle, ovvero quando il potenziale $V(\mathbf{r})$ è dato dalla

sovrapposizione di potenziali atomici indipendenti. Gli stati ottenuti sono degeneri tra loro con degenerazione pari a N_c e con energia pari a quella di singola particella.

In un solido gli N_c livelli si separano e si ha quindi uno spettro energetico a bande, poiché le interazioni interatomiche non sono trascurabili.

Per gli stati di singola particella, usando le funzioni di Wannier come base, otteniamo l'Hamiltoniana nella forma:

$$\widehat{H}_0 = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}, \quad (1.22)$$

dove t_{ij} è l'elemento di matrice tra gli stati di Wannier, $c_{i\sigma}^\dagger$ è l'operatore di creazione di un elettrone nel sito \mathbf{R}_i del reticolo con spin σ e $c_{j\sigma}$ è l'operatore di distruzione di un elettrone con stesso spin σ , ma nel sito reticolare \mathbf{R}_j .

Nell'approssimazione di tight-binding gli elementi di matrice non nulli sono solitamente pochi e quindi questo metodo risulta particolarmente vantaggioso per ricavare gli autovalori dell'energia di un solido cristallino; se per esempio si considera il caso di atomi isolati si ha $t_{ij} \propto \delta_{ij}$.

1.2.2 Metodo tight-binding nel grafene

Identifichiamo i due sotto-reticoli A e B come mostrato in Fig.(1.2) e definiamo i parametri t come l'energia che deve avere un elettrone per saltare da un atomo vicino all'altro tra differenti sotto-reticoli ($\approx 2.8eV$ [7]) e t' come l'energia per saltare da un atomo all'altro all'interno dello stesso sotto-reticolo.

L'Hamiltoniana in approssimazione di tight-binding per gli elettroni negli orbitali $2p_z$ del grafene deriva dall'espressione generale in Eq.(1.22) e ha la forma di una Hamiltoniana di singola particella:

$$\begin{aligned} \widehat{H}_0 = & -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \left(a_{\sigma,i}^\dagger b_{\sigma,j} + b_{\sigma,j}^\dagger a_{\sigma,i} \right) \\ & -t' \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \left(a_{\sigma,i}^\dagger a_{\sigma,j} + a_{\sigma,j}^\dagger a_{\sigma,i} + b_{\sigma,i}^\dagger b_{\sigma,j} + b_{\sigma,j}^\dagger b_{\sigma,i} \right), \end{aligned} \quad (1.23)$$

dove gli operatori a_σ^\dagger e b_σ^\dagger creano un elettrone nell'orbitale $2p_z$ con spin σ in un sito i o j del sotto-reticolo A e B rispettivamente, analogamente gli operatori a_σ e b_σ distruggono un elettrone; le parentesi angolari indicano le coppie di atomi primi vicini, contati una volta sola.

Limitiamoci ora al caso in cui il parametro t' sia zero. L'elettrone che si trova nell'origine $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2$ (vedi Eq.1.10) della cella unitaria interagisce solamente con l'elettrone in $\mathbf{R}' = \mathbf{R} + \frac{1}{3}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$ e con i due elettroni nelle celle precedenti in $(\mathbf{R} - \mathbf{a}_1)$ e in $(\mathbf{R} - \mathbf{a}_2)$, di conseguenza possiamo riscrivere l'Hamiltoniana in (1.23):

$$\begin{aligned} \widehat{H}_0 = -t \sum_{\mathbf{R}\sigma} a_\sigma^\dagger(\mathbf{R})b_\sigma(\mathbf{R}) + a_\sigma^\dagger(\mathbf{R})b_\sigma(\mathbf{R} - \mathbf{a}_1) + a_\sigma^\dagger(\mathbf{R})b_\sigma(\mathbf{R} - \mathbf{a}_2) \\ + b_\sigma^\dagger(\mathbf{R})a_\sigma(\mathbf{R}) + b_\sigma^\dagger(\mathbf{R} - \mathbf{a}_1)a_\sigma(\mathbf{R}) + b_\sigma^\dagger(\mathbf{R} - \mathbf{a}_2)a_\sigma(\mathbf{R}), \end{aligned} \quad (1.24)$$

A questo punto possiamo fare la trasformata di Fourier discreta sui siti reticolari degli operatori di creazione e di distruzione nella prima zona di Brillouin:

$$\begin{aligned} a_\sigma^\dagger(\mathbf{R}) &= \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}} e^{+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \tilde{a}_\sigma^\dagger(\mathbf{k}), & \tilde{a}_\sigma^\dagger(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} a_\sigma^\dagger(\mathbf{R}), \\ b_\sigma^\dagger(\mathbf{R}) &= \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}} e^{+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \tilde{b}_\sigma^\dagger(\mathbf{k}), & \tilde{b}_\sigma^\dagger(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} b_\sigma^\dagger(\mathbf{R}), \end{aligned} \quad (1.25)$$

dove N_c è il numero di celle del reticolo e \mathbf{k} è dato da Eq.(1.12).

Riscriviamo quindi l'Hamiltoniana (1.23) con $t' = 0$ adoperando gli operatori trasformati:

$$\begin{aligned} \widehat{H}_0 &= -\frac{t}{N_c} \sum_{\mathbf{R}\sigma} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \tilde{a}^\dagger(\mathbf{k})\tilde{b}^\dagger(\mathbf{k}') e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}} \left(1 + e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{a}_2} \right) \\ &\quad + \tilde{b}^\dagger(\mathbf{k}')\tilde{a}^\dagger(\mathbf{k}) e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}} \left(1 + e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{a}_2} \right) \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} -tf(\mathbf{k})\tilde{a}^\dagger(\mathbf{k})\tilde{b}(\mathbf{k}) - tf(\mathbf{k})^*\tilde{b}^\dagger(\mathbf{k})\tilde{a}(\mathbf{k}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \begin{pmatrix} \tilde{a}^\dagger(\mathbf{k}) & \tilde{b}^\dagger(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -tf(\mathbf{k}) \\ -tf(\mathbf{k})^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{a}(\mathbf{k}) \\ \tilde{b}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1.26)$$

precisando che nel secondo passaggio abbiamo utilizzato la definizione

$$f(\mathbf{k}) = 1 + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2}.$$

Tenendo conto del fatto che $\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i = 2\pi k_i$ ($i = 1, 2$), troviamo la seguente relazione di dispersione:

$$\epsilon_{\mathbf{k}}^\pm = \pm |tf(\mathbf{k})| = \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(2\pi k_1) + 2 \cos(2\pi k_2) + 2 \cos(2\pi(k_2 - k_1))} \quad (1.27)$$

che ci mostra la presenza di due bande energetiche, ovvero la banda di valenza ϵ^- e quella di conduzione ϵ^+ , le quali si toccano in corrispondenza dei punti di Dirac (vedi Eq.1.13) quando $(k_1, k_2) = (\frac{1}{3}, \frac{2}{3}), (\frac{2}{3}, \frac{1}{3})$.

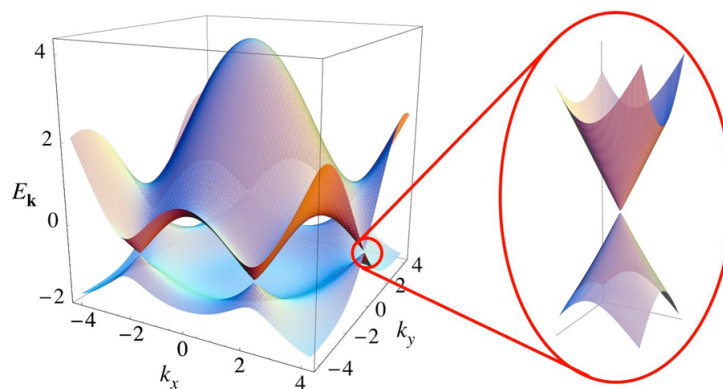


Figura 1.3: Spettro energetico della struttura a nido d'ape del grafene, con zoom (destra) sulle bande energetiche in prossimità dei punti di Dirac [7].

1.3 Proprietà elettriche del grafene

I risultati ottenuti nella precedente sezione permettono di studiare approfonditamente le proprietà eccezionali del grafene.

Iniziamo studiando le conseguenze della struttura a bande ricavata in Eq.(1.27). Dal momento che ogni atomo di carbonio nel grafene neutro, ovvero non drogato, contribuisce al riempimento delle bande energetiche con un elettrone, che ricordiamo essere coinvolto nella formazione dei legami π , la banda di valenza viene completamente riempita e per ogni stato \mathbf{k} si hanno due elettroni con spin opposto. Dunque il livello di Fermi è situato tra le due bande a $\epsilon_F = 0$ in corrispondenza dei punti di Dirac. Questa è la tipica struttura a bande dei semiconduttori.

Tuttavia, dal momento che il *gap* energetico tra la banda di valenza e quella di conduzione è nullo, si forma una banda singola metà riempita e quindi il grafene assume il comportamento tipico dei metalli; per questo motivo il grafene viene identificato come *semiconduttore a gap nullo*.

Man mano che ci si allontana da uno dei punti di Dirac nella prima zona di Brillouin aumenta il *gap* energetico e si ha quindi lo spettro energetico del grafene mostrato in Fig.(1.3). Si nota che in prossimità dei punti di Dirac lo spettro assume la forma di due coni, denominati coni di Dirac, con i vertici in contatto, proprio per la dipendenza cosinusoidale in Eq.(1.27).

Il motivo per il quale i punti \mathbf{K} e \mathbf{K}' in Eq.(1.13) sono chiamati punti di Dirac risiede proprio nella particolare forma che assume l'energia in Eq.(1.27) in un intorno di questi

siti:

$$E_{\pm}(\mathbf{q}) \approx \pm \hbar v_F |\mathbf{q}|, \quad (1.28)$$

la quale è un'equazione di dispersione lineare. Questa equazione è in evidente analogia con quella dei fermioni privi di massa, i quali sono descritti dall'Hamiltoniana di Dirac relativistica con spettro energetico a due falde:

$$\widehat{H}_D = \hbar c \sum_{\mathbf{q}} \phi^\dagger(\mathbf{q}) \vec{\sigma} \cdot \mathbf{q} \phi(\mathbf{q}), \quad \epsilon_{\mathbf{q}} = \pm \hbar c |\mathbf{q}|, \quad (1.29)$$

dove $\hbar \mathbf{q}$ è l'impulso dei fermioni, $\phi(\mathbf{q})$ è il campo quantistico spinoriale a due componenti su cui agiscono le matrici di Pauli $\vec{\sigma}$:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.30)$$

Se sostituiamo la velocità della luce c con la velocità di Fermi $v_F = \frac{\sqrt{3}}{2\hbar} t a$ è possibile dimostrare che l'Hamiltoniana e l'energia in Eq.(1.29) assumono la forma dell'Hamiltoniana del grafene in Eq.(1.26) e della relazione di dispersione in Eq.(1.27).

La velocità di Fermi viene stimata ad un valore di $v_F \approx 10^6 m/s$ [7].

Nel grafene emerge quindi la caratteristica di *quasiparticelle* dei portatori di carica, le quali sono identificate come fermioni privi di massa e sono descritte accuratamente a basse energie dall'equazione di Dirac relativistica; le quasiparticelle nel grafene avranno un comportamento differente dalle particelle di metalli e semiconduttori, i quali hanno relazioni di dispersione paraboliche, derivanti dal modello a elettroni liberi.

Tuttavia possiamo definire elettroni e lacune nel grafene in analogia con la trattazione generale dei materiali: ad energie negative, se la banda di valenza non è piena, gli stati elettronici non occupati si comporteranno come quasiparticelle di carica positiva e nel grafene queste assumeranno il ruolo di *lacune*; mentre ad energie positive, se la banda di conduzione non è vuota, gli stati si comporteranno come quasiparticelle di carica negativa con il comportamento simile a quello degli elettroni.

Vedremo ora come lacune ed elettroni nel grafene presentino la particolarità d a causa della simmetria del reticolo del grafene.

1.3.1 Chiralità degli elettroni

Ritorniamo brevemente ad utilizzare il linguaggio della prima quantizzazione per definire la funzione d'onda elettronica vicino ai punti di Dirac. Nello spazio dei momenti

si ha:

$$\psi_{\pm\mathbf{K}}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} \\ \pm e^{i\theta/2} \end{pmatrix} \quad (1.31)$$

$$\psi_{\pm\mathbf{K}'}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\theta/2} \\ \pm e^{-i\theta/2} \end{pmatrix} \quad (1.32)$$

dove $\theta = \arctan(k_x/k_y)$ è l'angolo nello spazio dei momenti. Queste funzioni d'onda sono spinori a due componenti che obbediscono all'equazione di Dirac in due dimensioni:

$$-iv_F\sigma \cdot \nabla\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (1.33)$$

con le matrici di Pauli $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y)$ e $\sigma^* = (\sigma_x, -\sigma_y)$ in Eq.(1.30). La caratteristica di spinori deriva dalla peculiarità per cui un cambiamento di fase di 2π , comporta il cambiamento del segno della funzione d'onda con fase π e questo cambiamento di fase a seguito di una rotazione è caratteristico degli spinori [7]. Questa fase geometrica di π , la quale si accumula lungo le traiettorie del ciclotrone, viene chiamata fase di Berry ed è dovuta all'accoppiamento tra lo *pseudospin*, che definiremo di seguito, e il moto orbitale [13].

Con le considerazioni finora fatte notiamo quindi che il grafene presenta un'ulteriore particolarità: solitamente lacune ed elettroni secondo la fisica della materia condensata sono descritti da equazioni d'onda di Schrödinger separate e gli stati non sono connessi in alcun modo; al contrario nel grafene le quasiparticelle sono descritte da uno spinore che rende conto dei contributi di entrambi i sotto-reticoli e si ha quindi una interconnessione tra gli stati degli elettroni e delle lacune.

L'Hamiltoniana della funzione d'onda (1.31) è $H_{\mathbf{K}} = \hbar v_F \sigma \cdot \mathbf{k}$ e il segno \pm corrisponde agli autovalori $E = \pm \hbar v_F k$, rispettivamente riferiti alla banda di conduzione e alla banda di valenza; mentre per la funzione d'onda (1.32) si ha $H_{\mathbf{K}'} = \hbar v_F \sigma^* \cdot \mathbf{k}$.

Vediamo ora brevemente la relazione di simmetria per inversione temporale che lega le due funzioni d'onda. Consideriamo come origine il centro della prima zona di Brillouin (in grigio nella Fig.1.2) e operiamo una riflessione lungo l'asse k_x ovvero passiamo da (k_x, k_y) a $(k_x, -k_y)$. A seguito di questa riflessione la funzione d'onda (1.32) sarà uguale a (1.31) e viceversa, poiché $\theta' = \arctan(-k_x/k_y) = -\theta$ e le stesse considerazioni possono essere fatte considerando le Hamiltoniane associate alle due funzioni d'onda. Questa riflessione nello spazio dei momenti è equivalente ad una inversione temporale.

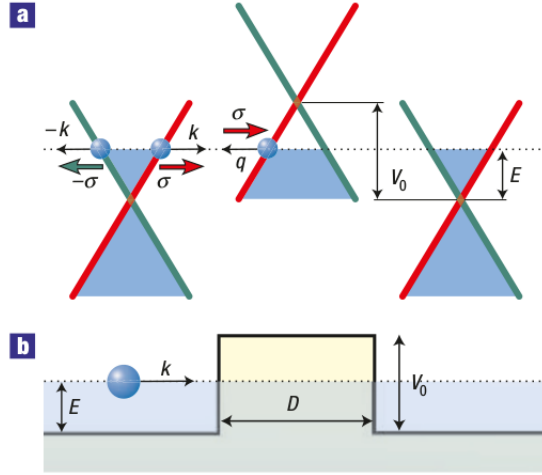


Figura 1.4: (a) Schema dello spettro delle quasiparticelle nel grafene. Le linee rosse e verdi enfatizzano l'origine dello spettro lineare, dato dalla sovrapposizione delle bande energetiche associate ai sotto-reticoli A e B. (b) Barriera di potenziale di altezza V_0 e larghezza D . Il livello di Fermi è individuato dalla linea tratteggiata ed E è l'energia di Fermi; in blu sono rappresentati gli stati occupati; σ è lo pseudospin e ha direzione fissa lungo le rette rosse e verdi; \mathbf{k} è il momento delle quasiparticelle [15].

Definiamo ora il numero quantico di *pseudospin*, il quale è associato alle due componenti della funzione d'onda e si riferisce al sotto-reticolo A (\uparrow) e al sotto-reticolo B (\downarrow). L'indice di pseudospin permette di tenere conto dei contributi degli stati che appartengono ai due differenti sotto-reticoli, i quali compongono gli stati elettronici quando le due bande energetiche si toccano [13].

Possiamo ora definire l'operatore elicità, ovvero la proiezione del operatore momento lungo la direzione dello pseudospin:

$$\hat{h} = \frac{1}{2} \sigma \cdot \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \quad (1.34)$$

del quale le funzioni d'onda (1.31),(1.32) sono autostati:

$$\hat{h}\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = \pm \frac{1}{2}\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}), \quad \hat{h}\psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) = \mp \frac{1}{2}\psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) \quad (1.35)$$

Precisiamo che l'elicità è un buon numero quantico soltanto vicino ai punti di Dirac \mathbf{K} e \mathbf{K}' . Dall'Eq.(1.35) si ottiene che gli elettroni avranno elicità positiva, mentre le lacune avranno elicità negativa. Inoltre σ ha due autovalori nella direzione parallela al momento \mathbf{p} o in direzione antiparallela; questa proprietà mostra che gli stati vicino ai punti di Dirac hanno una elicità ben definita, anche detta *chiralità*.

Essenzialmente la chiralità nel grafene significa che gli stati k di un elettrone e di una lacuna $-k$ sono connessi, poiché hanno origine dagli stessi sotto-reticoli: un elettrone con energia E , che si propaga in una direzione, è stato originato dallo stesso “ramo” dello spettro (vedi Fig.1.4a) di una lacuna con energia $-E$, che si propaga nella direzione opposta; quindi elettroni e lacune che hanno origine dallo stesso “ramo” hanno pseudospin concorde e per i primi questo sarà parallelo al momento, mentre per le lacune sarà antiparallelo [15].

Molti dei processi elettronici nel grafene possono essere compresi considerando la conservazione dello pseudospin e della chiralità [13].

1.3.2 Confinamento e paradosso di Klein

Nel grafene si verificano due particolari effetti di QED: il paradosso di Klein e il *Zitterbewegung*, o *jittery motion*.

La nozione paradosso di Klein si riferisce al processo di *tunnelling* perfetto degli elettroni relativistici attraverso barriere arbitrariamente alte e larghe; mentre il processo di *Zitterbewegung* descrive il moto agitato degli elettroni a causa dell’interferenza tra due parti del pacchetto d’onda associato agli stati ad energia positiva per gli elettroni e negativa per i positroni [13]. Analizziamo brevemente il primo di questi due fenomeni.

I materiali semiconduttori hanno portatori di carica diversi dalle quasiparticelle chirali del grafene ed è noto che in un processo di diffusione attraverso una barriera di potenziale il coefficiente di trasmissione attraverso la barriera assume valori compresi tra 0 e 1 quando l’incidenza è normale, mentre si ha la completa trasparenza quando si è in condizione di risonanza.

Si può dimostrare ([7], [15]) che per gli elettroni ultra-relativistici del grafene la barriera di potenziale risulta completamente trasparente, sia quando si è in condizioni di risonanza, sia quando l’incidenza è normale o per angoli vicini all’incidenza normale alla barriera; quest’ultima particolarità è manifestazione del paradosso di Klein.

Intuitivamente spieghiamo il fenomeno di *tunnelling* perfetto come conseguenza della chiralità delle quasiparticelle nel grafene. Se ritorniamo allo schema mostrato in Fig.(1.4a), vediamo subito che in un processo di diffusione gli elettroni potranno essere diffusi soltanto negli stati che appartengono allo stesso ramo, in questo caso il ramo di

colore rosso, e quindi la diffusione porterà questo elettrone in uno stato appartenente ad un elettrone che si muove verso destra lungo il ramo, oppure, se si verifica un processo di inversione di pseudospin, appartenente ad una lacuna che si muove verso sinistra sempre nello stesso ramo. Questo comportamento permette ad un elettrone con momento \mathbf{k} di oltrepassare una barriera di potenziale di altezza V_0 e larghezza D , come mostrato in Fig.(1.4b), nel limite $|V_0| \gg E$: avremo infatti che il coefficiente di trasmissione sarà 1 nel caso in cui l'angolo di incidenza è nullo oppure in risonanza [15]. Questo fenomeno rende difficile il confinamento degli elettroni nel grafene adoperando barriere di potenziale, una caratteristica che risulterà problematica nel caso in cui si voglia adoperare il grafene per la computazione quantistica. Tuttavia risulta che un campo magnetico e variazioni della barriera di potenziale portano alla rottura della simmetria tra le due valli dello spettro e il coefficiente di trasmissione risulta dipendente dall'indice di valle, aprendo quindi la possibilità di manipolare quest'ultimo [7].

1.3.3 Grado di libertà di valle

Il *valley DOF* è un grado di libertà discreto che si ha nei cristalli con simmetrie puntuali triangolari ed esagonali e si riferisce a uno dei due punti di simmetria nella prima zona di Brillouin, i punti K, K' e i loro primi vicini [29].

Il DOF di valle è divenuto di estremo interesse negli ultimi anni nell'ambito della computazione quantistica e per il controllo di dispositivi elettronici, poiché, in analogia con l'utilizzo dello spin degli elettroni in spintronica, si apre la possibilità di manipolare il DOF di valle per la *valleytronics*.

Il grafene si presta a questo scopo in virtù della particolare forma della sua struttura a bande (vedi Eq.1.27), difatti la banda di valenza e la banda di conduzione formano due valli coniche in ognuna delle quali gli elettroni e le lacune sono identificati come *quasiparticelle* di Dirac prive di massa.

Il DOF di valle nel grafene si comporta come un normale DOF binario, simile a quello di spin. In particolare la rotazione angolare della funzione d'onda dell'elettrone nelle valli K o K' genera un momento magnetico intrinseco analogo a quello prodotto dallo spin; questa proprietà permette di misurare direttamente la polarizzazione di valle come una quantità fisica. Si dimostra infatti che nei sistemi in cui viene rotta la simmetria per inversione temporale e spaziale si ha un momento magnetico intrinseco

associato all'indice di valle.

Se si considerano gli elettroni nel limite di basse energie, per il momento magnetico orbitale intrinseco associato al DOF di valle si ricava la seguente relazione [11]:

$$\mathbf{m}(\mathbf{K}_{1,2}) = \tau_z \mu_B^*, \quad \mu_B^* = \frac{e\hbar}{2m_e^*}, \quad (1.36)$$

dove la coordinata x delle due valli nel reticolo è data da $\mathbf{K}_{1,2} \equiv (\mp 4\pi/3a')$, $a' = a\sqrt{3} = 2.46\text{\AA}$, $\tau_z = \pm 1$ identifica le due valli non equivalenti.

In stretta analogia con il magnetone di Bohr si ha μ_B^* con la massa effettiva $m_e^* = (2\Delta\hbar^2)/(3a'^2t^2)$, dove Δ è un parametro che caratterizza la differenza di energia dei siti reticolari tra i sotto-reticoli, mentre t è il parametro di *hopping*, già precedentemente adoperato. Utilizzando i valori tipici $\Delta \sim 0.28\text{eV}$ e $t \sim 2.8\text{eV}$ si ottiene un valore per μ_B^* circa 30 volte superiore al valore del magnetone di Bohr ($5.79 \times 10^{-5}\text{eVT}^{-1}$) [11].

Ci si aspetta che il momento intrinseco di valle si accoppi con un campo magnetico perpendicolare allo strato di grafene portando ad avere una polarizzazione di valle, in modo simile a quanto accade con la polarizzazione dello spin; tuttavia non si avrà accoppiamento con campi magnetici applicati in differenti direzioni, dal momento che definiamo (1.36) per un sistema bidimensionale, per cui è noto che il momento magnetico è ortogonale al piano considerato.

Infine, data la grande differenza tra μ_B e μ_B^* , a seguito dell'applicazione di un campo magnetico perpendicolare il momento magnetico intrinseco di valle dominerà rispetto a quello di spin e questa caratteristica può essere sfruttata per distinguere i due momenti magnetici.

Bisogna fare un'importante considerazione riguardo al caso che abbiamo appena preso in esame: τ_z cambia segno per inversione spaziale e inversione temporale, visto che le due valli si scambiano quando cambia il segno del momento del cristallo, come discusso precedentemente; mentre il momento magnetico di valle non cambia segno per inversione spaziale. Di conseguenza il momento associato all'indice di valle è non nullo soltanto nei sistemi in cui viene rotta la simmetria per inversione [11]. La rottura della simmetria per inversione temporale e per inversione spaziale del reticolo viene causata dall'applicazione di un campo magnetico e portano alla rottura della simmetria tra le due valli [7].

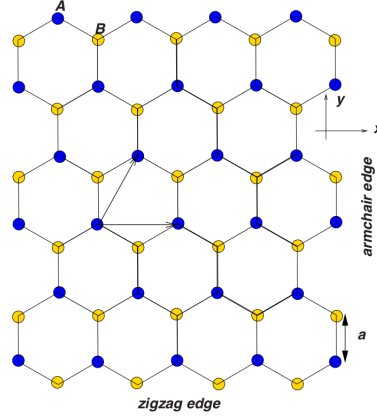


Figura 1.5: Struttura a nido d'ape di un GNR, in cui è possibile notare nelle estremità superiore e inferiore i bordi a zigzag e le armchair edges nei lateralmente. I siti del sottoreticolo A sono segnati in blu, mentre quelli di B in giallo [7].

1.4 Graphene Nanoribbons

I nanoribbons di grafene (GNRs) sono strisce sottili di grafene con un rapporto lunghezza-larghezza elevato [1] e sono oggetto di studio date le loro proprietà particolari. Vedremo nel Capitolo 3 che i nanoribbons di grafene si prestano alla realizzazione di dispositivi per la computazione quantistica.

Le proprietà dei GNRs dipendono dalla larghezza della striscia, dall'orientazione dei bordi e dalla loro terminazione e anche dalla presenza di atomi eteroatomi, ovvero atomi di una molecola organica diversi da carbonio e idrogeno, sulla struttura del nanoribbon. Studiamo ora le proprietà che derivano dalla diversa natura dei bordi.

I GNRs possono essere caratterizzati da *zigzag edges*, ovvero bordi a zigzag, oppure *armchair edges*, ossia bordi che ricordano il profilo di una sedia con i braccioli. In Fig.(1.5) vediamo entrambe le tipologie di terminazioni: se vogliamo realizzare terminazioni del primo tipo consideriamo che la striscia si estenda infinitamente lungo l'asse x , mentre per il secondo tipo consideriamo la dimensione lungo x fissata e la striscia si estende parallela a y .

In generale si trova che l'Hamiltoniana attorno ai punti di Dirac \mathbf{K} e \mathbf{K}' nello spazio dei momenti è [7]:

$$H_{\mathbf{K}} = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix}, \quad H_{\mathbf{K}'} = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x + ip_y \\ p_x - ip_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.37)$$

dove i due punti di Dirac sono ora dati da $\mathbf{K} = (\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0)$ e $\mathbf{K}' = (-\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0)$.

Nello spazio reale per i due sotto-reticoli A e B si ha:

$$\Psi_\mu(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}\psi_\mu(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{r}}\psi'_\mu(\mathbf{r}) \quad (1.38)$$

dove $\mu = A, B$.

Possiamo quindi definire due spinori per le due Hamiltoniane in Eq.(1.37) a seconda della tipologia di bordo che abbiamo realizzato: se consideriamo GNRs con *zigzag edges* allora avremo bordi paralleli all'asse x e lo spinore riferito a $H_{\mathbf{K}}$ sarà dato da:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ik_x x} \begin{pmatrix} \phi_A(y) \\ \phi_B(y) \end{pmatrix} \quad (1.39)$$

e una simile espressione si trova per $H_{\mathbf{K}'}$. Se invece realizziamo GNRs con *armchair edges* orientate lungo y avremo allora:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ik_y y} \begin{pmatrix} \phi_A(x) \\ \phi_B(x) \end{pmatrix}. \quad (1.40)$$

La differenza principale tra i comportamenti del materiale, derivati dalle due tipologie di bordo considerate, emerge proprio nel momento in cui è necessario imporre le condizioni al contorno per le funzioni d'onda che descrivono il nanoribbon.

Consideriamo quindi i nanoribbons con bordi a zigzag. Le condizioni al contorno che si dovranno imporre sono le seguenti:

$$\Psi_A(L) = \Psi_B(0) = 0 \quad (1.41)$$

dove L è la dimensione finita della striscia lungo y . Si nota quindi che la funzione d'onda deve annullarsi su un singolo sotto-reticolo ad ogni bordo.

Si può dimostrare ([5], [7]) che il nanoribbon ha stati elettronici confinati con funzioni d'onda che includono i siti di entrambi i sotto-reticoli quando le soluzioni per z sono complesse e nella forma $z = ik_n$. Si ha in questo caso l'equazione trascendente:

$$k_x = \frac{k_n}{\tan(k_n L)} \quad (1.42)$$

dove n indica il numero di nodi della funzione d'onda confinata; per ogni soluzione k_n esistono due stati confinati con energia $\tilde{\epsilon} = \pm\sqrt{k_n^2 + k_x^2}$.

Oltre a questi stati confinati il GNR ammette anche stati di superficie che sono fortemente localizzati vicino ai bordi e sono non nulli solo sui singoli sotto-reticoli. In

questo caso k_x deve essere positivo e le soluzioni per $z \equiv k$ sono reali; in particolare se $k_x > \frac{1}{L}$ allora gli stati hanno energia pari a $\tilde{\epsilon} = \pm\sqrt{k_x^2 - k^2}$, mentre se $0 < k_x < \frac{1}{L}$ si verifica il mescolamento tra gli stati di superficie, i quali sono indistinguibili dagli stati confinati.

Consideriamo ora i GNRs con *armchair edges*. Bisogna imporre l'annullarsi della funzione d'onda su entrambi i sotto-reticoli ai bordi:

$$\Psi_\mu(L) = \Psi_\mu(0) = 0 \quad (1.43)$$

dove $\mu = A, B$. Dobbiamo quindi mischiare gli stati di entrambi i punti di Dirac, ovvero mischiamo le due valli. In questo caso si dimostra che gli autovalori dell'energia sono dati da:

$$\tilde{\epsilon}^2 = k_y^2 - k_n^2 \quad (1.44)$$

dove i valori possibili per k_n sono dati da:

$$k_n = \frac{n\pi}{L} - \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}. \quad (1.45)$$

In questo caso non esistono stati di superficie, ma risulta che il comportamento del GNR dipende in modo sostanziale dalla sua larghezza: se $L = 3M\sqrt{3}a$, con M intero, allora il comportamento sarà di tipo metallico, dal momento che è ammesso uno stato a energia zero quando $k_x \rightarrow 0$ e gli stati sono doppiamente degeneri per $|n| \geq 0$; mentre se la larghezza non è un multiplo intero di $3\sqrt{3}a$ si ha il comportamento di un isolante, non è ammesso uno stato a energia zero e si hanno stati non-degeneri.

Nell'ultimo capitolo vedremo che quest'ultima tipologia di GNRs, ovvero con *armchair edges* e comportamento isolante, presenta dei vantaggi nella realizzazione di dispositivi per la computazione quantistica, rispetto ad altri materiali e al grafene stesso in altre forme.

Capitolo 2

Introduzione alla computazione quantistica

Il termine *computazione quantistica* si riferisce alla possibilità di immagazzinare, leggere e scrivere l'informazione in supporti costituiti da sistemi fisici con proprietà genuinamente quantistiche [9], in modo tale che venga preservato il carattere quantistico dell'informazione nello scambio tra due o più sottosistemi. Questo campo di ricerca nacque nei primi anni 80 del secolo scorso [14] e fu Richard Feynman a mettere in luce la necessità di sviluppare computer quantistici per simulare efficientemente la fisica quantistica.

A seguito dello sviluppo di teorie e algoritmi per la computazione quantistica, numerosi colossi informatici come Google, IBM, Intel, Microsoft e Lockheed Martin stanno investendo nell'implementazione di computer quantistici.

Innanzitutto bisogna delineare il confine di applicazione della computazione quantistica. Quest'ultima infatti è da utilizzare per risolvere quei problemi che sono ritenuti "difficili", ovvero problemi per la cui risoluzione le risorse impiegate dal migliore algoritmo classico seguono una legge più che polinomiale (esponenziale) [9].

Il più noto esempio di questo tipo di problemi è la fattorizzazione in numeri primi, la quale può richiedere un tempo pari all'età dell'universo per essere risolta da un computer classico, ma la risoluzione viene raggiunta in un tempo polinomiale adoperando l'algoritmo di Shor con un computer quantistico.

Al fine di realizzare un computer quantistico è necessario rispettare i cinque criteri di DiVincenzo [10]:

- sistema fisico scalabile con qubits ben caratterizzati;
- capacità di inizializzare lo stato del sistema dei qubits ad uno stato semplice come $|000\dots\rangle$;
- tempi di decoerenza di molto superiori al tempo in cui la porta logica esegue un'operazione;
- set universale di porte logiche;
- capacità di misurare un qubit singolarmente;

Per tempo di decoerenza, a volte anche identificata come *quantum noise*, si intende in maniera semplificata il tempo in cui uno stato generico $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ muta in uno stato misto $\rho = |a|^2|0\rangle\langle 0| + |b|^2|1\rangle\langle 1|$ [10], ovvero il tempo in cui lo stato perde le proprietà essenziali quantistiche con le quali era stato preparato [9]. La decoerenza è particolarmente dannosa per il funzionamento delle macchine quantistiche, dal momento che si rischiano di perdere le qualità quantistiche che le rendono vantaggiose rispetto agli elaboratori classici.

Un esempio di “rumore” che si può avere in un sistema candidato alla realizzazione di un qubit è il seguente: consideriamo due livelli elettronici con cui è possibile interagire tramite impulsi luminosi, che provocano la transizione da uno stato all'altro; sempre a causa dello stesso impulso sappiamo che si può verificare con una qualche probabilità la transizione ad un altro livello elettronico e si esce quindi dal sistema a due stati voluto.

2.1 Qubit

Il contenitore dell'informazione quantistica è il quantum bit, o qubit, il quale sostituisce il bit classico.

Se consideriamo due stati ortogonali di un sistema fisico $|0\rangle$ e $|1\rangle$, allora lo stato generico puro di un qubit può essere scritto come:

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle. \quad (2.1)$$

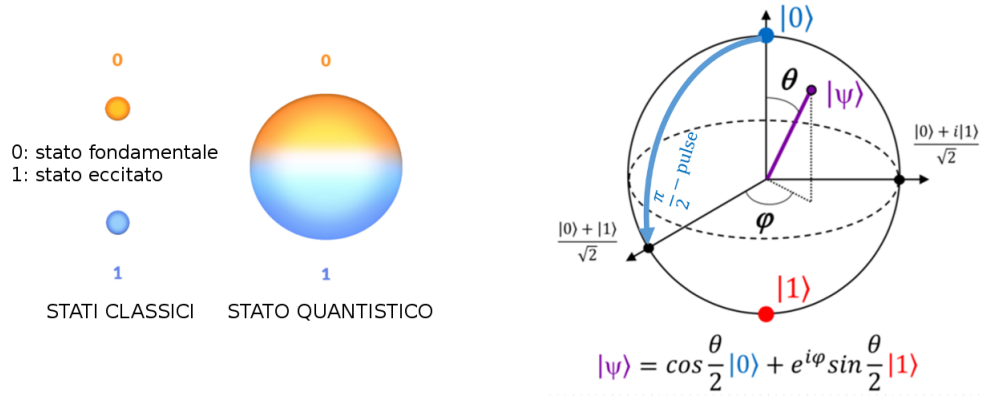


Figura 2.1: A sinistra la rappresentazione grafica di un qubit dato dalla sovrapposizione di stato fondamentale e stato eccitato e a destra la sfera di Bloch [14].

Le combinazioni lineari come in Eq.(2.1) al variare di $a, b \in \mathbb{C}$ individuano uno spazio di Hilbert \mathcal{H} di dimensione complessa 2. Si possono considerare gli stati normalizzati a uno, ovvero $\langle \psi | \psi \rangle = |a|^2 + |b|^2 = 1$.

Notiamo che esistono altre possibili nature del qubit: due differenti polarizzazioni di un fotone, due stati energetici di un elettrone che orbita attorno ad un atomo, lo stato fondamentale e quello eccitato (vedi Fig.2.1).

Per visualizzare lo stato di un singolo qubit si utilizza la sfera di Bloch, mostrata in figura 2.1. Per ricavare la sfera di Bloch sfruttiamo le matrici di Pauli:

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

e le loro proprietà:

$$\begin{aligned} \det \sigma^\alpha &= -1, & \text{tr} \sigma^\alpha &= 0, \\ (\sigma^\alpha)^2 &= \mathbb{I}, & \{\sigma^\alpha, \sigma^\beta\} &= 2\delta^{\alpha\beta} \mathbb{I}, \\ \sigma^\alpha \sigma^\beta &= i\epsilon^{\alpha\beta\gamma} \sigma^\gamma + \delta^{\alpha\beta} \mathbb{I}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

dove $\epsilon^{\alpha\beta\gamma}$ è il simbolo totalmente antisimmetrico di Levi-Civita e $\delta^{\alpha\beta}$ è la delta di Kronecker. Queste matrici costituiscono una base ortonormale rispetto al prodotto scalare tra matrici indotto dalla traccia $(A, B) = \text{tr} A^\dagger B$.

Definiamo quindi uno stato misto di un qubit:

$$\rho = c_0 \mathbb{I} + \vec{c} \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + c^z & c^x - ic^y \\ c^x + ic^y & \frac{1}{2} - c^z \end{pmatrix} = \frac{\mathbb{I} + \vec{n} \cdot \vec{\sigma}}{2} \quad (2.4)$$

poiché dalle proprietà in Eq.(2.3) si ricava $2c_0 = 1$ e abbiamo usato $\vec{c} = \frac{1}{2}\vec{n}$, che deve essere a componenti reali per soddisfare $\rho = \rho^\dagger$. Il vettore \vec{n} appartiene alla sfera di Bloch di raggio unitario. In seguito verrà introdotto l'operatore densità per definire gli stati misti.

Definiamo $\Delta \equiv \det\rho = \lambda(1 - \lambda)$, se λ e $1 - \lambda$ sono gli autovalori reali di ρ , tali che $0 \leq \lambda \leq 1$; allora si ha che $0 \leq \Delta \leq \frac{1}{4}$.

Anticipando il concetto di stato *entangled*, che è spiegato successivamente, vediamo che per $\lambda = 0, 1$ si ha $\Delta = 0$ e lo stato è puro; per $\lambda = \frac{1}{2}$ si ha $\Delta = \frac{1}{4}$ e lo stato $\rho = \frac{1}{2}\mathbb{I}$ ha la proprietà di essere massimamente entangled, secondo una certa misura. Il caso di stato puro si ha quando il vettore \vec{n} si trova sulla superficie sferica di Bloch e corrisponde all'autovettore di $\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$ con autovalore $+1$, otteniamo quindi:

$$\begin{aligned} \rho &= |\psi\rangle_{AA} \langle\psi|, \\ |\psi\rangle_A &= \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle - e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle, \end{aligned} \tag{2.5}$$

dove θ e ϕ sono gli angoli che definiscono il versore $\vec{n} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$. Il caso di stato misto si ha quando \vec{n} si trova all'interno della sfera, ovvero quando $\|\vec{n}\| < 1$.

Con un qubit è possibile fare principalmente due azioni, ossia possiamo misurare il suo stato 0 o 1 con una data probabilità, oppure possiamo applicargli un'operazione che corrisponde a ruotare lo stato ottenendo una differente posizione sulla sfera di Bloch. Nei computer quantistici queste rotazioni vengono implementate tramite le porte logiche quantistiche, di cui parleremo successivamente.

2.1.1 Principio di sovrapposizione e *entanglement*

I costituenti fondamentali che realizzano un computer quantistico secondo i criteri di DiVincenzo godono sia del principio di sovrapposizione sia del cosiddetto *entanglement*. Implicitamente nella sezione precedente abbiamo già introdotto entrambe queste proprietà di cui ora daremo una definizione più accurata.

Consideriamo un sistema con due stati base $|0\rangle$ e $|1\rangle$, allora lo stato quantistico di un qubit sarà uno stato continuo tra "0" e "1"; in linea con i principi fondamentali della meccanica quantistica se misuriamo un osservabile che ha come autostati $|0\rangle$ e $|1\rangle$ avremo come risultato della misura solamente "0" oppure "1". Quindi lo stato di un

qubit può essere definito come in Eq.(2.1) e a seguito di una misura potremo ottenere lo stato $|0\rangle$ con probabilità $|a|^2$ e lo stato $|1\rangle$ con probabilità $|b|^2$.

Ogni punto della sfera di Bloch rappresenta una combinazione lineare dei due stati 0 e 1 con coefficienti complessi.

Ampliando questo concetto a n qubits avremo la sovrapposizione di 2^n stati classici; ad esempio un *quantum register* di n qubits sarà descritto da:

$$|\psi\rangle = a_0 |0\rangle + a_1 |1\rangle + \dots + a_{2^n-1} |2^n - 1\rangle, \quad (2.6)$$

dove $\sum_{j=0}^{2^n-1} |a_j|^2 = 1$.

Per la seconda proprietà dei qubits occorre una trattazione più lunga e complicata, ma possiamo introdurla come segue: se due qubits sono *entangled* vi è una correlazione tra questi due qubits, per la quale se uno dei due è in un particolare stato allora l'altro deve essere in un altro particolare stato [14].

Diamo ora una definizione più accurata [9]: consideriamo uno stato $|\psi\rangle_C$ che descrive un sistema C isolato composto da due sottosistemi A e B ($C=A+B$); lo stato si dice separabile se lo si può scrivere come prodotto di uno stato riferito solo ad A ed uno stato riferito solo a B, ovvero $|\psi\rangle_C = |\psi\rangle_A \otimes |\psi\rangle_B$; in caso contrario lo stato viene detto entangled.

Bisogna però sempre ricordare che la definizione appena data fa riferimento ad un dato stato e ad una data partizione, dal momento che a seconda delle condizioni uno stesso sistema fisico può essere descritto da uno stato separabile o non separabile e uno stesso stato a seconda della partizione può essere separabile o entangled.

In ultima analisi riportiamo un'ulteriore proprietà dei sistemi quantistici, ovvero il teorema di non-clonabilità [9]: non può esistere un dispositivo che produce due copie esatte di un generico stato quantistico incognito $|\psi\rangle$.

Diamo una rapida dimostrazione di questo teorema: supponiamo per assurdo che un elaboratore quantistico prenda in ingresso un generico stato $|\psi\rangle$ e uno stato $|v\rangle$ su cui viene copiato l'altro stato, ovvero si avrà la trasformazione unitaria

$$|\psi\rangle |v\rangle \rightarrow |\psi\rangle |\psi\rangle.$$

Ripetiamo lo stesso procedimento con un altro stato in ingresso $|\psi'\rangle$, ossia

$$|\psi'\rangle |v\rangle \rightarrow |\psi'\rangle |\psi'\rangle.$$

Assumendo $\langle v|v\rangle = 1$ si ottiene $\langle \psi|\psi'\rangle = \langle \psi|\psi'\rangle^2$ ovvero $\langle \psi|\psi'\rangle = 0$ oppure $\langle \psi|\psi'\rangle = 1$, quindi abbiamo contraddetto l'ipotesi di partenza che i due stati siano arbitrari.

Questa proprietà emergerà nella trattazione della porta logica CNOT, nella sezione seguente.

2.1.2 Operatore densità e definizione dello stato misto

Nelle sezioni precedenti è stato definito lo stato misto come in Eq.(2.4), ora introduciamo un nuovo linguaggio che risulta conveniente per la descrizione di sistemi i cui stati non sono completamente noti.

L'operatore densità, anche denominato *matrice densità*, di un sistema che si trova in uno degli stati $|\psi_i\rangle$ possibili, con i indice, è definito nel modo seguente:

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (2.7)$$

dove p_i è la probabilità associata allo stato $|\psi_i\rangle$ e $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ è definito *ensemble di stati puri*. Possiamo quindi ora affermare che un sistema è in uno stato puro quando lo stato $|\psi\rangle$ è noto in modo esatto, $\rho = |\psi\rangle \langle \psi|$ e $tr(\rho^2) = 1$ [17]. Invece il sistema è in uno stato misto quando si trova in una sorta di *mistura* dei diversi stati puri che appartengono all'ensemble e in questo caso si dimostra che $tr(\rho^2) < 1$.

Se prepariamo il sistema in uno stato ρ_i con probabilità p_i e supponiamo che questo stato derivi dall'ensemble di stati puri $\{p_{ij}, |\psi_{ij}\rangle\}$, con i fissato; allora l'operatore densità del sistema sarà:

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i = \sum_i p_i p_{ij} |\psi_{ij}\rangle \langle \psi_{ij}| \quad (2.8)$$

dove chiaramente $p_i p_{ij}$ rappresenta la probabilità di avere lo stato $|\psi_{ij}\rangle$. In questo caso si dice per l'appunto che il sistema ρ si trova in una *mistura* di stati ρ_i con probabilità p_i . Lo stato misto quindi corrisponde alla situazione in cui il sistema non viene preparato esattamente in modo identico in una serie di misure ripetute; possiamo interpretare le probabilità p_i come pesi da associare ai corrispondenti stati quantistici $|\psi_i\rangle$ in cui viene preparato il sistema di volta in volta.

L'importanza del concetto di stato misto emerge nell'analisi del problema della decoerenza e del *quantum noise*, dal momento che questi elementi provocano la perdita di informazione sullo stato quantistico. Ricordiamo infatti che il tempo di decoerenza viene definito come il tempo in cui uno stato puro muta in uno stato misto [10]. Risulta

che lo stato di un sistema quantistico è descritto dalla matrice densità se non si può affermare che il sistema è completamente isolato dall'ambiente circostante [9].

In Appendice B sono esposte le proprietà dell'operatore densità in relazione a trasformazioni unitarie e processi di misura.

2.2 Porte logiche quantistiche

La realizzazione di un computer quantistico richiede l'esistenza di un set universale di porte logiche quantistiche, in analogia alle porte classiche AND, OR e NOT.

Un operatore unitario che agisce su un numero ridotto di qubits viene denominato *gate* [14]. Il caso esemplare di evoluzione unitaria è l'evoluzione temporale di uno stato dal tempo t_0 al tempo t in rappresentazione di Schrödinger tramite un operatore unitario $U^{-1} = U^\dagger$:

$$|\psi(t)\rangle = U(t; t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (2.9)$$

Consideriamo in generale che in un elaboratore quantistico uno stato $|\psi\rangle$ si trasformi tramite le trasformazioni unitarie $|\psi\rangle \rightarrow U|\psi\rangle$, in assenza di processi di misura che porterebbero al collasso della funzione d'onda.

2.2.1 Operazioni ad un qubit

Studiamo ora il caso di operazioni su un singolo qubit, potendo così ottenere tutte le trasformazioni lineari e unitarie tramite combinazioni lineari delle matrici di Pauli in Eq.(2.2) e la matrice identità \mathbb{I} , dove si identifica la prima componente sullo stato $|0\rangle$ e la seconda sullo stato $|1\rangle$.

La prima porta logica che esaminiamo è il NOT, il quale classicamente nega lo stato logico in ingresso. La porta logica quantistica è descritta dalla matrice:

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \sigma^x \quad (2.10)$$

dove σ^x è una delle matrici di Pauli. Infatti è facile verificare che la matrice in Eq.(2.10) inverte il ruolo di $|0\rangle$ e $|1\rangle$:

$$a|0\rangle + b|1\rangle \rightarrow b|0\rangle + a|1\rangle.$$

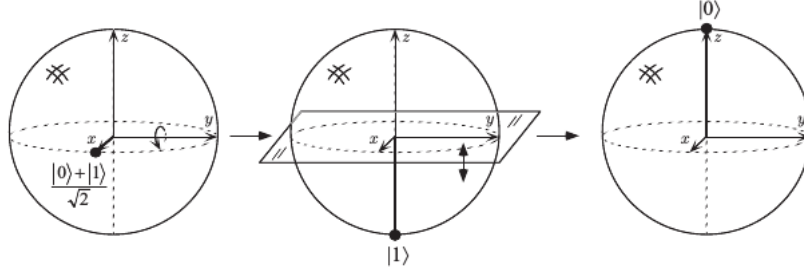


Figura 2.2: Visualizzazione della porta logica di Hadamard sulla sfera di Bloch che agisce sullo stato di input $\frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}}$ [17].

La seconda porta logica è quella di Hadamard:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma^x + \sigma^y). \quad (2.11)$$

Se in ingresso si ha lo stato $|0\rangle$, con probabilità di osservare il valore 0 del 100%, in uscita si avrà lo stato $\frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}}$, con probabilità di misurare 0 del 50% e di misurare 1 del 50%. Se invece in ingresso si ha lo stato $|1\rangle$ si avrà in uscita lo stato $\frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}}$.

Osservando la sfera di Bloch (Fig.2.2) notiamo che la porta di Hadamard che agisce sullo stato di input $|0\rangle$ corrisponde ad una rotazione di $\pi/2$ attorno all'asse \hat{y} seguita da una rotazione di π attorno all'asse \hat{x} .

Altre due porte logiche quantistiche, che ci risulteranno utili in seguito, sono quella di fase, denotata con S e il $\pi/8$ gate, denotato con T :

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}, \quad T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

2.2.2 Operazioni a due qubit

Consideriamo lo spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ a cui appartengono gli stati di due qubits A e B; la dimensione di questo spazio, detto *prodotto tensore*, per due qubits sarà $\dim\mathcal{H}_A \dim\mathcal{H}_B = 4$. Esiste sempre una base di stati separabili nella quale lo stato complessivo del sistema A+B isolato sarà dato da $|\psi\rangle_{AB} = |\psi\rangle_A \otimes |\psi\rangle_B$.

Una base possibile è quella computazionale data da:

$$|0\rangle_A |0\rangle_B, \quad |0\rangle_A |1\rangle_B, \quad |1\rangle_A |0\rangle_B, \quad |1\rangle_A |1\rangle_B \quad (2.13)$$

che è formata da tutte le possibili combinazioni degli elementi di base di A e B; con un'altra notazione possiamo semplicemente scrivere $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$.

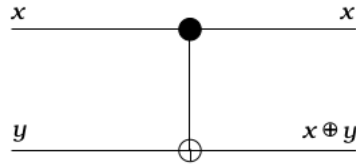


Figura 2.3: Rappresentazione grafica della porta logica CNOT. Il bit in corrispondenza del simbolo \bullet è di controllo, mentre quello in corrispondenza di \oplus contiene il dato in uscita [9].

Se avessimo L qubits la dimensione dello spazio di Hilbert globale sarebbe 2^L .

Vediamo ora alcune proprietà che valgono in questo spazio di Hilbert:

- azione di operatori lineari L_A , che agisce su A , e L_B , che agisce su B :

$$(L_A \otimes L_B) |\psi\rangle_{AB} = (L_A |\psi\rangle_A) \otimes (L_B |\psi\rangle_B)$$

- prodotto scalare:

$$({}_A \langle \phi | \otimes_B \langle \phi |) (|\psi\rangle_A \otimes |\psi\rangle_B) = {}_A \langle \phi | \psi \rangle_{AB} \langle \phi | \psi \rangle_B$$

- proiezione parziale di A su un dato stato $|\phi\rangle_A$:

$${}_A \langle \phi | (|\psi\rangle_A \otimes |\psi\rangle_B) = {}_A \langle \phi | \psi \rangle_A |\psi\rangle_B \in \mathcal{H}_B$$

Per realizzare il set universale di porte logiche è sufficiente combinare ripetutamente porte logiche ad un qubit, ovvero matrici unitarie del gruppo $U(2)$, ed una porta logica a due qubit che li accoppi [9]. Analogamente per L qubit avremo le trasformazioni unitarie del gruppo $U(N)$ con $N=2^L$; il numero di parametri continui reali indipendenti da specificare per questo gruppo è 2^{2L} .

Studiamo ora la terza porta logica di notevole importanza, ovvero il CNOT (*controlled NOT*), che esegue l'operazione $A \oplus B$ su due input in ingresso. Se consideriamo il CNOT come una porta logica a due ingressi e due uscite (vedi Fig.2.3) schematizziamo la sua azione come:

$$(x, y) \rightarrow (x, x \oplus y)$$

ovvero viene lasciato invariato il valore x del bit A e viene invece variato il valore y del bit B a seconda di quale valore in ingresso si ha per A , il quale viene quindi definito come bit di controllo; di conseguenza se $x = 0$ allora il valore di B rimane inalterato, mentre se $x = 1$ allora il valore di B viene negato.

Rappresentiamo la porta logica CNOT nella base computazionale come una matrice 4×4 :

$$U_{CNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Come accennato nella sezione precedente con la porta CNOT si può avere evidenza del teorema di non-clonabilità: supponiamo infatti di avere $|x\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ e prendiamo come valore per il bit B $y = 0$:

$$|x0\rangle = a|00\rangle + b|10\rangle.$$

A seguito dell'azione della porta CNOT si ottiene

$$a|00\rangle + b|11\rangle,$$

il quale è una copia del bit A di controllo solo se $x = 0$ o $x = 1$ ovvero se rispettivamente $a = 1, b = 0$ o $a = 0, b = 1$; tuttavia nel caso generale non è una copia di A.

Una delle questioni che ci si può porre a questo punto riguarda la possibilità di esprimere le porte classiche, ad esempio NAND e XOR, in termini di matrici unitarie in modo tale da realizzare delle porte logiche che agiscono sui qubits, che siano quindi l'analogo quantistico delle tipiche funzioni sui bits. Tuttavia questo non è possibile, poiché queste porte logiche classiche sono *irreversibili*: noto l'output $A \oplus B$ non è possibile ricavare quali siano gli input in ingresso per A e B [17]; vi è quindi una perdita di informazioni a seguito dell'applicazione di queste porte. In sostanza la differenza con la porta logica quantistica risiede nella unitarietà della matrice che ne definisce l'azione, infatti sappiamo che l'inversa di una matrice unitaria è sempre unitaria e possiamo quindi invertire una porta logica quantistica tramite un'altra porta logica.

2.2.3 Universalità

I criteri di DiVincenzo richiedono che sia possibile trovare un set universale di porte logiche, al fine di realizzare un computer quantistico.

Introduciamo quindi il concetto di universalità esaminando le porte logiche classiche NOT, NAND, XOR. Innanzitutto è possibile dimostrare [17] che qualsiasi funzione

che modifichi i bits classici può essere implementata dalla combinazione di sole porte NAND, di conseguenza questa porta viene definita *universale*. Al contrario le porte logiche XOR e NOT non sono universali: dal momento che le due porte conservano la parità dei bits, se realizzassimo un circuito con soltanto queste due operazioni e avessimo due input con la stessa parità dovremmo restringere la classe di funzioni che possono essere implementate.

In computazione quantistica un set di porte logiche è detto universale se qualsiasi operazione unitaria può essere approssimata con arbitraria accuratezza da un circuito che includa solo quelle porte [17].

Definiamo quindi cosa significa approssimare un operatore unitario. Supponiamo di volere implementare l'operatore U unitario e di ottenere un altro operatore unitario V dello stesso spazio degli stati come implementazione; definiamo quindi come errore quando V viene implementato al posto di U :

$$E(U, V) \equiv \max_{|\psi\rangle} \|(U - V)|\psi\rangle\|, \quad (2.15)$$

dove il massimo è riferito a tutti gli stati normalizzati $|\psi\rangle$ nello spazio degli stati.

Se l'errore (2.15) è piccolo significa che per ogni stato iniziale $|\psi\rangle$ ogni misura che viene effettuata sullo stato $V|\psi\rangle$ restituisce approssimativamente lo stesso risultato di una misura effettuata su $U|\psi\rangle$ e quindi le probabilità di ottenere un certo risultato della misura sono simili, sia che venga applicato U , sia V .

Generalizziamo questa definizione al caso in cui è necessario approssimare una sequenza di operazioni unitarie U_1, \dots, U_m , ottenendo come implementazione V_1, \dots, V_m :

$$E(U_m U_{m-1} \dots U_1, V_m V_{m-1} \dots V_1) \leq \sum_{j=1}^m E(U_j, V_j). \quad (2.16)$$

Sfruttando le definizioni in Eq.(2.15) e Eq.(2.16) e procedendo per step è possibile dimostrare [17] che un operatore unitario arbitrario si può esprimere in modo esatto come prodotto di operatori unitari, i quali agiscono in modo non triviale solo su un sottospazio generato da due stati della base computazionale. Successivamente è possibile dimostrare che un operatore arbitrario unitario può essere espresso in modo esatto usando solo porte logiche a un qubit e CNOT. Infine è possibile approssimare un circuito composto da m porte logiche unitarie su singoli qubits e CNOT, utilizzando solo porte logiche di Hadamard, di fase e $\pi/8$ con accuratezza arbitraria, ovvero si

dimostra che per ottenere un'accuratezza pari a ϵ , con $\epsilon > 0$, è necessario approssimare ogni porta logica su qubit singoli con accuratezza pari a ϵ/m e applicare l'Eq.(2.16). Di conseguenza qualsiasi operazione unitaria può essere approssimata dalle porte di Hadamard, fase, $\pi/8$ e CNOT.

Questa catena di dimostrazioni porta ad affermare che è possibile realizzare un set *universale* di porte logiche quantistiche formato per l'appunto dalle porte di Hadamard (2.11), CNOT (2.14) fase e $\pi/8$ (2.12).

In particolare si ricava [17] tramite il teorema di Solovay-Kitaev che per approssimare con accuratezza ϵ un circuito contenente m CNOT e porte logiche unitarie su singoli qubit sono necessarie $O(m \log^c(m/\epsilon))$ porte logiche del set discreto; quindi l'andamento è polinomiale in $\log(m/\epsilon)$ e si dimostra che la costruzione di un set universale di porte logiche come qui riportato è ottimale [17].

Notiamo però che possono esistere ulteriori famiglie di porte logiche in grado di costituire un set universale.

Capitolo 3

Computazione quantistica ibrida spin-valle

3.1 Realizzazione fisica dei quantum computer

Nel capitolo precedente abbiamo delineato i caratteri principali della computazione quantistica, ma non abbiamo ancora affrontato come effettivamente realizzare un elaboratore quantistico. In questo capitolo vedremo come sfruttare le eccezionali proprietà del grafene per realizzare un qubit ibrido spin-valle.

Inizialmente si daranno alcuni esempi di sistemi che possono costituire un qubit. Successivamente, al fine di realizzare un qubit con il grafene, verrà introdotto il modello di Hubbard per trattare l'interazione a più corpi degli elettroni. Infine si darà un esempio di implementazione di un quantum register con qubit ibridi spin-valle.

Dai criteri di DiVincenzo sappiamo che per realizzare un elaboratore quantistico dobbiamo dare ai qubits una rappresentazione fisica “robusta” in cui si possano racchiudere le loro proprietà quantistiche e dobbiamo avere un sistema in cui questi qubits possano evolvere nel modo desiderato, ovvero tramite trasformazioni unitarie, e possano essere accoppiati; inoltre dobbiamo essere in grado di preparare i qubits in uno stato iniziale definito e infine di operare una misura dello stato finale del sistema. Diamo ora qualche esempio di “cattivi” qubits, per comprendere meglio la difficoltà che è insita nel realizzare con un sistema fisico reale tutte le richieste appena enunciate. L'esempio più facile è dato da una moneta: sebbene abbia due stati classici ben definiti (testa o croce), non riesce a mantenere lo stato di sovrapposizione dei due stati per un tempo

abbastanza lungo da renderla un buon qubit. Al contrario lo spin nucleare sarebbe un buon qubit, dal momento che lo stato di sovrapposizione tra i due stati classici possibili di allineamento con un campo magnetico esterno o contro di esso permane sufficientemente a lungo, tuttavia è difficile misurare in un computer quantistico l'orientazione di un singolo nucleo.

Vediamo ora i principali sistemi con cui vengono attualmente realizzati i qubits[14]. I *Nuclear Magnetic Resonance Qubits*, ovvero i qubits realizzati applicando la risonanza magnetica nucleare, permettono un elevato grado di controllo sul qubit e tempi di rilassamento abbastanza lunghi da arginare il problema della decoerenza; tuttavia vi sono forti limitazioni sulla dimensione che i computer di questo tipo possono conseguire. I computer realizzati con le *ion traps* operano invece su un quantum register formato da una stringa di ioni confinati in un intenso campo magnetico; questi ioni sono eccellenti memorie quantistiche e hanno tempi di decoerenza lunghi.

Un'altra tipologia di recente sviluppo sono i qubits superconduttivi, implementati tramite l'accoppiamento di un dispositivo superconduttivo e di un *microwave resonator* per il controllo e la lettura; in particolare, nel circuito realizzato il dispositivo superconduttivo è dato da una giunzione di Josephson, ovvero due strati di materiale superconduttivo tra cui viene posto un sottile strato di materiale non superconduttivo, la quale permette di ottenere un oscillatore non lineare, in cui lo stato fondamentale e il primo stato eccitato sono sufficientemente separati dagli altri stati eccitati.

È possibile realizzare qubits anche sfruttando le vacanze di azoto nel diamante, che si accoppiano facilmente con i fotoni, ma sono difficilmente controllabili durante la fabbricazione. Infine vi sono gli spin qubits in silicio realizzati sfruttando gli spin degli elettroni nei quantum dots oppure gli spin degli elettroni o dei nuclei degli atomi che costituiscono un'impurità nel silicio in cui sono stati impiantati; per la fabbricazione di simili dispositivi si ha il grande vantaggio di avere un'ampia conoscenza delle tecniche di lavorazione del silicio dato il suo vasto utilizzo in elettronica.

3.1.1 Singolo e doppio quantum dot

Nelle sezioni successive vedremo l'implementazione di qubits in cui i due stati del sistema sono quelli di spin dell'elettrone, in modo tale che si abbiano lunghi tempi di coerenza e una facile scalabilità [24]. Con questi qubits si realizzano sistemi di

quantum-dot accoppiati. Nel caso più semplice si ha *single-spin quantum-dot* (SQD) in cui gli stati possibili sono quelli di spin up/down dell'elettrone e in questo sistema l'operazione a due qubit viene implementata dall'interazione di scambio. Il secondo sistema più semplice è costituito da un doppio quantum-dot (DQD) in cui gli stati sono quelli di singoletto/tripletto; in questo caso l'interazione di scambio controlla lo splitting tra i livelli energetici dei due stati.

Possiamo distinguere un SQD e un DQD sfruttando una semplice analogia: un SQD può essere visto come un atomo artificiale, ovvero un contenitore di grandezza nell'ordine dei nanometri contenente un certo numero di elettroni confinati; il confinamento degli elettroni porta ad avere uno spettro dell'energia discreto, simile a quello di un atomo [26]. Il trasporto di elettroni attraverso i QDs sarà influenzato sia dalla interazione Coulombiana repulsiva, che è necessario superare per introdurre un nuove elettrone nel sistema, sia dagli effetti quantistici causati dal confinamento.

Invece un DQD può essere visto come una molecola, essendo ottenuto dall'accoppiamento di due SQD. Inoltre a seconda della forza del legame tra i dots possiamo distinguere dots con legame simile a quello ionico, e quindi dato da un accoppiamento debole, oppure simile a quello covalente; nel primo caso gli elettroni sono localizzati nel singolo dot, mentre nel secondo caso consideriamo l'elettrone come un'onda coerente che è delocalizzata tra i due dots.

3.2 Doppio quantum-dot ibrido spin-valle

Nel 2014 Rohling *N., et al.* [22] dimostrarono che adoperando DQD ibridi spin-valle, ossia quantum-dots in cui gli stati del sistema dipendono dal grado di libertà di valle e di spin, è possibile realizzare un set universale di operazioni ad uno e due qubits in un quantum register. L'informazione quantistica contenuta in ciascun qubit viene codificata in un DQD, in cui gli stati possibili saranno quelli di singoletto e tripletto, definiti nel seguente modo:

$$|S\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |T_0\rangle = \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (3.1)$$

dove $|0\rangle$ identifica lo stato con spin up e $|1\rangle$ quello con spin down. Per questi due stati non vi è la possibilità fisica di generare transizioni verso gli stati polarizzati del tripletto $|00\rangle$ o $|11\rangle$.

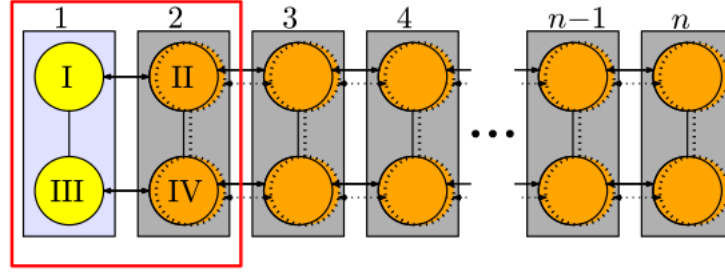


Figura 3.1: Quantum register con qubits ibridi spin-valle con stati di singoletto e tripletto. I dots gialli hanno soltanto grado di libertà di spin; i dots arancioni hanno grado di libertà di spin e di valle e contengono ognuno un qubit con uno spin e una valle. Il rettangolo rosso racchiude l'unità strutturale del sistema. L'interazione di scambio che coinvolge lo spin è rappresentata con una linea piena tra i dots di uno stesso DQD, mentre quella che coinvolge la valle con una linea tratteggiata. L'operazione SWAP è rappresentata da una doppia freccia tra due diversi DQD [22].

Il quantum register implementato è mostrato in Fig.(3.1) ed è composto da n DQD: ogni DQD è formato da due dots della stessa natura, ovvero due dots con solo grado di libertà di spin (I e III), oppure due dots con grado di libertà di spin e di valle (II e IV); l'unità strutturale del sistema è formata quindi da due DQD di diversa natura. I DQD di solo spin non sono descritti da stati di singoletto/tripletto, ma sono polarizzati nello stato $|00\rangle$ o $|11\rangle$ e tra i dots che li compongono possono avvenire solo interazioni di scambio di spin. I DQD di spin-valle hanno invece gli stati in Eq.(3.1) e si avranno interazioni di scambio sia di spin, sia di valle.

3.2.1 Implementazione di operazioni logiche quantistiche nel quantum register

Al fine di realizzare *single-qubit gates* e *two-qubit gates*, consideriamo il sistema in Fig.(3.1). Innanzitutto le operazioni possibili all'interno di un singolo DQD sono quelle di interazione di scambio, mentre tra differenti DQD sono possibili le operazioni denominate SWAP, le quali rappresentano un'alternativa al gate CNOT per la computazione universale. Nel Capitolo 2 abbiamo dimostrato come ottenere un set universale di porte logiche quantistiche con il CNOT, ma viene ulteriormente dimostrato [21] che può essere applicato ai qubits di spin senza intaccare lo stato di valle e viceversa;

in questo caso l'interazione di scambio viene accompagnata da operazioni ad un solo qubit, sia sui qubits di spin, sia di valle. Tuttavia nel caso in cui sia assente la degenerazione di valle, l'interazione di scambio porta ad avere il gate \sqrt{SWAP} , il quale semplicemente scambia gli stati di spin dei due qubits; applicando due volte questo gate e combinandolo con rotazioni di solo spin possiamo riottenere il CNOT.

Come sappiamo dalla trattazione quantistica dei solidi, l'interazione di scambio è rilevante quando gli elettroni non possono più essere considerati liberi [3] e deriva quindi dalla interazione tra gli elettroni vicini o confinati. La trattazione riguardante la funzione d'onda degli elettroni e il principio di Pauli mostrano infatti la possibilità che avvengano scambi di posizione o di spin tra gli elettroni e nel presente caso consideriamo quest'ultima interazione di scambio.

Le operazioni logiche a singolo qubit, implementate con l'interazione di scambio, si hanno solamente nel qubit di solo spin ed è stato dimostrato [16] che questa interazione permette di ottenere gates quantistici universali, se combinata con rotazioni dei qubits di solo spin. Le operazioni a due qubits si implementano nei quantum-dots ibridi, in cui l'interazione di scambio coinvolge spin e valle degli elettroni.

Le operazioni di SWAP coinvolgono dots in differenti DQD: se si ha lo scambio di stato di spin tra due dots nella riga superiore o inferiore dei DQD n e $n - 1$, si usa la notazione $SWAP_s(n, n - 1)$; in particolare nel caso in esame (vedi Fig.3.1) possiamo realizzare questa operazione quando $n = 2$. Con la notazione $SWAP_{sv}(n, n - 1)$ si intende invece l'operazione $SWAP_s \otimes SWAP_v$ che è possibile applicare nei DQD ibridi. La porta logica ad un singolo qubit di valle viene realizzata partendo dal DQD n e applicando nell'ordine:

$$SWAP_{sv}(n, n - 1), SWAP_{sv}(n - 1, n - 2), \dots, SWAP_{sv}(3, 2), SWAP_s(2, 1).$$

L'ultima di queste operazioni trasferisce il qubit di spin dal DQD 2 al DQD 1 e lo stato polarizzato $|00\rangle$ o $|11\rangle$ viene trasferito nel DQD 2. A questo punto possiamo applicare le operazioni ad un solo qubit di valle nel DQD 2 e di spin nel DQD 1 sugli stati $|S\rangle$ e $|T_0\rangle$. Ripetiamo quindi la prima sequenza di operazioni in ordine inverso, in modo tale da trasportare il qubit che era nel DQD 1 fino al DQD n .

Se si vuole realizzare una porta logica a due qubits di valle k e n , con $n > k$, si segue un procedimento analogo al precedente. Inizialmente si applicano nell'ordine:

$$SWAP_{sv}(k, k - 1), SWAP_{sv}(k - 1, k - 2), \dots, SWAP_{sv}(3, 2),$$

$$SWAP_{sv}(n, n-1), SWAP_{sv}(n-1, n-2), \dots, SWAP_{sv}(4, 3).$$

Applichiamo ora nel DQD k un'operazione SWAP sul qubit di spin e di valle; successivamente procediamo con $SWAP_s(2, 1)$, $SWAP_{sv}(3, 2)$, $SWAP_s(2, 1)$ e invertiamo la sequenza per riportare i qubits nella posizione originaria.

In linea con le richieste generali per la computazione quantistica abbiamo dimostrato di poter applicare gates quantistici ai DQD del sistema considerato e di poter invertire il processo per riottenere lo stato iniziale.

In termini di efficienza se si hanno $2(n-1)$ qubits, per realizzare un gate ad un solo qubit per il DQD n -esimo servono $2(n-2)$ operazioni $SWAP_{sv}$, infatti si ripete la sequenza due volte e in aggiunta si hanno due operazioni $SWAP_s$ e i gates a singolo qubit. Se si implementa il procedimento su ogni qubit del quantum register si ha un numero di porte logiche pari a $\sum_{k=2}^n (2k-1) = O(n^2)$.

3.2.2 Modello di Hubbard per la descrizione di doppi quantum-dot ibridi spin-valle

Il modello di Hubbard è il modello che permette di descrivere sia l'interazione repulsiva Coulombiana di un sistema di elettroni interagenti, sia gli effetti quantistici, in assenza dei quali il modello di Hubbard generalizzato è equivalente al modello capacitivo. Quest'ultimo modello considera i quantum-dots connessi tra di loro da una capacità e connessi sempre da una capacità ad un gate posto ad un certo potenziale elettrostatico, permettendo di studiare efficientemente l'interazione Coulombiana quando non si includono gli effetti quantistici. Il modello di Hubbard aggiunge principalmente gli effetti dovuti alla possibilità che un elettrone salti da un sito ad un altro (*hopping*) e gli effetti dovuti allo scambio di spin (*spin-exchange*). A livello microscopico questi effetti derivano dalla sovrapposizione della funzione d'onda dell'elettrone quando si ha un potenziale che lo confina.

Sebbene il modello di Hubbard possa essere ricondotto al modello capacitivo sopprimendo le fluttuazioni quantistiche, non è possibile introdurre *ad hoc* nel modello capacitivo gli effetti quantistici, poiché questo modello assume che l'energia elettrostatica del sistema dipenda dal numero quantico di occupazione di un elettrone in ciascun quantum dot; al contrario risulterà che introducendo gli effetti quantistici questo numero quantico non è più buono, essendo soggetto a fluttuazioni.

Vediamo quindi la formulazione del modello di Hubbard generalizzato. Assumiamo che ogni quantum dot in un DQD possa contenere da zero a due elettroni, che significa considerare soltanto gli orbitali di tipo s . Il sistema si può descrivere con la distribuzione di carica tra i due dots (N_1, N_2) , dove N_i è il numero di elettroni che occupano il dot i .

Dal momento che ogni dot ammette quattro stati possibili, avremo in totale sedici stati possibili e l'Hamiltoniana del sistema sarà una matrice 16×16 . Ad esempio, se considerassimo anche orbitali p si avrebbero fino a sei elettroni per dots ed è possibile dimostrare che si verifica un abbassamento della barriera di potenziale sul singolo sito e le funzioni d'onda sono meno localizzate; il motivo è facilmente intuibile, dal momento che gli orbitali di questo tipo hanno energie maggiori rispetto agli orbitali s .

Le considerazioni che faremo in seguito si baseranno su queste assunzioni e sul vincolo che il numero totale di particelle $N = N_1 + N_2$ e lo spin totale S_z siano conservati; l'Hamiltoniana in questo caso sarà nella forma diagonale a blocchi [27].

Nel Capitolo 1 abbiamo ricavato l'Hamiltoniana in Eq.(1.22) con il formalismo della seconda quantizzazione e il modello di tight-binding per gli elettroni, dove però abbiamo definito gli operatori di creazione e distruzione di un elettrone in un sito reticolare; ora si deve considerare non più il sito reticolare, ma il quantum dot e si deve aggiungere il termine di interazione a due corpi, ottenendo così l'Hamiltoniana generale del sistema [24]:

$$H = \sum_{i,j} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \sum_{hki j} G_{hki j} c_h^\dagger c_k^\dagger c_i c_j \quad (3.2)$$

dove è stato omesso l'indice di spin; in questo caso gli operatori di creazione c_i^\dagger e distruzione c_i agiscono su un elettrone nel quantum dot $i = 1, 2$.

L'Hamiltoniana in Eq.(3.2) può essere separata in quattro termini:

$$H = H_\mu + H_t + H_U + H_J \quad (3.3)$$

dove i termini sono i seguenti:

- $H_\mu = \sum_{i\sigma} (-\mu_i n_{i\sigma})$, che è il termine che descrive il potenziale chimico μ_i nel sito i ; abbiamo definito l'operatore numero dell'elettrone con spin σ come $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$, tale che $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$;
- $H_t = \sum_{\sigma} (-t c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma} + H.c)$, che è il termine di hopping degli elettroni tra i differenti dots;

- H_U dipende dal termine di repulsione Coulombiana sul singolo sito (U_1, U_2) e tra due siti differenti (U_{12});
- H_J include il termine di scambio di spin (J_e), di hopping di una coppia di elettroni (J_p) e di hopping modulato dall'occupazione del dot (J_{t1}, J_{t2}).

Il modello presenta quindi otto parametri ($t, U_{12}, U_1, U_2, J_e, J_p, J_{t1}, J_{t2}$), il cui effetto può essere studiato adoperando il diagramma di stabilità di carica [27]. Assumiamo che $U_1 = U_2 = U$ e $J_{t1} = J_{t2} = J_t$.

I due quantum dots sono disaccoppiati quando tutti i parametri sono nulli tranne l'interazione Coulombiana nel singolo sito ($U \neq 0$), ma questo sistema non è di nostro interesse. Introduciamo quindi il termine di interazione Coulombiana tra i due dots ($U_{12} > 0$); si dimostra che gli autovalori dell'energia in questo caso dipendono linearmente dal potenziale chimico μ_i e dai parametri Coulombiani U e U_{12} . Nel caso in cui $U_1 \neq U_2$ viene rotta la simmetria per permutazioni dei due dots rispetto a $\mu_1 = \mu_2$.

Finché questi sono gli unici parametri non nulli, i numeri quantici di occupazione n_i sono buoni numeri quantici e possiamo identificare lo stato fondamentale con (N_1, N_2) ; quando invece gli altri parametri iniziano ad avere valori finiti, lo stato fondamentale sarà dato da una combinazione lineare degli stati (N_1, N_2) .

Il parametro di hopping t principalmente mischia gli stati che hanno lo stesso numero di elettroni totali N , mentre il parametro J_p gli stati $(2,0)$ e $(0,2)$. Il parametro J_t provoca la rottura della simmetria particella-lacuna e risulta cambiare il valore di t negli stati ad alta occupazione. Infatti il suo valore finito non provoca cambiamenti per gli stati con $N = 0, 1$, mentre modifica il diagramma di stabilità di carica in modo consistente per gli stati con $N = 3, 4$.

Si ricava infine che i valori di J_p e J_e sono piccoli rispetto agli altri parametri Coulombiani.

Applicazione del modello al DQD ibrido

Al fine di studiare un DQD ibrido, consideriamo un sistema composto da uno spin dot e uno spin-valle dot, ovvero i dots I e II in Fig.(3.1), la cui configurazione di carica sarà data da (N_1, N_2) , dove il pedice 1 identifica il dot I nel DQD 1 e il pedice 2 si riferisce al dot II nel DQD 2. In base alle considerazioni appena esposte, applichiamo il modello di Hubbard, considerando non trascurabili soltanto gli effetti quantistici di

hopping di un elettrone tra i due dots, caratterizzati dal parametro t . Gli unici parametri non trascurabili saranno quindi t e U , che è l'energia di repulsione Coulombiana tra due elettroni che si trovano nello stesso sito; la repulsione Coulombiana tra siti differenti U_{12} sarà trascurabile poiché stiamo considerando due dots in differenti DQD. Nel caso in esame consideriamo che nel dot I vi sarà soltanto la possibilità di creazione/distruzione di un elettrone con spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ e si avrà quindi l'operatore numero $n_1 = \sum_{\sigma} c_{1\sigma}^{\dagger} c_{1\sigma}$. Nel caso del dot II si ha l'ulteriore grado di libertà di valle $v = \pm$ e allora $n_2 = \sum_{\sigma, v} c_{2\sigma v}^{\dagger} c_{2\sigma v}$. Possiamo ora ottenere la Hamiltoniana che descrive due elettroni in un DQD:

$$H = H_0 + H_t + H_v \quad (3.4)$$

i cui termini hanno le seguenti definizioni:

- $H_0 = \epsilon \left(\frac{n_1 - n_2}{2} \right) + U \sum_{i=1,2} n_i \left(\frac{n_i - 1}{2} \right)$, dove ϵ è la differenza tra i livelli di energia dei due dots, controllabile tramite l'applicazione di una tensione [21];
- $H_t = \sum_{\sigma v} \left(t c_{1\sigma}^{\dagger} c_{2\sigma v} + H.c \right)$, in cui identifichiamo il termine di hopping in Eq.(3.3), ma con una nuova dipendenza dal grado di libertà di valle che porta ad avere $t_{\pm} = \frac{t(1 \pm e^{i\phi})}{2}$, con t e ϕ parametri reali;
- $H_v = h \sum_{\sigma} \left(c_{2\sigma+}^{\dagger} c_{2\sigma+} - c_{2\sigma-}^{\dagger} c_{2\sigma-} \right)$, che descrive il *valley splitting* con il parametro reale h .

Si dimostra [22] che, a partire dalla Hamiltoniana totale in Eq.(3.4), si ottiene una Hamiltoniana efficace di scambio, che sebbene sia dipendente dal grado di libertà di valle, permette di realizzare un'operazione di SWAP di solo spin. Saranno quindi possibili interazioni di scambio di spin, nonostante la dipendenza dalla valle.

Fondamentalmente la presenza di un altro grado di libertà modifica l'interazione di scambio ed è problematica per la computazione quantistica che sfrutta soltanto lo spin degli elettroni nel materiale. Innanzitutto processi di *tunneling* che prima erano vietati sulla base del principio di Pauli, introducendo il grado di libertà di valle sono ammessi. Un esempio può essere rappresentato dal passaggio da uno stato di tripletto (1, 1) allo stato (0, 2), il quale è ammesso se gli elettroni appartengono a valli differenti. Quindi se ci fosse solo il DOF di spin, ci sarebbe uno *splitting* energetico tra lo stato di singoletto e di tripletto, il quale deriva dalla impossibilità degli elettroni di saltare tra i due dots in uno stato di tripletto, con i due elettroni che hanno spin parallelo; si potrebbe

quindi ottenere gates quantistici universali tramite l'interazione di scambio, che deriva direttamente da questo splitting energetico, e rotazioni di singolo spin [16].

Applicando la trasformazione di Schrieffer-Wolff alla Hamiltoniana in Eq.(3.4) possiamo ottenere una Hamiltoniana efficace nel limite di eccitazioni a basse energie, in cui gli stati ad energie elevate sono eliminati e rimane come contributo soltanto l'interazione di scambio di spin. Dobbiamo ridurre lo spazio di Hilbert della Hamiltoniana totale ad un sottospazio definito da un'appropriata funzione d'onda antisimmetrica, la quale può essere costruita con le funzioni d'onda ortogonalizzate degli elettroni singoli adoperando il determinante di Slater; questa funzione d'onda ci porta ad avere uno spettro energetico a basse energie [12]. Il sottospazio a basse energie ha approssimativamente la configurazione di carica (1, 1) quando non vi è differenza tra i livelli energetici dei due dots.

Il gate di SWAP di solo spin si può ottenere considerando il caso degenero, in cui gli stati degli elettroni sono doppiamente degeneri a causa del DOF di valle. Si ottiene la risoluzione al problema di hopping dallo stato di tripletto (1, 1) agli stati (0, 2) e (2, 0). Prima è però necessario definire lo stato di valle e lo stato ad esso ortogonale:

$$|k\rangle = \frac{(1 + e^{-i\phi})|+\rangle + (1 - e^{-i\phi})|-\rangle}{2}, \quad |k^\perp\rangle = \frac{(1 - e^{-i\phi})|+\rangle + (1 + e^{-i\phi})|-\rangle}{2}, \quad (3.5)$$

dove gli stati $|\pm\rangle$ sono riferiti al DOF di valle v .

Avendo definito questi stati vediamo che il passaggio allo stato (2, 0) dipende come di consuetudine dallo stato di spin, che deve essere di singoletto nel dot di destra, poiché il dot di sinistra è di solo spin. Il passaggio a (0, 2) dipende invece dallo stato di valle del dot di destra: se lo stato è $|k\rangle$, lo stato di spin dovrà essere di singoletto; se lo stato di destra è $|k^\perp\rangle$ allora non vi sono limitazione sullo stato di spin, poichè $|k\rangle$ è vuoto.

In questo caso è importante ricavare il termine di interazione di scambio in questo regime, il quale sarà dato da [22]:

$$J = \frac{4t^2U}{U^2 - \epsilon^2}, \quad (3.6)$$

L'Hamiltoniana efficace dipende linearmente da questo parametro con le seguente relazione:

$$H_{eff}^0 = -JP_S P_k - \tilde{J}P_{k^\perp}, \quad (3.7)$$

dove P_S , P_k e P_{k^\perp} sono i proiettori sullo stato di spin, di valle e sullo stato ortogonale a quello di valle e $\tilde{J} = \frac{t^2}{U-\epsilon}$, il quale è trascurabile se $|U + \epsilon| \ll U$. Vediamo quindi che rimane una dipendenza soltanto dal parametro di hopping t , l'interazione Coulombiana tra due elettroni sullo stesso dot U e la differenza di energia tra i livelli dei due dots ϵ . Dal momento che viene dimostrato [21] che l'interazione di scambio permette di realizzare un gate universale a due qubits all'interno dello stesso DQD ibrido e dal momento che è possibile realizzare, come appena mostrato, un SWAP gate con un alta fedeltà tra differenti DQD, con dipendenza dal parametro J , allora il sistema appena mostrato permette di ottenere l'universalità delle porte logiche quantistiche utilizzate.

3.3 Utilizzo del grafene per la realizzazione di QD

Il grafene, con le sue eccezionali caratteristiche, si presenta come un materiale estremamente promettente per la realizzazione di QDs.

Uno dei problemi per la realizzazione di dispositivi quantistici è la perdita di informazioni causata dalla decoerenza dello spin e uno dei vantaggi che presenta il grafene è il debole accoppiamento spin-orbita, dal momento che gli atomi presenti sono leggeri. Risulta sperimentalmente che le interazioni dovute a questo fattore siano nel range di 0.01-0.2 K [7] e che siano quindi inferiori alle altre scale energetiche che caratterizzano il sistema.

Inoltre risulta che l'interazione iperfine, dovuta all'accoppiamento con lo spin nucleare, è trascurabile, poiché l'isotopo ^{12}C , presente in maggiore abbondanza nel carbonio naturale, ha spin nucleare zero. I tempi di coerenza per i dot in grafene sono stimati essere dell'ordine di 10 μs ; se confrontiamo questa stima con il comportamento di un altro materiale usato per la realizzazione di quantum, ad esempio quantum dots in Arsenuro di Gallio (GaAs), risulta che i tempi di coerenza del grafene sono maggiori di due ordini di grandezza [25].

Viceversa i problemi principali che derivano dall'utilizzo del grafene per la computazione quantistica sono il difficile confinamento degli elettroni e la degenerazione dovuta al grado di libertà di valle.

La prima di queste complicazioni è attribuibile al paradosso di Klein, di cui abbiamo parlato nel Capitolo 1, il quale predice che la trasmissione di un elettrone attraverso

una barriera di potenziale sia pressoché perfetta. Questo comportamento si ha in virtù del fatto che le quasiparticelle nel grafene sono chirali.

Il secondo problema invece deriva dalla possibilità di poter attribuire agli elettroni nel grafene un ulteriore grado di libertà di valle, oltre a quello di spin. Sempre nel Capitolo 1 abbiamo spiegato che i due stati associati alle valli sono legati da una relazione di simmetria per inversione temporale e che essi hanno momento magnetico orbitale intrinseco opposto (vedi Eq.1.36); gli stati dell'elettrone saranno doppiamente degeneri vicino ai punti di Dirac nella prima zona di Brillouin. Abbiamo già notato come questa degenerazione, a causa della quale manca lo splitting energetico tra lo stato di tripletto e di singoletto, è necessario che sia rimossa per operare gates quantistici attraverso l'interazione di scambio.

Inoltre la degenerazione degli stati dell'elettrone rende i tempi di coerenza dello spin più brevi. Si può infatti dimostrare che i DOF di spin e di valle per due elettroni in QDs vicini sono disaccoppiati, quindi l'isospin di valle può essere in uno stato completamente non coerente, mentre lo spin è in uno stato coerente. Otteniamo questo risultato definendo la matrice densità per i due elettroni con DOF di valle degeneri [20]:

$$\rho_v = \frac{|KK\rangle\langle KK| + |K'K\rangle\langle K'K| + |KK'\rangle\langle KK'| + |K'K'\rangle\langle K'K'|}{4}, \quad (3.8)$$

dove $|K\rangle$ e $|K'\rangle$ sono gli stati associati ai due possibili valori del grado di libertà di valle. Includendo anche lo stato di spin $|\phi\rangle$ e assumendo che questo sia uno stato puro, otteniamo la matrice densità $\rho = \rho_v \otimes |\phi\rangle\langle\phi|$.

Tuttavia una volta rimossa questa degenerazione possiamo sfruttare il nuovo grado di libertà per implementare QDs ibridi come mostrato nelle sezioni precedenti.

Nel grafene la degenerazione di valle può essere rimossa applicando un campo magnetico perpendicolare alla superficie [20] oppure sfruttando le proprietà dei GNRs con *armchair edges*. Infatti sappiamo che imponendo le condizioni al contorno caratteristiche di tali bordi è possibile rimuovere la degenerazione di valle e ottenere soluzioni per lo stato fondamentale non-degeneri [5].

L'interazione di scambio J con cui realizzare gates quantistici, come quelli esposti nella Sezione 3.2.1, risulta [25] essere dipendente dal parametro di hopping t , dalla interazione Coulombiana dentro il dot U e dalla interazione Coulombiana tra i dots, viste nella Sezione 3.2.2. In particolare nel regime $t \ll U$ si ha $J = 4t^2/U$, che possiamo ricollegare al risultato ottenuto in Eq.(3.6).

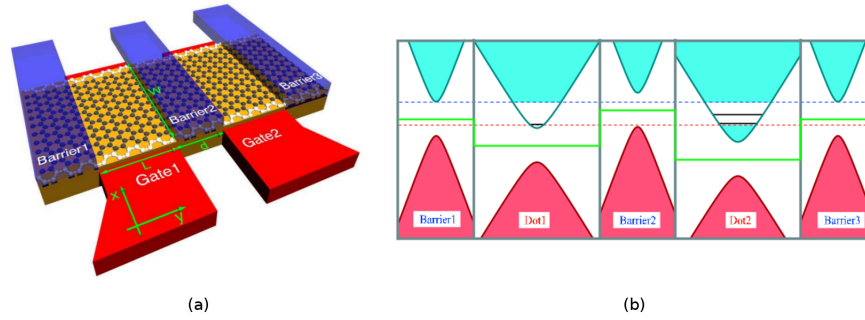


Figura 3.2: (a) Schema di un doppio quantum dot realizzato con GNRs con *armchair edges* (bianco); ogni dot ha lunghezza L e larghezza W . La barriera di potenziale ha spessore d . I gates (rosso) permettono di controllare i livelli energetici dei dots. (b) Bande energetiche di un DQD: in rosa la banda di valenza e in blu la banda di conduzione; nei due dots sono rappresentati gli stati legati (linea nera), accoppiati tramite la banda di valenza della barriera centrale. La linea rossa e blu tratteggiata evidenziano il continuum di stati attraverso la barriera [25].

Inoltre adoperando questa tipologia di GNRs risulta possibile accoppiare i quantum dots sfruttando gli stati nella banda di conduzione e nella banda di valenza presenti nella regione in cui si ha la barriera di potenziale che confina il dot. In Fig.(3.2) è mostrato uno schema della realizzazione di un doppio quantum dot con GNRs con *armchair edges* e uno schema delle bande energetiche in questo sistema. Risulta evidente la possibilità di sfruttare il paradosso di Klein per accoppiare i due dots, attraverso la banda di valenza della barriera di potenziale centrale. Se si volessero disaccoppiare i due dots basterebbe modulare il gap energetico di uno dei dots. Questa possibilità è uno dei maggiori vantaggi del grafene su altri materiali, come per esempio il GaAs, e deriva dal piccolo gap energetico tra le due bande e l'elevata simmetria di queste ultime.

Sebbene i GNRs presentino questi vantaggi, rimane il problema di ridurre le fonti di rumore in tali dispositivi. Una delle possibili scelte di fabbricazione di quantum dots in grafene prevede l'utilizzo di un substrato in Biossido di Silicio (SiO_2), il quale però porta ad avere un'elevata irregolarità delle superficie del grafene ed è quindi fonte di disordine. Come soluzione è stato proposto di depositare il grafene su substrati atomicamente piatti, come il Nitrato di Boro esagonale (hBN). Con questo substrato, la cui superficie risulta atomicamente più liscia rispetto a SiO_2 , l'irregolarità della

superficie del grafene viene significativamente ridotta rispetto al grafene su SiO_2 e la dimensione dei pozzi di carica (*charge puddles*) risulta di un ordine di grandezza superiore a quella che si ha con il SiO_2 , la quale ha diametro di circa 10-30 nm [8]. Viene in questo modo migliorata la mobilità degli elettroni nel grafene.

Un'altra fonte di rumore, il quale causa il rilassamento dello spin degli elettroni nel grafene, è data dalla irregolarità dei bordi dei GNRs o dalle vacanze nel reticolo di atomi di carbonio; questi difetti causano anche la riduzione delle capacità elettriche di trasporto. Al momento le soluzioni che sono state esplorate prevedono l'utilizzo di un doppio strato di grafene sospeso, nel quale è stata dimostrata la realizzazione di quantum dots [2], oppure del grafene funzionalizzato, ad esempio con una copertura di fluoro, al fine di ottenere il confinamento quantico e allo stesso tempo definire su scala nanometrica i bordi del grafene, tramite litografia e irradiazione con un fascio di elettroni [8]. Tuttavia non sono ancora stati riportati esperimenti con quantum dots in grafene funzionalizzato. Un'ulteriore metodo per risolvere questo problema è quello di fabbricare i GNRs atomo per atomo (*atomically precise GNRs*) [6], usando precursori molecolari; recentemente con questa tecnica sono stati ottenuti GNRs con *armchair edges* su Au(111) della larghezza di 13 e 17 atomi, adoperando il dibromobenzene ($\text{C}_6\text{H}_4\text{Br}_2$) come precursore [28].

Conclusioni

In questa trattazione si è voluto analizzare la possibilità di realizzare un sistema per la computazione quantistica con un doppio quantum dot ibrido spin-valle e di adoperare come materiale il grafene.

Il primo obiettivo è stato studiare le proprietà del grafene, le quali risultano derivare dalla sua particolare struttura cristallina e dallo spettro energetico a bande. Il secondo obiettivo è stato quello di dimostrare che un doppio quantum-dot ibrido permette di ottenere l'universalità dei gates quantistici che vengono implementati sul sistema. In questa tipologia di quantum dots vengono sfruttati due gradi di libertà degli elettroni nel grafene, quello di spin e quello di valle, per l'implementazione dei qubits. Si mostra la realizzazione di un set universale di porte logiche quantistiche in un tale sistema adoperando l'interazione di scambio. Nel regime di basse energie risulta possibile sfruttare questa interazione, anche nel caso in cui sia presente il grado di libertà di valle, per applicare operazioni di SWAP di spin e di valle sugli elettroni confinati nel quantum dot.

Il grafene presenta numerosi vantaggi per la costruzione di un doppio quantum dot ibrido. Innanzitutto per il debole accoppiamento spin-orbita e la trascurabile interazione iperfine, dovuti alla sua natura di allotropo di carbonio, si hanno tempi di coerenza dello spin di $10\mu s$, più lunghi rispetto ad altri materiali usati per lo stesso scopo, come il GaAs. Il problema di confinamento degli elettroni, a causa del paradosso di Klein, e della degenerazione degli stati dell'elettrone, attribuita alla presenza del grado di libertà di valle, viene risolto adoperando *Graphene Nanoribbons* con *armchair edges*, dove il gap nullo del grafene esteso viene aperto per via del confinamento quantico laterale. Infatti si mostra l'esistenza di stati non-degeneri, i quali possono essere usati per la realizzazione di un doppio quantum-dot ibrido, e sui quali possiamo operare tramite l'interazione di scambio $J = 4t^2/U$, quando il parametro di hopping t è molto minore

della interazione Coulombiana sul singolo dot U . La chiralità degli elettroni viene in questo caso sfruttata per accoppiare i dots.

Infine rimane il problema della riduzione del disordine causato dalla irregolarità della superficie del grafene, a causa del substrato; una soluzione è quella di adoperare hBN al posto di SiO_2 , che risulta migliorare la mobilità degli elettroni. La formazione di quantum dots con disordine ridotto è stata ottenuta nel grafene sospeso a doppio strato. Per quanto riguarda le fonti di rumore causate dalle irregolarità dei bordi dei GNRs sono state proposte tecniche di crescita assemblata con precursori molecolari e di definizione dei bordi tramite litografia nel grafene funzionalizzato, ad esempio con il fluoro.

Appendice A

Seconda quantizzazione

Formalismo della prima quantizzazione

Consideriamo un sistema ortonormale di autostati $|\lambda\rangle$ di una Hamiltoniana di singola particella, i quali formano una base per uno spazio di Hilbert \mathcal{H} :

$$H|\lambda\rangle = \epsilon_\lambda |\lambda\rangle,$$

dove ϵ_λ sono gli autovalori. A questi stati corrispondono le funzioni d'onda (*rappresentazione delle coordinate*):

$$\psi_\lambda = \langle x|\lambda\rangle,$$

con le quali possiamo costruire le funzioni d'onda di due particelle:

$$\begin{aligned}\psi_F(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{\lambda_1}(x_1)\psi_{\lambda_2}(x_2) - \psi_{\lambda_2}(x_1)\psi_{\lambda_1}(x_2)), \\ \psi_B(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{\lambda_1}(x_1)\psi_{\lambda_2}(x_2) + \psi_{\lambda_2}(x_1)\psi_{\lambda_1}(x_2)),\end{aligned}\tag{A.1}$$

in cui abbiamo denotato con il pedice F la funzione d'onda fermionica, antisimmetrica rispetto allo scambio di particelle nei due stati λ_1 e λ_2 , mentre con il pedice B la funzione d'onda bosonica, simmetrica.

Usiamo ora la notazione di Dirac per gli stati $|\lambda_1, \lambda_2\rangle$:

$$|\lambda_1, \lambda_2\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|\lambda_1\rangle \otimes |\lambda_2\rangle + \zeta |\lambda_2\rangle \otimes |\lambda_1\rangle),\tag{A.2}$$

dove $\zeta = -1$ per i fermioni e $\zeta = 1$ per i bosoni.

Uno stato di N particelle identiche si definisce come:

$$|\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N! \prod_\lambda n_\lambda!}} \sum_P \zeta^{|P|} |\psi_{P(\lambda_1)}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{P(\lambda_N)}\rangle,\tag{A.3}$$

dove la somma è estesa a tutte le permutazioni P dell'insieme dei numeri quantici $\lambda_1, \dots, \lambda_N$; la parità della permutazione è indicata con $|P|$ e n_λ è il numero di particelle nello stato. Per i bosoni i numeri quantici non sono necessariamente distinti, mentre per i fermioni lo devono essere per soddisfare il principio di Pauli e i numeri di occupazione n_λ risultano essere 0 o 1.

Le proprietà di simmetria sono soddisfatte:

$$|\lambda_2, \lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle = \zeta |\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N\rangle. \quad (\text{A.4})$$

Formalismo della seconda quantizzazione

La seconda quantizzazione si ottiene associando ad ogni stato di base di singola particella $|\lambda\rangle$ un operatore di creazione a_λ^\dagger che agisce sugli stati (A.3):

$$a_\lambda^\dagger |\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle = \sqrt{n_\lambda + 1} |\lambda, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N\rangle, \quad (\text{A.5})$$

aggiungendo una particella con i numeri quantici λ .

Nel caso dei fermioni si ha:

$$a_\lambda^\dagger |\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle = \begin{cases} |\lambda, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N\rangle & \text{se } \lambda \text{ non è presente in } \lambda_1, \dots, \lambda_N, \\ 0 & \text{se } \lambda \text{ è presente in } \lambda_1, \dots, \lambda_N, \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

e si nota immediatamente che l'antisimmetrizzazione dello stato è soddisfatta automaticamente dalla definizione (A.5). Nel caso di fermioni l'operatore a_λ^\dagger opera il sottospazio \mathcal{F}_N con N particelle e \mathcal{F}_{N+1} con $N+1$ particelle, entrambi totalmente antisimmetrici rispetto alle permutazioni delle particelle; per i bosoni i due sottospazi saranno totalmente simmetrici. Il sottospazio \mathcal{F}_N è sottospazio dello spazio prodotto di N copie di un medesimo spazio di Hilbert \mathcal{H} :

$$\mathcal{H}^N = \mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}.$$

Definiamo inoltre lo stato vuoto $|0\rangle$ con zero particelle il cui operatore di creazione viene definito come:

$$a_\lambda^\dagger |0\rangle = |\lambda\rangle \quad (\text{A.7})$$

e il cui sottospazio \mathcal{F}_0 è unidimensionale.

Definiamo quindi lo spazio di Fock:

$$\mathcal{F} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{F}_N \quad (\text{A.8})$$

di cui a_λ^\dagger sono operatori.

Definiamo la rappresentazione dei numeri di occupazione ordinando i numeri quantici λ e codifichiamo gli stati specificando i numeri di particelle nei vari stati distinti, ovvero:

$$|\lambda_1, \lambda_2, \dots\rangle = |n_1, n_2, \dots\rangle, \quad N = \sum_j n_j \quad (\text{A.9})$$

e quindi è possibile ridefinire gli operatori di creazione a_j^\dagger nel modo seguente:

$$a_j^\dagger |n_1, \dots, n_j, \dots\rangle \equiv \zeta^{s_j} \sqrt{n_j + 1} |n_1, \dots, n_j + 1, \dots\rangle, \quad s_j = \sum_{k=1}^{j-1} n_k. \quad (\text{A.10})$$

Allora definiamo gli stati di Fock:

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \prod_j \frac{(a_j^\dagger)^{n_j}}{\sqrt{n_j!}} |0\rangle, \quad (\text{A.11})$$

i quali formano una base univoca per lo spazio di Fock \mathcal{F} .

Definiamo ora gli operatori di distruzione, ovvero gli operatori aggiunti di a_j^\dagger :

$$a_j |n_1, \dots, n_j, \dots\rangle \equiv \zeta^{s_j} \sqrt{n_j} |n_1, \dots, n_j - 1, \dots\rangle, \quad s_j = \sum_{k=1}^{j-1} n_k. \quad (\text{A.12})$$

da cui si evince che per lo stato vuoto si avrà

$$a_j |0\rangle = 0.$$

Possiamo verificare che le proprietà di simmetria o di antisimmetria degli stati sono espresse dalle relazioni di commutazione degli operatori ladder a_j e a_j^\dagger :

$$\left[a_j, a_k^\dagger \right]_{-\zeta} = \delta_{jk}, \quad [a_j, a_k]_{-\zeta} = 0, \quad \left[a_j^\dagger, a_k^\dagger \right]_{-\zeta} = 0, \quad (\text{A.13})$$

dove vengono usati i commutatori

$$[A, B]_{\pm} \equiv AB \pm BA.$$

Appendice B

Operatore densità

Mostriamo brevemente le proprietà della matrice densità a seguito dell'applicazione trasformazioni unitarie sui qubit e della misurazione dello stato finale.

Supponiamo che l'operatore unitario U descriva l'evoluzione di un sistema quantistico chiuso con stato iniziale $|\psi_i\rangle$, la cui probabilità p_i . Se a seguito dell'applicazione di U si ottiene lo stato $U|\psi_i\rangle$ con probabilità p_i , allora l'operatore densità si evolverà nel seguente modo:

$$\rho \longrightarrow U\rho U^\dagger = \sum_i p_i U|\psi_i\rangle\langle\psi_i|U^\dagger \quad (\text{B.1})$$

dove ρ è data da Eq.(2.7).

Supponiamo ora di operare una misura sul sistema tramite l'operatore M_m , a seguito della quale si ottiene il risultato m e un ensemble di stati $|\psi_i^m\rangle$ con probabilità $p(i|m)$. Si ricava che questa probabilità è data da:

$$p(i|m) = \frac{p(m,i)}{p(m)} = \frac{p(m|i)p_i}{p(m)} \quad (\text{B.2})$$

dove $p(m|i)$ è la probabilità di ottenere il risultato m a seguito dell'operazione di misura sullo stato $|\psi_i\rangle$, mentre $p(m)$ è la probabilità totale. Queste due probabilità sono rispettivamente definite come:

$$p(m|i) = \langle\psi_i|M_m^\dagger M_m|\psi_i\rangle = \text{tr}(M_m^\dagger M_m|\psi_i\rangle\langle\psi_i|), \quad (\text{B.3})$$

$$p(m) = \sum_i p(m|i)p_i = \text{tr}(M_m^\dagger M_m\rho). \quad (\text{B.4})$$

A questo punto, sostituendo (B.3) e (B.4) in (B.2) troviamo che:

$$p(i|m) = \frac{\langle\psi_i|M_m^\dagger M_m|\psi_i\rangle p_i}{\text{tr}(M_m^\dagger M_m\rho)}. \quad (\text{B.5})$$

Inoltre gli stati $|\psi_i^m\rangle$ si ottengono come:

$$|\psi_i^m\rangle = \frac{M_m |\psi_i\rangle}{\sqrt{\langle\psi_i|M_m^\dagger M_m|\psi_i\rangle}}. \quad (\text{B.6})$$

Ora possiamo ricavare la matrice densità a seguito della misura:

$$\begin{aligned} \rho_m &= \sum_i p(i|m) |\psi_i^m\rangle \langle\psi_i^m| = \sum_i p(i|m) \frac{M_m |\psi_i\rangle \langle\psi_i| M_m^\dagger}{\langle\psi_i|M_m^\dagger M_m|\psi_i\rangle} \\ &= \sum_i \left(\frac{\langle\psi_i|M_m^\dagger M_m|\psi_i\rangle p_i}{\text{tr}(M_m^\dagger M_m \rho)} \right) \left(\frac{M_m |\psi_i\rangle \langle\psi_i| M_m^\dagger}{\langle\psi_i|M_m^\dagger M_m|\psi_i\rangle} \right) \\ &= \sum_i p_i \frac{M_m |\psi_i\rangle \langle\psi_i| M_m^\dagger}{\text{tr}(M_m^\dagger M_m \rho)} \\ &= \frac{M_m^\dagger M_m \rho}{\text{tr}(M_m^\dagger M_m \rho)}. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Volendo quindi trovare l'espressione finale dell'operatore densità utilizziamo (B.4) e (B.7):

$$\rho = \sum_m p(m) \rho_m = \sum_m M_m \rho M_m^\dagger. \quad (\text{B.8})$$

Una delle ragioni di utilità è quella di avere introdotto l'operatore densità consiste proprio nel poter descrivere lo stato di un sistema tramite espressioni compatte come quelle appena esposte. Consideriamo per esempio il caso in cui sia avvenuto un esperimento di misura a seguito del quale si ha un sistema ρ_m con probabilità $p(m)$, in cui però si è persa informazione sul valore di m ; possiamo comunque utilizzare l'espressione in Eq.(B.8) per descrivere lo stato ρ .

Inoltre si dimostra [9] che il valore di aspettazione di un qualunque operatore O relativo al sistema preparato in una miscela con probabilità p_i di stati iniziali $|\psi_i\rangle$ si calcola nel modo seguente:

$$\langle O \rangle = \text{tr}(\rho O) = \sum_i p_i \langle\psi_i|O|\psi_i\rangle \quad (\text{B.9})$$

ed è quindi evidente che non è necessario conoscere tutto lo stato del sistema, ma è sufficiente conoscere la matrice densità.

Bibliografia

- [1] Afonso M. M., Palenzuela J. A., *Recent Trends in the Synthesis of Carbon Nanomaterials* In AA.VV. *Nanomaterials Synthesis: Design, Fabrication and Applications*, Elsevier, pp. 519-555 (2019).
- [2] Allen M., Martin J., Yacoby A., *Gate-defined quantum confinement in suspended bilayer graphene*, Nat. Commun., 3, 934 (2012).
- [3] Ashcroft N.W., Mermin N.D., *Solid State Physics*, Brooks/Cole (1976).
- [4] Bransden B.H., Joachain C.J., *Physics of Atoms and Molecules*, Pearson Education Limited, Seconda Edizione, pp. 533-537 (2003).
- [5] Brey L., Fertig H. A., *Electronic States of Graphene Nanoribbons*, <https://arxiv.org/abs/cond-mat/0603107>(2006).
- [6] Cai J., Ruffieux P., Jaafar R., et al., *Atomically precise bottom-up fabrication of graphene nanoribbons*, Nature, 466, pp. 470–473 (2010).
- [7] Castro Neto, et al., *The Electronic Properties of Graphene*, Rev. Mod. Phys., 81, pp. 109-162 (2009).
- [8] Chiu K. L., Yang Xu, *Single-electron Transport in Graphene-like Nanostructures*, <https://arxiv.org/abs/1601.00986> (2019).
- [9] Degli Esposti Boschi C., *Introduzione alla Teoria dell'Informazione Quantistica*, <https://www.unibo.it/sitoweb/cristian.degliesti/useful-contents/2838efc8>(2019).
- [10] DiVincenzo D. P., IBM, *The Physical Implementation of Quantum Computation*, <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0002077>(2000).

- [11] Di Xiao, Wang Yao, Qian Niu, *Valley Contrasting Physics in Graphene: Magnetic Moment and Topological Transport*, <https://arxiv.org/abs/0709.1274>(2008).
- [12] Ferraro E., De Michielis M., Mazzeo G. et al., *Effective Hamiltonian for the hybrid double quantum dot qubit*, *Quantum Inf Process*, 13, pp. 1155–1173 (2014).
- [13] Geim A., Novoselov K., *The Rise of Graphene*, *Nat. Mater.*, 6, pp. 183–191 (2007).
- [14] Jazaeri F., Beckers A., Tajalli A., Sallese J-M., *A Review on Quantum Computing: Qubits, Cryogenic Electronics and Cryogenic MOSFET Physics*, <https://arxiv.org/abs/1908.02656>(2019).
- [15] Katsnelson M. I., Novoselov K. S., Geim A. K., *Chiral Tunnelling and The Klein Paradox in Graphene*, *Nat. Phys.* 2, pp. 620-625(2006).
- [16] Loss D., DiVincenzo D. P., *Quantum computation with quantum dots*, *Phys. Rev. A*, 57, 1 (1998).
- [17] Nielsen M. A., Chuang I. L., *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press, 10th Anniversary Edition(2000).
- [18] Novoselov et al., *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*, *Science*, 306, 5696, pp. 666-669 (2004).
- [19] Ortolani F., *Appunti di Teoria Quantistica della Materia*, <https://core.ac.uk/download/pdf/11215663.pdf>(2012).
- [20] Recher P., Nilsson J., Burkard G., Trauzettel B., *Bound states and magnetic field induced valley splitting in gate-tunable graphene quantum dots*, *Phys. Rev. B*, 79, 8 (2009).
- [21] Rohling N., Burkard G., *Universal quantum computing with spin and valley states*, *New J. Phys.*, 14, 083008(2012).
- [22] Rohling N., Russ M., Burkard G., *Hybrid Spin and Valley Quantum Computing with Singlet-Triplet Qubits*, *Phys. Rev. Lett.*, 113 (2014).
- [23] Rohling N., Russ M., Burkard G., *Supplemental Material: Hybrid Spin and Valley Quantum Computing with Singlet-Triplet Qubits*, <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.113.176801#supplemental>.

- [24] Shuo Yang, Xin Wang, and Das Sarma S., *Generic Hubbard Model Description of Semiconductor Quantum-dot Spin Qubits*, Phys. Rev. B, 83, 16 (2011).
- [25] Trauzettel B., Bulaev D., Loss D., et al., *Spin qubits in graphene quantum dots*, Nature Phys, 3, pp. 192–196 (2007).
- [26] van der Wiel W. G., et al., *Electron transport through double quantum dots*, Rev. Mod. Phys., 75, 1 (2002).
- [27] Xin Wang, Shuo Yang, Das Sarma S., *Quantum theory of the charge stability diagram of semiconductor double quantum dot systems*, Phys. Rev. B, 84, 11 (2011).
- [28] Yamaguchi J., Hayashi H., Jippo H., et al., *Small bandgap in atomically precise 17-atom-wide armchair-edged graphene nanoribbons*, Commun Mater, 1, 36 (2020).
- [29] Yuhao Kang, Xiang Ni, Xiaojun Cheng, Khanikaev A. B., Genack A. Z., *Pseudo-spin–valley Coupled Edge States in a Photonic Topological Insulator*, Nat. Commun., 9, 3029 (2018).
- [30] Sito ufficiale *American Elements*
<https://www.americanelements.com/carbon-nanorods-7440-44-0>.
- [31] Sito ufficiale *Dissemination of IT for the promotion of Materials Science* : <https://www.doitpoms.ac.uk/>