

Research Paper

Temperature Effect on the Hybrid Electron Spin-oscillation Entanglement in an Anisotropic Two-dimensional Quantum Dot¹

Fatemeh Amiri^{*2} and Fatemeh Mohammadpour³

Received: 2023.08.16

Revised: 2023.11.06

Accepted: 2023.12.13

Abstract

Entanglement plays a fundamental role in the field of quantum computing and quantum communication. In real conditions, a physical system is never isolated and inevitably interacts with its surroundings. Temperature is one of these effects that mainly reduces entanglement. In real conditions, the system is at a non-zero temperature, which will lead to a mixed state. Therefore, in the present work, the combined thermal entanglement of electron spin-oscillation in an anisotropic two-dimensional quantum dot is investigated using the negativity criterion. The results show that the combined entanglements are strongly dependent on the changes of the controllable parameters, such as the Rashba parameter and the magnetic field. The thermal entanglement between the spin and the assembly of oscillators is zero at absolute zero temperature and reaches a maximum with increasing temperature and then tends to zero asymptotically. This temperature, at which the amount of entanglement reaches its maximum value, can be controlled by changing the magnetic field and the coupling of the Rashba parameter. These two factors also control the rate of reaching the asymptotic state. These results provide a way to control the degree of entanglement between electron degrees of freedom, which is a fundamental requirement of quantum information processing.

Keywords: *Hybrid Entanglement, Anisotropic Quantum Dot, The Rashba Parameter, Magnetic Field.*

¹ <https://doi.org/10.22051/ijap.2023.44710.1345>

² Assistant Professor, Department of Physics Education, Farhangian University, Tehran, Iran. (Corresponding Author) Email: amiri@cfu.ac.ir

³ Assistant Professor, Department of Physics Education, Farhangian University, Tehran, Iran. Email: f.mohammadpour@cfu.ac.ir

اثر دما بر درهم‌تنیدگی هیبریدی اسپین - نوسانگری الکترون در یک نقطه کوانتومی دوبعدی ناهمسانگرد^۱

فاطمه امیری*^۲ و فاطمه محمدپور^۳

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۰۵/۲۵

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۲/۰۸/۱۵

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۹/۲۲

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

سال چهاردهم، پیاپی ۳۶، بهار ۱۴۰۳

صص ۲۵ - ۴۴

چکیده:

درهم‌تنیدگی نقشی اساسی در محدوده محاسبات کوانتومی و ارتباطات کوانتومی ایفا می‌کند. در شرایط حقیقی، یک سامانه فیزیکی هرگز ایزوله نیست و به‌صورت اجتناب‌ناپذیری با محیط اطراف خود برهم‌کنش دارد. دمای یکی از این اثرات است که به‌صورت کلان سبب کاهش درهم‌تنیدگی می‌شود. سامانه در شرایط حقیقی در دمایی غیرصفر قرار داشته که منجر به یک حالت آمیخته خواهد شد. از این‌رو، در این مقاله درهم‌تنیدگی گرمایی هیبریدی اسپین - نوسانگری الکترون در یک نقطه کوانتومی دوبعدی ناهمسانگرد با استفاده از سنج منفیت بررسی می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که درهم‌تنیدگی‌های هیبریدی به تغییرات متغیرهای قابل کنترل، چون پارامتر راشبا و میدان مغناطیسی بسیار وابسته است. درهم‌تنیدگی گرمایی بین اسپین و اجتماع نوسانگرها در دمای صفر مطلق صفر بوده و با افزایش دما به یک بیشینه رسیده و پس از آن به صورت مجانبی به سمت صفر میل می‌کند. این دما، که در آن میزان درهم‌تنیدگی به بیشینه مقدار خود می‌رسد، را می‌توان با تغییر میدان مغناطیسی و جفتیدگی راشبا کنترل کرد. این دو عامل همچنین آهنگ رسیدن به حالت مجانبی را کنترل می‌نمایند. این نتایج روشی برای کنترل میزان درهم‌تنیدگی میان درجات آزادی الکترون، که نیاز اساسی پردازش اطلاعات کوانتومی است، در دسترس می‌گذارد.

واژگان کلیدی: درهم‌تنیدگی هیبریدی، نقطه کوانتومی ناهمسانگرد، پارامتر راشبا، میدان مغناطیسی.

¹ <https://doi.org/10.22051/ijap.2023.44710.1345>

^۲ استادیار، گروه آموزش فیزیک، دانشگاه فرهنگیان، تهران، ایران. (نویسنده مسئول) Email: amiri@cfu.ac.ir

^۳ استادیار، گروه آموزش فیزیک، دانشگاه فرهنگیان، تهران، ایران. Email: f.mohammadpour@cfu.ac.ir



۱. مقدمه

درهم تنیدگی کوانتومی سرعت محاسبات و نیز میزان انتقال داده‌ها را در مقایسه با حالت کلاسیک بسیار افزایش می‌دهد. این درهم تنیدگی می‌تواند بین درجات آزادی مختلف یک ذره یا درجات آزادی دو یا چند ذره به وجود آید [۱]. درهم تنیدگی بین درجات آزادی مستقل یک ذره که امروزه به "درهم تنیدگی هیبریدی" مشهور است، یک روش جدید برای پردازش داده‌ها و انتقال داده‌های کوانتومی فراهم کرده است [۲]. در این راستا حالت‌های درهم تنیده هیبریدی یکی از موضوعات بسیار مهم در فناوری داده‌های کوانتومی به‌شمار آمده و به تازگی به‌صورت نظری و تجربی مورد بررسی قرار گرفته‌اند [۳-۶]. تاکنون الگوهای مختلفی با استفاده از حالت‌های درهم تنیده هیبریدی برای رسیدن به اهداف فناوری و پردازش داده‌های کوانتومی ارائه شده است. در این ارتباط، مطالعه ویژگی‌های درهم تنیدگی بین درجات آزادی یک ذره (هیبریدی) در نانو ساختارهای کوانتومی، بلورهای در حد نانو از مواد نیم‌رسانا، یکی از گزینه‌های پیش رو به‌شمار می‌رود. کنترل رفتار حالت‌های الکترون، که شامل درجات آزادی اسپینی و فضایی می‌باشد، در نانو ساختارهای کوانتومی از راه چند عامل صورت می‌پذیرد: اعمال میدان مغناطیسی خارجی که سبب شکست تبهگنی کرامرز و جدا شدن دو حالت اسپینی می‌گردد [۷-۸]. از طرف دیگر، جفتیدگی اسپین-مدار، اثرات راشبا [۹-۱۰] و درسلهوس [۱۱]، که در این گونه ساختارها به‌صورت طبیعی ظاهر شده و سبب جفتیدگی درجات آزادی فضایی و اسپینی می‌شوند، نیز در کنترل رفتار حالت‌های الکترون نقش اساسی را ایفا می‌کنند. از آنجا که حالت‌های الکترون در نانو ساختارها متأثر از محدودیت‌ها و ویژگی‌های نانو ساختار می‌باشد، در سال‌های کنونی، ویژگی‌های اسپینی الکترون و درهم تنیدگی حالت‌های الکترون، اسپینی و فضایی، به‌صورت چشم‌گیری مورد توجه قرار گرفته است [۱۵-۱۲]. بنابراین چنین سامانه‌هایی در پردازش داده‌ها به‌روش کوانتومی می‌تواند نهفته استفاده شود. بر-این‌اساس، در این مقاله درهم تنیدگی هیبریدی در یک نقطه کوانتومی دوبعدی ناهمسانگرد، تحت تأثیر میدان مغناطیسی همراه با اثر راشبا به‌عنوان گزینه‌ای مناسب در پردازش و ذخیره داده‌های کوانتومی مورد بررسی قرار گرفته است.

ساختار مورد بررسی در این مقاله، هیبریدی از دو ماده متفاوت $GaAs$ و $InGaAs$ است که بر روی هم (با فصل مشترک تخت) قرار گرفته‌اند [۱۶]. در چنین نانو ساختارهایی، الکترون‌های رسانش، یک گاز الکترونی دوبعدی را در فصل مشترک تشکیل می‌دهند [۱۷-۱۶]. به‌خاطر شکاف‌های انرژی متفاوت این دو ماده، یک پتانسیل عمیق نامتقارن در راستای عمود بر فصل مشترک تشکیل می‌گردد که منجر به اثر وابسته اسپینی به نام برهم‌کنش اسپین-مدار راشبا می‌شود



[۹-۱۰]. تفاوت مواد در ساختارهای ناهمگن، همراه با میدان‌های الکتریکی خارجی به کار رفته، آزادی حرکت الکترون را کاهش داده و آن را در یک نقطه کوانتومی دوبعدی ناهمسانگرد محدود می‌کند. پتانسیلی که این محدودیت را در هر دو راستای نقطه کوانتومی ایجاد می‌کند، سهمی شکل می‌باشد [۱۸]. از این رو در ادامه، یک الکترون محدود شده در یک نقطه کوانتومی دوبعدی ناهمسانگرد، با محدودیت سهمی شکل در یک میدان مغناطیسی یکنواخت را در نظر گرفته خواهد شد.

الکترون در یک نقطه کوانتومی دوبعدی ناهمسانگرد دارای دو درجه‌ی آزادی فضایی و یک درجه‌ی آزادی اسپینی بوده که هر سه‌ی این درجات از راه اعمال میدان مغناطیسی خارجی (یکنواخت) و اثر راشبا به یکدیگر جفت می‌شوند. اگر نقطه یاد شده از نوع سهموی اختیار شود، همان‌طور که خواهیم دید، درجات آزادی فضایی تبدیل به نوسانگرهای ساده خواهند شد. از آنجا که در این مقاله اثر دما بر درهم‌تنیدگی هیبریدی الکترون در نقطه کوانتومی دوبعدی ناهمسانگرد موردنظر است، فرض می‌شود که سامانه یاد شده در تعادل با منبعی حرارتی در دمای T قرار دارد. بدین ترتیب حالت‌های مختلف الکترون هر یک با احتمالی مشخص در آنسامبل (آمیخته) شرکت می‌نمایند.

در بخش دوم مقاله حاضر، هامیلتونی الکترون در نقطه کوانتومی دوبعدی ناهمسانگرد در یک میدان مغناطیسی یکنواخت همراه با اثر راشبا معرفی خواهد شد. در بخش سوم، به هامیلتونی الکترون در یک نقطه کوانتومی یک تبدیل یکانی اعمال شده که در اثر آن برهم‌کنش‌های نوسانگر-نوسانگر و یکی از نوسانگرها با اسپین استتار می‌شوند. در این صورت با استفاده از هامیلتونی تبدیل‌یافته و با معرفی یک عملگر کازیمیر که ویژه‌مقادیر آن برانگیختگی‌های سامانه را نشان می‌دهد، به محاسبه درهم‌تنیدگی هیبریدی حالت‌های اسپینی و فضایی الکترون در دمای صفر و غیر صفر پرداخته شده است. در ادامه تأثیر عوامل خارجی چون پارامتر راشبا و میدان مغناطیسی بر روی رفتار زمانی و رفتار گرمایی درهم‌تنیدگی مورد بررسی قرار می‌گیرد.

۲. محاسبات

۲.۱. الکترون در یک نقطه کوانتومی ناهمسانگرد دوبعدی

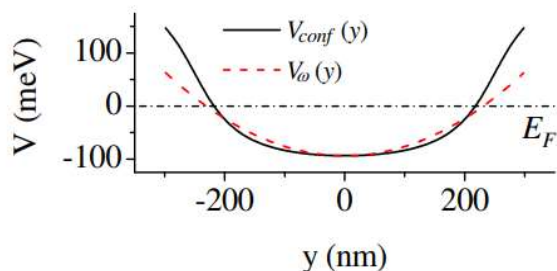
ساختار مورد بررسی در این مقاله، هیبریدی از دو ماده متفاوت ($GaAs/InGaAs$) است که روی هم قرار گرفته و فصل مشترک آن‌ها یک سطح است (در اینجا عمود بر جهت \hat{z}). در فصل مشترک این نانو ساختارها، الکترون‌های رسانش یک گاز الکترونی دوبعدی را تشکیل می‌دهند. با



محدود کردن این گاز در هر دو بعد (در اینجا x و y)، یک نقطه کوانتومی دوبعدی خواهیم داشت که در راستای z توسط ساختار ناهمگن محدود شده است. این محدودیت می‌تواند منشأ متفاوتی داشته باشد. به‌عنوان مثال، پتانسیل الکتریکی ناشی از صفحات فلزی قرار گرفته روی ساختار مورد نظر، یک ناخالصی باری مقید کننده الکترون یا یک ترکیب مادی متفاوت در ناحیه محدودیت را می‌توان نام برد. پتانسیل‌های ناشی از دو مورد آخر، دارای مقادیر ثابتی هستند و نقش مهمی در این سامانه ندارند. پس تنها پتانسیل مؤثر، پتانسیل صفحات فلزی است که در هر بعد می‌تواند به‌صورت زیر وجود داشته باشد [۱۹].

$$v_g = |v_0| \left\{ 1 - \frac{1}{\pi} \left[\arctan \frac{a+y}{b} + \arctan \frac{a-y}{b} \right] \right\} \quad (1)$$

که در آن، v_0 اختلاف پتانسیل اعمال شده بر صفحات فلزی، پارامتر a فاصله میان صفحات فلزی محدود کننده و b فاصله سطح نانو ساختار تا گاز الکترونی دو بعدی می‌باشد [۱۹]. وقتی $\arctan \frac{a \pm y}{b}$ به شرط $1 \ll \left(\frac{a \pm y}{b}\right)^2$ بسط داده شود، نتیجه یک تابع درجه دوم خواهد بود. بنابراین، پتانسیل v_g را می‌توان با یک سهمی به صورت $v(y) = \frac{1}{2} m_e^* \omega_0^2 y^2$ تقریب زد (به صورت مشابه $v(x) = \frac{1}{2} m_e^* \omega_0^2 x^2$ به‌طوری که m_e^* جرم مؤثر الکترون می‌باشد [۱۹].

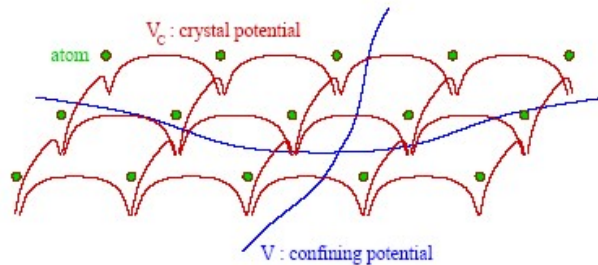


شکل ۱ پتانسیل صفحات فلزی قرار گرفته روی گاز الکترونی دوبعدی (منحنی با خطوط پیوسته) و تقریب سهمی مربوطه (منحنی خط چین) [۱۹].

افزون بر این پتانسیل محدودیت، پتانسیل مؤثر بلور v_c (ناشی از اثر اتم‌های بلور و دیگر الکترون‌ها) را نیز باید در نظر گرفت (شکل (۲)). v_c یک پتانسیل دوره‌ای است با دوره تناوبی بسیار کوچک تر از طول مشخصه پتانسیل‌های $v(x)$ و $v(y)$ (طولی که روی آن پتانسیل محدودیت به صورت



محسوسی تغییر می‌کند) و اثر آن در هامیلتونی سامانه تنها از راه تغییر جرم الکترون m_e و جرم مؤثر m_e^* ظاهر می‌گردد [۲۰].



شکل ۲ پتانسیل میکروسکوپیکی در یک نقطه کوانتومی. دوره تناوب پتانسیل بلور با دوره تناوب بلور برابر است. پتانسیل محدودکننده V یک کمینه موضعی دارد؛ که در آن الکترون می‌تواند محصور شود. طول مشخصه این پتانسیل محدودکننده بسیار بزرگ‌تر از دوره تناوب بلور است [۲۰].

به دلیل تقارن تحت برگشت زمان، حالت اسپینی الکترون در این سامانه دارای تبهگنی کرامرز است که با اعمال یک میدان مغناطیسی یکنواخت و عمود بر صفحه نقطه کوانتومی (در راستای محور Z) برطرف می‌شود. هامیلتونی سامانه الکترون‌های محدودشده با استفاده از پتانسیل سهموی ناهمسانگرد در اثر یک میدان مغناطیسی یکنواخت خارجی و عمود بر سطح آن، همراه با برهم‌کنش اثر اسپین-مدار راشبا در تقریب جرم مؤثر (در نمادگذاری استاندارد) به صورت زیر بیان می‌شود [۸]:

$$H = \frac{(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A})^2}{2m^*} + \frac{1}{2} m_e^* (\omega_{0x}^2 x^2 + \omega_{0y}^2 y^2) - \frac{\alpha}{\hbar} [(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}) \times \vec{\sigma}]_z + \frac{\omega_c m^*}{4m_0} g \sigma_z \quad (2)$$

که در آن تکانه خطی تنها دو مولفه خواهد داشت $\vec{p} = (p_x, p_y, 0)$. اولین جمله در معادله (۲) بیانگر انرژی جنبشی الکترون در حضور میدان مغناطیسی است که با استفاده از پتانسیل برداری \vec{A} بیان می‌شود. $\vec{p} = -i\hbar\nabla$ تکانه الکترون و m^* جرم مؤثر الکترون (در $InGaAs$, $m_e^* = 0.05m_e$ است) می‌باشد. دومین جمله، ناشی از پتانسیل محدودکننده، v_g است. α بیانگر پارامتر راشبا در برهم‌کنش اسپین-مدار و آخرین جمله بیانگر اثر زیمان است.

σ ماتریس‌های پائولی هستند، g بیانگر فاکتور لانداو^۱ مربوط به الکترون (که در $InGaAs$ ، $g = 4$) بوده و $\omega_c = \frac{eB}{m_e^* c}$ فرکانس سیکلوترونی می‌باشد. با انتخاب پیمانه متقارن برای پتانسیل برداری $\vec{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$ ، معادله (۲) را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$H = \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{1}{2} m^* \Omega_x^2 x^2 + \frac{p_y^2}{2m^*} + \frac{1}{2} m^* \Omega_y^2 y^2 + \frac{\omega_c}{2} (xp_y - yp_x) - \frac{\alpha}{\hbar} \left[\left(p_x - \frac{eB}{2c} y \right) \sigma_y - \left(p_y - \frac{eB}{2c} x \right) \sigma_x \right] + \frac{\hbar \omega_c}{4} \frac{m}{m_0} g \sigma_z \quad (3)$$

که در آن $\Omega_{x(y)} = \sqrt{\omega_{0x(y)}^2 + \frac{\omega_c^2}{4}}$ عملگرهای خلق و نابودی یک نوسانگر هماهنگ ساده دوبعدی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$a_{x(y)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m_e^* \Omega_{x(y)}}{\hbar}} x(y) + \sqrt{\frac{1}{\hbar m_e^* \Omega_{x(y)}}} P_{x(y)} \right),$$

$$a_{x(y)}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m_e^* \Omega_{x(y)}}{\hbar}} x(y) - i \sqrt{\frac{1}{\hbar m_e^* \Omega_{x(y)}}} P_{x(y)} \right) \quad (4)$$

عملگرهای خلق و نابودی به صورتی تعریف شده‌اند که رابطه جابه‌جایی زیر برقرار می‌باشد،

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad i, j = x, y \quad (5)$$

در صورتی که عملگرهای مکان و تکانه، در هر بعد، برحسب عملگرهای خلق و نابودی نوسانگر نوشته شود و رابطه جابه‌جایی (۵) استفاده شود، هامیلتونی به شکل زیر خواهد شد:

$$H = \hbar \Omega_x \left(a_x^\dagger a_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar \Omega_y \left(a_y^\dagger a_y + \frac{1}{2} \right) + i \frac{\omega_c}{4} \left(\frac{\Omega_x + \Omega_y}{\Omega_x \Omega_y} \right) (a_x a_y^\dagger - a_x^\dagger a_y) + \hbar \omega_x (a_x \sigma_+ + a_x^\dagger \sigma_-) + i \hbar \omega_y (-a_y \sigma_+ + a_y^\dagger \sigma_-) + \frac{\hbar \omega_c}{4} \frac{m}{m_0} g \sigma_z \quad (6)$$

که در آن، $\omega_{x(y)} = \frac{\alpha}{\hbar^2} \left(\frac{\sqrt{2m\hbar\Omega_{x(y)}}}{2} + \frac{eB}{4c} \sqrt{\frac{2\hbar}{m\Omega_{x(y)}}} \right)$ است و عملگرهای نردبانی اسپین به صورت زیر تعریف می‌شود:

¹ Landau



$$\sigma_{\pm} = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y) \quad (7)$$

در معادله (۶)، دو جمله اول بیانگر انرژی یک نوسانگر ناهمسانگرد دوبعدی با فرکانس‌های Ω_x و Ω_y می‌باشد. جمله سوم بیانگر برهم‌کنش دو نوسانگر است که ناشی از انتخاب پیمانه متقارن در جمله $\vec{A} \cdot \vec{P}$ هامیلتونی است. جملات چهارم و پنجم برهم‌کنش اسپین با نوسانگر، ناشی از برهم‌کنش اسپین-مدار راشبا می‌باشند. جمله آخر نیز برهم‌کنش اسپین و میدان مغناطیسی را نشان می‌دهد که همان اثر زیمان است. در ادامه این هامیلتونی را تحت یک تبدیل یکانی به شکل ساده‌تری درآورده و از آن برای محاسبه اثر دما بر درهم‌تنیدگی هیبریدی حالت‌های الکترون در چنین ساختاری استفاده خواهد شد.

۲.۲. نمایش هامیلتونی سامانه تحت تبدیل یکانی

نشان داده شد که هامیلتونی مربوط به یک الکترون در نقطه کوانتومی ناهمسانگرد دوبعدی همراه با اثر راشبا، بیانگر این است که الکترون به صورت یک نوسانگر دوبعدی در این سامانه پدیدار می‌گردد. همچنین، نشان داده شد که مؤلفه‌های این نوسانگر مستقل نبوده و با هم برهم‌کنش دارند. اما در اینجا با استفاده از یک تبدیل یکانی، هامیلتونی برحسب نوسانگرهای جدیدی بدست خواهد آمد که دارای شکل ساده‌تری باشد. در نهایت هامیلتونی تبدیل یافته برای محاسبه رفتار زمانی درهم‌تنیدگی هیبریدی بین حالت‌های الکترون مورد استفاده قرار خواهد گرفت. از این رو، با اعمال تبدیل یکانی زیر

$$\begin{pmatrix} a_x \\ a_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ i \sin \theta & -i \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_x \\ b_y \end{pmatrix} \quad (8)$$

که در آن، $\theta = \tan^{-1} \frac{\omega_x}{\omega_y}$ است، بر روی هامیلتونی (۶) خواهیم داشت:

$$\tilde{H} = \hbar \left[\sum_{k=x,y} \tilde{\Omega}_k b_k^\dagger b_k + \frac{\omega_c m^*}{4m_0} g \sigma_z + \sqrt{\omega_x^2 + \omega_y^2} (b_x^\dagger \sigma_- + b_x \sigma_+) \right] \quad (9)$$

مشاهده می‌شود که در این نمایش، تبادل انرژی بین نوسانگرها و اسپین-نوسانگر در جهت y وجود ندارد. اثرات این دو نوع برهم‌کنش به ترتیب در فرکانس‌های نوسانی جدید،

$$\begin{aligned}\tilde{\Omega}_x &= \Omega_x \cos^2 \theta + \Omega_y \sin^2 \theta + \lambda \sin 2\theta \\ \tilde{\Omega}_y &= \Omega_x \sin^2 \theta + \Omega_y \cos^2 \theta - \lambda \sin 2\theta\end{aligned}\quad (10)$$

با $\lambda = \frac{\omega_c}{4} \left(\frac{\Omega_x + \Omega_y}{\sqrt{\Omega_x \Omega_y}} \right)$ و قدرت جفتیدگی نوسانگر نوع X و اسپین ظاهر می‌شوند. عملگر تعداد برانگیختگی کل، $N = a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + \sigma_+ \sigma_-$ ، با ویژه مقدار n تحت تبدیلات یکانی ناورداست و با هامیلتونی کل، معادله (۶)، جابه‌جا می‌شود و بنابراین عملگر کازیمیر سامانه است. در نتیجه نمایش هامیلتونی کل در پایه‌های N قطعه‌ای، با بعد $2n+1$ برای هر قطعه قطری است. اگرچه، به آسانی می‌توان نشان داد که هامیلتونی تبدیل یافته، معادله (۹)، با هر دو عملگر $\tilde{N} = \tilde{N}_y = b_y^\dagger b_y$ و $b_x^\dagger b_x + b_y^\dagger b_y + \sigma_+ \sigma_-$ جابه‌جا می‌شود و در نتیجه، هر دو ثابت حرکت هستند. در این صورت هامیلتونی تبدیل یافته، معادله (۹)، برای هر قطعه شامل یک زیر قطعه 1×1 و n تا زیر قطعه 2×2 می‌باشد. از آنجایی که هامیلتونی سامانه نامبرده شامل درجه اسپینی، $|s\rangle$ ، و فضایی $|\tilde{n}_x, \tilde{n}_y\rangle$ می‌باشد، این هامیلتونی در فضای هیلبرت $|\pm\rangle \otimes |\tilde{n}_x, \tilde{n}_y\rangle$ بررسی می‌شود. نمایش هامیلتونی (۹) در نماد دیراک با استفاده از عملگر واحد به صورت زیر بازنویسی می‌شود:

$$\tilde{H} = \sum_{\tilde{n}_x, \tilde{n}_y} \hbar \left(\tilde{\Omega}_y \tilde{n}_y - \frac{\omega_0}{2} \right) |0, \tilde{n}_y, -\rangle \langle 0, \tilde{n}_y, -| + \sum_{\tilde{n}_x, \tilde{n}_y} H(\tilde{n}_x, \tilde{n}_y) \quad (11)$$

در حالی که،

$$\begin{aligned}\tilde{H}(\tilde{n}_x, \tilde{n}_y) &= \hbar [\tilde{\Omega}_x \tilde{n}_x + \tilde{\Omega}_y \tilde{n}_y + \omega_0] |\tilde{n}_x, \tilde{n}_y, +\rangle \langle \tilde{n}_x, \tilde{n}_y, +| \\ &+ \hbar [\tilde{\Omega}_x (\tilde{n}_x + 1) + \tilde{\Omega}_y \tilde{n}_y + \omega_0] |\tilde{n}_x + 1, \tilde{n}_y, -\rangle \langle \tilde{n}_x + 1, \tilde{n}_y, -| \\ &+ \hbar \sqrt{(\omega_x^2 + \omega_y^2)(\tilde{n}_x + 1)} [|\tilde{n}_x, \tilde{n}_y, +\rangle \langle \tilde{n}_x + 1, \tilde{n}_y, -| \\ &+ |\tilde{n}_x + 1, \tilde{n}_y, -\rangle \langle \tilde{n}_x, \tilde{n}_y, +|]\end{aligned}\quad (12)$$

از معادله (۱۱) مشاهده می‌شود که جمله اول قطعه‌های 1×1 و جمله دوم قطعه‌های 2×2 را تشکیل می‌دهد. ویژه مقدار و ویژه حالت قطعات 1×1 به صورت زیر می‌باشد:



$$\tilde{E}(0, \tilde{n}_y) = \hbar(\tilde{\Omega}_y \tilde{n}_y - \frac{\omega_0}{2}) \quad (13)$$

و

$$|\psi(0, \tilde{n}_y)\rangle = |0, \tilde{n}_y, -\rangle \quad (14)$$

درحالی‌که با قطری کردن قطعات 2×2 ، ویژه مقادیر هر قطعه،

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}_1(\tilde{n}_x, \tilde{n}_y)\rangle &= \alpha_1 |\tilde{n}_x, \tilde{n}_y, +\rangle + \alpha_2 |\tilde{n}_x + 1, \tilde{n}_y, -\rangle \\ |\tilde{\psi}_2(\tilde{n}_x, \tilde{n}_y)\rangle &= \alpha_2 |\tilde{n}_x, \tilde{n}_y, +\rangle - \alpha_1 |\tilde{n}_x + 1, \tilde{n}_y, -\rangle \end{aligned} \quad (15)$$

با ویژه مقادیر

$$\tilde{E}_{1,2}(\tilde{n}_x, \tilde{n}_y) = \hbar[\tilde{\Omega}_x(\tilde{n}_x + \frac{1}{2}) + \tilde{\Omega}_y \tilde{n}_y \pm \frac{1}{2}R(\tilde{n}_x)] \quad (16)$$

بدست می‌آیند که در آن‌ها،

$$\alpha_1 = \frac{2\sqrt{(\omega_x^2 + \omega_y^2)(\tilde{n}_x + 1)}}{\sqrt{(\tilde{\Omega}_x - \frac{\omega_c m^*}{4m_0}g + R(\tilde{n}_x))^2 + (\omega_x^2 + \omega_y^2)(\tilde{n}_x + 1)}} \quad (17)$$

که از شرط بهنجارش آن‌ها داریم، و $|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 = 1$

$$R(\tilde{n}_x) = \sqrt{(\tilde{\Omega}_x - \frac{\omega_c m^*}{4m_0}g)^2 + (\omega_x^2 + \omega_y^2)(\tilde{n}_x + 1)} \quad (18)$$

در بخش بعدی از معادلات (۱۳) تا (۱۸) برای محاسبه عملگر چگالی گرمایی استفاده می‌شود.

۳.۲. حالت‌های گرمایی اسپین-اجتماع نوسانگرها

در این بخش هدف محاسبه ماتریس چگالی گرمایی با توجه به ویژه مقادیر و ویژه حالت‌های انرژی سامانه، روابط (۱۵) و (۱۶)، می‌باشد. برای محاسبه درهم‌تنیدگی، با استفاده از معیار منفیت نیاز به ماتریس ترانهاده جزئی چگالی گرمایی سامانه داریم. بنابراین پس از محاسبه ماتریس چگالی گرمایی، ماتریس ترانهاده جزئی آن نیز بررسی خواهد شد. می‌دانیم حالت گرمایی اسپین-

نوسانگری در تعادل با محیط اطراف در دمای T ، بر حسب عملگر چگالی به صورت زیر تعریف می شود،

$$\rho(T) = \frac{1}{Z} \left[\sum_{\tilde{n}_y=0}^{\infty} e^{-\frac{\hbar(\tilde{\Omega}_y \tilde{n}_y - \omega_0)}{K_B T}} \left| 0, \tilde{n}_y, - \right\rangle \left\langle 0, \tilde{n}_y, - \right| + \sum_{i=1,2} \sum_{\tilde{n}_x, \tilde{n}_y} e^{-\frac{E_i(\tilde{n}_x, \tilde{n}_y)}{K_B T}} \left| \psi_i(\tilde{n}_x, \tilde{n}_y) \right\rangle \left\langle \psi_i(\tilde{n}_x, \tilde{n}_y) \right| \right] \quad (19)$$

که در آن Z تابع پارش سامانه، $\beta = \frac{1}{K_B T}$ است (K_B ثابت بولتزمن و T دمای سامانه می باشد). $E_i(\tilde{n}_x, \tilde{n}_y)$ ها و $\left| \psi_i(\tilde{n}_x, \tilde{n}_y) \right\rangle$ ها در رابطه های (۱۵) و (۱۶) داده شده اند. با توجه به معادلات (۱۵) الی (۱۸) عملگر چگالی گرمایی به صورت زیر خواهد بود.

$$\rho(T) = \frac{1}{Z} \left[\sum_{\tilde{n}_x, \tilde{n}_y} (A_{\tilde{n}_x, \tilde{n}_y}(T) \left| \tilde{n}_x, \tilde{n}_y, + \right\rangle \left\langle \tilde{n}_x, \tilde{n}_y, + \right| + B_{\tilde{n}_x, \tilde{n}_y}(T) \left| \tilde{n}_x, \tilde{n}_y, + \right\rangle \left\langle \tilde{n}_x, \tilde{n}_y, + \right| + C_{\tilde{n}_x, \tilde{n}_y}(T) \left(\left| \tilde{n}_x, \tilde{n}_y, + \right\rangle \left\langle \tilde{n}_x + 1, \tilde{n}_y, - \right| + \left| \tilde{n}_x + 1, \tilde{n}_y, - \right\rangle \left\langle \tilde{n}_x, \tilde{n}_y, + \right| \right) \right] \quad (20)$$

که در آن،

$$B_{0, \tilde{n}_y}(T) = e^{-\frac{\hbar(\tilde{\Omega}_y \tilde{n}_y - \omega_0)}{K_B T}},$$

$$A_{\tilde{n}_x, \tilde{n}_y}(T) = e^{-\frac{\hbar(2\tilde{\Omega}_x \tilde{n}_x + 2\tilde{\Omega}_y \tilde{n}_y + \tilde{\Omega}_x)}{K_B T}} \left[\cosh \frac{\hbar R(\tilde{n}_x)}{2K_B T} + \frac{\hbar(\tilde{\Omega}_x - 2\omega_0)}{K_B T} \sinh \frac{\hbar R(\tilde{n}_x)}{2K_B T} \right]$$

$$B_{\tilde{n}_x+1, \tilde{n}_y}(T) = e^{-\frac{\hbar(2\tilde{\Omega}_x \tilde{n}_x + 2\tilde{\Omega}_y \tilde{n}_y + \tilde{\Omega}_x)}{K_B T}} \left[\cosh \frac{\hbar R(\tilde{n}_x)}{2K_B T} - \frac{\hbar(\tilde{\Omega}_x - 2\omega_0)}{K_B T} \sinh \frac{\hbar R(\tilde{n}_x)}{2K_B T} \right], \quad (21)$$



$$C_{\tilde{n}_x, \tilde{n}_y}(T) = \frac{\hbar(2\tilde{\Omega}_x \tilde{n}_x + 2\tilde{\Omega}_y \tilde{n}_y + \tilde{\Omega}_x)}{K_B T} \left[\frac{2\sqrt{(\omega_x^2 + \omega_y^2)(\tilde{n}_x + 1)}}{R(\tilde{n}_x)} \sinh \frac{\hbar R(\tilde{n}_x)}{2K_B T} \right]. \quad (22)$$

در روابط (۱۹) و (۲۰) تابع پارش به صورت زیر بدست می‌آید:

$$Z = \sum_{\tilde{n}_y} e^{-\frac{\hbar(\tilde{\Omega}_y \tilde{n}_y - \omega_0)}{K_B T}} + 2 \sum_{\tilde{n}_x, \tilde{n}_y} e^{-\frac{\hbar(2\tilde{\Omega}_x \tilde{n}_x + 2\tilde{\Omega}_y \tilde{n}_y + \tilde{\Omega}_x)}{K_B T}} \cosh \frac{\hbar R(\tilde{n}_x)}{2K_B T} \quad (23)$$

از آنجا که حالت‌های اسپینی تنها دو حالت $|\pm\rangle$ را شامل می‌شوند، ولی بینهایت حالت نوسانگری وجود دارد، برای سهولت، ماتریس ترانهاده جزئی از عملگر چگالی نسبت به حالت‌های اسپینی بررسی می‌شود. ماتریس ترانهاده جزئی عملگر چگالی به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\langle n, i | \rho^{PT} | m, j \rangle = \langle n, j | \rho | m, i \rangle \text{ or } \langle m, i | \rho | n, j \rangle \quad (24)$$

که در آن i, j حالت‌های اسپینی، m, n حالت‌های نوسانگری و ρ^{PT} عملگر چگالی ترانهاده جزئی می‌باشد. بدین ترتیب عملگر چگالی ترانهاده جزئی برای الکترون در نقطه کوانتومی راشبا و در دمای T به صورت زیر تعریف می‌شود،

$$\rho^{PT}(T) = \frac{1}{Z} \left[\sum_{\tilde{n}_y} A_{0, \tilde{n}_y}(T) |0, \tilde{n}_y, +\rangle \langle 0, \tilde{n}_y, +| + \sum_{\tilde{n}_x, \tilde{n}_y} \rho_{\tilde{n}_x, \tilde{n}_y}^{PT}(T) \right], \quad (25)$$

که در آن،

$$\begin{aligned} \rho_{\tilde{n}_x, \tilde{n}_y}^{PT}(T) = & A_{\tilde{n}_x+1, \tilde{n}_y}(T) |\tilde{n}_x+1, \tilde{n}_y, +\rangle \langle \tilde{n}_x+1, \tilde{n}_y, +| \\ & + B_{\tilde{n}_x, \tilde{n}_y}(T) |\tilde{n}_x, \tilde{n}_y, -\rangle \langle \tilde{n}_x, \tilde{n}_y, -| \\ & + C_{\tilde{n}_x, \tilde{n}_y}(T) (|\tilde{n}_x, \tilde{n}_y, -\rangle \langle \tilde{n}_x+1, \tilde{n}_y, +| + |\tilde{n}_x+1, \tilde{n}_y, +\rangle \langle \tilde{n}_x, \tilde{n}_y, -|) \end{aligned} \quad (26)$$

ماتریس عملگر ترانهاده جزئی در هر قطعه \tilde{n}_x, \tilde{n}_y ثابت را نتیجه می‌دهد.



در روابط (۲۵) و (۲۶)، $A_{\bar{n}_x, \bar{n}_y}(T)$ ، $B_{\bar{n}_x, \bar{n}_y}(T)$ ، $C_{\bar{n}_x, \bar{n}_y}(T)$ ، به همان صورت است که در معادلات (۲۱) و (۲۲) بیان شده است. همان گونه که دیده می شود، هر قطعه از نمایش ماتریسی رابطه (۲۶)، به جز عضو اول که 1×1 است، ماتریس های 2×2 تشکیل می دهد. تک عضو اول در ماتریس چگالی ترانهاده جزئی $A_{0, \bar{n}_y}(T)$ است که در حقیقت، ویژه مقدار این قطعه نیز می باشد. هر قطعه 2×2 را به سادگی می توان قطری نمود و ویژه مقادیر ماتریس ترانهاده جزئی، برای هر قطعه را می توان محاسبه کرد.

۴.۲. شرط ایجاد درهم تنیدگی گرمایی هیبریدی

همان گونه که در بخش قبل مشاهده شد، ماتریس ترانهادهی جزئی از قطعات 1×1 و 2×2 تشکیل می شود. ویژه مقدار قطعه 1×1 مثبت بوده و نقشی در ایجاد درهم تنیدگی ندارد. ویژه مقادیر قطعات 2×2 را می توان به آسانی محاسبه نموده و نتایج زیر را بدست آورد:

$$\lambda^{\pm}(T) = \frac{1}{2} [A_{\bar{n}_x+1, \bar{n}_y}(T) + B_{\bar{n}_x, \bar{n}_y}(T)] \quad (27)$$

$$\pm \sqrt{(A_{\bar{n}_x+1, \bar{n}_y}(T)^2 + B_{\bar{n}_x, \bar{n}_y}(T)^2 - 4(A_{\bar{n}_x+1, \bar{n}_y}(T)B_{\bar{n}_x, \bar{n}_y}(T) - C_{\bar{n}_x, \bar{n}_y}^2(T)))}$$

با توجه به معادله (۲۷) مشاهده می شود که تنها $\lambda^{-}(T)$ می تواند منفی باشد. شرط لازم و کافی برای آنکه $\lambda^{-}(T)$ منفی شود برقراری رابطه زیر می باشد:

$$A_{\bar{n}_x+1, \bar{n}_y}(T)B_{\bar{n}_x, \bar{n}_y}(T) - C_{\bar{n}_x, \bar{n}_y}^2(T) < 0 \quad (28)$$

شرط لازم برای درهم تنیدگی یک سامانه این است که ماتریس ترانهاده جزئی حداقل یک ویژه مقدار منفی داشته باشد. بر اساس این جمله، مجموع ویژه مقادیر ماتریس ترانهاده جزئی عملگر چگالی سامانه، میزان درهم تنیدگی در سامانه را مشخص می کند. هر چه $\lambda^{-}(T)$ ، برای تعداد n های بیشتری منفی باشد و قدر مطلق بزرگتری داشته باشد، درهم تنیدگی در سامانه نیز بیشتر می شود. پس از جایگذاری $A_{\bar{n}_x, \bar{n}_y}(T)$ ، $B_{\bar{n}_x, \bar{n}_y}(T)$ و $C_{\bar{n}_x, \bar{n}_y}(T)$ از روابط (۲۱) و (۲۲) شرط (۲۷) را می توان به صورت زیر بازنویسی کرد:



(۲۹)

$$A_{\tilde{n}_x+1, \tilde{n}_y}(T) B_{\tilde{n}_x, \tilde{n}_y}(T) - C_{\tilde{n}_x, \tilde{n}_y}^2(T) = e^{-\frac{\hbar(\tilde{\Omega}_x(2\tilde{n}_x+1)+2\tilde{\Omega}_y\tilde{n}_y)}{K_B T}}$$

$$\left[\cosh\left(\frac{\hbar\sqrt{\omega_x^2+\omega_y^2}}{2K_B T} \sqrt{\frac{(\tilde{\Omega}_x-\omega_0)^2}{\omega_x^2+\omega_y^2}+4(\tilde{n}_x)}\right) \cosh\left(\frac{\hbar\sqrt{\omega_x^2+\omega_y^2}}{2K_B T} \sqrt{\frac{(\tilde{\Omega}_x-\omega_0)^2}{\omega_x^2+\omega_y^2}+4(\tilde{n}_x+2)}\right) \right.$$

$$\left. + \frac{\frac{\tilde{\Omega}_x-\omega_0}{\omega_x^2+\omega_y^2} \sinh\left(\frac{\hbar\sqrt{\omega_x^2+\omega_y^2}}{2K_B T} \sqrt{\frac{(\tilde{\Omega}_x-\omega_0)^2}{\omega_x^2+\omega_y^2}+4(\tilde{n}_x)}\right) \cosh\left(\frac{\hbar\sqrt{\omega_x^2+\omega_y^2}}{2K_B T} \sqrt{\frac{(\tilde{\Omega}_x-\omega_0)^2}{\omega_x^2+\omega_y^2}+4(\tilde{n}_x+2)}\right)}{\sqrt{\frac{(\tilde{\Omega}_x-\omega_0)^2}{\omega_x^2+\omega_y^2}+4(\tilde{n}_x)}} \right.$$

$$\left. - \frac{\frac{\tilde{\Omega}_x-\omega_0}{\omega_x^2+\omega_y^2} \sinh\left(\frac{\hbar\sqrt{\omega_x^2+\omega_y^2}}{2K_B T} \sqrt{\frac{(\tilde{\Omega}_x-\omega_0)^2}{\omega_x^2+\omega_y^2}+4(\tilde{n}_x+2)}\right) \cosh\left(\frac{\hbar\sqrt{\omega_x^2+\omega_y^2}}{2K_B T} \sqrt{\frac{(\tilde{\Omega}_x-\omega_0)^2}{\omega_x^2+\omega_y^2}+4(\tilde{n}_x)}\right)}{\sqrt{\frac{(\tilde{\Omega}_x-\omega_0)^2}{\omega_x^2+\omega_y^2}+4(\tilde{n}_x+2)}} \right.$$

$$\left. - \frac{\frac{\tilde{\Omega}_x-\omega_0}{\omega_x^2+\omega_y^2} \sinh\left(\frac{\hbar\sqrt{\omega_x^2+\omega_y^2}}{2K_B T} \sqrt{\frac{(\tilde{\Omega}_x-\omega_0)^2}{\omega_x^2+\omega_y^2}+4(\tilde{n}_x+2)}\right) \cosh\left(\frac{\hbar\sqrt{\omega_x^2+\omega_y^2}}{2K_B T} \sqrt{\frac{(\tilde{\Omega}_x-\omega_0)^2}{\omega_x^2+\omega_y^2}+4(\tilde{n}_x)}\right)}{\sqrt{\frac{(\tilde{\Omega}_x-\omega_0)^2}{\omega_x^2+\omega_y^2}+4(\tilde{n}_x+2)}} \right.$$

$$\left. - \frac{\left(\frac{\tilde{\Omega}_x-\omega_0}{\omega_x^2+\omega_y^2}\right)^2 \sinh\left(\frac{\hbar\sqrt{\omega_x^2+\omega_y^2}}{2K_B T} \sqrt{\frac{(\tilde{\Omega}_x-\omega_0)^2}{\omega_x^2+\omega_y^2}+4(\tilde{n}_x+2)}\right) \sinh\left(\frac{\hbar\sqrt{\omega_x^2+\omega_y^2}}{2K_B T} \sqrt{\frac{(\tilde{\Omega}_x-\omega_0)^2}{\omega_x^2+\omega_y^2}+4(\tilde{n}_x)}\right)}{\sqrt{\left[\frac{(\tilde{\Omega}_x-\omega_0)^2}{\omega_x^2+\omega_y^2}+4(\tilde{n}_x+2)\right]\left[\frac{(\tilde{\Omega}_x-\omega_0)^2}{\omega_x^2+\omega_y^2}+4(\tilde{n}_x)}\right]}} \right.$$

$$\left. - \frac{4(\tilde{n}_x+1) \sinh^2\left(\frac{\hbar\sqrt{\omega_x^2+\omega_y^2}}{2K_B T} \sqrt{\frac{(\tilde{\Omega}_x-\omega_0)^2}{\omega_x^2+\omega_y^2}+4(\tilde{n}_x+1)}\right)}{\frac{(\tilde{\Omega}_x-\omega_0)^2}{\omega_x^2+\omega_y^2}+4(\tilde{n}_x+2)} \right]$$

معادله (۲۹)، برای $\tilde{n}_x \gg \frac{(\tilde{\Omega}_x-\omega_0)^2}{\omega_x^2+\omega_y^2}$ به صورت زیر ساده می‌شود:

$$A_{\tilde{n}_x+1, \tilde{n}_y}(T) B_{\tilde{n}_x, \tilde{n}_y}(T) - C_{\tilde{n}_x, \tilde{n}_y}^2(T) \cong e^{-\frac{\hbar(\tilde{\Omega}_x(2\tilde{n}_x+1)+2\tilde{\Omega}_y\tilde{n}_y)}{K_B T}} f_n(x) \quad (۳۰)$$

که در آن،

$$f_n(x) := \cosh\left(\frac{\hbar\sqrt{\omega_x^2+\omega_y^2}}{K_B T} \sqrt{(\tilde{n}_x)}\right) \cosh\left(\frac{\hbar\sqrt{\omega_x^2+\omega_y^2}}{K_B T} \sqrt{(\tilde{n}_x+2)}\right)$$

$$- \sinh^2\left(\frac{\hbar\sqrt{\omega_x^2+\omega_y^2}}{K_B T} \sqrt{(\tilde{n}_x+1)}\right) \quad (۳۱)$$



در صورتی شرط (۲۸) برقرار می‌شود که $f_n(x) < 0$ باشد. اگر معادله بالا را به صورت روشمند، بر حسب \tilde{n}_x^{-1} ، بسط دهیم، در دمای ثابت به شکل زیر تبدیل می‌شود:

$$f_n(x) = 1 - \frac{\frac{2\hbar\sqrt{\omega_x^2 + \omega_y^2}}{KT} e^{\frac{2\hbar\sqrt{\omega_x^2 + \omega_y^2}}{KT}\sqrt{n_x + 1}}}{16(n_x + 1)^{3/4}} \quad (32)$$

روشن است که برای n های بزرگ $f_n(x)$ منفی خواهد شد و شرط (۲۸) برقرار می‌باشد. بنابراین برای n های بزرگ در هر دمایی (به جز دمای صفر) ویژه مقادیر منفی خواهیم داشت. به عبارت دیگر، در هر دمایی ویژه مقادیر قطعه‌ای از ماتریس ترانزیتور خواهد داشت. نتیجه این استدلال آن است که سامانه اسپین-نوسانگری الکترون در نقطه کوانتومی راشبا برای هر دمایی (به جز صفر و بی‌نهایت) درهم‌تنیده می‌باشد. دلیل این امر آن است که تعداد حالت‌های نوسانگری نامتناهی است و دمای محدودی وجود ندارد که بالاتر از آن، $\rho(T)$ جداپذیر شود. در نتیجه، منفیت هیچ‌گاه صفر نخواهد شد و حالت‌های گرمایی اسپین-نوسانگری الکترون در یک نانونقطه ناهمسانگرد راشبا همیشه درهم‌تنیده هستند. یادآوری می‌شود که پرس نشان داده است، که شرط لازم برای درهم‌تنیده بودن یک سامانه، این است که ماتریس چگالی سامانه که به صورت جزئی نسبت به یکی از زیر سامانه‌ها ترانزیتور شده است، حداقل یک ویژه مقدار منفی داشته باشد.

در بخش بعد جزئیات رفتار گرمایی درهم‌تنیدگی هیبریدی حالت‌های الکترون در نقطه کوانتومی ناهمسانگرد راشبا و به ویژه تأثیر میدان مغناطیسی و پارامتر راشبا، به عنوان عوامل کنترلی ارائه و بررسی خواهد شد.

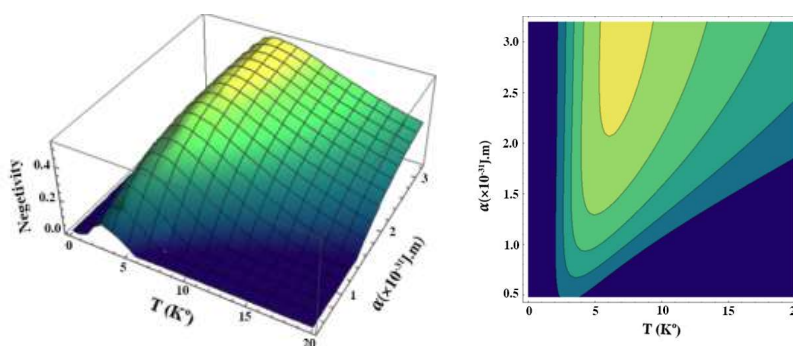
۵.۲. بررسی پارامترهای مؤثر بر درهم‌تنیدگی گرمایی هیبریدی

برای تأیید رفتار کلی درهم‌تنیدگی گرمایی هیبریدی الکترون در نقطه کوانتومی ناهمسانگرد راشبا، رفتار $N(T)$ ، معیار منفیت، بر حسب دما را به صورت عددی محاسبه و در شکل‌های (۳) و (۴) همراه با نمودارهای پربندی متناظر نشان داده شده است. برای ترسیم این شکل‌ها از پارامترهای موجود در منبع [۸] برای $InGaAs / GaAs$ استفاده شد.

با نگاه به شکل (۳) که در آن رفتار منفیت، بر حسب دم و پارامتر راشبا در میدان‌های مغناطیسی ثابت نشان داده شده، مشاهده می‌شود که با افزایش پارامتر راشبا درهم‌تنیدگی افزایش پیدا می‌کند و این



افزایش در دمای پایین رخ می‌دهد. از آنجا که برهم‌کنش اسپین-مدار راشبا، حالت‌های اسپین-نوسانگرها را باهم جفت می‌کند، انتظار می‌رود که با افزایش پارامتر راشبا و ثابت بودن دیگر پارامترها انرژی گرمایی پایین‌تری برای رسیدن به بیشینه همبستگی اسپین-نوسانگری نیاز باشد. همچنین، مشاهده می‌شود که در دماهای بالا، نرخ کاهش منفیت برای مقادیر بزرگ پارامتر راشبا بیشتر است. افزون بر این، مشاهده می‌شود که در دماهای پایین، افزایش پارامتر راشبا منجر به درهم‌تنیدگی بیشتر شده و در دماهای بالا آهسته‌تر به سمت صفر میل می‌کند. این رفتار مشابه رفتار درهم‌تنیدگی در نقطه‌های کوانتومی همسانگرد می‌باشد، با این تفاوت که حالت‌های نقطه کوانتومی همسانگرد در دمای صفر درهم‌تنیده هستند [۲۱].



شکل ۳ نمودار درهم‌تنیدگی هیبریدی اسپین-نوسانگری به صورت تابعی از دما و پارامتر راشبا در یک میدان مغناطیسی ثابت $l_B = 5 \times 10^{-8} m$ (سمت چپ). نمودار پربندی متناظر، نواحی روشن تر نشان دهنده منفیت بیشتر است (سمت راست).

در پایان، به بررسی رفتار منفیت، برحسب دما و میدان مغناطیسی در یک پارامتر راشبای ثابت پرداخته می‌شود. با بررسی شکل (۴) که در آن درهم‌تنیدگی هیبریدی اسپین-نوسانگر نشان داده شده، مشاهده می‌شود که با افزایش میدان مغناطیسی، مقدار درهم‌تنیدگی سامانه اسپین-نوسانگر کاهش می‌یابد و نزدیک شدن آن به مقادیر بسیار کوچک سریع‌تر است. این نتیجه از این حقیقت ناشی می‌شود که به خاطر جمله‌ی زیمنان و میدان مغناطیسی، با افزایش میدان مغناطیسی، جدایی ترازهای انرژی افزایش می‌یابد و جفت‌شدگی راشبا سبب گذارهای کمتری بین حالت‌ها می‌شود. از طرفی، در اینجا انرژی گرمایی نیز سبب ایجاد گذار و ترکیب بیشتری از حالت‌ها می‌گردد. بنابراین، در

درهم تنیدگی گرمایی، افزون بر عوامل مؤثر در درهم تنیدگی زمانی، گرما نیز به درهم تنیدگی کمک می کند. از این رو، برای میدان های مغناطیسی بزرگ تر، انرژی گرمایی بزرگ تری لازم است تا حالت های اسپین - نوسانگری به بیشترین حد همبستگی خود (درهم تنیدگی) برسند. به بیان دیگر، با افزایش میدان مغناطیسی، درهم تنیدگی بین حالت ها در دمای بزرگتری به بیشینه مقدار خود می رسد.

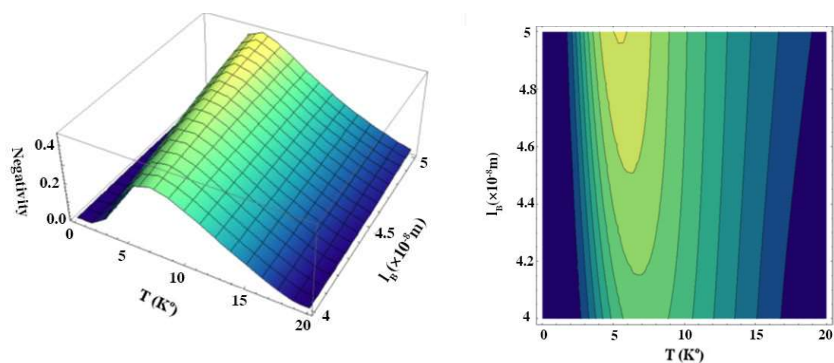
در اینجا نیز مشاهده می شود که حالت های نقطه کوانتومی ناهمسانگرد، برخلاف شرایط همسانگرد جداپذیر هستند و در دمای صفر، برای هیچ مقداری از پارامتر راشبا و میدان مغناطیسی از خود درهم تنیدگی نشان نمی دهند [۲۱]. دلیل این تفاوت در دمای صفر آن است که حالت های فضایی الکترون ها (در اینجا نوسانگردهای ساده) در نقطه کوانتومی همسانگرد برچسب هایی دارند (فرکانس ها) که موجب غیرقابل تمیز بودن الکترون ها می شود. از این رو حالت های الکترون ها از نوع حالت های دیکی^۱ بوده که ذاتا درهم تنیده هستند [۲۲-۲۳]. در حالی که، در نقطه کوانتومی ناهمسانگرد این نکته حقیقت نداشته و سبب می شود حالت های الکترون ها در سامانه ناهمسانگرد در دمای صفر از خود درهم تنیدگی نشان ندهند.

در شکل های (۳) و (۴)، به ترتیب رفتار درهم تنیدگی هیبریدی اسپین - نوسانگری بر حسب دما و پارامتر راشبا در میدان مغناطیسی ثابت و رفتار درهم تنیدگی هیبریدی اسپین - نوسانگری بر حسب دما و میدان مغناطیسی در پارامتر راشبا ثابت نشان داده شده است.

با نگاهی کوتاه به شکل های (۳) و (۴)، دیده می شود که با افزایش دما، میزان درهم تنیدگی افزایش و پس از رسیدن به یک بیشینه قابل کنترل با استفاده از پارامترهای محیط، به صورت مجانبی به سمت صفر میل می کند.

¹ Dicke





شکل ۴ نمودار درهم‌تنیدگی هیبریدی اسپین-نوسانگری به صورت تابعی از دما و میدان مغناطیسی در پارامتر راشبای ثابت $\alpha = 1.5 \times 1.6 \times 10^{-1} \text{ eVm}$ (سمت چپ). نمودار پرنبدی متناظر، نواحی روشن‌تر نشان‌دهنده‌ی منفیت بیشتر است (سمت راست).

۳. نتایج

دما یکی از عوامل مهم در سامانه‌های فیزیکی است که به راحتی قابل کنترل می‌باشد. از این رو، با فرض اینکه سامانه یادشده در تعادل با یک منبع گرمایی بوده و در نتیجه همه حالت‌های اسپینی و فضایی الکترون با احتمالات مشخص رخ دهند، در کار حاضر به بررسی اثر دما در درهم‌تنیدگی حالت‌های اسپینی و برانگیختگی‌های نوسانگر در یک نقطه کوانتومی تحت تأثیر میدان مغناطیسی همراه با اثر راشبا پرداخته شد. محاسبات نشان می‌دهد که درهم‌تنیدگی هیبریدی در ابتدا صفر بوده و سپس شروع به افزایش می‌کند. پس از رسیدن به یک مقدار بیشینه، کاهش یافته و به آرامی به سمت صفر (در دمای بی‌نهایت) میل می‌کند. همچنین نتایج محاسبات نشان می‌دهد که هر کدام از پارامترهای دما، پارامتر راشبا و میدان مغناطیسی روی مقدار کمی درهم‌تنیدگی تأثیر بسزایی دارند. به صورت خلاصه، بررسی درهم‌تنیدگی هیبریدی دمایی نشان می‌دهد که:

- در سامانه‌هایی با بعد (حالت‌های) نامحدود، درهم‌تنیدگی در هیچ دمایی، به جز در دمای صفر و بی‌نهایت، از بین نمی‌رود.
- جفت‌شدگی راشبا رابطه مستقیم با درهم‌تنیدگی دارد. بدین معنا که هر چه این جفت‌شدگی در سامانه بیشتر باشد درهم‌تنیدگی بیشتر خواهد بود.
- با افزایش میدان مغناطیسی، مقدار درهم‌تنیدگی سامانه کاهش می‌یابد.

با توجه به نکات بالا می‌توان پاسخ روشنی برای تولید و کنترل میزان درهم‌تنیدگی میان حالت‌های الکترون (درهم‌تنیدگی هیبریدی) در نقطه‌های کوانتومی دوبعدی فراهم کرد. از این رو می‌توان انتظار

داشت که این سامانه فیزیکی توانایی به کارگیری در فناوری داده‌های کوانتومی را داشته باشد. در این مقاله سعی بر این بود، که عملکرد سامانه مورد بررسی به صورت نظری طراحی شود تا علاقه‌مندان با استفاده از آن با بهره‌گیری از آزمایشات تجربی، سامانه را بهینه‌سازی نمایند.

۴. تقدیر و تشکر

نویسندگان از حمایت‌های معاونت پژوهشی دانشگاه فرهنگیان قدردانی و تشکر کرده، همچنین مراتب امتنان و قدردانی خود را از داوران محترم مقاله بابت نظرات و پیشنهادات ارزشمند ایشان که موجب ارتقای سطح علمی و ساختاری مقاله شده است، صمیمانه ابراز می‌نمایند.

منابع

- [1] Wu P., Du P., Zhang H., and Cai C., " Graphyne-supported single Fe atom catalysts for CO oxidation", *Physical Chemistry Chemical Physics*, **17(2)**, 1441-1449, 2014, <https://doi.org/10.1039/C4CP04181J>
- [2]. Machado B.F and Serp P., " Graphene-based materials for catalysis", *Catal. Sci. Technol.*, **2**, 54-75, 2012, <https://doi.org/10.1039/C1CY00361E>
- [3] Castro Neto A.H., Guinea, F. Peres N.M.R., Novoselov K.S., and Geim A.K., " The electronic properties of graphene", *Rev. Mod. Phys.*, **81(1)**, 109-162, 2009, <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>
- [4] Adamska L., and Sharifzadeh S., " Fine Tuning the Optoelectronic Properties of Freestanding Borophene by Strain", *ACS Omega*, **2**, 8290-8299, 2017, <https://doi.org/10.1021/acsomega.7b01232>
- [5] Yang S.W., Li W., Ye C.C., Wang G., Tian H., Zhu C., He P., Ding G.Q., Xie X.M, Liu Y., Lifshitz Y., Lee S., Kang Z., and Jiang M., "C3N—A 2D crystalline, hole-free, tunable-narrow-bandgap semiconductor with ferromagnetic properties." *Advanced Materials*, **29**, 1605625, 2017, <https://doi.org/10.1002/adma.201605625>
- [6] Makaremi M.,; Mortazavi B., and Singh C., "Adsorption of Metallic, Metalloidal, and 21 Nonmetallic Adatoms on Two-Dimensional C3N", *J. Phys. Chem. C*, **121(34)**, 18575-18583, 2017, <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b04511>
- [7] Rao X., Si Q., Shi T., Han X., and Ma, S., "Fe-doped C3N monolayer as a promising SAC for CO oxidation with low temperature and high reactivity", *Computational and Theoretical Chemistry*, **1194**, 113080, 2021, <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2020.113080>
- [8] Bagheri M., "Electrical and mechanical properties of a fully hydrogenated two-dimensional polyaniline sheet", *Computational Materials Science*, **153**, 126-133, 2018, <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.06.027>
- [9] Bagheri M., and Izadi S., "Polyaniline (C3N) nanoribbons: Magnetic metal, Semiconductor, and Half-Metal", *Applied physics* **124**, 84304, 2018, <https://doi.org/10.1063/1.5042207>
- [10] Xu J., Mahmood J., Dou Y., Dou S., Li F., Dai L., and Baek, J.B., "2D frameworks of C2N and C3N as new anode materials for lithium-ion batteries", *Advanced Materials*, **29(34)**, 1702007, 2017, <https://doi.org/10.1002/adma.201702007>



- [11] He B., Shen J., Ma D., Lu Z., and Yang Z., "Boron-Doped C3N Monolayer as a Promising Metal-Free Oxygen Reduction Reaction Catalyst: A Theoretical Insight", *J. Phys. Chem. C*, **122**, 20312-20322, 2018, <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b05171>.
- [12] Wu, Q., Wongwiryapan W., Park J.H., Sangwoo Park, Jung S.J., Jeong T., Lee S., Young H.L., and Song Y.J., "In situ chemical vapor deposition of graphene and hexagonal boron nitride heterostructures", *Current Applied Physics* **16(9)**, 1175-1191, 2016, <https://doi.org/10.1016/j.cap.2016.04.024>
- [13] Tedstone A.A., Lewis D.J., Hao R., Mao S.M., Bellon P., Averback R.S., et al., "Mechanical Properties of Molybdenum Disulfide and the Effect of Doping: An inSitu TEM Study", *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **7**, **37**, 20829-20834, 2015, <https://doi.org/10.1021/acsami.5b06055>
- [14] EinalipourEshkalak K., Sadeghzadeh S., and Molaei F., "Interfacial Thermal Resistance Mechanism for the Polyaniline (C3N)-Graphene Heterostructure", *J. Phys. Chem. C*, **124**, 14316-14326, 2020, <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c02051>
- [15]. Lau V.H., Mesch M.B., Duppel V., and Blum V., "Low-molecular-weight carbon nitrides for solar hydrogen evolution", *J. Am. Chem. Soc.*, **37**, 1064, 2015, <https://doi.org/10.1021/ja511802c>
- [16]. Geim A.K. and Grigorieva I.V., "Van der Waals heterostructures", *Nature*, **499**, 419-425, 2013, <https://doi.org/10.1038/nature12385>
- [17] Kademi Zahedi R., Shirazi A.H.N., Alimouri P., Alajlan N., and Rabczuk T., "Mechanical properties of graphene-like BC3; a molecular dynamics study", *Comput. Mater. Sci*, **168**, 1-10, 2019, <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.05.053>
- [18] Sahafi M.H., "First-principles investigation of phonon spectrum, elastic, mechanical and thermophysical characteristics of an actinide-oxide ceramic", *J. Solid State Chem.*, 124102, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2023.124102>
- [19] Cai Z., Liu B., Zou X. and Cheng H.M., "Chemical vapor deposition growth and applications of two-dimensional materials and their heterostructures", *Chemical reviews*, **118(13)**, 6091-6133, 2018, <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.7b00536>
- [20] Mendoza-Sánchez B., and Gogotsi Y., "Chemical vapor deposition growth and applications of two-dimensional materials and their heterostructures", *Chemical reviews*, **118(13)**, 6091-6133, 2018, <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.7b00536>
- [21] He B.L., Shen J.S., and Tian Z.X., "Iron-embedded C2N monolayer: a promising low-cost and high-activity single-atom catalyst for CO oxidation", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **18(35)**, 24261, 2016, <https://doi.org/10.1039/C6CP03398A>
- [22] Mahmood J., Lee E.K., Jung M., Shin D., Jeon I.Y., Jung S.M., Choi H.J., Seo J.M., Bae S.Y., Sohn S.D., Park N., Oh J.H., Shin H.J., and Baek J.B., "Nitrogenated holey two-dimensional structures", *Naturecommunications*, **6**, 6486, 2015, <https://doi.org/10.1038/ncomms7486>
- [23] Blaha P., Schwarz K., Madsen G.K.H., Kvasnicka D, Luitz J., Laskowski R., Tran F., and Marks L.D., "wien2k", *An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties*, **60(1)**, 2001.
- [24] Sahafi M.H., and Mahdavi M., "Ab initio investigations on lattice dynamics and thermal characteristics of ThO2 using Debye-Einstein model", *Bull. Mater. Sci.*, **44**, 1-9, 2021. <https://doi.org/10.1007/s12034-021-02370-0>
- [25] Diakite Y.I., Traore S.D., Malozovsky Y., Khamala B., Franklin L., and Bagayoko D., "Accurate Electronic, Transport, and Bulk Properties of Gallium Arsenide (GaAs)", *arXiv preprint arXiv:1601.05300*, 2016, <https://doi.org/10.48550/arXiv.1601.05300>
- [26] Agrawal S., Kaushal G., and Srivastava A., "Electron transport in C3N monolayer: DFT analysis of volatile organic compound sensing", *Chemical Physics Letters*, **762**, 138121, 2021, <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2020.138121>



- [27] Eshrafili M.D., and Heydari S., "Si-doped C₃N monolayers as efficient single-atom catalysts for the reduction of N₂O: a computational study", *Molecular Physics*, **18**, 118, 2020, <https://doi.org/10.1080/00268976.2020.1759830>
- [28] Molaei F., Eshkalak K.E., Sadeghzadeh S., and Siavoshi H., "Assessing mechanical properties of single-layer B-doped C₃N and N-doped BC₃ nanosheets and their hybrid", *Computational Materials Science*, **192**, 110368, 2021, <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110368>
- [29] Bafekry A., Stampfl C., Farjami Shayesteh S., "A First-Principles Study of C₃N Nanostructures: Control and Engineering of the Electronic and Magnetic Properties of Nanosheets, Tubes and Ribbons", *Chem. Phys. Chem.*, **21**, 164, 2020, <https://doi.org/10.1002/cphc.201900852>



This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).

