

Neste trabalho, estudamos como um único defeito de rede em uma caminhada quântica de tempo discreto afeta a probabilidade de retorno de uma partícula quântica. O defeito é modelado por uma moeda quântica na posição de origem do caminhante que é distinta das demais moedas sobre a rede. Essa moeda tem uma dependência explícita com um parâmetro ω que quantifica a intensidade da localização. Investigamos dois diferentes tipos de defeitos para os quais mostramos como a localização pode ter uma dependência apenas com ω (N. Konno, Quantum Inf. Process. **9**, 405, 2010) e também, com os ângulos polar α e azimutal β do qubit inicial (A. Wójcik et al, Phys. Rev. A **85**, 012329, 2012) por meio de cálculos numéricos. Além disso, propomos um novo defeito de rede, cuja localização possui uma dependência adicional em $\beta + \omega$ levando a perfis extras de localização. Comparamos as caminhadas quânticas com nosso defeito de rede às anteriores da literatura e discutimos suas propriedades de propagação e probabilidade de sobrevivência.

Orientador: Edgard Pacheco Moreira Amorim

Joinville, 2021

ANO
2021

LAURITA ISTÉFANI DA SILVA TELES | LOCALIZAÇÃO EM CAMINHADAS QUÂNTICAS
COM UM ÚNICO DEFEITO DE REDE



UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA – UDESC
CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS – CCT
PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM FÍSICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

LOCALIZAÇÃO EM CAMINHADAS QUÂNTICAS COM UM ÚNICO DEFEITO DE REDE

LAURITA ISTÉFANI DA SILVA TELES

JOINVILLE, 2021

Laurita Istéfani da Silva Teles

Localização em Caminhadas Quânticas com um Único Defeito de Rede

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências Tecnológicas da Universidade do Estado de Santa Catarina como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador:
Prof. Dr. Edgard Pacheco Moreira Amorim

**JOINVILLE - SC
2021**

**Ficha catalográfica elaborada pelo programa de geração automática da
Biblioteca Setorial do CCT/UDESC,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)**

Teles, Laurita Istéfani Da Silva

Localização em caminhadas quânticas com um único defeito de rede / Laurita Istéfani Da Silva Teles. -- 2021.

50 p.

Orientador: Edgard Pacheco Moreira Amorim

Dissertação (mestrado) -- Universidade do Estado de Santa Catarina, Centro de Ciências Tecnológicas, Programa de Pós-Graduação em Física, Joinville, 2021.

1. Caminhadas quânticas. 2. Localização. 3. Defeito de rede. 4. Probabilidade de sobrevivência. I. Amorim, Edgard Pacheco Moreira . II. Universidade do Estado de Santa Catarina, Centro de Ciências Tecnológicas, Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

LAURITA ISTÉFANI DA SILVA TELES

**LOCALIZAÇÃO EM CAMINHADAS QUÂNTICAS COM UM
ÚNICO DEFEITO DE REDE**

Dissertação aprovada como requisito parcial para obtenção do título Mestre em Física, na área de Física, no mestrado acadêmico do Programa de Pós Graduação em Física da Universidade do Estado de Santa Catarina.

Banca Examinadora:

Orientador: ASSINADO DIGITALMENTE

Dr. Edgard Pacheco Moreira Amorim
CCT/UDESC

Membros:

ASSINADO DIGITALMENTE

Dr. Rafael Vieira
UFSCAR

ASSINADO DIGITALMENTE

Dr. Fernando Deeke Sasse
CCT/

Joinville, 22 de fevereiro de 2021

Para minha família.

AGRADECIMENTOS

A Deus, minha base.

Aos meus pais, Alda e Jorge, pelo incentivo aos estudos desde sempre, especialmente nesse momento da minha trajetória me apoiando na estadia em outra cidade e fornecendo todo suporte emocional para esse período, por toda dedicação e carinho e por sonharem comigo os meus sonhos.

À minha amada avó, Antonieta (*in memoriam*), por me inspirar e encorajar com seu exemplo de mulher humilde, forte, generosa e temente a Deus. Em cada passo da minha carreira profissional carregue-a comigo com sua promessa de me ver chegar lá!

Aos meus irmãos, Larissa e Jorge, por me incentivarem mesmo de longe, especialmente a Larissa que além de irmã, é minha melhor amiga, por me ouvir em tantos momentos e me cuidar com tanto amor e carinho.

Ao Edgard, meu orientador, pela atenção e paciência, por me proporcionar todo suporte necessário para o trabalho, pelos conhecimentos compartilhados com tanta generosidade, por acreditar na minha capacidade e me incentivar.

Ao professor coordenador Julio Sagás e o secretário do PPGF, Sidnei Otero, por todo auxílio e suporte para o trabalho.

Aos professores do PPGF que participaram da minha formação. Ao professor Luis Fontana pela oportunidade da realização de estágio na sua disciplina.

Aos colegas da sala do mestrado, pela parceria nos estudos e experiências agradáveis, especialmente à Thaís pelo carinho e refúgio.

Aos meus amigos de Joinville, por todo acolhimento e convivência durante esse período, particularmente ao Bruno e a Vanessa, amigos muito especiais que fizeram a diferença nessa jornada.

À CAPES, pelo financiamento da bolsa de estudos durante esse período.

RESUMO

Teles, L. I. S.: *Localização em Caminhadas Quânticas com um Único Defeito de Rede*. Dissertação de Mestrado (Universidade do Estado de Santa Catarina, 2021). 50 p.

Neste trabalho, estudamos como um único defeito de rede em uma caminhada quântica de tempo discreto afeta a probabilidade de retorno de uma partícula quântica. O defeito é modelado por uma moeda quântica na posição de origem do caminhante que é distinta das demais moedas sobre a rede. Essa moeda tem uma dependência explícita com um parâmetro ω que quantifica a intensidade da localização. Investigamos dois diferentes tipos de defeitos para os quais mostramos como a localização pode ter uma dependência apenas com ω (N. Konno, Quantum Inf. Process. **9**, 405, 2010) e também, com os ângulos polar α e azimutal β do qubit inicial (A. Wójcik et al, Phys. Rev. A **85**, 012329, 2012) por meio de cálculos numéricos. Além disso, propomos um novo defeito de rede, cuja localização possui uma dependência adicional em $\beta + \omega$, levando a perfis extras de localização. Comparamos as caminhadas quânticas com nosso defeito de rede às anteriores da literatura e discutimos suas propriedades de propagação e probabilidade de sobrevivência.

Palavras-chave: caminhadas quânticas; localização; defeito de rede; probabilidade de sobrevivência.

ABSTRACT

Teles, L. I. S.: *Localization in Quantum Walks with a Single Lattice Defect*. Master Thesis (Santa Catarina State University, 2021). 50 p.

In this work, we study how a single lattice defect in a discrete time quantum walk affects the return probability of a quantum particle. The defect is modeled by a quantum coin at the starting position of the walker, that is distinct from the others over the lattice. This coin has an explicit dependence on ω which quantifies the intensity of the localization. We investigate two different kinds of defects, which we show how the localization can have a dependence just on ω (N. Konno, Quantum Inf. Process. **9**, 405, 2010) and also, the polar α and azimuth β angles of the initial qubit (A. Wójcik et al, Phys. Rev. A **85**, 012329, 2012) by means of numerical calculations. Moreover, we propose a new lattice defect whose localization has additional dependence on $\beta + \omega$, leading to extra localization profiles. We compare the quantum walks with our lattice defect to the earlier ones from the literature and we discuss their spreading properties and survival probability.

Key-words: quantum walks; localization; lattice defect; survival probability.

Lista de Figuras

1.1	Distribuição de probabilidades comparando uma caminhada aleatória clássica (Gaussiana) e quântica (Hadamard) e suas correspondentes dispersões em função do tempo. Retirado de [7].	18
2.1	Representação do colapso de um qubit para um bit clássico no ato da medida.	23
2.2	Esfera de Bloch.	25
2.3	Representação da atuação dos operadores Hadamard \hat{H} , Fourier \hat{F} e Matriz de Pauli \hat{X} na esfera de Bloch sobre um qubit no estado $ \uparrow\rangle$	26
3.1	Probabilidade de retorno da partícula para $t \rightarrow \infty$ dada pela Eq. 3.7 obtida por Konno [13].	36
3.2	Coeficientes A_n da Eq. 3.8 (linhas sólidas) e os coeficientes correspondentes de F_c da Eq. 3.9 (linhas tracejadas).	38
3.3	Probabilidade $P_0(\omega, t)$ de localização e $\delta = c(\omega) - P_0(\omega, t)$ para $t = 10$ (curvas pretas), 100 (curvas vermelhas) e 1000 (curvas azuis) e $c(\omega)$ (curva tracejada verde).	38
3.4	Probabilidade $P_0(\omega)$ da localização (linhas sólidas) e sobreposição total $F(\omega)$ (linhas tracejadas) entre estados estacionários e qubits iniciais [14] dado pela Eq. 3.11 para os qubits $ \uparrow\rangle$ (preto), $\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\rangle + i \downarrow\rangle)$ (vermelho) e $\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\rangle - i \downarrow\rangle)$ (azul).	40
3.5	Probabilidade $P_0(\omega)$ da localização (curva sólida) para os qubits $ \uparrow\rangle$ (preto), $\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\rangle + i \downarrow\rangle)$ (vermelho) $\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\rangle - i \downarrow\rangle)$ (azul), $\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\rangle + \downarrow\rangle)$ (verde) e $\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\rangle - \downarrow\rangle)$ (marrom).	41
3.6	Probabilidade para $\omega = \pi/2$ em função do qubit inicial (α, β) para o caso do defeito de fase do Wojcik (pontos azuis) [14] e nossa proposta de defeito de rede (pontos laranjas).	42
3.7	Distribuição de probabilidade $P(j)$ da caminhada quântica com um defeito Fourier na origem (\hat{C}_T para $\omega = \pi/2$) e caminhada Hadamard partindo dos qubits iniciais $\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\rangle - \downarrow\rangle)$ e $\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\rangle + i \downarrow\rangle)$, respectivamente, após 100 passos. Os pontos no gráfico são somente para as posições pares e as linhas conectando-os são guias para os olhos. No detalhe: dispersão (Eq. 2.28) para ambos os casos.	43
3.8	Probabilidade de sobrevivência para os qubits $\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\rangle - \downarrow\rangle)$ (círculos pretos), $ \uparrow\rangle$ (quadrados vermelhos) e $\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\rangle + \downarrow\rangle)$ (losangos azuis) para uma caminhada quântica com um defeito Fourier na origem. Os qubits $\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\rangle \pm i \downarrow\rangle)$ tem o mesmo comportamento apresentado pelo $ \uparrow\rangle$. Os pontos no gráfico são somente para passos de tempo pares ($P_0 \neq 0$) e as linhas conectando pontos são somente guias para os olhos.	44

Lista de Tabelas

3.1 Cálculo de $c(\omega)$, $P_0(\omega, 20)$ e $S_0(\omega, 20) = \sum_{n=0}^3 A_n \cos n\omega$ que nos fornece a soma dos quatro primeiros termos da série dada pela Eq. 3.8 para $\omega = \pi/2$ e π 38

4.1 Tipos de defeitos e dependência nos perfis de localização. 47

Sumário

1	Introdução	17
1.1	Organização da dissertação	19
2	Teoria	21
2.1	Caminhada Quântica	21
2.1.1	Qubit	21
2.1.2	Operador Moeda	25
2.1.3	Estado da Caminhada Quântica	28
2.1.4	Quantidades de interesse	30
3	Resultados	33
3.1	Caminhadas Quânticas com um Único Defeito na Rede	33
3.1.1	Moeda Konno \hat{C}_K	35
3.1.2	Moeda Wojcik \hat{C}_W	39
3.1.3	Moeda Proposta \hat{C}_T	40
3.1.4	Propagação e Probabilidade de Sobrevivência	42
4	Conclusões	47
	Bibliografia	49

1 Introdução

Nas últimas três décadas, o estudo de caminhadas aleatórias na versão quântica ganhou espaço na comunidade científica, especialmente por suas implicações no desenvolvimento das áreas de informação e computação quântica [1, 2]. Pioneiros nessa empreitada, Aharonov, Davidovich e Zagury em 1993, extrapolaram o estudo das caminhadas aleatórias clássicas ao associar uma natureza quântica ao caminhante [3, 4]. Classicamente, a caminhada aleatória descreve uma partícula numa rede unidimensional, com probabilidade p de dar um passo de tamanho fixo à direita e $q = 1 - p$ à esquerda. Trata-se portanto de um problema claramente binário de tomada de decisões, podendo ser simulado através de um jogo de lançamento de moedas, cujo resultado desse lançamento, determina a cada passo o movimento da partícula na rede. Ao considerarmos uma partícula quântica, introduzimos um grau de liberdade interno extra à partícula e sua dinâmica é regida por princípios da mecânica quântica.

Do ponto de vista clássico, a caminhada aleatória é tal que cada passo traz uma nova informação que independe do passo anterior. A posição da partícula ao final da caminhada é especulada a partir de um levantamento estatístico da distribuição de probabilidade sobre as posições. Sob a ótica da mecânica quântica, essas probabilidades clássicas dão lugar à amplitudes de probabilidades quânticas, que determinam qual é a probabilidade da partícula ser medida* em uma dada posição. Portanto, enquanto classicamente o problema consiste numa partícula material que segue uma rota específica embora probabilística, no caso quântico, a partícula é descrita por uma função de onda que viaja por todos os caminhos possíveis ao mesmo tempo e suas amplitudes de probabilidade interferem entre si, levando à uma distribuição de probabilidade bastante diferente da versão clássica.

Se na versão clássica consideramos uma caminhada aleatória com igual probabilidade de ir para direita e esquerda, isto é $p = q$, para $t \rightarrow \infty$ tem-se uma distribuição de

*Visto que o aspecto aleatório das caminhadas quânticas é introduzido pelo processo de medida, usaremos a nomenclatura caminhadas quânticas em vez de caminhadas aleatórias quânticas. Nesse trabalho abordaremos apenas sua versão discreta no tempo sobre uma rede regular unidimensional.

probabilidades dada por uma Gaussiana simétrica. A versão quântica para esse problema apresenta uma distribuição completamente diferente, envolvendo dois picos nas extremidades que podem ou não ser simétricos dependendo das condições iniciais da caminhada. A Figura 1.1 mostra um exemplo no qual temos a comparação da distribuição de probabilidades clássica, representada pela Gaussiana, e quântica, de um caso particular assimétrico. Esses picos laterais na distribuição de probabilidade quântica devem-se aos efeitos de interferências destrutivas próximo a origem, o que leva a uma maior concentração de probabilidade nas extremidades do gráfico. Uma característica fundamental que distingue a caminhada clássica da quântica é observada na dispersão $\sigma(t)$ no detalhe da Figura 1.1: enquanto a caminhada clássica fornece uma dispersão $\sigma \propto \sqrt{t}$, a quântica exibe um comportamento balístico, isto é $\sigma \propto t$. Em função disso, caminhadas quânticas possuem potenciais aplicações no que se refere a algoritmos de busca quânticos [5, 6].

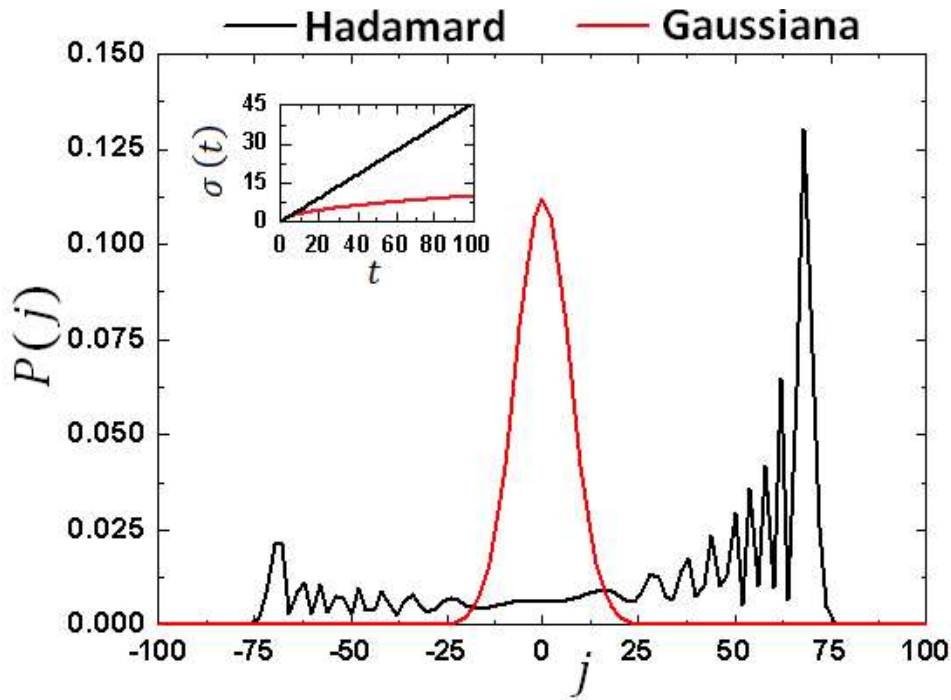


Figura 1.1: Distribuição de probabilidades comparando uma caminhada aleatória clássica (Gaussiana) e quântica (Hadamard) e suas correspondentes dispersões em função do tempo. Retirado de [7].

Caminhadas quânticas descrevem uma caminhada de uma partícula de spin-1/2 dirigida por um operador de evolução temporal unitário. O operador de evolução temporal unitário, por sua vez, é formado por outros dois operadores: a moeda quântica e o operador de translação condicional. A moeda quântica atua no grau de liberdade interno da partícula (estados de spin-1/2) levando a uma nova superposição de estados de spin, então o operador de translação condicional desloca a partícula condicionado ao seu estado

interno. A particular dinâmica quântica de tais caminhadas dão espaço para efeitos de interferência surgirem, resultando em uma propagação que é quadraticamente mais rápida do que sua contraparte clássica, como já mencionado, e também no surgimento de emaranhamento entre posição e spin [2].

De um modo geral, além das aplicações em algoritmos de busca [5, 6], as caminhadas quânticas demonstraram ser fonte de uma perspectiva frutífera para modelar uma vasta gama de fenômenos, tais como a implementação de computação universal primitiva [8, 9], fenômenos biológicos como a fotossíntese [10], até processos sociais como a tomada de decisão humana [11], dentre outras aplicações. Além do mais, a realização física das caminhadas quânticas em diversas plataformas experimentais [12] fazem com que elas sejam uma rota promissora para a construção de um computador quântico. Existem alguns artigos de revisão que fornecem uma ampla visão desse tópico bem como outras de suas aplicações [2, 4, 6, 12].

Uma vez que as caminhadas quânticas possuem propagação balística, a probabilidade de uma partícula quântica retornar a sua posição inicial cai exponencialmente com o tempo [13]. Contudo, um único defeito de fase ou rede nessa posição pode gerar interferência construtiva, localizando o estado quântico que evolui para um estado estacionário considerando passos duplos no tempo [14]. Nesse trabalho de pesquisa, buscamos responder como diferentes tipos de defeitos na posição de origem da partícula quântica podem mudar a localização sob a luz de estudos anteriores [13, 14]. Além disso, apresentamos outro tipo de defeito de rede, comparando seu impacto nas caminhadas quânticas com relação aos outros defeitos da literatura. Para tanto, verificamos os perfis de localização para distintos qubits iniciais, além também de caracterizar algumas propriedades dinâmicas tais como a dispersão e a probabilidade de sobrevivência.

1.1 Organização da dissertação

A dissertação está organizada de maneira que, no próximo capítulo é apresentado a teoria básica com os principais conceitos a respeito das caminhadas quânticas bem como seu formalismo matemático. No terceiro capítulo aborda-se o estudo realizado com os respectivos resultados, detalhando diferentes perfis de localização para defeitos distintos na rede e confrontando-os com os perfis da moeda proposta. Para a moeda proposta, detalhamos seu comportamento no que tange a propagação e probabilidade de

sobrevivência da partícula. Finalmente, o último capítulo traz as conclusões do estudo, resumizando os principais resultados.

Todas as figuras e gráficos presentes nesta dissertação que não possuem fonte indicada na legenda são de própria autoria.

2 Teoria

Neste capítulo abordamos os conceitos básicos por trás das caminhadas quânticas, apresentando seu formalismo matemático bem como as quantidades físicas que serão utilizadas para os cálculos numéricos apresentados no próximo capítulo.

2.1 Caminhada Quântica

O caminhante quântico é descrito por uma partícula de spin-1/2 cujos graus de liberdade interno e externo são dados respectivamente por um qubit e a posição da partícula na rede. A dinâmica da caminhada quântica ocorre pela atuação de um operador unitário aplicado sucessivas vezes a um dado estado inicial do caminhante. Tal operador é composto por outros dois operadores denominados moeda quântica e operador de translação condicional. A seguir, entenderemos cada elemento de uma caminhada quântica e o papel que cada um desempenha para a dinâmica da evolução do seu estado.

2.1.1 Qubit

Na teoria da computação e informação clássica, a unidade básica que carrega a menor porção de informação é o bit, o qual pode ter somente um de dois valores [15]. Então, podemos definir um bit como uma unidade de informação que descreve um sistema clássico bidimensional [16]. Existem muitos exemplos de bits, a citar: corrente elétrica através de um circuito ou não (ou alta e baixa), como uma maneira de denotar "verdadeiro" ou "falso", ou ainda, um interruptor ligado ou desligado. Todos esses exemplos estão descrevendo um conjunto de estados de tamanho 2, tais como $\{0, 1\}$, $\{F, T\}$, etc [16]. No entanto, no mundo quântico, há situações físicas nas quais um dado estado pode ser descrito como 0 e 1 ao mesmo tempo.

O estado quântico é dado pelo vetor ou ket de estado $|\psi\rangle$ (na notação de Dirac) e, é uma entidade abstrata que contém e serve como base para extrair toda informação necessária

sobre o sistema [17], além de carregar informações sobre os resultados de possíveis medidas [18]. O estado $|\psi\rangle$ pertence ao espaço vetorial de Hilbert \mathcal{H} [15, 18, 19] cuja característica da linearidade implica no princípio da superposição, isto é, uma combinação linear de vetores de estado também é um vetor do mesmo espaço de estados

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n a_i |\lambda_i\rangle, \quad (2.1)$$

tal que a_i representam coeficientes complexos e a base é dada por $\{|\lambda_1\rangle, \dots, |\lambda_n\rangle\}$. A dimensionalidade do espaço vetorial \mathcal{H} é dada por n e especificada de acordo com a natureza do sistema físico em consideração [20]. Consequentemente, isso nos leva a uma definição de um qubit (bit quântico) como uma unidade de informação que descreve o estado de um sistema quântico bidimensional sendo completamente definido por um ket de estado $|\psi_c\rangle$ pertencente a um espaço de Hilbert bidimensional \mathcal{H}_c^* e suas bases de estados podem ser denotadas por $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, $\{|H\rangle, |V\rangle\}$, $\{|D\rangle, |E\rangle\}$, $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$, etc.

A implementação mais simples de um qubit pode ser realizada com base nos estados de polarização de um fóton. Nesse caso, pode-se tomar dois estados de polarização como estados quânticos distinguíveis. Por exemplo, o estado $|H\rangle$ pode ser associado com a polarização horizontal e $|V\rangle$ com a polarização vertical. Naturalmente, outras polarizações como a circular e elíptica para direita $|D\rangle$ e esquerda $|E\rangle$, também podem ser utilizadas. Outra simples implementação física para o qubit é considerá-lo a partir dos estados fundamental representado pelo estado $|0\rangle$ e o primeiro estado excitado como $|1\rangle$.

A representação que usaremos ao longo desse trabalho é numa base de spin-1/2 na direção z dado pelos kets de estado $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$, portanto representa-se um qubit como

$$|\psi_c\rangle = a_\uparrow |\uparrow\rangle + a_\downarrow |\downarrow\rangle, \quad (2.2)$$

ou seja, diferente de um bit, um qubit pode estar em ambos os estados $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ simultaneamente. Essa é a interpretação física para um qubit, o que permite ao estado $|\psi_c\rangle$ infinitas possibilidades de armazenamento de informação. No entanto, essa informação encontra-se no nível quântico e torná-la acessível significa efetuar uma medida, o que, pela mecânica quântica, leva o ket $|\psi_c\rangle$ ao colapso em $|\uparrow\rangle$ com $|a_\uparrow|^2$ de probabilidade ou

*O subíndice c refere-se a coin (moeda) e na literatura no contexto das caminhadas quânticas, o qubit é também denominado como uma superposição de estados de moeda.

a $|\downarrow\rangle$ com probabilidade $|a_\downarrow|^2$. O ato de medir altera o estado quântico. Em outras palavras, não é possível extrair toda informação do estado e, após a medição, o estado está no estado $|\uparrow\rangle$ ou $|\downarrow\rangle$. Nesse sentido, a medição torna a informação contida em um qubit equivalente a de um bit clássico [15, 16].

Os estados $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ formam uma base ortonormal em \mathcal{H}_c e são chamadas de base computacional na computação quântica [1] e são representados matricialmente por:

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

e, sendo $|\psi_c\rangle$ normalizado, a condição de normalização exige que $\langle\psi_c|\psi_c\rangle = 1$, de modo que $|a_\uparrow|^2 + |a_\downarrow|^2 = 1$. Podemos perceber então que

$$|\psi\rangle = a_\uparrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + a_\downarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_\uparrow \\ a_\downarrow \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

logo, o que observamos é que um bit clássico é um tipo particular de qubit (com $a_\uparrow = 1$ ou $a_\downarrow = 1$), mas fora desses casos particulares, o qubit existirá num contínuo entre os estados $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ até que seja observado. Como exemplo, a Figura 2.1 ilustra o "colapso" de um qubit para um bit.

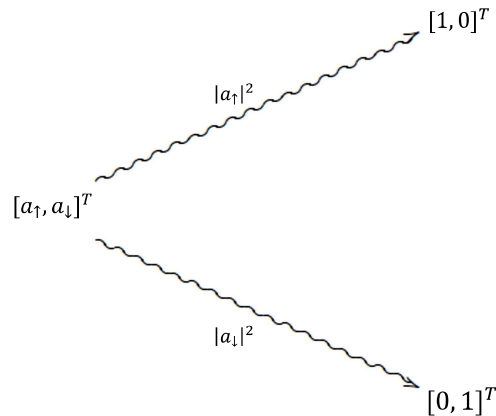


Figura 2.1: Representação do colapso de um qubit para um bit clássico no ato da medida.

Os kets $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ são uma base canônica do \mathbb{C}^2 [16], desse modo, sendo 2.4 uma forma geral para escrever um qubit, podemos assumir que um vetor unitário de \mathbb{C}^2 é um modelo matemático para um qubit [21], pois qualquer elemento não nulo desse espaço vetorial complexo pode ser convertido num qubit [16]. Ainda assim, um modo útil de "pensar" um

qubit é segundo uma representação geométrica [1]. Desse modo, considerando o fato que $a_{\uparrow} = a + ib$ e $a_{\downarrow} = c + id$ são números complexos, o vetor unitário[†] $(a, b, c, d) \in \mathbb{R}^4$ é também um modelo matemático para um qubit e a esfera S^3 de \mathbb{R}^4 é o lugar geométrico dos qubits [21]. Numa representação esférica, podemos reduzir para dois graus de liberdade (por exemplo, latitude e longitude) [16], reescrevendo os coeficientes a_{\uparrow} e a_{\downarrow} na forma polar $a_{\uparrow} = a + ib = \rho_{\uparrow}(\cos \phi_{\uparrow} + i \sin \phi_{\uparrow}) = \rho_{\uparrow}e^{i\phi_{\uparrow}}$ e $a_{\downarrow} = c + id = \rho_{\downarrow}(\cos \phi_{\downarrow} + i \sin \phi_{\downarrow}) = \rho_{\downarrow}e^{i\phi_{\downarrow}}$, portanto a equação 2.2 pode ser reescrita na forma que segue:

$$|\psi\rangle = \rho_{\uparrow}e^{i\phi_{\uparrow}}|\uparrow\rangle + \rho_{\downarrow}e^{i\phi_{\downarrow}}|\downarrow\rangle, \quad (2.5)$$

e evidenciando o termo $e^{i\phi_{\uparrow}}$,

$$|\psi\rangle = e^{i\phi_{\uparrow}}(\rho_{\uparrow}|\uparrow\rangle + \rho_{\downarrow}e^{i(\phi_{\downarrow}-\phi_{\uparrow})}|\downarrow\rangle). \quad (2.6)$$

É interessante notar que $e^{i\phi_{\uparrow}}|\psi\rangle$ é equivalente a $|\psi\rangle$, pois esse fator de fase global, não tem efeito observável, uma vez que $|e^{i\phi_{\uparrow}}|\psi\rangle|^2 = e^{-i\phi_{\uparrow}}e^{i\phi_{\uparrow}}\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = ||\psi\rangle|^2$, sendo portanto irrelevante. Agora, nos restam três parâmetros reais $\beta = \phi_{\downarrow} - \phi_{\uparrow}$, ρ_{\uparrow} e ρ_{\downarrow} , mas usando a condição de normalização temos que $|a_{\uparrow}|^2 + |a_{\downarrow}|^2 = |\rho_{\uparrow}|^2 + |\rho_{\downarrow}|^2 = 1$, que podemos reescrever como $|\rho_{\uparrow}| = \cos \theta$ e $|\rho_{\downarrow}| = \sin \theta$ tal que $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$. Tomando $\alpha = 2\theta$, o qubit pode ser representado agora na sua forma polar

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\alpha}{2}|\uparrow\rangle + \sin \frac{\alpha}{2}e^{i\beta}|\downarrow\rangle, \quad (2.7)$$

com $0 \leq \alpha \leq \pi$ e $0 \leq \beta \leq 2\pi$ na representação da esfera de Bloch.

Na esfera de Bloch na Figura 2.2, o pólo norte representa o qubit $|\uparrow\rangle$ enquanto o pólo sul representa o $|\downarrow\rangle$. Por outro lado, se o qubit se encontra na linha do Equador, existirá 50% de chance de colapsar no $|\uparrow\rangle$ ou $|\downarrow\rangle$. Portanto, o que determina as chances de colapso é o ângulo polar α que expressa a latitude de um qubit na esfera de Bloch. Já a fase relativa entre $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ dada pelo ângulo azimutal β determina a longitude de um qubit. No contexto das caminhadas quânticas, o operador moeda é uma porta quântica de um qubit que realiza uma operação sobre ele, levando-o de um qubit a outro na esfera de Bloch, como pode ser visto na seção a seguir.

[†]Repare que $a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = 1$ devido a condição de normalização.

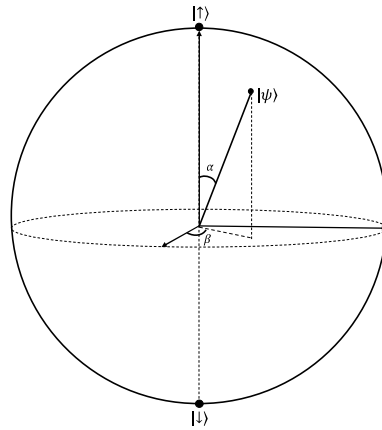


Figura 2.2: Esfera de Bloch.

2.1.2 Operador Moeda

O qubit conforme descrito anteriormente obedece a condição de normalização e a atuação de um operador sobre o qubit deve preservar sua norma. Em razão disso, moedas quânticas são matrizes unitárias 2×2 , que levam de um qubit a outro, o que equivale a uma rotação na esfera de Bloch [16] mantendo preservado sua condição de normalização[‡]. As matrizes de Pauli \hat{X} , \hat{Y} e \hat{Z} são exemplo dessas moedas, escritas como

$$\hat{X} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{Y} \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{Z} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.8)$$

e levam a uma rotação na esfera de Bloch de 180° sobre os respectivos eixos x , y e z [16]. Além destas, duas moedas frequentemente utilizadas na literatura são a Hadamard e Fourier:

$$\hat{H} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{F} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

A título de exemplo, tomemos a atuação das moedas \hat{H} e \hat{F} (Eq. 2.9) bem como uma das moedas de Pauli \hat{X} sobre o qubit $|\uparrow\rangle$

[‡]Embora exista na literatura caminhadas quânticas não-unitárias, não é o caso desse trabalho.

$$\begin{aligned}
\hat{H}|\uparrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle), \\
\hat{F}|\uparrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle), \quad (2.10) \\
\hat{X}|\uparrow\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle.
\end{aligned}$$

A moeda Hadamard \hat{H} rotaciona o qubit de $\pi/2$ em α levando o qubit para a linha equatorial da esfera, gerando assim uma superposição igualitária entre os estados $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$, conforme ilustrado na Figura 2.3. Convém observar que a moeda Fourier \hat{F} também gera uma superposição igualitária, todavia com uma fase relativa β de $\pi/2$ entre $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$. Portanto, a atuação de \hat{F} produz uma rotação de $\pi/2$ em ambos os ângulos polar α e azimutal β (Figura 2.3). Finalmente, a operação da moeda \hat{X} de Pauli, conforme já mencionado anteriormente e exposto na ilustração da Figura 2.3, leva a uma rotação de $\alpha = \pi$, equivalente a 180° em torno do eixo x . A curiosidade da moeda \hat{X} é que sua atuação apenas inverte a base de estado do qubit, isto é, se a atuação for em $|\downarrow\rangle$ uma rotação π no ângulo polar na esfera de Bloch levará o qubit ao pólo de cima $|\uparrow\rangle$. Essa moeda, em particular, é conhecida também como porta NOT.

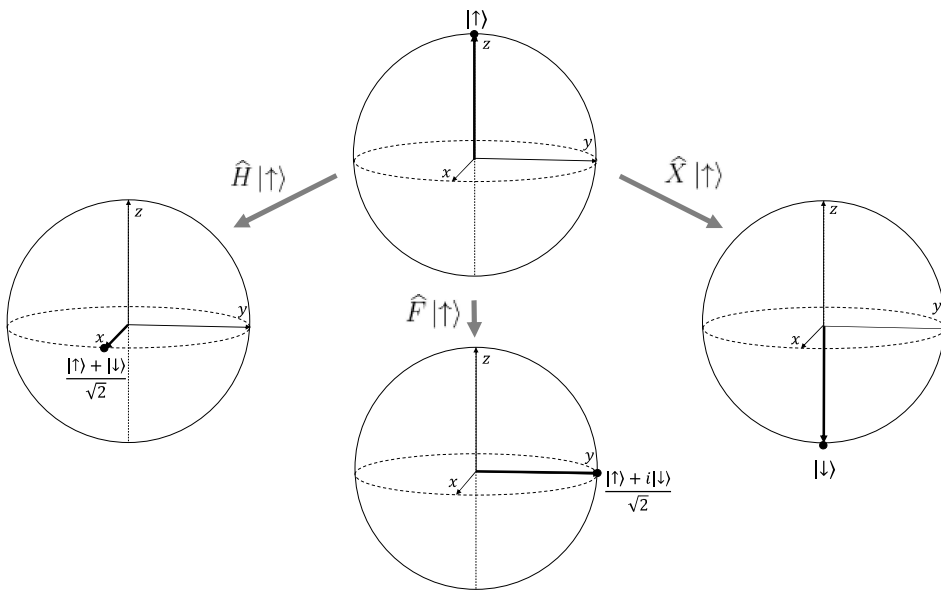


Figura 2.3: Representação da atuação dos operadores Hadamard \hat{H} , Fourier \hat{F} e Matriz de Pauli \hat{X} na esfera de Bloch sobre um qubit no estado $|\uparrow\rangle$.

Contudo, é conveniente pensar numa forma de rotacionar a esfera de Bloch por um dado ângulo θ arbitrário em torno dos eixos x , y ou z [16], de modo que possamos escrever a moeda da forma mais geral possível. Para tanto, usamos as matrizes de Pauli (Eq. 2.8) exponenciadas, pois dão origem a três classes de matrizes unitárias de rotação em torno dos respectivos eixos x , y ou z [1] definidas pelas equações

$$\begin{aligned} R_x(\theta) &\equiv e^{-i\theta X/2} = \cos \frac{\theta}{2} I - i \sin \frac{\theta}{2} X = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -i \sin \frac{\theta}{2} \\ -i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \\ R_y(\theta) &\equiv e^{-i\theta Y/2} = \cos \frac{\theta}{2} I - i \sin \frac{\theta}{2} Y = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \\ R_z(\theta) &\equiv e^{-i\theta Z/2} = \cos \frac{\theta}{2} I - i \sin \frac{\theta}{2} Z = \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Supondo \hat{m} e \hat{n} vetores unitários reais não paralelos, é possível escrever um operador moeda tal que

$$\hat{C} = e^{i\alpha} R_{\hat{n}}(\beta) R_{\hat{m}}(\gamma) R_{\hat{n}}(\delta), \quad (2.12)$$

sendo α , β , γ e δ parâmetros reais. Assim, com base na Eq. 2.11, podemos escrever Eq. 2.12 como, por exemplo, $\hat{C} = e^{i\alpha} R_{\hat{z}}(\beta) R_{\hat{y}}(\gamma) R_{\hat{z}}(\delta)$. Desse modo, o operador moeda geral pode ser expresso da seguinte maneira

$$\hat{C} = e^{i\alpha} \begin{pmatrix} e^{-i\beta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\beta/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\gamma}{2} & -\sin \frac{\gamma}{2} \\ \sin \frac{\gamma}{2} & \cos \frac{\gamma}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\delta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\delta/2} \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

Seja $\cos \gamma/2 = \sqrt{q}$, $\beta = 2\theta$, $\delta = 2\phi + \pi$ e $\alpha = \pi$ o operador moeda $\hat{C}(t)$ escrito da maneira mais geral como $\hat{C}(t) = c_{\uparrow\uparrow} |\uparrow\rangle \langle\uparrow| + c_{\uparrow\downarrow} |\uparrow\rangle \langle\downarrow| + c_{\downarrow\uparrow} |\downarrow\rangle \langle\uparrow| + c_{\downarrow\downarrow} |\downarrow\rangle \langle\downarrow|$ na base $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ na forma matricial é

$$\hat{C}(t) = \begin{pmatrix} c_{\uparrow\uparrow} & c_{\uparrow\downarrow} \\ c_{\downarrow\uparrow} & c_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{q} & \sqrt{1-q}e^{i\theta} \\ \sqrt{1-q}e^{i\phi} & -\sqrt{q}e^{i(\theta+\phi)} \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

onde, $0 \leq q \leq 1$ e $0 \leq \theta, \phi < 2\pi$ [22]. Esses três parâmetros são independentes, o q representa a tendência da moeda, enquanto que os outros dois parâmetros θ e ϕ estão relacionados com as fases relativas. Se o objetivo, por exemplo, é aplicar um operador

moeda justo de tal modo que leve o qubit a uma superposição de estados igualitária entre $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$, define-se $q = 1/2$, e quando o interesse é uma moeda tendenciosa, usa-se $q \neq 1/2$. Hadamard e Fourier são portanto, exemplos de moedas justas ($q = 1/2$), mas enquanto os parâmetros $\theta = \phi = 0$ nos fornecem \hat{H} , $\theta = \phi = \pi/2$ nos levam a \hat{F} .

2.1.3 Estado da Caminhada Quântica

O estado inicial de uma caminhada quântica $|\Psi(0)\rangle$ é dado pelo produto tensorial do qubit $|\psi_c\rangle$ pelo estado de posição $|\psi_p\rangle$ correspondendo respectivamente aos graus de liberdade interno e externo do caminhante. Esses estados são subsistemas quânticos, cada qual pertencente a seu respectivo espaço de Hilbert. Enquanto o qubit pertence ao espaço de moeda \mathcal{H}_c , o estado de posição $|\psi_p\rangle = \sum_j f(j) |j\rangle$ ($j \in \mathbb{Z}$) pertence ao espaço de posições \mathcal{H}_p (infinito e enumerável) e $f(j)$ é uma função de distribuição que define como o estado inicial está distribuído ao longo das posições [23]. Portanto, o estado inicial $|\Psi(0)\rangle = |\psi_c\rangle \otimes |\psi_p\rangle$ de uma caminhada quântica é bipartido [24] e pertencente a $\mathcal{H} = \mathcal{H}_c \otimes \mathcal{H}_p$. Considerando um estado local tal que $f(j) = \delta(j)$, podemos escrever

$$|\Psi(0)\rangle = (\cos \frac{\alpha}{2} |\uparrow\rangle + \sin \frac{\alpha}{2} e^{i\beta} |\downarrow\rangle) \otimes |0\rangle. \quad (2.15)$$

A evolução temporal para o estado da caminhada, conforme postulado pela mecânica quântica para um sistema quântico fechado, é dado pela equação de Schrodinger

$$i\hbar \frac{d|\Psi\rangle}{dt} = H |\Psi\rangle, \quad (2.16)$$

tal que \hbar é a constante de Planck e H é a Hamiltoniana do sistema fechado [15, 18, 19]. Todavia, o processo de evolução dado pela equação de Schrodinger pode também ser descrito por uma transformação unitária. Isto é, se o estado do sistema no tempo t_1 é $|\Psi(t_1)\rangle$ e o estado no tempo t_2 é $|\Psi(t_2)\rangle$, o processo de evolução de t_1 para t_2 pode ser descrito por um operador unitário $\hat{U}(t_1, t_2)$ tal que $|\Psi(t_2)\rangle = \hat{U}(t_1, t_2) |\Psi(t_1)\rangle$. Desse modo, a evolução do estado da caminhada é definida por um operador de evolução temporal particular \hat{U} que atua sobre $|\psi_c\rangle \otimes |\psi_p\rangle$, o qual é dado por

$$\hat{U} = \hat{S} \cdot (\hat{C} \otimes \hat{I}_p), \quad (2.17)$$

onde \hat{I}_p é o operador identidade em \mathcal{H}_p , \hat{C} é a moeda quântica e \hat{S} é o operador de translação condicional, que por sua vez é dado por

$$\hat{S} = \sum_j (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes |j+1\rangle\langle j| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \otimes |j-1\rangle\langle j|), \quad (2.18)$$

e atua levando os estados $|\uparrow\rangle \otimes |j\rangle$ para $|\uparrow\rangle \otimes |j+1\rangle$ e $|\downarrow\rangle \otimes |j\rangle$ para $|\downarrow\rangle \otimes |j-1\rangle$. Nesse sentido, a atuação do operador \hat{U} implica em, primeiro, uma rotação no espaço das moedas, com a atuação de $\hat{C} \otimes \hat{I}$ no estado inicial da caminhada, seguido da atuação do operador \hat{S} que a translada as posições do caminhante condicionado pelos estados de spin.

Tomemos como exemplo um estado inicial local $|\Psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |0\rangle$ e a moeda Hadamard \hat{H} . Ao aplicar o operador \hat{U} obtemos $|\Psi(1)\rangle$, ou seja o estado no primeiro passo de tempo, da seguinte maneira

$$\begin{aligned} |\Psi(1)\rangle &= \hat{U} |\Psi(0)\rangle \\ &= \hat{S} \cdot (\hat{C} \otimes \hat{I}) |\uparrow\rangle \otimes |0\rangle \\ &= \hat{S}(\hat{C} |\uparrow\rangle \otimes \hat{I} |0\rangle) \\ &= \hat{S}(\hat{H} |\uparrow\rangle \otimes |0\rangle) \\ &= \hat{S} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes |0\rangle \right) \\ &= \hat{S} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes |0\rangle \right) \\ &= \hat{S} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \otimes |0\rangle \right) \\ &= \left(\sum_j (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes |j+1\rangle\langle j| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \otimes |j-1\rangle\langle j|) \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \otimes |0\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes |0+1\rangle\langle 0| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \otimes |0-1\rangle\langle 0|) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle \otimes |1\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |-1\rangle). \end{aligned} \quad (2.19)$$

A atuação do operador moeda, conforme mostrado na Figura 2.3, levou o estado $|\uparrow\rangle$ a uma superposição de estados entre $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$. Em seguida, a atuação de \hat{S} transladou os respectivos estados internos do caminhante para as posições simétricas $j = +1$ e $j = -1$.

Se no lugar de \hat{H} atuasse \hat{F} , por exemplo, no estado $|\uparrow\rangle$ em $j = 0$ o estado seria dividido também entre essas posições simétricas, porém com diferença de fase relativa de $\pi/2$ entre estados de spin.

Assim, tratando-se de uma evolução em tempo discreto, após um número n de passos da caminhada, o estado pode ser escrito como

$$|\Psi(n)\rangle = \hat{U}(n) \dots \hat{U}(1) |\Psi(0)\rangle = \mathcal{T} \prod_{t=1}^n \hat{U}(t) |\Psi(0)\rangle, \quad (2.20)$$

sendo \mathcal{T} um operador que tem a função de explicitar a ordem temporal do produtório na atuação do \hat{U} . Portanto, sabendo que um estado geral pode ser escrito como

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j (a(j, t) |\uparrow\rangle + b(j, t) |\downarrow\rangle) \otimes |j\rangle, \quad (2.21)$$

e como $|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\Psi(t-1)\rangle$, podemos reescrever as amplitudes de probabilidade através de equações de recorrência na forma

$$\begin{aligned} a(j, t) &= c_{\uparrow\uparrow}(j-1, t) a(j-1, t-1) + c_{\uparrow\downarrow}(j-1, t) b(j-1, t-1), \\ b(j, t) &= c_{\downarrow\uparrow}(j+1, t) a(j+1, t-1) + c_{\downarrow\downarrow}(j+1, t) b(j+1, t-1), \end{aligned} \quad (2.22)$$

que são utilizadas a partir de um procedimento iterativo, para obter todas as amplitudes no tempo e para todas as posições. A partir dessas amplitudes, é possível calcular várias quantidades de interesse no nosso trabalho, como mostrado na seção a seguir.

2.1.4 Quantidades de interesse

Devido a interpretação estatística do processo de medida na mecânica quântica, o cálculo da probabilidade é imprescindível para obtermos todas as quantidades de interesse relevantes para esse estudo. A probabilidade de encontrar a partícula numa dada posição j num tempo t é dada por $P(j, t) = |\langle j | \Psi(t) \rangle|^2$, que ao usarmos a forma geral do estado $|\Psi(t)\rangle$ (Eq. 2.21) nos fornece

$$P(j, t) = |a(j, t)|^2 + |b(j, t)|^2, \quad (2.23)$$

tal que o primeiro termo acima $P_{\uparrow}(j, t) = |(\langle \uparrow | \otimes \langle j |) |\Psi(t)\rangle|^2 = |a(j, t)|^2$ e o segundo $P_{\downarrow}(j, t) = |(\langle \downarrow | \otimes \langle j |) |\Psi(t)\rangle|^2 = |b(j, t)|^2$ nos fornecem as probabilidades de medir em j a partícula no estado $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ respectivamente. Portanto, a soma dessas duas quantidades nos fornecem a probabilidade total de medir a partícula nessa posição, independente do seu estado interno. Essa probabilidade pode ser entendida como a intensidade da onda de De Broglie num dado ponto no espaço, que é proporcional a probabilidade de encontrar, naquele ponto, a partícula material que corresponde a onda [17].

Ao longo desse estudo, consideramos caminhadas quânticas que partem da origem $j = 0$ (estado local). Em particular, como estamos interessados nos perfis de localização na origem, podemos avaliar essa localização com a probabilidade de retorno da partícula a sua posição de origem, ou seja

$$P(0, t) = |\langle 0 | \Psi(t) \rangle|^2 = |a(0, t)|^2 + |b(0, t)|^2, \quad (2.24)$$

que para facilitar a notação tomaremos simplesmente como $P_0(t)$. Para analisar a dinâmica assintótica do estado da caminhada empregamos a chamada probabilidade de sobrevivência

$$PS(t) = |\langle \Psi_0(t) | \Psi_C \rangle|^2, \quad (2.25)$$

sendo $|\Psi_0(t)\rangle = \langle 0 | \Psi(t) \rangle$, ao passo que $|\Psi(0)\rangle$ corresponde ao estado inicial da caminhada dado pela Eq. 2.15. Diferente da Eq. 2.23, que descreve a probabilidade de encontrar o estado do caminhante num dado ponto da rede no tempo, a Eq. 2.25 descreve a probabilidade de encontrar o próprio estado inicial na posição de partida da caminhada. Desse modo, trata-se da probabilidade de encontrar o estado $|\Psi(0)\rangle$ no passo de tempo t na posição inicial da caminhada $|0\rangle$, podendo ser interpretada como a fidelidade ao estado inicial, ou seja, indica o quanto de $|\Psi(0)\rangle$ permanece na posição de partida do caminhante ao longo do tempo [25, 26].

Por último, estamos interessados também nas propriedades de transporte, em particular a dispersão do estado ao longo do tempo. A dispersão é calculada pela raiz quadrada da variância, que por sua vez, pode ser escrita como a diferença entre os valores médios $\langle j^2 \rangle$ e $\langle j \rangle^2$ [27]. Assim, a dispersão é dada por

$$\sigma = \sqrt{\langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2}, \quad (2.26)$$

e sabendo que o valor médio de j^k é dado por

$$\langle j^k \rangle = \sum_j j^k P(j), \quad (2.27)$$

substituindo a Eq. 2.27 para $k = 1$ e 2 e a Eq. 2.23 na dispersão dada pela Eq. 2.26 temos que

$$\begin{aligned} \sigma(t) &= \sqrt{\sum_j j^2 P(j, t) - \left(\sum_j j P(j, t) \right)^2} \\ &= \sqrt{\sum_j j^2 (|a(j, t)|^2 + |b(j, t)|^2) - \left(\sum_j j (|a(j, t)|^2 + |b(j, t)|^2) \right)^2}, \end{aligned} \quad (2.28)$$

que assim como as demais quantidades de interesse, são calculadas a partir das amplitudes de probabilidade $a(j, t)$ e $b(j, t)$ obtidas via equações de recorrências (Eq. 2.22).

3 Resultados

Nosso objetivo neste capítulo é estudar por meio de cálculos numéricos, o impacto de diferentes tipos de defeitos de rede em uma caminhada quântica discreta no tempo unidimensional. Tratamos aqui de caminhadas partindo de um estado local, cujo defeito é introduzido na posição de origem. Primeiramente, entenderemos como diferentes tipos de defeitos mudam essa localização. Para tanto nos apoiaremos nos estudos de Konno [13] e Wojcik *et al* [14], reproduzindo seus resultados através de simulações numéricas e comparando-as com nossa proposta de defeito de rede.

3.1 Caminhadas Quânticas com um Único Defeito na Rede

A caminhada quântica pode ser denominada como ordenada, quando a moeda é fixa no tempo e na posição ao longo da evolução temporal da caminhada. Todavia, a literatura apresenta estudos nos quais são introduzidos diferentes tipos de defeitos de rede na posição inicial da caminhada [13, 14, 28–30]. Uma vez que caminhadas quânticas possuem dispersão balística, a probabilidade da partícula retornar a sua posição de origem cai exponencialmente no tempo [13]. Contudo, um único defeito de rede nessa posição pode gerar interferências construtivas, armadilhando a partícula e localizando parcialmente o estado quântico que evolui para um estado estacionário em passos de tempo duplos [14].

Konno estudou localização via abordagem combinatória de contagem de caminho [13], empregando na caminhada um defeito de rede através de uma moeda \hat{C}_K justa e fixa no tempo. Os parâmetros da moeda utilizada por Konno foram $q = \frac{1}{2}$, $\theta = \omega$ e $\phi = -\omega$, de modo que, de acordo com a Eq. 2.14, a moeda é escrita como,

$$\hat{C}_K = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & e^{i\omega} \\ e^{-i\omega} & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

introduzindo uma inomogeneidade na rede em $j = 0$, que depende somente de um parâ-

metro $\omega \in (0, 2\pi)$, enquanto nas demais posições ao longo do tempo mantém-se a moeda Hadamard.

Wojcik *et al.* adicionou um defeito de fase à uma moeda Hadamard na origem. Resolvendo equações de recorrências para estados estacionários, eles calcularam a sobreposição entre esses estados com alguns qubits particulares ([14]). A peculiaridade do defeito implementado por Wojcik *et al.* está em usar a mesma moeda em toda a evolução temporal da caminhada, introduzindo simplesmente uma fase global na moeda em $j = 0$. A moeda de Wojcik \hat{C}_W também é justa e fixa no tempo, podendo ser escrita da seguinte maneira,

$$\hat{C}_W = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\omega} & e^{i\omega} \\ e^{i\omega} & -e^{i\omega} \end{pmatrix} = e^{i\omega} \hat{H}, \quad (3.2)$$

onde \hat{H} é a moeda Hadamard (Eq. 2.9). O defeito de fase é um tipo de defeito de rede, no qual uma fase global é adicionada à moeda Hadamard em um ponto específico da rede [14].

Para os cálculos do nosso trabalho, além de estudarmos as moedas do Konno e Wojcik, propomos também uma moeda justa \hat{C}_T em $j = 0$, cujos parâmetros são $\theta = \phi = \omega$ na Eq. 2.14, de tal modo que nossa moeda fica,

$$\hat{C}_T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & e^{i\omega} \\ e^{i\omega} & -e^{2i\omega} \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

enquanto as demais moedas em outras posições da rede são Hadamard.

Considerando as moedas de Konno e Wojcik [13, 14] e a nossa moeda, consideraremos no nosso trabalho uma moeda dependente da posição, um operador geral, no qual a partir de uma mudança de parâmetros podemos simular os três tipos de caminhadas com defeitos,

$$\hat{C}(j) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\omega_{\uparrow\uparrow}\delta_{jn}} & e^{i\omega_{\uparrow\downarrow}\delta_{jn}} \\ e^{i\omega_{\downarrow\uparrow}\delta_{jn}} & -e^{i\omega_{\downarrow\downarrow}\delta_{jn}} \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

onde δ_{jn} é a delta de Kronecker,

$$\delta_{jn} = \begin{cases} 1, & \text{se } j = n \\ 0, & \text{se } j \neq n \end{cases}$$

sendo j a posição do caminhante e n a posição do defeito. Essa moeda, portanto, introduz uma caminhada Hadamard com um defeito de rede em uma posição específica. A título de exemplo, o conjunto de parâmetros $(\omega_{\uparrow\uparrow}, \omega_{\uparrow\downarrow}, \omega_{\downarrow\uparrow}, \omega_{\downarrow\downarrow}) = (0, \pi/2, \pi/2, \pi)$ na Eq. 3.4, leva a uma caminhada Hadamard com um defeito Fourier em $j = n$. Portanto, os defeitos nas caminhadas quânticas estudados por (i) Konno, (ii) Wojcik e (iii) nossa proposta de defeito, podem ser modelados usando os seguintes conjuntos de parâmetros:

$$(i) \ (\omega_{\uparrow\uparrow}, \omega_{\uparrow\downarrow}, \omega_{\downarrow\uparrow}, \omega_{\downarrow\downarrow}) = (0, \omega, -\omega, 0),$$

$$(ii) \ (\omega_{\uparrow\uparrow}, \omega_{\uparrow\downarrow}, \omega_{\downarrow\uparrow}, \omega_{\downarrow\downarrow}) = (\omega, \omega, \omega, \omega),$$

$$(iii) \ (\omega_{\uparrow\uparrow}, \omega_{\uparrow\downarrow}, \omega_{\downarrow\uparrow}, \omega_{\downarrow\downarrow}) = (0, \omega, \omega, 2\omega).$$

Em vista da moeda dependente da posição geral (Eq. 3.4), as equações de recorrência a partir da Eq. 2.22 podem ser reescritas como

$$\begin{aligned} a(j, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[e^{i\omega_{\uparrow\uparrow}\delta_{j-1,n}} a(j-1, t-1) + e^{i\omega_{\uparrow\downarrow}\delta_{j-1,n}} b(j-1, t-1) \right], \\ b(j, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[e^{i\omega_{\downarrow\uparrow}\delta_{j+1,n}} a(j+1, t-1) - e^{i\omega_{\downarrow\downarrow}\delta_{j+1,n}} b(j+1, t-1) \right], \end{aligned} \quad (3.5)$$

sendo utilizadas para calcular todas as amplitudes e quantidades de interesse nesse estudo.

3.1.1 Moeda Konno \hat{C}_K

Em relação a moeda do Konno (Eq. 3.1), observa-se que o termo $e^{\pm i\omega}$ impõe uma fase relativa de ω entre os estados da moeda. Partindo da Equação 2.15, ao aplicar o operador de evolução temporal (Eq. 2.17) em passos duplos a atuação da moeda do Konno na posição $|0\rangle$, segundo nossas equações de recorrência (Eq. 3.5), leva a

$$\begin{aligned} a(0, 2) &= \frac{1}{2} \left[e^{-i\omega} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - e^{i\beta} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right], \\ b(0, 2) &= \frac{1}{2} \left[\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) + e^{i\beta+i\omega} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right]. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Uma vez que o cálculo da probabilidade $P_0(t)$ é dado pelo quadrado das amplitudes, conforme Eq. 2.24, a dependência com qubit inicial é eliminada após o cálculo de $P(0, t)$. Essa moeda, portanto, gera o mesmo perfil de localização independente do qubit inicial (Figura 3.1).

Como um de seus principais resultados, Konno mostrou que no limite de $t \rightarrow \infty$, a probabilidade de retorno da partícula a sua origem em passos duplos $2t$ é expressa por

$$c(\omega) = \lim_{t \rightarrow \infty} P_0(\omega, 2t) = \left(\frac{2 - 2 \cos \omega}{3 - 2 \cos \omega} \right)^2, \quad (3.7)$$

assim, independente do qubit inicial, $c(\omega)$ cresce com ω até $c(\pi) = 0,640$ [13], conforme ilustrado na Figura 3.1.

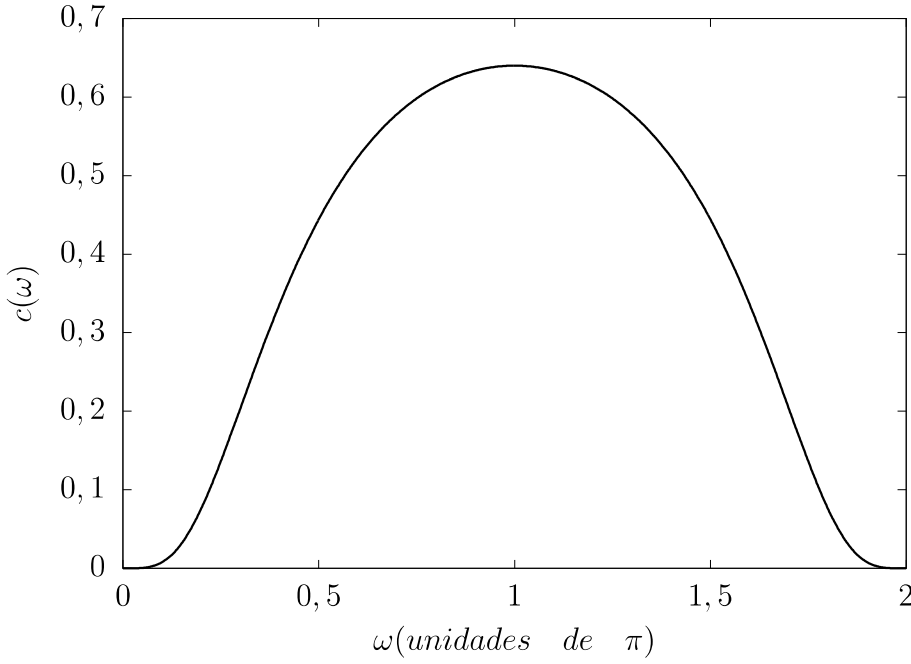


Figura 3.1: Probabilidade de retorno da partícula para $t \rightarrow \infty$ dada pela Eq. 3.7 obtida por Konno [13].

A partir da moeda dependente da posição dada pela Eq. 3.4 com os parâmetros $(\omega_{\uparrow\uparrow}, \omega_{\uparrow\downarrow}, \omega_{\downarrow\uparrow}, \omega_{\downarrow\downarrow}) = (0, \omega, -\omega, 0)$ que fornecem \hat{C}_K (Eq. 3.1), calculamos as probabilidades de retorno no tempo através da Eq. 2.24, a partir de um procedimento iterativo para obter as amplitudes na origem via equações de recorrência (Eq. 3.5) e verificamos, como

previsto, que tais probabilidades dependem somente do parâmetro ω

$$\begin{aligned}
P_0(\omega, 2) &= \frac{1}{2}, \\
P_0(\omega, 4) &= \frac{1}{8}(3 - 2\cos\omega), \\
P_0(\omega, 6) &= \frac{1}{8}(3 - 2\cos\omega), \\
P_0(\omega, 8) &= \frac{1}{128}(-40\cos\omega - 2\cos(2\omega) + 2\cos(3\omega) + 49), \\
P_0(\omega, 10) &= \frac{1}{128}(-40\cos\omega - 2\cos(2\omega) + 2\cos(3\omega) + 49), \\
P_0(\omega, 12) &= \frac{1}{512}(-162\cos\omega - 22\cos(2\omega) + 13\cos(3\omega) + 3\cos(4\omega) - \cos(5\omega) + 194), \\
P_0(\omega, 14) &= \frac{1}{512}(-162\cos\omega - 22\cos(2\omega) + 13\cos(3\omega) + 3\cos(4\omega) - \cos(5\omega) + 194), \\
&(\dots)
\end{aligned}$$

e a partir do passo $t = 4$ observa-se que $P_0(\omega, t) = P_0(\omega, t + 2)$ para $t = 4k$ com $k \in \mathbb{N}^*$. Desse modo, é possível escrever a probabilidade de retorno como uma série da seguinte maneira

$$P_0(\omega, 4k) = \sum_{n=0}^{2k-1} A_n \cos(n\omega), \quad (3.8)$$

onde A_n corresponde aos coeficientes da série. Podemos comparar a Eq. 3.8 com $c(\omega)$, expandindo via Fourier a Eq. 3.7 em uma série de cossenos

$$F_c(\omega) = \left(1 - \frac{7}{5\sqrt{5}}\right) + \left(2 - \frac{26}{5\sqrt{5}}\right)\cos\omega + \left(7 - \frac{79}{5\sqrt{5}}\right)\cos 2\omega + \mathcal{O}(n \geq 3), \quad (3.9)$$

e comparar os valores dos primeiros A_n de nossos cálculos na Eq. 3.8 com os coeficientes da expansão F_c para 20 passos, conforme ilustrado na Figura 3.2.

Ao comparar nossos cálculos em $t = 20$ com o modelo do Konno para $\omega = \pi/2$ e $\omega = \pi$, vemos que as diferenças entre os resultados do Konno e os nossos são pequenas, conforme Tabela 3.1. Todavia, quando $\omega \rightarrow 0$ ou $\omega \rightarrow 2\pi$ essas diferenças são acentuadas. Consequentemente, torna-se essencial um número maior de passos na caminhada quântica para verificar a convergência desses valores. Nesse sentido, a Figura 3.3 mostra à esquerda $P_0(\omega)$ da moeda \hat{C}_K considerando diferentes períodos de tempo. Como pode-se observar, para caminhadas longas o comportamento de P_0 aproxima-se dos resultados do Konno para todo valor de ω . De fato, à direita a Figura 3.3 revela que as caminhadas com 100 e 1000 passos são capazes de explorar o comportamento de $t \rightarrow \infty$ com discrepâncias $|\delta|$

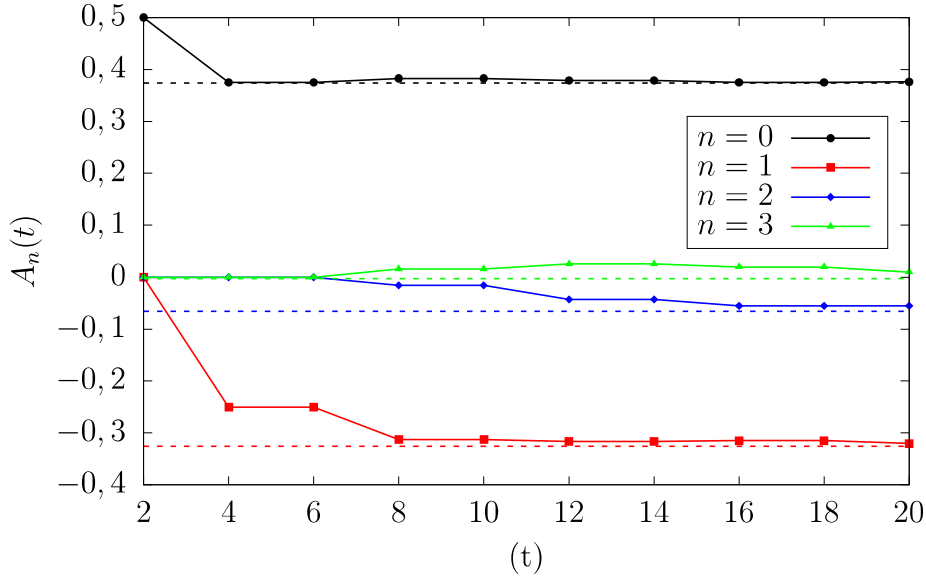


Figura 3.2: Coeficientes A_n da Eq. 3.8 (linhas sólidas) e os coeficientes correspondentes de F_c da Eq. 3.9 (linhas tracejadas).

da ordem de 10^{-2} e 10^{-3} para $t = 100$ e 1000 respectivamente.

ω	c	P_0	S_0
$\pi/2$	0,444	0,458	0,431
π	0,640	0,646	0,631

Tabela 3.1: Cálculo de $c(\omega)$, $P_0(\omega, 20)$ e $S_0(\omega, 20) = \sum_{n=0}^3 A_n \cos n\omega$ que nos fornece a soma dos quatro primeiros termos da série dada pela Eq. 3.8 para $\omega = \pi/2$ e π .

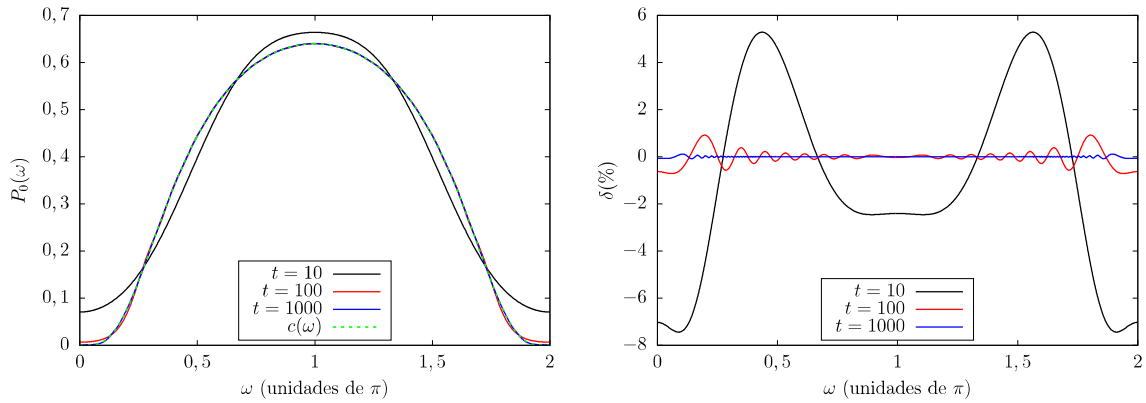


Figura 3.3: Probabilidade $P_0(\omega, t)$ de localização e $\delta = c(\omega) - P_0(\omega, t)$ para $t = 10$ (curvas pretas), 100 (curvas vermelhas) e 1000 (curvas azuis) e $c(\omega)$ (curva tracejada verde).

Uma vez que a diferença entre o cálculo do Konno para $t \rightarrow \infty$ em relação ao nosso com $t = 1000$ nos fornecem diferenças tão pequenas, então a partir desse ponto, nosso

trabalho será voltado ao estudo da probabilidade de localização em relação as moedas de Wojcik e a nossa que são dependentes do qubit inicial, somente com caminhadas quânticas com 1000 passos de tempo.

3.1.2 Moeda Wojcik \hat{C}_W

Wojcik trabalha com uma moeda $e^{i\omega}\hat{H}$ (Eq. 3.2), conforme já visto, que é basicamente uma moeda Hadamard com uma fase global ω . Observa-se que \hat{C}_W mantém a mesma fase relativa entre os estados de spin da moeda de Hadamard. No entanto, esta fase relativa na origem é levada para outras posições via cálculos de recorrência ocasionado uma quebra da simetria da fase relativa em comparação com a moeda de Konno \hat{C}_K . Isso faz com que surja uma dependência da localização com o qubit (α, β) do estado inicial da caminhada quântica, além do parâmetro ω .

Considerando os parâmetros para a moeda \hat{C}_W , $(\omega_{\uparrow\uparrow}, \omega_{\uparrow\downarrow}, \omega_{\downarrow\uparrow}, \omega_{\downarrow\downarrow}) = (\omega, \omega, \omega, \omega)$ na Eq. 3.4 que fornecem a Eq. 3.2, calculamos a probabilidade de retorno na posição de origem com a Eq. 2.24 por intermédio da Eq. 3.5 e verificamos que a probabilidade de retorno depende dos parâmetros α e β do qubit já nos primeiros passos de tempo

$$\begin{aligned} P_0(\omega, 2) &= \frac{1}{2}, \\ P_0(\omega, 4) &= \frac{1}{8}(3 - 2\cos\omega - 2\sin\alpha\sin\beta\sin\omega), \\ P_0(\omega, 6) &= \frac{1}{8}(3 - 2\cos\omega - 2\sin\alpha\sin\beta\sin\omega), \\ P_0(\omega, 8) &= \frac{1}{128}(47 - 34\cos\omega - 4\cos(3\omega) - 2\sin\alpha\sin\beta(17\sin\omega + 2\sin(2\omega) - 2\sin(3\omega))), \\ P_0(\omega, 10) &= \frac{1}{128}(47 - 34\cos\omega - 4\cos(3\omega) - 2\sin\alpha\sin\beta(17\sin\omega + 2\sin(2\omega) - 2\sin(3\omega))), \\ &(\dots) \end{aligned}$$

além do parâmetro ω e, do mesmo modo que já visto anteriormente, a partir do passo $t = 4$, $P_0(\omega, t) = P_0(\omega, t + 2)$. Então, as probabilidades podem ser escritas como

$$P_0(\omega, 4k) = \sum_{n=0}^{2k-1} [B_n \cos(n\omega) + C_n \sin\alpha\sin\beta\sin(n\omega)], \quad (3.10)$$

onde B_n e C_n correspondem aos coeficientes da série. Convém observar que a Eq. 3.10 sugere que essa dependência com o qubit inicial aparece somente para os casos nos quais

$\sin \alpha \sin \beta \neq 0$.

A Figura 3.4 mostra a probabilidade $P_0(\omega, t)$ para três qubits iniciais junto com a sobreposição total $F(\omega)$ entre estados estacionários e esses qubits [14]. Essa sobreposição é dada por F_+ para $\omega \in (0, \pi/2]$, $F_+ + F_-$ para $\omega \in (\pi/2, 3\pi/2)$ e F_- para $\omega \in [3\pi/2, 2\pi)$ tal que

$$F_{\pm} = |\langle \Phi_{\pm} | \psi_c \rangle|^2, \quad (3.11)$$

onde

$$|\Phi_{\pm}\rangle = \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{4 \cos \omega \mp 4 \sin \omega - 6}} \begin{pmatrix} 1 \\ \mp i \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

correspondem aos estados estacionários [14]. A comparação entre os nossos cálculos com os do modelo do Wojcik revela que o método estacionário pode explorar os perfis de localização introduzidos por um defeito de fase na origem ou em outras posições [28] e apresenta boa concordância com nossos cálculos.

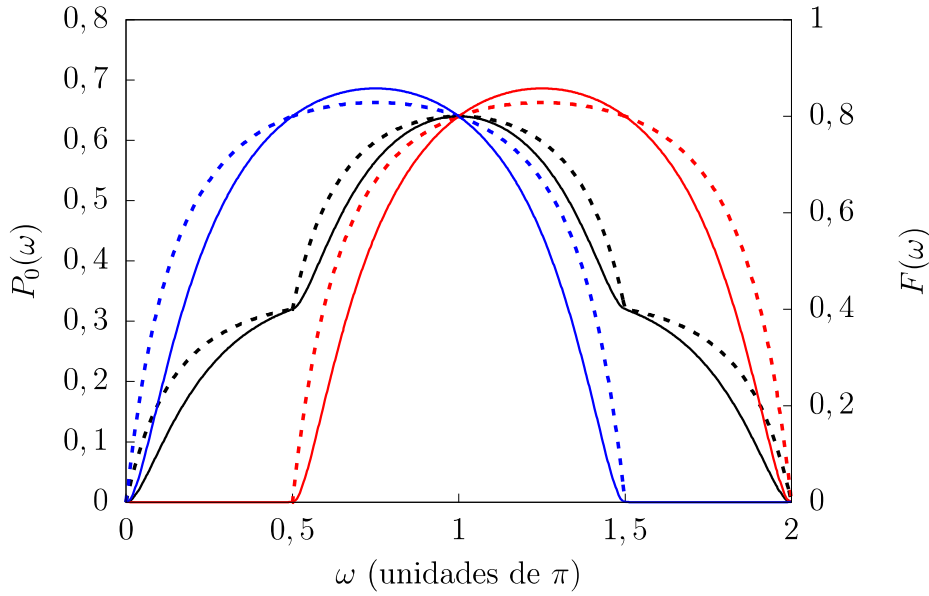


Figura 3.4: Probabilidade $P_0(\omega)$ da localização (linhas sólidas) e sobreposição total $F(\omega)$ (linhas tracejadas) entre estados estacionários e qubits iniciais [14] dado pela Eq. 3.11 para os qubits $|\uparrow\rangle$ (preto), $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle)$ (vermelho) e $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - i|\downarrow\rangle)$ (azul).

3.1.3 Moeda Proposta \hat{C}_T

Considerando agora a nossa moeda \hat{C}_T na Eq. 3.3, observa-se que esta possui algumas similaridades e diferenças em relação ao defeito de fase introduzido pela moeda \hat{C}_W . O determinante de ambas as moedas é o mesmo. Contudo, ao reescrever \hat{C}_T com uma fase

global, temos

$$\hat{C}_T = \frac{e^{i\omega}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega} & 1 \\ 1 & -e^{i\omega} \end{pmatrix}, \quad (3.13)$$

o que mostra que além da fase global, esta moeda introduz uma fase relativa extra ω entre os estados de moeda. Portanto, isso resulta em uma translação de β por ω após \hat{C}_T atuar no qubit. O cálculo da probabilidade de retorno, assim como para as outras moedas, considerando passos duplos é tal que $P_0(\omega, t) = P_0(\omega, t + 2)$ para $t = 4k$ com $k \in \mathbb{N}^*$ e apresenta a seguinte forma

$$P_0(\omega, 4k) = \sum_{n=0}^{2k-1} [B_n \cos(n\omega) + C_n \sin \alpha \sin(\beta + \omega) \sin(n\omega)], \quad (3.14)$$

tendo os mesmos coeficientes B_n e C_n do caso \hat{C}_W , embora com uma nova dependência em $\beta + \omega$. Por exemplo, para $k = 1$, $P_0(\omega, 4) = 3/8 - (1/4) \cos \omega - (1/4) \sin \alpha \sin(\beta + \omega) \sin \omega$. Essa diferença em relação a moeda do Wojcik traz novos perfis de localização, conforme mostrado na Figura 3.5.

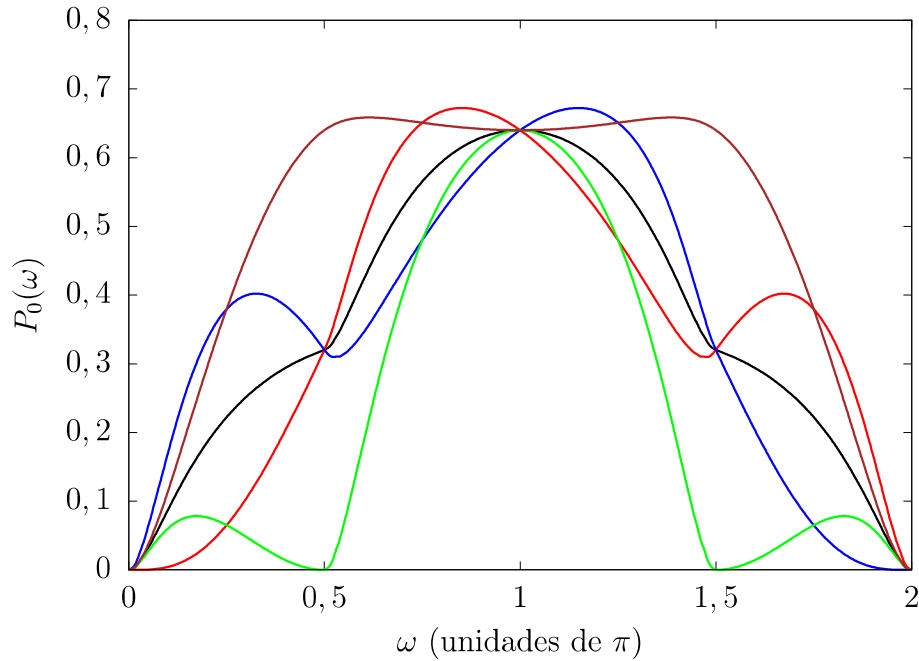


Figura 3.5: Probabilidade $P_0(\omega)$ da localização (curva sólida) para os qubits $|\uparrow\rangle$ (preto), $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle)$ (vermelho) $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - i|\downarrow\rangle)$ (azul), $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$ (verde) e $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$ (marrom).

A Figura 3.6 mostra P_0 em função do qubit inicial (α, β) para $\omega = \pi/2$, a proposta do Wojcik com \hat{C}_W e a nossa com \hat{C}_T , ou seja, estamos comparando caminhadas quânticas com um defeito de fase de $\pi/2$ e com um defeito Fourier na origem. Observamos o

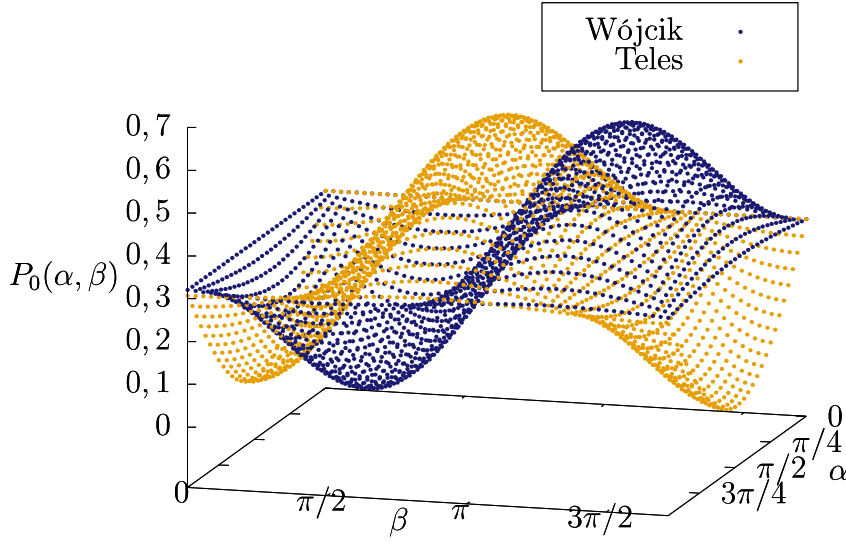


Figura 3.6: Probabilidade para $\omega = \pi/2$ em função do qubit inicial (α, β) para o caso do defeito de fase do Wojcik (pontos azuis) [14] e nossa proposta de defeito de rede (pontos laranjas).

mesmo perfil de localização para ambos os casos, no entanto deslocados por $\pi/2$, conforme esperado, visto que a diferença entre as Eqs. 3.14 e 3.10 reside na translação imposta pela nova dependência com $\beta + \omega$. A integração de P_0 sobre toda a esfera de Bloch, leva ao mesmo perfil de localização médio em função de ω idêntico ao do qubit inicial $|\uparrow\rangle$ (curvas pretas nas Figuras 3.4 e 3.5), já que ambas superfícies na Figura 3.6 são iguais a menos de uma translação.

3.1.4 Propagação e Probabilidade de Sobrevivência

Todas as caminhadas quânticas consideradas aqui tem como característica comum armadilhar parte do estado na origem sem evitar a propagação de parte do estado não aprisionada. Esses defeitos podem ser entendidos como um poço de potencial, de forma análoga aos problemas clássicos de mecânica quântica, de modo que os auto-estados gerados devido a evolução temporal, ocorrida pela atuação da operação unitária podem ser pensados como estados ligados e os estados remanescentes correspondem então aos estados espalhados [14]. Portanto, pode ser interessante dar uma olhada no comportamento dessas caminhadas ao longo do tempo. Primeiro, é conveniente contrastá-la com as propriedades de propagação da caminhada quântica ordenada Hadamard e em seguida, vamos analisar suas características dinâmicas assintóticas comparando a parte armadilhada com

o estado inicial da caminhada quântica.

Vamos considerar uma caminhada quântica com um defeito Fourier na origem partindo do qubit $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$. Este qubit específico apresenta a maior probabilidade de ocupar a posição de origem para um defeito Fourier (\hat{C}_T para $\omega = \pi/2$) entre os casos estudados na Figura 3.5. Para efeito de comparação, vamos considerar uma caminhada Hadamard partindo de um qubit inicial $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle)$. Escolhemos estados distintos para cada um deles, porque ambos levam a distribuições de probabilidade simétricas. A Figura 3.7 mostra a distribuição de probabilidade de ambas juntamente com a respectiva dispersão calculados a partir da Eq. 2.28. A parte do estado não aprisionada é dada por alguns picos simétricos separados por $\sqrt{2}t$ posições, o que também ocorre na caminhada Hadamard [23]. Somado a isso, verificamos no gráfico da dispersão que, ambos exibem comportamento balístico tendo coeficientes de difusão bem similares.

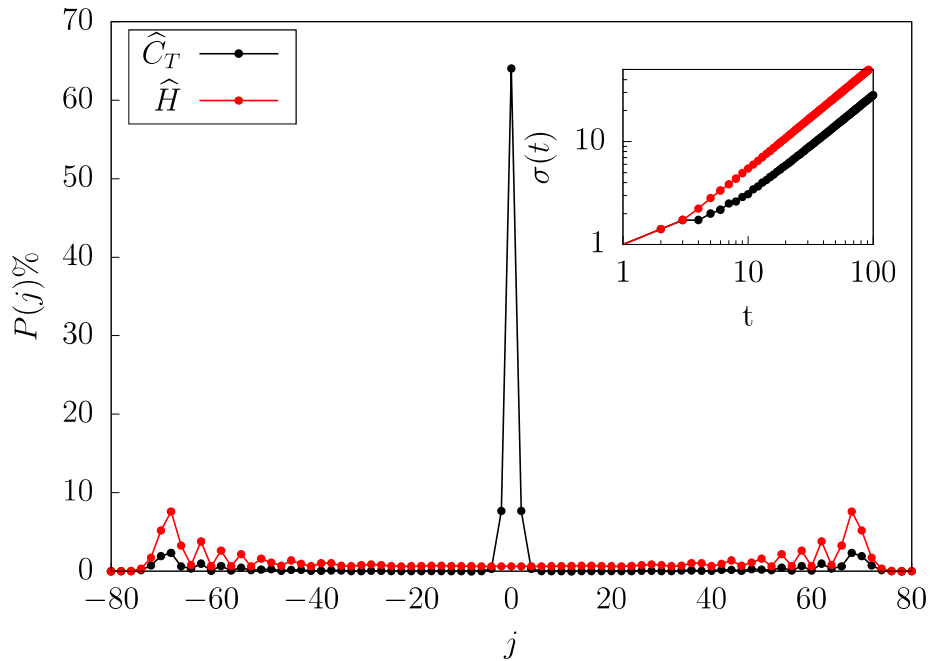


Figura 3.7: Distribuição de probabilidade $P(j)$ da caminhada quântica com um defeito Fourier na origem (\hat{C}_T para $\omega = \pi/2$) e caminhada Hadamard partindo dos qubits iniciais $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$ e $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle)$, respectivamente, após 100 passos. Os pontos no gráfico são somente para as posições pares e as linhas conectando-os são guias para os olhos. No detalhe: dispersão (Eq. 2.28) para ambos os casos.

Convém ressaltar que a localização estudada aqui é notavelmente distinta da localização de Anderson, a qual surge quando uma partícula quântica propaga-se em um meio desordenado e é caracterizado pela ausência de difusão. Uma maneira de gerar uma localização de Anderson no contexto das caminhadas quânticas é através de uma desordem estática, ou seja, quando moedas quânticas são escolhidas aleatoriamente em cada posi-

ção [31]. Em razão disso, é razoável supor que um conjunto randômico de defeitos de redes sobre várias posições tal como os estudados aqui, naturalmente levam a uma forte localização interrompendo qualquer tipo de difusão.

Outra maneira de interpretar um único defeito, como o exposto aqui, é assumindo-o como uma fronteira ou barreira absorvedora. Quando uma partícula clássica inicia uma caminhada na presença de tal fronteira, esta é totalmente absorvida. Contudo, isso não acontece com uma partícula quântica. Por exemplo, um estado inicial $|\uparrow\rangle \otimes |0\rangle$ dirigido por uma moeda Hadamard próximo a uma barreira absorvedora tem uma probabilidade de escape de ≈ 0.36 [2, 4]. Em particular, a parte do estado não absorvida por tal fronteira mantém uma difusão balística. Nesse sentido, podemos afirmar que há uma semelhança considerável entre a caminhada quântica com um único defeito e uma caminhada na presença de uma barreira absorvedora.

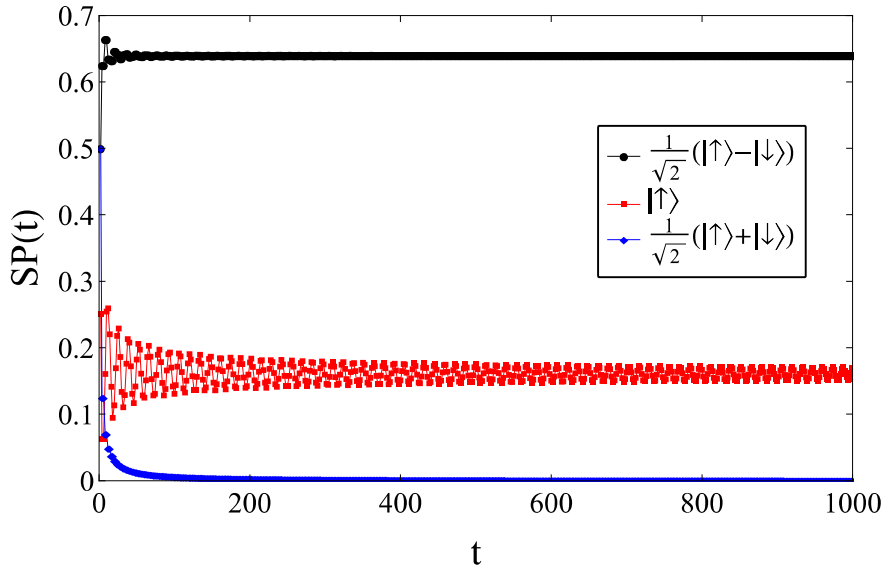


Figura 3.8: Probabilidade de sobrevivência para os qubits $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$ (círculos pretos), $|\uparrow\rangle$ (quadrados vermelhos) e $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$ (losangos azuis) para uma caminhada quântica com um defeito Fourier na origem. Os qubits $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle \pm i|\downarrow\rangle)$ tem o mesmo comportamento apresentado pelo $|\uparrow\rangle$. Os pontos no gráfico são somente para passos de tempo pares ($P_0 \neq 0$) e as linhas conectando pontos são somente guias para os olhos.

Por último, ainda considerando um único defeito Fourier introduzido por meio de nossa moeda, é pertinente examinar as características dinâmicas assintóticas da parte do estado aprisionado comparando-o com seu respectivo estado inicial. Para tanto, calculamos a probabilidade de sobrevivência via Eq. 2.25 para caminhadas quânticas partindo de três

distintos qubits iniciais na Figura 3.8). Quando a caminhada quântica parte dos qubits $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$ e $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$ a razão PS/P_0 sobre o tempo é 1. Portanto, particularmente para esses qubits, esse defeito de rede não altera a fase relativa entre os estados de spin na posição da localização. Entretanto, para os demais qubits considerados, essa razão converge para ≈ 0.5 indicando uma mudança na fase original do qubit.

4 Conclusões

A proposta inicial de investigação era compreender como diferentes defeitos na posição de partida impactam o comportamento da caminhada quântica no que tange a produção de localização. Para tanto, por meio da nossa moeda dependente da posição (Eq. 3.4) introduzimos três distintos tipos de defeitos na posição de partida em caminhadas quânticas caracterizando seus respectivos perfis de localização por meio de cálculos numéricos. Esses perfis de localização correspondem a probabilidade da partícula retornar a sua posição inicial em função de um parâmetro ω que quantifica a intensidade da localização. Observamos que basicamente, o tipo de defeito muda a dependência e a variedade dos perfis de localização como pode ser visto na Tabela 4.1.

Moeda	Defeito na origem	Dependência	Perfis de Localização
Konno	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & e^{i\omega} \\ e^{-i\omega} & -1 \end{pmatrix}$	ω	1
Wojcik	$e^{i\omega} \hat{H}$	ω, α, β	3
Teles	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & e^{i\omega} \\ e^{i\omega} & -e^{2i\omega} \end{pmatrix}$	$\omega, \alpha, (\beta + \omega)$	5

Tabela 4.1: Tipos de defeitos e dependência nos perfis de localização.

Podemos resumir nossos principais resultados nas seguintes constatações:

- (i) nossos cálculos numéricos são capazes de reproduzir os resultados dos modelos de Konno [13] e Wojcik [14] com boa concordância;
- (ii) enquanto o defeito de rede proposto por Konno [13] introduz uma localização independente do qubit inicial, o defeito de fase de Wojcik [14] e o nosso defeito de rede são dependentes do qubit inicial;
- (iii) nós descrevemos a dependência com ω e o qubit inicial dado por (α, β) para cada moeda proposta;

- (iv) nós descobrimos que nossa moeda gera dependência em $\beta + \omega$, diferente do defeito de fase;
- (v) a nova dependência da nossa moeda abre a possibilidade para novos perfis de localização;
- (vi) a presença de um único defeito de rede não evita a propagação balística;
- (vii) a probabilidade de sobrevivência indica que o defeito de rede pode modificar a fase relativa da localização com relação ao qubit inicial.

A dependência do estado de localização com o qubit inicial pode ser útil seja para filtrar ou encurralar partículas em caminhadas quânticas a tempo discreto com respeito a seus estados internos da moeda. Assim, produzindo efeitos que podem ser aplicados, por exemplo, em algoritmos quânticos [14]. Outra perspectiva interessante, que poderá ser investigada em estudos futuros é avaliar a moeda proposta em cenários de defeitos simétricos bem como seus desdobramentos não somente ao comportamento de propagação mas também ao emaranhamento.

Por fim, esperamos que os resultados aqui expostos possam ser usados para promover discussão sobre a localização em tais caminhadas e inspire pesquisadores experimentais a testar nossas descobertas.

Bibliografia

- ¹M. A. Nielsen e I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, 2010).
- ²S. E. Venegas-Andraca, “Quantum walks: a comprehensive review”, *Quantum Information Processing* **11**, 1015–1106 (2012).
- ³Y. Aharonov, L. Davidovich e N. Zagury, “Quantum random walks”, *Physical Review A* **48**, 1687 (1993).
- ⁴J. Kempe, “Quantum random walks: an introductory overview”, *Contemporary Physics* **44**, 307–327 (2003).
- ⁵N. Shenvi, J. Kempe e K. B. Whaley, “Quantum random-walk search algorithm”, *Physical Review A* **67**, 052307 (2003).
- ⁶R. Portugal, *Quantum walks and search algorithms* (Springer, 2013).
- ⁷R. Vieira et al., “Emaranhamento em caminhadas quânticas desordenadas”, (2014).
- ⁸A. M. Childs, “Universal computation by quantum walk”, *Physical review letters* **102**, 180501 (2009).
- ⁹N. B. Lovett et al., “Universal quantum computation using the discrete-time quantum walk”, *Physical Review A* **81**, 042330 (2010).
- ¹⁰G. S. Engel et al., “Evidence for wavelike energy transfer through quantum coherence in photosynthetic systems”, *Nature* **446**, 782–786 (2007).
- ¹¹J. R. Busemeyer, Z. Wang e J. T. Townsend, “Quantum dynamics of human decision-making”, *Journal of Mathematical Psychology* **50**, 220–241 (2006).
- ¹²J. Wang e K. Manouchehri, *Physical implementation of quantum walks* (Springer, 2013).
- ¹³N. Konno, “Localization of an inhomogeneous discrete-time quantum walk on the line”, *arXiv preprint arXiv:0908.2213* (2009).
- ¹⁴A. Wójcik et al., “Trapping a particle of a quantum walk on the line”, *Physical Review A* **85**, 012329 (2012).
- ¹⁵J. Pade, *Quantum mechanics for pedestrians 1: Fundamentals* (Springer, 2014).
- ¹⁶N. S. Yanofsky e M. A. Mannucci, *Quantum computing for computer scientists* (Cambridge University Press, 2008).
- ¹⁷N. Zettili, *Quantum mechanics: concepts and applications* (American Association of Physics Teachers, 2003).
- ¹⁸D. Bes, *Quantum mechanics: a modern and concise introductory course* (Springer Science & Business Media, 2012).
- ¹⁹C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloe, *Quantum Mechanics, vol. 1, 231* (Singapore: Wiley, 2005).

- ²⁰J. J. Sakurai e E. D. Commins, *Modern quantum mechanics, revised edition* (American Association of Physics Teachers, 1995).
- ²¹L. Carvalho, C. Lavor e V. Motta, “Caracterização matemática e visualização da esfera de Bloch: ferramentas para computação quântica”, *TEMA-Tendências em Matemática Aplicada e Computacional* **8**, 351–360 (2007).
- ²²R. Vieira, E. P. Amorim e G. Rigolin, “Dynamically disordered quantum walk as a maximal entanglement generator”, *Physical review letters* **111**, 180503 (2013).
- ²³A. C. Orthey Jr e E. P. Amorim, “Connecting velocity and entanglement in quantum walks”, *Physical Review A* **99**, 032320 (2019).
- ²⁴M. Gessner, *Dynamics and characterization of composite quantum systems* (Springer, 2016).
- ²⁵A. Buarque e W. Dias, “Aperiodic space-inhomogeneous quantum walks: Localization properties, energy spectra, and enhancement of entanglement”, *Physical Review E* **100**, 032106 (2019).
- ²⁶G. Martín-Vázquez e J. Rodríguez-Laguna, “Optimizing the spatial spread of a quantum walk”, *arXiv preprint arXiv:2004.05657* (2020).
- ²⁷D. J. Griffiths, *Introduction to quantum mechanics* (Pearson Prentice Hall, 2005).
- ²⁸R. Zhang, P. Xue e J. Twamley, “One-dimensional quantum walks with single-point phase defects”, *Physical Review A* **89**, 042317 (2014).
- ²⁹T. Chen e X. Zhang, “The defect-induced localization in many positions of the quantum random walk”, *Scientific reports* **6**, 1–12 (2016).
- ³⁰Z. Li, J. Izaac e J. Wang, “Position-defect-induced reflection, trapping, transmission, and resonance in quantum walks”, *Physical Review A* **87**, 012314 (2013).
- ³¹R. Vieira, E. P. Amorim e G. Rigolin, “Entangling power of disordered quantum walks”, *Physical Review A* **89**, 042307 (2014).