

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

LORENA ROSA CERUTTI

CAMINHADAS QUÂNTICAS DESORDENADAS COM BARREIRA
ABSORVEDORA

JOINVILLE - SC
2023

LORENA ROSA CERUTTI

**CAMINHADAS QUÂNTICAS DESORDENADAS COM BARREIRA
ABSORVEDORA**

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
2023**

Cerutti, Lorena Rosa

Caminhadas Quânticas Desordenadas com Barreira Absorvedora / Lorena Rosa Cerutti. - Joinville – 2023. 96 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, 2023.

1. Caminhadas quânticas. 2. Localização. 3. Barreira de Absorção 4. Desordem. I. Amorim, Edgard Pacheco Moreira II. Universidade do Estado de Santa Catarina, Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

LORENA ROSA CERUTTI

**CAMINHADAS QUÂNTICAS DESORDENADAS COM BARREIRA
ABSORVEDORA**

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.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Edgard Pacheco Moreira Amorim
Universidade do Estado de Santa Catarina (presidente/orientador)

Membros:

Prof. Dr. Olimpio Pereira de Sá Neto
Universidade Estadual do Piauí

Prof. Dr. Daniel Vieira
Universidade do Estado de Santa Catarina

Joinville, 14 de julho de 2023.

Para todos que compartilharam comigo essa jornada.

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Álvaro e Sônia, que foram meus primeiros educadores e meus maiores incentivadores. Obrigada por me ajudarem a compreender que o conhecimento é o único bem que não nos pode ser tomado e nossa maior chance de conquistar uma vida mais digna.

À minha irmã, que desde cedo foi exemplo. Obrigada por ser meu alicerce. Você é uma força da natureza.

Ao meu amor, Patrick. Obrigada por todo seu carinho, dedicação e compreensão. Seu amor deixou em mim marcas para toda vida.

Ao meu orientador, Edgard. Obrigada por ter me contagiado com o seu entusiasmo pela pesquisa e pelo conhecimento.

À Janice pela parceria estabelecida na reta final de nossos mestrados.

Aos meus familiares, amigos e a todos que sonharam comigo esse sonho.

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

RESUMO

Cerutti, L. R.: *Caminhadas Quânticas Desordenadas com Barreira Absorvedora*. Dissertação de Mestrado (Universidade do Estado de Santa Catarina, 2023). 96 p.

Neste trabalho estudamos o comportamento da probabilidade de escape para caminhadas quânticas unidimensionais de tempo discreto com barreira absorvedora em diferentes posições da rede via método analítico e simulações numéricas. A partir de ambas as abordagens, observamos que a probabilidade de escape depende do estado interno inicial do caminhante (*qubit*) e da posição da barreira absorvedora. Em seguida, estudamos caminhadas quânticas desordenadas dinamicamente e estaticamente com uma barreira absorvedora, assumindo que para uma quantidade de passos de tempo muito grande, a probabilidade de escape média sobre várias caminhadas segue uma lei de potência com o tempo. Nesse contexto, obtemos que quando a barreira está muito próxima do caminhante, no geral, ele é totalmente absorvido pela barreira em taxas de tempo cada vez maiores na medida que o nível de desordem da caminhada aumenta, tornando-se muito semelhante ao comportamento clássico em alguns casos. Por outro lado, quando a barreira está bem afastada da origem, as taxas de absorção diminuem significativamente, ao ponto que a partícula escapa parcialmente ou totalmente da barreira absorvedora em alguns casos de desordem estática.

Palavras-chave: Caminhadas quânticas; Localização; Barreira de absorção; Desordem.

ABSTRACT

Cerutti, L. R.: *Disordered Quantum Walks with Absorbing Barrier*. Master Thesis (Santa Catarina State University, 2023). 96 p.

In this work, we study the behavior of the escape probability for one-dimensional discrete-time quantum walks with an absorbing barrier in different lattice positions via an analytical method and numerical simulations. From both approaches, we observe that the escape probability depends on the walker's initial internal state (*qubit*) and the position of the absorbing barrier. After that, we study dynamically- and statically-disordered quantum walks with an absorbing barrier, assuming that for a large number of time steps, the average escape probability over several walks follows a power law with time. In this context, we obtain that when the barrier is very close to the walker, in general, the walker is fully absorbed through the barrier at increasing rates of time as the level of walking disorder increases, becoming very similar to the classic behavior in some cases. On the other hand, when the barrier is far from the origin, the absorption rates decrease significantly, to some extent that the particle partially or completely escapes the absorbing barrier in some cases of static disorder.

Key-words: Quantum walks; Localization; Absorbing barrier; Disorder.

Lista de Figuras

1.1	Curvas de distribuição de probabilidade $P(j, t)$ para caminhadas clássicas em uma dimensão para três valores diferentes de passos de tempo: $t = 72, 180$ e 450 . Imagem retirada de [24] com adaptações.	26
1.2	Exemplo de uma possível CAC unidimensional em cinco passos. Imagem retirada de [20] com adaptações.	27
1.3	Curva de densidade de probabilidade $P(x)$ obtida a partir da Eq. 1.2 mostrando a percentagem da probabilidade associada a alguns intervalos de posições em função do desvio padrão. Imagem retirada de [36].	29
1.4	Implementação de uma CAC unidimensional conhecido como Tábua de Galton. Imagem retirada de [38] com adaptações.	30
1.5	Representação da dinâmica dos seis primeiros passos de um caminhante clássico (à esquerda) e quântico (à direita) em uma dimensão. Imagem retirada de [38] com adaptações.	32
1.6	(a) Interferômetro de Mach-Zehnder. (b) Arranjo de interferômetros semelhante a uma tábua de Galton utilizado para simular uma CQ de três passos. A probabilidade do feixe chegar em cada anteparo em diferentes posições está correlacionada com a intensidade do feixe. Neste arranjo, cada Bs atua como o operador moeda quântica e o operador de translação condicional ao mesmo tempo. Imagem retirada de [18].	34
2.1	Esfera de Bloch. Perceba que se $\alpha = 0$ então $ \Psi_C\rangle = L\rangle$, por outro lado para $\alpha = \pi$ tem-se $ \Psi_C\rangle = R\rangle$. As superposições igualitárias entre os <i>kets</i> $ L\rangle$ e $ R\rangle$, ilustradas aqui, correspondem a $\alpha = \pi/2$ com diferentes possibilidades de fase relativa dado que $\beta \in [0, 2\pi]$. Na figura, destacamos quatro superposições igualitárias com $\beta = 0, \pi/2, \pi$ e $3\pi/2$. Retirado de [18] com adaptações.	41

2.2	Uma partícula quântica com estado $ L\rangle$ na posição $j = 0$ sofre uma rotação que coloca seu estado inicial (em vermelho) em um estado de superposição $ S_L\rangle$ (roxo) entre os <i>kets</i> $ L\rangle$ (vermelho) e $ R\rangle$ (azul). A seguir, a operação de translação condicional efetuada sobre esse estado já rotacionado, translada o <i>ket</i> $ L\rangle$ para a posição vizinha à esquerda $j = -1$ e o <i>ket</i> $ R\rangle$ para a posição $j = 1$ à direita no passo $t = 1$. Essa operação se repete para as demais posições e passos. Note que a atuação da moeda quântica em $ L\rangle$ e $ R\rangle$, levam a diferentes superposições cuja diferença de fase entre os <i>kets</i> são respectivamente 0 para $ S_L\rangle$ e π para $ S_R\rangle$. Observe ainda que a amplitude na posição $j = 0$ em $t = 2$ é dada por uma superposição com amplitudes vindas das posições à esquerda e à direita. Retirado de [18] com adaptações.	44
2.3	Ilustração representativa das desordens dinâmica e estática no contexto de uma CQ. As linhas pontilhadas representam um possível passeio clássico. As curvas sólidas retratam as amplitudes de probabilidade e as diferentes cores representam diferentes moedas. Os termos RQW_2 e RQW_∞ correspondem as caminhadas quânticas desordenadas (aleatórias) e os seus subíndices indicam o número de possíveis opções de moedas a serem escolhidas. As desordens apresentadas aqui são (a) dinâmica na qual as moedas são sorteadas a cada passo de tempo e são fixas na posição e (b) estática na qual as moedas são sorteadas para cada posição e são fixas no tempo. Imagem retirada de [7] com adaptações.	52
2.4	Distribuições de probabilidade para $t = 100$ para caminhadas Hadamard cujo estado inicial parte de $j = 0$ com os <i>qubits</i> $ R\rangle$, $ L\rangle$ e $\frac{1}{\sqrt{2}}(L\rangle + i R\rangle)$. Imagem retirada de [19] com adaptações.	54
2.5	(a) Comparação entre a distribuição de probabilidade $P(j)$ para uma CAC (em vermelho) e para uma CQ Hadamard (em azul) cujo estado inicial é dado por $ \Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(L\rangle + i R\rangle) \otimes 0\rangle$ levando a uma distribuição simétrica. (b) Comparação entre os valores de dispersão $\sigma(t)$ obtidos para uma CAC e uma CQ. Imagem retirada de [22].	55
3.1	CAC com barreira absorvedora na origem. Para esta situação a partícula inicia seu passeio em $j = 1$. O caminhante se movimenta com probabilidades iguais de ir para à esquerda ou direita. Imagem retirada de [12].	58
3.2	Esquema de uma CQ unidimensional com uma barreira absorvedora em $j = M$. A seta preta representa a dinâmica do passeio sem influência da barreira. A seta vermelha pontilhada reproduz a absorção do caminhante pela barreira absorvedora. Retirado de [65] com adaptações.	65
4.1	Probabilidade de escape $P_E(M)$ para as posições $j = M$ da barreira tal que (a) $M = 1$, (b) $M = 2$ (c) $M = 3$, (d) $M = 4$, (e) $M = 5$ e (f) $M \rightarrow \infty$, com $\alpha \in [0, \pi]$ e $\beta \in [0, 2\pi]$. As regiões em vermelho representam probabilidades de escape altas e as regiões em azul representam probabilidades baixas segundo as diferentes escalas à direita de cada gráfico.	75
4.2	Cortes feitos em algumas das superfícies da Fig. 4.1 acima mostrando $P_E(M) \times \alpha$ para $\beta = 0, \pi/2$ e π e $P_E(M) \times \beta$ para $\alpha = 0, \pi/2$ e π respectivamente em (a) e (b) para $M = 1$, (c) e (d) para $M = 2$ e (e) e (f) para $M \rightarrow \infty$	76

- 4.3 Probabilidade de escape para os seguintes *qubits*: (a) $|L\rangle$, (b) $\frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + |R\rangle)$, (c) $\frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle \pm i|R\rangle)$ e (d) $\frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle - |R\rangle)$ considerando diferentes posições da barreira absorvedora variando de $M = 1$ até 5 e $M = 20$ para uma caminhada Hadamard com 100 passos de tempo. Nos detalhes ΔP_E representa a diferença percentual entre os valores analítico e numérico para os dez últimos passos da CQ. Note que ΔP_E para $M = 20$ é comparado a $M \rightarrow \infty$ do modelo analítico. 79
- 4.4 Distribuição de probabilidade $\langle P(j) \rangle$ após $t = 100$ passos de tempo e dispersão $\langle \sigma(t) \rangle$ médias sobre 100 caminhadas partindo do estado inicial $|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + i|R\rangle) \otimes |0\rangle$ com as seguintes desordens: (a) dinâmica DD_∞ , (b) estática DE_∞ , (c) dinâmica DD_2 e (d) estática DE_2 . A desordem ∞ possibilita a escolha de infinitas possibilidades de moedas quânticas dentro de um intervalo contínuo definido por δ tal que $\delta = 0$ corresponde a uma caminhada Hadamard, $\delta = 0, 1$ e $\delta = 0, 5$ restringem respectivamente em 10% e 50% as possibilidades de moeda, enquanto $\delta = 1$ permite a escolha de qualquer moeda do $SU(2)$. Já a desordem $_2$ possibilita escolhas entre as moedas Hadamard e Fourier tal que a probabilidade de escolher uma ou outra é determinada pelo parâmetro δ tal que $\delta = 0$ resulta numa caminhada Hadamard, $\delta = 0, 1$ e $\delta = 0, 5$ correspondem respectivamente a 95% e 75% de chance de sair uma moeda Hadamard, enquanto que para $\delta = 1$ as moedas Hadamard e Fourier ocorrem com a mesma probabilidade. As curvas com linhas pontilhadas à esquerda correspondem a uma gaussiana $P(j) \propto e^{-j^2/(2\sigma^2)}$ e à direita correspondem a uma localização $P(j) \propto e^{-|j|}$ normalizadas segundo $\sum_j P(j) = 1$ com j variando de -100 até 100 83
- 4.5 Probabilidade de escape $\langle P_E(t) \rangle$ média sobre 1000 caminhadas ($t = 80$ até 100) partindo do estado inicial $|\Psi(0)\rangle = |L\rangle \otimes |0\rangle$ com as seguintes desordens: (a)-(c) DD_∞ , (d)-(f) DE_∞ , (g)-(i) DD_2 e (j)-(l) DE_2 , tal que $\delta = 0$ (caminhada Hadamard), $0, 1, 0, 5$ e 1 . A primeira, segunda e terceira colunas referem-se as situações cujas barreiras absorvedoras estão posicionadas em $M = 1, 2$ e 20 respectivamente. Nas legendas internas dos gráficos, temos os expoentes n de $\langle P_E(t) \rangle \propto t^{-n}$ obtidos via ajuste cujas cores correspondem as respectivas curvas. Note que $n = 0$ para a caminhada Hadamard (em preto). 85
- 4.6 Probabilidade de escape $\langle P_E(t) \rangle$ média sobre 1000 caminhadas ($t = 80$ até 100) cujo estado inicial é $|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + i|R\rangle) \otimes |0\rangle$ com as seguintes desordens: (a)-(c) DD_∞ , (d)-(f) DE_∞ , (g)-(i) DD_2 e (j)-(l) DE_2 , para $\delta = 0$ (caminhada Hadamard), $0, 1, 0, 5$ e 1 . A primeira, segunda e terceira colunas referem-se as situações cujas barreiras absorvedoras estão em $M = 1, 2$ e 20 respectivamente. Nas legendas internas dos gráficos, temos os expoentes n de $\langle P_E(t) \rangle \propto t^{-n}$ obtidos via ajuste cujas cores correspondem as respectivas curvas ($n = 0$ para a caminhada Hadamard na cor preta). 86

Lista de Tabelas

1.1	Valores para a distribuição de probabilidade de uma CAC com uma moeda justa ($p = q = 1/2$). Os dados que compõem essa tabela foram obtidos a partir da Eq. 1.1 para os cinco primeiros passos da caminhada.	28
1.2	Distribuição de probabilidade para uma caminhada quântica de cinco passos desenvolvida a partir do arranjo de vários interferômetros de Mach-Zehnder.	36
3.1	Coefficientes que caracterizam a probabilidade de escape para $j \rightarrow -\infty$ em uma CQ Hadamard iniciada no estado $(L(0,0) L\rangle + R(0,0) R\rangle) \otimes 0\rangle$ tal que $L(0,0) = le^{i\phi_l}$, $R(0,0) = re^{i\phi_r}$ e $\Phi = \phi_l - \phi_r$. Neste modelo, a barreira absorvedora está localizada em $M > 0$. Enquanto a probabilidade de escape é dada por $P_E(1/2, M) = l^2\mathcal{C}_l(M) + r^2\mathcal{C}_r(M) + lr \cos \Phi \mathcal{C}_{lr}(M)$, a probabilidade de absorção da barreira é dada por $1 - P_E(1/2, M)$ [47]. .	71

Sumário

1	Introdução	23
1.1	Motivação	23
1.2	Caminhada aleatória clássica	25
1.3	Tábua de Galton	29
1.4	Caminhada quântica	30
1.5	Interferômetro de Mach-Zehnder	33
1.6	Organização da dissertação	36
2	Modelo Teórico	39
2.1	Estado do caminhante quântico	39
2.2	Evolução temporal da caminhada quântica	42
2.3	Operador moeda	44
2.4	Operador de translação condicional	48
2.5	Equações de recorrência e desordem	51
2.6	Distribuição de probabilidade e dispersão	53
3	Barreira Absorvedora	57
3.1	Barreira absorvedora na caminhada aleatória clássica	57
3.2	Caminhada quântica no espaço de momento	59
3.3	Caminhada quântica com condições periódicas de contorno	63
3.4	Caminhada quântica com barreira absorvedora	64
3.5	Aplicação para uma caminhada Hadamard	70
3.6	Cálculo numérico da probabilidade de escape	71
4	Resultados	73
4.1	Análise do modelo analítico da probabilidade de escape	73
4.2	Modelo analítico x cálculo numérico	78
4.3	Caminhadas quânticas desordenadas	80
4.4	Probabilidade de escape para caminhadas desordenadas	84
5	Conclusões	89
	Bibliografia	92

Introdução

"Science offers the boldest metaphysics of the age. It is a thoroughly human construct, driven by the faith that if we dream, press to discover, explain, and dream again, thereby plunging repeatedly into new terrain, the world will somehow come clearer and we will grasp the true strangeness of the universe. And the strangeness will all prove to be connected, and make sense."

Edward O. Wilson

1.1 Motivação

O fim do século XIX e o começo do século XX marcaram um período conturbado para a ciência. O surgimento do problema da emissão de radiação do corpo negro, fenômeno que mostrou-se com o tempo não poder ser resolvido através de modelos clássicos, abriu precedentes para uma revolução nos fundamentos da física [1]. Enquanto as teorias clássicas previam absurdos, entre os quais está a catástrofe do ultravioleta e suas energias infinitas, surgia algo realmente novo que levaria anos para ser compreendido, a mecânica quântica [1, 2].

Em paralelo ao desenvolvimento da física quântica, durante a primeira metade do século XX é criada a Máquina de Turing [3]. O invento que deu a Alan Mathison Turing, homem homossexual, o título simbólico de "pai da computação", modificou a sociedade em todos os seus aspectos [4], ao mostrar que toda informação poderia ser codificada através dos símbolos "0" e "1", conhecidos como *bits*¹ [5]. Junto com a teoria da informação de Shanon, o processamento de símbolos proposto por Turing permitiu a Von Neumann

¹Unidade básica de informação clássica. Simplificação para dígitos binários, *binary digits* em inglês.

iniciar o desenvolvimento do computador como o conhecemos hoje, cuja arquitetura diferencia hardware e software. Todo computador clássico é atualmente visto como uma variante da máquina de Turing [3].

Apesar de não ter sido fisicamente implementada por seu criador, a Máquina de Turing teve seu processo computacional demonstrado pelo mesmo em 1936. A teoria abordada neste artigo deu resposta ao 10º de 23 problemas postulados por Hilbert em 1900, conhecido como o problema de decisão ou *Entscheidungsproblem*². Esse problema questionava a possibilidade de, dada uma equação com coeficientes inteiros e um número determinado de variáveis, elaborar um processo que decida, através de um número infinito de operações, se as equações tem soluções inteiras. O raciocínio de David Hilbert, que visou o estudo da matemática e solução de problemas teóricos por meios mecânicos, precedeu em décadas a invenção dos computadores [6].

A construção do primeiro computador eletrônico ocorreu assim que o transistor foi criado em 1947, pouco tempo depois do surgimento da Máquina de Turing [2]. Em um contexto de guerra e disputas econômicas [3], o aumento do processamento dos computadores deu-se em um ritmo inimaginável, levando a miniaturização do transistor [6]. Em 1965, Gordon Earl Moore quantificou esse aumento de capacidade, afirmando que os fabricantes de chips duplicariam o número de transistores de uma lâmina de silício a cada 24 meses [1, 2, 6]. Esse intervalo de tempo foi posteriormente modificado para 18 meses e essa previsão passou a ser conhecida como Lei de Moore [6].

Embora a Lei de Moore tenha se mantido fidedigna à realidade desde 1960 [2], é sabido que existe um limite de tamanho na fabricação dos dispositivos eletrônicos, imposto pela física clássica [1]. Assim sendo, uma vez que a Lei de Moore continue a valer, haverá um momento em que não será possível reunir tantos transistores em uma mesma lâmina sem contar com efeitos quânticos [3]. Acredita-se que devido ao processo de miniaturização dos componentes eletrônicos que constituem os computadores [6], este limite deve ser atingido em algum momento próximo as duas primeiras décadas do século XXI [2].

Quando os limites físicos na produção de componentes eletrônicos forem atingidos e a Lei de Moore chegar ao seu limite, uma mudança de paradigma na computação será necessária [2]. A habilidade de controlar sistemas quânticos será essencial a fim de que a mecânica quântica possa ser utilizada de modo a caracterizar, transportar e manipular

²Termo alemão para "problema de decisão".

informações [2, 3]. Os computadores clássicos (aqueles que obedecem às leis da mecânica clássica) cederão então lugar a uma nova e sofisticada computação baseada na mecânica quântica [7]. Neste cenário, os *bits* clássicos (0 e 1), ou simplesmente *bits*, darão lugar aos *bits* quânticos³ também denotados como *q-bits* ou *qubits*.

O computador quântico foi proposto primeiramente em 1980 por Paul Benioff [8] através da descrição de um modelo quântico da máquina de Turing. Outra grande contribuição para a área é atribuída a Richard Philips Feynman, devido ao artigo [9] publicado em 1982 [6]. Nesse trabalho, o autor propôs que para simular sistemas quânticos com eficiência é necessário construir uma nova computação [2]. Em 1985, David Deutsch chega à definição atual de computador quântico [2, 3]. Os primeiros algoritmos de busca e fatoração quânticos foram desenvolvidos em meados de 1990, por Lov Grover e Peter Shor, respectivamente [3] e são exponencialmente mais rápidos com relação aos algoritmos clássicos [2, 3].

Neste ambiente efervescente de novos algoritmos baseados na mecânica quântica, as caminhadas quânticas tanto discretas [10] quanto contínuas [11] no tempo, despontaram inicialmente como propostas de algoritmos de busca exponencialmente mais rápidos do que seus correspondentes clássicos [4, 12]. No entanto, mais recentemente, outros trabalhos mostraram que elas podem também nos fornecer *insights* sobre a tomada de decisão humana [13], assim como sobre a eficiência energética da fotossíntese [14], sendo viáveis para realizar computação universal [15, 16] e implementáveis em diferentes plataformas experimentais [17].

Nesta introdução, partiremos na próxima seção do modelo matemático da caminhada aleatória clássica e em seguida, apresentaremos a caminhada quântica através de uma analogia com óptica clássica. Diferenças notáveis entre os dois modelos serão apontadas.

1.2 Caminhada aleatória clássica

A caminhada aleatória clássica (CAC), do inglês *Classical Random Walk*, é um problema matemático referente a teoria das probabilidades [18], que busca descrever o movimento não-determinístico de uma partícula clássica [19]. Embora faça parte das somas de variáveis aleatórias, fortemente estudadas entre os séculos XVII e XIX [20], esse modelo foi

³Análogo quântico do *bit* clássico. Enquanto os dois valores lógicos de um *bit* clássico são mutuamente excluídos um *qubit* pode ter os valores lógicos $|L\rangle$, $|R\rangle$ ou qualquer superposição entre eles. Qualquer objeto quântico que possua dois estados distinguíveis pode representar um *qubit*. Entre os exemplos mais comuns estão: os estados de polarização de um fóton (horizontal ou vertical) e *spins* nucleares [5].

proposto pela primeira vez somente em 1905, por Karl Pearson, em um artigo que deu nome ao problema [21, 22]. Nessa publicação, Pearson evidenciou sua dificuldade para obter a probabilidade de localizar, a determinada distância da origem (entre r e $r + \delta r$), um homem que caminha em uma rede de posições [21]. Como resposta ao questionamento de Karl, Lord Rayleigh argumentou que a distribuição de probabilidade procurada deve resultar, para muitos passos numa curva gaussiana [23].

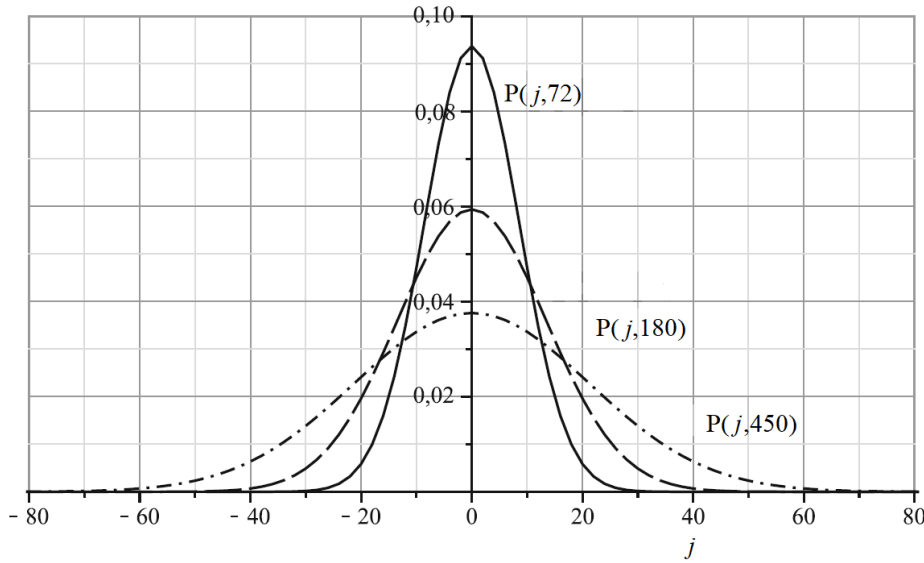


Figura 1.1: Curvas de distribuição de probabilidade $P(j, t)$ para caminhadas clássicas em uma dimensão para três valores diferentes de passos de tempo: $t = 72, 180$ e 450 . Imagem retirada de [24] com adaptações.

A Fig. 1.1 ilustra a distribuição de probabilidade de uma CAC para três valores de tempo diferentes. Perceba que para todos os casos, a curva em questão é uma gaussiana, cujo formato irá variar conforme o número de passos de tempo. Enquanto a largura da curva aumenta, a altura do ponto médio irá diminuir com o passar do tempo [24]. Pode-se dizer que quanto maior a quantidade de passos, mais achatada será a curva em questão.

Atualmente, a CAC é um modelo utilizado para estudar diversos sistemas físicos [20], o que a faz ser amplamente conhecida dentro das ciências exatas, sendo largamente usada em algoritmos estocásticos, tal como o método de Monte Carlo para resolver, por exemplo, a equação de Schroedinger de muitos corpos [25] ou estudar fractais [26]. A CAC também é utilizada em problemas de otimização [27] e classificação [28], para explicar fenômenos econômicos [23], e também possui várias aplicações em biologia [29], em particular, nos estudos sobre genética ou modelagem do movimento de animais [22], em física de polímeros [30] e movimento browniano [31].

Para se adaptarem aos mais diversos contextos, as CACs podem considerar, por exemplo, o tempo como uma variável contínua ou discreta [18]. A probabilidade da partícula dar um passo num determinado sentido pode ser igual ou diferente da probabilidade de dar um passo no sentido oposto. Não há restrições também quanto a posição inicial do caminhante, que pode partir de qualquer ponto da rede, ou quanto ao tamanho do passo, que pode ser fixo ou variável [32]. Do mesmo modo, é possível modelar caminhadas em malhas uni ou bidimensionais, ou até mesmo na forma gaussiana [33].

Nesta seção, vamos considerar a CAC em uma dimensão que é equivalente ao problema do caminhante aleatório em uma linha [20], com passos de tamanho fixo e tempo discreto. Para tanto, imagine uma partícula (caminhante) que se encontra inicialmente na origem de uma rede unidimensional de posições, denotada por j tal que $j \in \mathbb{Z}$ [19] e cujo deslocamento se dará através de passos de comprimento $l = 1$. Segundo a dinâmica da caminhada, partindo da sua posição inicial, o caminhante terá uma probabilidade $p \in [0, 1]$ de se deslocar para à direita e $q = 1 - p$ de se mover para à esquerda. Os primeiros cinco passos de uma possível caminhada podem ser vistos na Fig. 1.2.

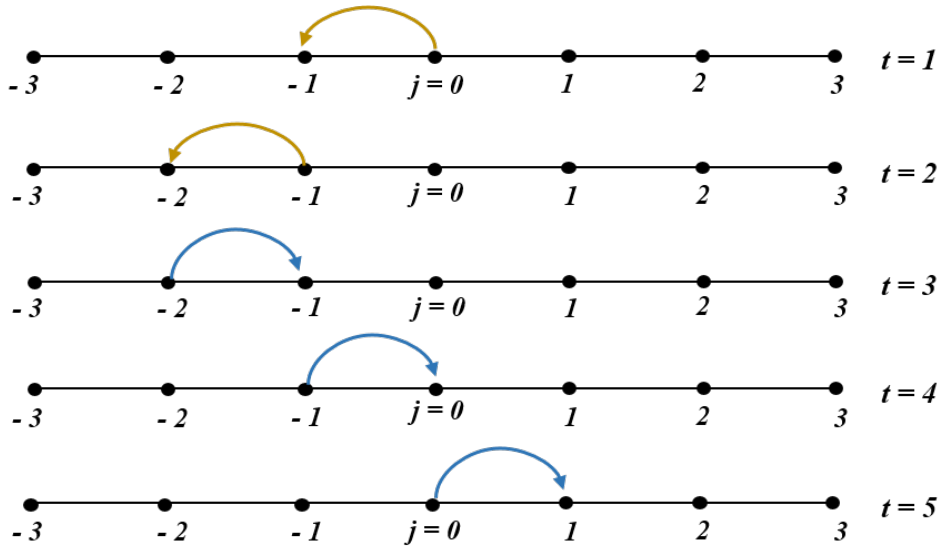


Figura 1.2: Exemplo de uma possível CAC unidimensional em cinco passos. Imagem retirada de [20] com adaptações.

Uma vez que a CAC é um processo markoviano, ou seja, a probabilidade de cada novo passo do caminhante é independente da probabilidade dos anteriores, é comum atribuir a aleatoriedade da partícula ao lançamento de uma moeda. Desta forma, o sentido do movimento, será definido em um jogo de cara e coroa [19]. Se o resultado do lançamento da moeda for cara, diz-se que a partícula dará um passo para à direita, do contrário

(coroa), ela irá se deslocar para à esquerda [22]. No caso de uma moeda equiprovável (justa, imparcial ou não-viciada) [34] $p = q = 1/2$, ou seja, há 50% de chance de ir para cada um dos sentidos a cada passo.

Na Fig. 1.2 temos uma CAC na qual a partícula parte da origem ($j = 0$), dando dois passos de comprimento $l = 1$ para à esquerda (em amarelo) e três para à direita (em azul). Assim sendo, após cinco lançamentos da moeda, que marcam os cinco passos do caminhante, ele estará ocupando a posição $j = 1$ que possui probabilidade associada de aproximadamente 31,25%, conforme é possível ver na Tabela 1.1. A probabilidade do caminhante estar a uma certa posição j em um instante de tempo t pode ser calculada pela distribuição binomial,

$$P(j, t) = \frac{t!}{\left(\frac{t+j}{2}\right)! \left(\frac{t-j}{2}\right)!} p^{(t+j)/2} (1-p)^{(t-j)/2}. \quad (1.1)$$

Para que a probabilidade acima fosse obtida, considerou-se que cada passo da partícula é dado em um instante de tempo, de modo que o tempo total da caminhada $t = 5$ corresponde ao número total de passos dados [34]. Da mesma maneira, para que não houvesse dependência com o comprimento do passo, e para que a equação estivesse de acordo com a Fig. 1.2, convencionou-se que $l = 1$. Se o caminhar da partícula for determinado pelo lançamento de uma moeda justa, então a distribuição de probabilidades para os cinco primeiros passos é dada pela Tabela 1.1.

t/j	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
0						1					
1					$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{2}$				
2				$\frac{1}{4}$		$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{4}$			
3			$\frac{1}{8}$		$\frac{3}{8}$		$\frac{3}{8}$		$\frac{1}{8}$		
4		$\frac{1}{16}$		$\frac{1}{4}$		$\frac{3}{8}$		$\frac{1}{4}$		$\frac{1}{16}$	
5	$\frac{1}{32}$		$\frac{5}{32}$		$\frac{5}{16}$		$\frac{5}{16}$		$\frac{5}{32}$		$\frac{1}{32}$

Tabela 1.1: Valores para a distribuição de probabilidade de uma CAC com uma moeda justa ($p = q = 1/2$). Os dados que compõem essa tabela foram obtidos a partir da Eq. 1.1 para os cinco primeiros passos da caminhada.

Para muitos passos, ou seja, considerando $t \rightarrow \infty$, a distribuição binomial dada na Eq. 1.1 dá lugar a uma distribuição de probabilidade gaussiana [34], conforme conjecturou Lord Rayleigh. Assim sendo, a função densidade de probabilidade $P(x)dx$ de encontrar o caminhante entre x e $x + dx$, será dada por

$$P(x)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2} dx, \quad (1.2)$$

tal que μ , σ e σ^2 representam respectivamente a média, o desvio padrão e a variância na posição do caminhante, onde $\mu = (p - q)t$ e $\sigma = 2l\sqrt{tpq}$ [19]. Para um lançamento justo, com passo $l = 1$, obtém-se $\mu = 0$, $\sigma \propto \sqrt{t}$ e $\sigma^2 \propto t$ [18, 34].

Embora não seja possível afirmar com certeza qual será a posição final ocupada pelo caminhante, uma vez que os resultados dos lançamentos da moeda são aleatórios [35], a Eq. 1.2 nos fornece como a probabilidade está distribuída nas posições. Na Fig.1.3, é possível notar que existe uma probabilidade de 68,2% de encontrar a partícula na área verde da curva, correspondente a $\mu \pm \sigma$. Em contrapartida, é possível perceber que há pouca probabilidade de encontrar o caminhante nas áreas mais afastadas da origem (em vermelho), que juntas somam uma probabilidade aproximada de 4,2%.

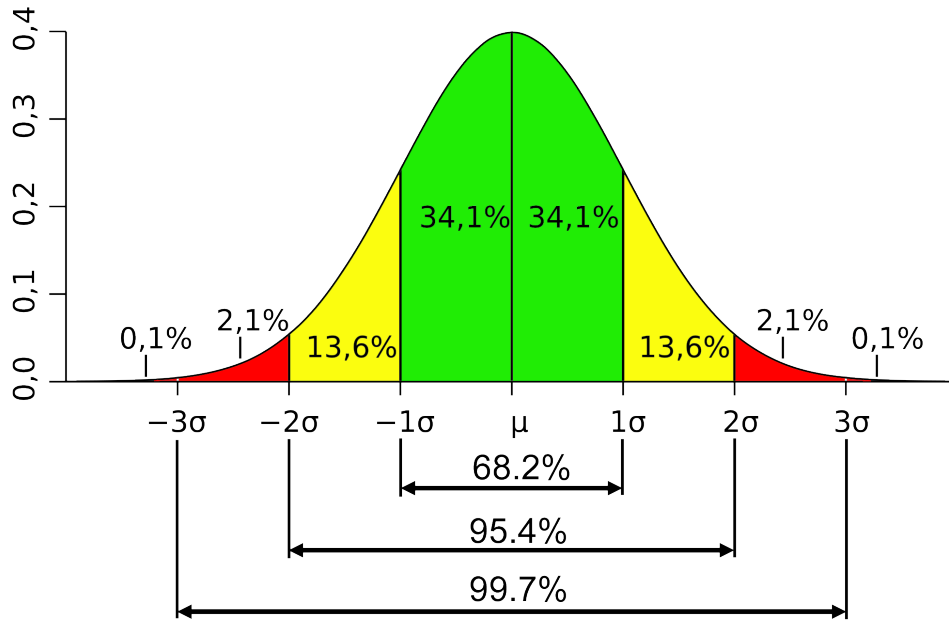


Figura 1.3: Curva de densidade de probabilidade $P(x)$ obtida a partir da Eq. 1.2 mostrando a percentagem da probabilidade associada a alguns intervalos de posições em função do desvio padrão. Imagem retirada de [36].

1.3 Tábua de Galton

Uma forma tangível de visualizar tais propriedades associadas a uma CAC se dá através da análise da *Tábua de Galton* [34], em evidência na Fig. 1.4. Muito utilizada no estudo de conceitos de probabilidade, estatística, trajetória e aleatoriedade [37], a Tábua de Galton consiste em uma mesa com pinos cuidadosamente colocados a uma mesma distância entre eles [34]. O objetivo deste dispositivo é ilustrar um movimento aleatório e a precisão na

montagem do aparato garante que as probabilidades p e q sejam iguais [37].

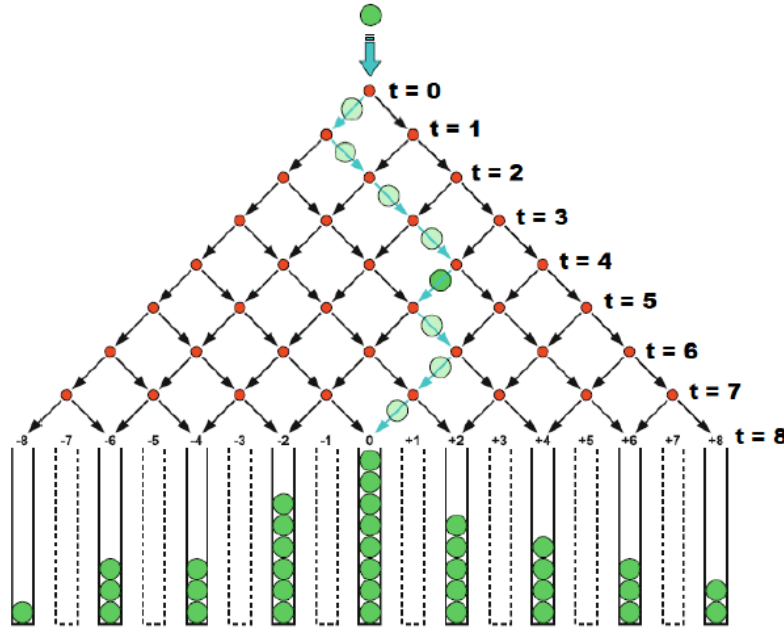


Figura 1.4: Implementação de uma CAC unidimensional conhecido como Tábua de Galton. Imagem retirada de [38] com adaptações.

Como mostra a Fig. 1.4, o funcionamento da tábua de Galton é bastante simples. Inicialmente as esferas são soltas em sequência a partir da posição inicial escolhida, que neste caso é a origem do eixo coordenado (centro da mesa). As esferas caem quicando entre os pinos até chegarem a uma das colunas coletoras [34]. Neste exemplo, partindo da posição $j = 0$, a esfera quicou (transladou) quatro vezes para à esquerda e quatro vezes para à direita, chegando na coluna coletora da origem, ou seja, na mesma posição que a bolinha ocupava no instante inicial.

O que se vê nas colunas coletoras é o formato da curva de probabilidade. Como esperado, quanto maior o número de passos e de bolinhas utilizadas nesta demonstração, mais próximo a formação encontrada nas colunas coletoras será de uma curva gaussiana [37], o que resultará em uma maior concentração de esferas na origem (posição inicial), diminuindo de maneira exponencial a medida que as posições vão para os extremos [34].

1.4 Caminhada quântica

Uma vez que os computadores clássicos passaram a se mostrar ineficientes na resolução de alguns problemas e na simulação de sistemas quânticos [2], torna-se cada vez mais evidente a necessidade de uma quebra de paradigma [24]. Dessa mudança de pensamento,

irrompe uma nova área de pesquisa multidisciplinar, a computação e informação quântica, que atrai a atenção de toda a comunidade científica [24]. Nesse contexto, dado que a intuição humana está enraizada no mundo clássico, os cientistas passam a procurar versões quânticas dos modelos e dispositivos já estabelecidos classicamente [2].

Por ser uma ferramenta flexível e muito utilizada em inúmeras áreas de estudo para a modelagem dos mais diversos sistemas [20], além de ter sido empregada com grande sucesso no desenvolvimento de algoritmos clássicos [39], surgiu a tentativa de propor um análogo quântico da CAC unidimensional [20, 39]. O primeiro modelo deste tipo surge em 1993, no artigo *Quantum Random Walks* [10].

Em sua proposta, os autores Aharonov, Zagury e Davidovich consideraram uma partícula quântica de spin-1/2 como caminhante (por exemplo, um elétron), que possui além do grau de liberdade externo (posição ou momento), um grau extra de liberdade interno (o *spin up* ou *down*) [19] correlacionado ao sentido da sua movimentação [7] (direita ou esquerda). A definição atual de "moeda quântica" surgiu nessa publicação, que considera, devido ao caráter quântico da caminhada, os efeitos de interferência construtiva e destrutiva, cuja descrição se dá em termos de amplitudes de probabilidades quânticas [10] em vez de probabilidades clássicas. Vários trabalhos importantes sobre esse tema foram feitos [4, 12, 40–42] desde então, alguns inclusive, consistem de revisões abrangentes sobre o tema [4, 12].

Mesmo não tendo sido a primeira publicação a usar o termo caminhada aleatória quântica (CAQ), o trabalho de Aharonov *et al.* é por consenso o pioneiro a associar esse nome a sua respectiva ferramenta. Com o passar do tempo a terminologia CAQ acabou se tornando alvo de discussões [24] envolvendo determinismo e estocasticidade em sistemas quânticos⁴ [4, 24]. Dessa maneira, esse modelo passou a ser chamado simplesmente de caminhada quântica (CQ).

A Fig.1.5 ilustra algumas diferenças entre a CAC e a CQ. Como visto na seção anterior, no caso clássico, o caminhante se movimentará conforme o resultado do lançamento da moeda, para à direita ou para à esquerda [19], percorrendo uma trajetória bem definida [20]. Por sua vez, a partícula quântica terá suas amplitudes de probabilidade colocadas em superposição [19], podendo ir para à direita e para à esquerda simultaneamente [22].

⁴O processo de evolução dinâmica de uma caminhada quântica é dado por uma transformação unitária determinística, no entanto, o aspecto estocástico (probabilístico) de tais caminhadas refere-se ao processo quântico de medição. Nesse sentido o termo "aleatório" já estaria contemplado em "quântica" tornando-se então redundante.

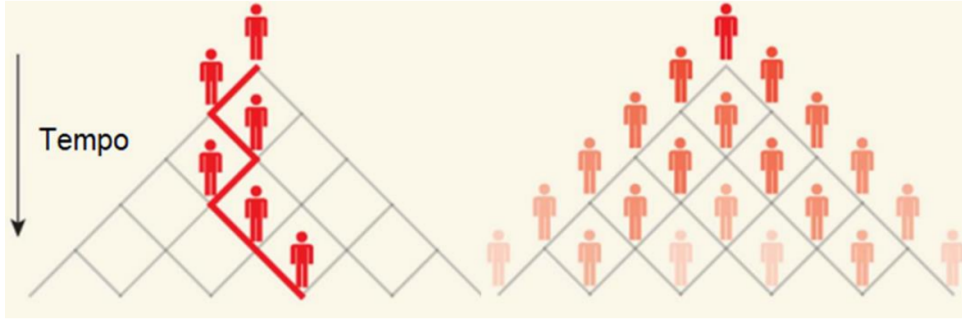


Figura 1.5: Representação da dinâmica dos seis primeiros passos de um caminhante clássico (à esquerda) e quântico (à direita) em uma dimensão. Imagem retirada de [38] com adaptações.

No caso quântico, a cor do caminhante varia em certas posições, se encontrando mais ou menos intensa. Isso ocorre para ilustrar os efeitos de interferência destrutiva e construtiva sofrido por suas amplitudes de probabilidade [22].

Como será visto adiante, as diferenças entre a CAC e a CQ levam a duas distribuições de probabilidade drasticamente diferentes [19]. Comparando as curvas de distribuição de probabilidade vemos que a probabilidade média de encontrar o caminhante longe da origem será maior no caso quântico [24] levando a uma dispersão $\sigma \propto t$ quadraticamente superior a sua contraparte clássica $\sigma \propto \sqrt{t}$. Portanto, a CQ consiste em uma ferramenta eficaz para a simulação de muitos sistemas físicos complexos [24], sendo útil na construção de novos algoritmos mais eficientes [12] cuja implementação não dependerá necessariamente de computadores quânticos [24].

Assim como as caminhadas aleatórias clássicas, as CQs também possuem mais de um modelo [20]. Na atualidade, os dois modelos de CQ de maior interesse de estudo são a *caminhada quântica de tempo discreto* proposta por Aharonov *et al.* [10] e a *caminhada quântica de tempo contínuo* proposta em 1998 por Farhi e Gutmann [11]). Em ambos os modelos a CQ ocorre em um espaço de posições discretas construído por um grafo de geometria arbitrária no qual os vértices definem as posições do caminhante e as arestas representam as possíveis orientações nas quais o mesmo poderá se mover [24]. O modelo de tempo contínuo consiste em uma dinâmica quântica de tempo ininterrupto [40] cuja função de onda parte diretamente da solução da equação de Schrödinger e cujo Hamiltoniano contém a geometria do grafo da caminhada [4, 43].

Já o modelo discreto que será abordado nesse trabalho, consiste em uma caminhada na qual cada passo leva uma unidade de tempo discreta [24]. Em geral, esse modelo é caracterizado pelo caminhante e a moeda quântica [4]. A evolução do passeio, neste caso, se

dá pela aplicação de um operador de evolução temporal unitário ao estado do caminhante. Esse operador de evolução é constituído pela moeda quântica e operador de translação condicional. Enquanto a moeda quântica atua no estado interno do caminhante levando de um *qubit* a outro, a translação condicional translada as amplitudes condicionadas ao novo *qubit*. Uma forma de ilustrar o comportamento de uma CQ de tempo discreto de uma maneira intuitiva é através de uma analogia com óptica clássica usando um arranjo com vários interferômetros de Mach-Zehnder.

1.5 Interferômetro de Mach-Zehnder

Para melhor compreender os fenômenos de interferência construtiva e destrutiva presentes em uma caminhada quântica, bem como a forma pela qual esse efeito afeta a distribuição de probabilidade do passeio, faremos uma analogia com um arranjo de interferômetros de Mach Zehnder [19]. Descrito pela primeira vez por volta dos anos 1890, por Ludwig Mach e Ludwig Zehnder [44], esse esquema interferométrico é composto por uma fonte de luz *laser*, divisores de feixe, espelhos e anteparos (detectores) [45].

Nesse experimento, o feixe de fótons que se comporta como uma onda, sofre interferências destrutivas e construtivas ao percorrer diferentes caminhos ópticos [18]. Para tanto, consideraremos uma onda de amplitude inicial E_0 que toda vez que passar pelo divisor de feixe será fracionada em duas partes de intensidade iguais a serem transmitida e refletida com um ângulo de $\pi/2$ entre elas [7]. A cada divisão, a amplitude da onda será reduzida em $E_n = E_0/\sqrt{2^n}$, onde n corresponde ao número de reflexões e, a cada reflexão o feixe ganhará uma fase de $\pi/2$ [22].

Na Fig. 1.6 usamos as abreviações Bs para se referir aos divisores de feixe (*beam splitters*), M_1 e M_2 para os espelhos refletos e D_{-3} , D_{-1} , D_1 e D_3 para diferentes detectores. Perceba que, enquanto os subíndices dos espelhos servem apenas para diferenciá-los, nos detectores os mesmos tem a função de explicitar a sua localização na rede de posições [18]. Ao percorrer todo o caminho óptico é possível identificar o padrão de interferência no anteparo [45].

Na Fig. 1.6 (a) temos a montagem experimental de um interferômetro de Mach-Zehnder [18]. Nesse aparato, a onda (na cor roxa) incide primeiro no Bs_{input} (Bs de entrada) aonde será segmentada em dois novos feixes de amplitude $E_0/\sqrt{2}$, um refletido (em azul) que ganha uma fase de $\pi/2$ e um transmitido (em vermelho) sem ganho de fase

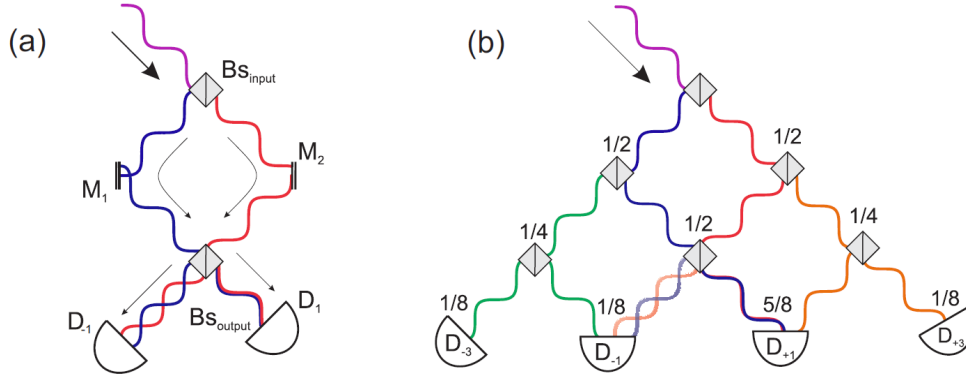


Figura 1.6: (a) Interferômetro de Mach-Zehnder. (b) Arranjo de interferômetros semelhante a uma tábua de Galton utilizado para simular uma CQ de três passos. A probabilidade do feixe chegar em cada anteparo em diferentes posições está correlacionada com a intensidade do feixe. Neste arranjo, cada Bs atua como o operador moeda quântica e o operador de translação condicional ao mesmo tempo. Imagem retirada de [18].

[19]. Na sequência, ambos os feixes serão refletidos pelos espelhos M_1 e M_2 . Assim sendo, ambas as frações de onda em azul e vermelho terão respectivamente π e $\pi/2$ de fase em relação ao feixe original. As ondas que atingirem o Bs_{output} (Bs de saída) serão fracionadas mais uma vez. Por fim, no detector D_{-1} chegará o feixe azul cuja fase resultante será de $3\pi/2$ e o feixe vermelho que manterá sua fase de $\pi/2$. Desse modo, as ondas irão interferir destrutivamente em D_{-1} . Por sua vez, no detector D_1 vão incidir ambos os feixes transmitido e refletido com fase π , resultando numa interferência construtiva cuja onda terá amplitude E_0 , igual a inicial⁵.

A Fig. 1.6 (b) representa uma adaptação com vários interferômetros de Mach-Zehnder para a simulação de uma caminhada quântica. Perceba que esse arranjo é semelhante a uma tábua de Galton, para a qual os pregos (vértices da rede) foram sucessivamente substituídos por *beam splitters* [7] e as colunas coletoras deram lugar aos detectores. Nesse caso, as bolinhas são trocadas pelo feixe de luz e a intensidade com que o ele chega nos detectores, ao percorrer todo o caminho óptico, pode ser obtida através da amplitude da onda pela relação $I = |E_n|^2$, permitindo a obtenção da sua distribuição de intensidade nos detectores [22].

No aparato experimental ilustrado na Fig. 1.6 (b), a linha vertical na qual está localizado o primeiro *beam splitter*, marca a origem do sistema coordenado. As demais colunas imaginárias que se seguem a essa representam as posições discretas da rede. Os passos de tempo, por sua vez, serão marcados pelas linhas horizontais formadas pelos divisores de

⁵No caso ideal, considerando que não há perdas de sinal.

feixe. Para a Fig. 1.6 (b), a onda percorrerá o caminho óptico delimitado respeitando as "regras" estabelecidas acima, sem a presença dos espelhos.

Perceba então que na Fig. 1.6 (b) o feixe sofre repetidas reflexões e transmissões sendo submetido a interferências construtivas e destrutivas apenas a partir de $t = 2$. Sendo assim, as distribuições de probabilidade clássica e quântica coincidem até esse passo de tempo. Em $t = 3$ apenas os detectores D_{-1} e D_1 irão registrar intensidades resultantes de fenômenos de interferência distintas do que se observa classicamente: enquanto a onda azul chega em D_{-1} com uma fase de $3\pi/2$ adquirida após a mesma sofrer três reflexões, a onda vermelha chega com uma fase de $\pi/2$ resultante do ganho de fase de uma única reflexão. Portanto, os feixes azul e vermelho irão sofrer uma interferência totalmente destrutiva, permitindo que apenas o feixe verde seja detectado por D_{-1} que corresponde a uma intensidade de $1/8$. Por sua vez, no detector D_1 os feixes azul e vermelho irão sofrer uma interferência construtiva, dado que ambos adquiriram a mesma fase π , resultante de duas reflexões. Logo, o detector D_1 registrará a maior intensidade desses três passos iniciais da caminhada, formada pela intensidade da interferência construtiva dos feixes azul e vermelho somados a intensidade do feixe laranja.

Embora o interferômetro de Mach-Zehnder considere uma onda clássica, quando reduzimos nosso feixe para um único fóton no contexto quântico, temos a CQ, pois nesse caso, o padrão de interferência se mantém já que um único fóton também se comporta como uma onda e interfere consigo mesmo! Além disso, é importante ressaltar que poderíamos observar a caminhada clássica se a cada passo de tempo fizéssemos uma medida da posição do caminhante quântico, ou seja, colapsando a função e então, prosseguir com a caminhada a partir da posição medida, assim como no caso clássico [22]. Portanto, embora o interferômetro de Mach-Zehnder e o arranjo com vários interferômetros estejam dentro do contexto clássico, a analogia é válida, sendo possível implementar experimentalmente uma caminhada quântica nesse contexto [46].

A Tabela 1.2 traz a distribuição de probabilidade $P(j, t)$ associada a cada posição da rede na CQ, ou seja, traz a soma dos módulos quadrados das amplitudes dos feixes que chegaram em cada posição segundo o arranjo experimental ilustrado pela Fig. 1.6 (b) [7]. Perceba que a Tabela 1.2 estende os resultados obtidos a partir desse arranjo de interferômetros para uma caminhada quântica de cinco passos.

Note que, para a situação ilustrada na Tabela 1.2 e na Fig. 1.6(b) as posições de maior

t/j	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
0						1					
1					$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{2}$				
2				$\frac{1}{4}$		$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{4}$			
3			$\frac{1}{8}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{5}{8}$		$\frac{1}{8}$		
4		$\frac{1}{16}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{5}{8}$		$\frac{1}{16}$	
5	$\frac{1}{32}$		$\frac{5}{32}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{17}{32}$		$\frac{1}{32}$

Tabela 1.2: Distribuição de probabilidade para uma caminhada quântica de cinco passos desenvolvida a partir do arranjo de vários interferômetros de Mach-Zehnder.

probabilidade estão localizadas à direita da origem. No entanto, por estar associada com a direção em que a onda inicial incidiu no primeiro *beam splitter* essa não é a única possibilidade: se o feixe inicial atingir o Bs inicial vindo da direita para a esquerda, haverá uma tendência para probabilidades maiores na região à esquerda. Do mesmo modo, uma distribuição simétrica de probabilidades poderá ser obtida se a onda inicial for uma superposição igualitária de feixes vindo da esquerda e da direita [19]. Ao introduzirmos o formalismo matemático da CQ no capítulo 2, veremos que essa condição está associada ao estado inicial do caminhante.

Por fim, vemos que essas diferenças de probabilidade entre o caso clássico e quântico, que fazem com que o pico de probabilidade de encontrar a partícula se afaste rapidamente da posição de origem, representa fisicamente uma propagação mais rápida da partícula quântica com relação a partícula clássica. Essa diferença, consiste na base conceitual para suas aplicações como algoritmos quânticos superiores aos correspondentes clássicos [12, 47].

1.6 Organização da dissertação

Nesta dissertação ambiciona-se discutir os pontos fundamentais acerca da caminhada aleatória quântica, fazendo um paralelo desta com a sua correspondente clássica. Uma vez definido o modelo de CQ a ser utilizado neste estudo, serão então estudadas caminhadas desordenadas com barreira absorvedora. Para que estes objetivos sejam alcançados, este trabalho será dividido da forma que segue.

No capítulo 1 foi introduzida a CAC bem como o seu análogo quântico. Para tanto, foi feita uma abordagem histórica acerca do surgimento da computação, informação e algoritmos quânticos, contextualizando a importância dos modelos utilizados neste trabalho.

No capítulo 2 será apresentada a formalização matemática da CQ. Portanto, serão

abordados o estado do caminhante quântico e como realizar sua evolução temporal. Por fim, será explicado o que são barreiras e desordens no contexto dos passeios quânticos.

No capítulo 3, o modelo a ser discutido será uma CQ Hadamard, reescrita no espaço de momento e modificada de tal maneira a introduzir uma barreira absorvedora. Nessa parte analítica do trabalho, coeficientes que compõem a probabilidade de escape no limite assintótico ($t \rightarrow \infty$) serão apresentados em função de diferentes posições da barreira.

No capítulo 4 discutiremos os principais resultados, confrontando o modelo analítico do capítulo 3 com os resultados numéricos de caminhadas Hadamard. Em seguida, introduziremos desordens dinâmicas e estática nas caminhadas, que correspondem a caminhadas cujas moedas variam aleatoriamente no tempo e na posição respectivamente. Nesse contexto, a absorção da barreira será analisada.

Por fim, as principais considerações e conclusões sobre o trabalho estarão reunidas no capítulo 5. Todas as figuras e gráficos presentes nesta dissertação que não possuem fonte indicada na legenda são de própria autoria.

Modelo Teórico

Neste capítulo serão apresentadas as ferramentas matemáticas necessárias para a formalização da CQ unidimensional de tempo discreto, que constituirá o objeto de estudo dos capítulos 3 e 4. Com esse propósito, serão definidos conforme as regras da mecânica quântica o estado do caminhante e a maneira como acontece a sua evolução temporal. Todos os operadores e conceitos necessários para a completa compreensão do assunto serão discutidos aqui. Na sequência, serão apresentadas duas maneiras de modificar o modelo de caminhada estabelecida até então (passeio Hadamard). A primeira adaptação consiste na inserção de uma moeda identidade na rede, constituindo o que é conhecido como barreira absorvedora. A segunda adaptação, por sua vez, impõe uma mudança aleatória da moeda quântica no decorrer da caminhada, ao longo do tempo ou das posições. A essa segunda alteração é dado o nome de desordem. Os conceitos abordados aqui servirão de base para a compreensão dos resultados desse trabalho.

2.1 Estado do caminhante quântico

Segundo o primeiro postulado da mecânica quântica, todo e qualquer sistema físico tem a ele associado um espaço vetorial complexo, completo e provido de uma métrica, chamado espaço de Hilbert [5, 48]. Nesse espaço, os vetores $|\Psi\rangle$, também chamados de *kets*, são responsáveis por especificar, a cada instante, o estado do sistema de interesse [3]. Devido a essa característica, $|\Psi\rangle$ pode também ser chamado de vetor de estado (ou estado, simplesmente) [49]. O formalismo de *Bra-Ket*, utilizado na mecânica quântica e neste trabalho, é conhecido por notação de Dirac. Um estado de caminhada quântica, sob o ponto de vista do formalismo de Dirac, pode ser tratado como um sistema físico composto dado pelos graus de liberdade interno e externo do caminhante quântico unidimensional [50]. Esse

estado pertence ao espaço de Hilbert \mathcal{H} dado pelo produto tensorial $\mathcal{H} = \mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_P$ [5] tal que \mathcal{H}_C e \mathcal{H}_P representam respectivamente os espaços de moeda e de posições¹ [50].

O espaço de posições \mathcal{H}_P , de dimensão infinita e contável, tem sua base representada por $\{|j\rangle : j \in \mathbb{Z}\}$ e refere-se a todas as posições discretas sobre a rede regular unidimensional [34] visitadas pelo caminhante durante o passeio. Já \mathcal{H}_C é um espaço vetorial bidimensional associado a moeda quântica [20], cuja representação é dada pelos estados quânticos ortonormais $\{|L\rangle, |R\rangle\}$ [22] correlacionados aos dois possíveis sentidos² de movimento do caminhante, respectivamente as posições vizinhas à esquerda e à direita. A representação matricial dos estados $|L\rangle$ e $|R\rangle$ é dada por

$$|L\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |R\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

Portanto, para que o estado do caminhante ($|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$) seja integralmente descrito, são necessárias informações relativas ao seu estado externo, mais precisamente referentes a sua posição ($|\Psi_P\rangle \in \mathcal{H}_P$) [19], assim como informações acerca do seu estado interno ($|\Psi_C\rangle \in \mathcal{H}_C$), descrito também como estado da moeda ou simplesmente *qubit* [7, 19]. Dessa forma, a representação geral do estado inicial ($t = 0$) de uma CQ é

$$|\Psi(0)\rangle = |\Psi_C\rangle \otimes |\Psi_P\rangle, \quad (2.2)$$

onde $|\Psi_P\rangle = |0\rangle$ ao longo desse trabalho, ou seja, o caminhante parte da posição de origem $j = 0$ e, por sua vez, o $|\Psi_C\rangle$ define o estado interno do caminhante como um sistema de dois níveis, ou seja, o *bit* quântico inicial [5] é dado pelos estados $|L\rangle, |R\rangle$ ou qualquer combinação linear (superposição) entre eles [2]. O *qubit* inicial, $|\Psi_C\rangle$ é um vetor unitário da forma [49]

$$|\Psi_C\rangle = L(0, 0) |L\rangle + R(0, 0) |R\rangle, \quad (2.3)$$

definido pelas amplitudes $L(j, t)$ e $R(j, t)$ iniciais ($j = 0$ e $t = 0$).

Dessa maneira, tendo em vista que neste trabalho os passeios partirão de um estado inicial local, e dado o $|\Psi_C\rangle$ acima, a Eq. (2.2) pode ser reescrita como

$$|\Psi(0)\rangle = [L(0, 0) |L\rangle + R(0, 0) |R\rangle] \otimes |0\rangle, \quad (2.4)$$

¹O subíndice "C" do inglês refere-se a *coin* (moeda) e "P" *positions* (posições).

²Nos *kets* de estado "L" e "R" correspondem respectivamente a *left* (esquerda) e *right* (direita).

desde que a condição de normalização

$$|L(0,0)|^2 + |R(0,0)|^2 = 1, \quad (2.5)$$

seja preservada [19]. Os coeficientes $L(0,0)$ e $R(0,0)$ são valores complexos e representam amplitudes de probabilidade [22], de modo que as probabilidades de medir os estados $|L\rangle$ e $|R\rangle$ em $j = 0$ serão respectivamente $|L(0,0)|^2$ e $|R(0,0)|^2$ [3, 19, 22, 34]. Uma vez que essas amplitudes são complexas, elas podem ser escritas em coordenadas polares [51]. Consequentemente, o estado interno do caminhante poderá ser reescrito na forma geral

$$|\Psi_C\rangle = \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) |L\rangle + e^{i\beta} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) |R\rangle, \quad (2.6)$$

na qual $L(0,0) = \cos(\alpha/2)$ e $R(0,0) = e^{i\beta} \sin(\alpha/2)$ onde $\alpha \in [0, \pi]$ e $\beta \in [0, 2\pi]$, sendo β a diferença de fase, ou fase relativa, entre os estados $|R\rangle$ e $|L\rangle$ [22].

A Eq. (2.6) é conhecida como equação geométrica do estado interno do caminhante quântico [22]. Essa mudança de coordenada é realizada com o objetivo de facilitar, através do uso da *Esfera de Bloch*, a visualização das propriedades algébricas e geométricas de um *qubit* [2, 51]. Nessa representação, usada para quaisquer sistema de dois níveis [18], toda possibilidade de estado interno que o caminhante pode assumir é compreendida como um vetor unitário cujo lugar geométrico é uma esfera tridimensional unitária [51].

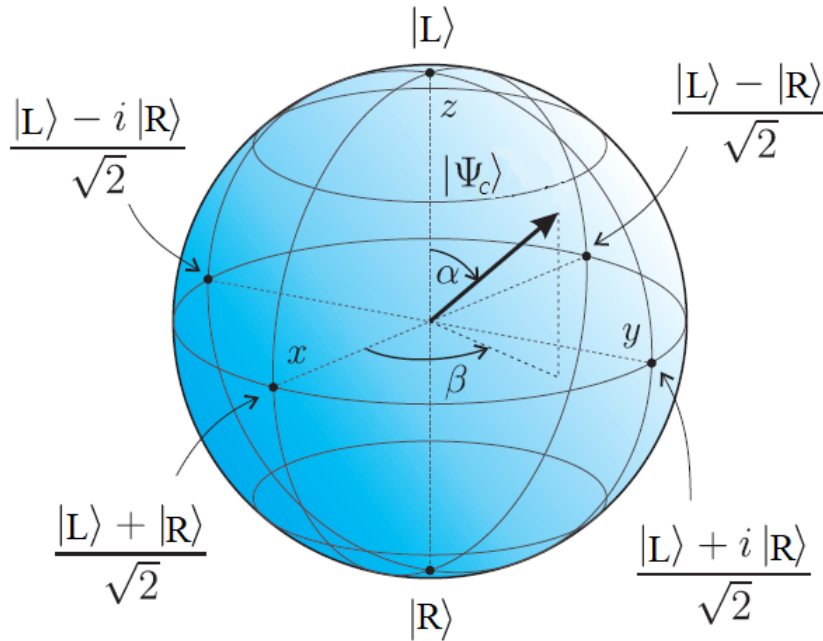


Figura 2.1: Esfera de Bloch. Perceba que se $\alpha = 0$ então $|\Psi_C\rangle = |L\rangle$, por outro lado para $\alpha = \pi$ tem-se $|\Psi_C\rangle = |R\rangle$. As superposições igualitárias entre os *kets* $|L\rangle$ e $|R\rangle$, ilustradas aqui, correspondem a $\alpha = \pi/2$ com diferentes possibilidades de fase relativa dado que $\beta \in [0, 2\pi]$. Na figura, destacamos quatro superposições igualitárias com $\beta = 0, \pi/2, \pi$ e $3\pi/2$. Retirado de [18] com adaptações.

Conforme a Fig. 2.1, todo ponto que compõe a superfície da esfera de Bloch representa um *qubit* diferente, determinado através dos ângulos polar α e azimutal β e, toda operação realizada sobre esses estados, constituem rotações na esfera de Bloch [18] que levam o vetor representativo de um dado *qubit* a um outro ponto (*qubit*) sobre a esfera. Perceba que na Fig. 2.1 os pontos que compõem o Equador consistem em uma superposição equilibrada (ou balanceada) dos *kets* $|L\rangle$ e $|R\rangle$ com diferentes fases relativas dadas por β [22]. Já nos hemisférios ocorre uma superposição não-equilibrada entre os *kets* $|L\rangle$ e $|R\rangle$, com maior probabilidade de medir o estado $|L\rangle$ nos *qubits* do hemisfério norte e $|R\rangle$ nos *qubits* do hemisfério sul [19, 22]. Os estados da base $|L\rangle$ e $|R\rangle$ estão localizados respectivamente nos polos norte e sul da esfera [18].

Na literatura da computação quântica, a representação mais comum de um *qubit* é sem dúvida a esfera de Bloch [51]. É importante ressaltar que esse modelo fornece um meio útil de visualizar o estado de um único *qubit*, no entanto, não possui nenhuma generalização simples conhecida para vários *qubits* [2].

2.2 Evolução temporal da caminhada quântica

Segundo o sexto postulado da mecânica quântica, a evolução temporal de um vetor de estado $|\Psi(t)\rangle$ pertencente a um sistema quântico fechado, será realizada pela aplicação de uma transformação unitária [49]. Neste trabalho, essa transformação será representada pelo operador \hat{U} , denominado operador de evolução temporal [18, 20]. Sua aplicação deverá acontecer repetidas vezes seguidas e sem medições intermediárias [52]. Dessa maneira, considerando que no instante de tempo t a CQ esteja no estado $|\Psi(t)\rangle$, e que no instante $t - 1$ o mesmo sistema esteja no estado $|\Psi(t - 1)\rangle$, é possível escrever

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U} |\Psi(t - 1)\rangle, \quad (2.7)$$

para um único passo desse passeio [49]. Nessa situação, uma vez que para $t > 0$ as amplitudes de probabilidade podem estar distribuídas sobre várias posições, tem-se que

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j [L(j, t) |L\rangle + R(j, t) |R\rangle] \otimes |j\rangle. \quad (2.8)$$

Sendo $|\Psi(0)\rangle$ o estado inicial da caminhada em questão, sua evolução para $|\Psi(n)\rangle$ após n passos será descrita pela relação

$$|\Psi(n)\rangle = \hat{U}(n)\hat{U}(n-1)\dots\hat{U}(1)|\Psi(0)\rangle = \mathcal{T} \prod_{t=1}^n \hat{U}(t) |\Psi(0)\rangle, \quad (2.9)$$

para a qual \mathcal{T} evidencia a ordenação temporal do produtório [19, 22, 35].

Uma vez que \hat{U} é responsável pela evolução temporal (coloquialmente "dar os passos" do caminhante), todo formalismo dos passeios quânticos gira em torno desse operador [53], cuja forma é dada pela expressão

$$\hat{U} = \hat{S}(\hat{C} \otimes \hat{\mathbb{I}}_P). \quad (2.10)$$

Na equação acima $\hat{\mathbb{I}}_P$ é a identidade no espaço das posições (\mathcal{H}_P), \hat{C} é o operador moeda, ou simplesmente moeda quântica que atua sobre o estado $|\Psi_C\rangle$ (em \mathcal{H}_C) e \hat{S} é o operador de translação condicional [18, 19, 22].

Em vista disso, a dinâmica de uma CQ ocorre seguindo uma "receita". Primeiro, o operador moeda \hat{C} será aplicado ao *qubit* inicial do caminhante quântico, modificando o mesmo, a fim de que ele se torne uma nova superposição dos *kets* de estado $|L\rangle$ e $|R\rangle$ [20]. Essa operação é conhecida como rotação do estado de moeda ou rotação do *qubit* [18, 19]. Na sequência, ocorre a atuação do operador \hat{S} , que deverá movimentar (transladar) a partícula na rede de posições conforme o seu novo estado interno rotacionado. Como resultado dessa última operação, as amplitudes de probabilidade do caminhante quântico ocuparão diferentes posições [19].

A Fig. 2.2 ilustra a dinâmica da caminhada quântica conduzida pelo operador de evolução temporal. Veja que, no primeiro passo do passeio aplica-se \hat{C} no *qubit* inicial da caminhada. O *qubit* $|L\rangle$ é então rotacionado na esfera de Bloch se tornando uma superposição dos estados $|L\rangle$ e $|R\rangle$. Se, nesse estágio, uma medição for feita com a intenção de determinar o estado interno do caminhante, o mesmo colapsará, segundo as leis da mecânica quântica, em um dos autoestados $|L\rangle$ ou $|R\rangle$ [18, 24, 52]. Em virtude disso, o passeio se seguiria como uma CAC, já que a operação efetuada por \hat{S} levaria o caminhante para a esquerda ou direita apenas sem superposições [18]. Por outro lado, se os operadores \hat{C} e \hat{S} forem aplicados consecutivamente, as correlações quânticas entre as posições e estados de moeda são preservadas, gerando as interferências construtivas e/ou destrutivas necessárias à existência da caminhada quântica [24]. Portanto, ao "não

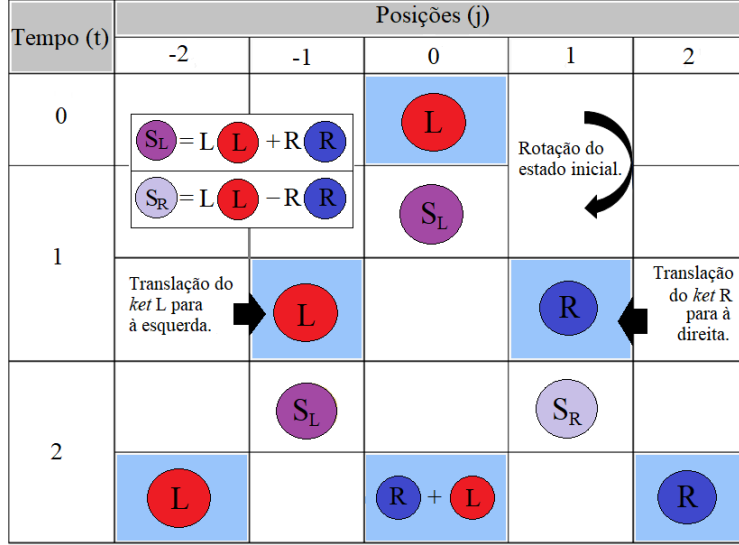


Figura 2.2: Uma partícula quântica com estado $|L\rangle$ na posição $j = 0$ sofre uma rotação que coloca seu estado inicial (em vermelho) em um estado de superposição $|S_L\rangle$ (roxo) entre os *kets* $|L\rangle$ (vermelho) e $|R\rangle$ (azul). A seguir, a operação de translação condicional efetuada sobre esse estado já rotacionado, translada o *ket* $|L\rangle$ para a posição vizinha à esquerda $j = -1$ e o *ket* $|R\rangle$ para a posição $j = 1$ à direita no passo $t = 1$. Essa operação se repete para as demais posições e passos. Note que a atuação da moeda quântica em $|L\rangle$ e $|R\rangle$, levam a diferentes superposições cuja diferença de fase entre os *kets* são respectivamente 0 para $|S_L\rangle$ e π para $|S_R\rangle$. Observe ainda que a amplitude na posição $j = 0$ em $t = 2$ é dada por uma superposição com amplitudes vindas das posições à esquerda e à direita. Retirado de [18] com adaptações.

realizar a medida" ao longo de uma certa quantidade de passos, dá-se espaço para que a superposição de estados leve as essas interferências que caracterizam o comportamento de uma CQ [18], conseqüentemente, diferenciando o comportamento quântico do clássico, conforme visto na introdução deste trabalho.

2.3 Operador moeda

Como visto acima, o operador moeda atua no *qubit* que pertence ao espaço \mathcal{H}_C , levando o estado interno da partícula quântica de um *qubit* para um novo *qubit*, ou seja, uma nova superposição dos *kets* $|L\rangle$ e $|R\rangle$ [22]. Como a representação do *qubit* é dada pela esfera de Bloch [18, 19], geometricamente, a atuação desse operador gera uma rotação do grau de liberdade interno do caminhante [34]. Na sua forma mais geral, a moeda quântica pode ser escrita como

$$\hat{C} = c_{LL} |L\rangle \langle L| + c_{LR} |L\rangle \langle R| + c_{RL} |R\rangle \langle L| + c_{RR} |R\rangle \langle R|. \quad (2.11)$$

Por ser aplicado diretamente no $|\Psi_C\rangle$ que é um vetor normalizado, é indispensável que \hat{C} seja unitário a fim de manter a norma do novo estado gerado por essa operação [49].

Para tanto, a moeda quântica deverá pertencer ao $SU(2)^3$ [54]. As matrizes do $SU(2)$ podem ser obtidas, em sua forma geral, a partir das matrizes de Pauli [24, 54],

$$\hat{\mathbb{I}} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{X} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{Y} \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \hat{Z} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

A primeira, conhecida como identidade, é eventualmente omitida dessa lista [2]. As demais matrizes, \hat{X} , \hat{Y} e \hat{Z} são denotadas dessa maneira por rotacionarem em π os respectivos eixos x , y e z da esfera de Bloch [19]. Embora sejam extremamente úteis e importantes na computação e informação quântica, neste trabalho o interesse nas matrizes de Pauli se restringe ao fato de que, a combinação linear de \hat{X} , \hat{Y} e \hat{Z} permitem a obtenção da forma matricial geral do operador moeda [22, 24] a partir de três parâmetros, ou seja,

$$\hat{C} = \begin{pmatrix} c_{LL} & c_{LR} \\ c_{RL} & c_{RR} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\rho} & \sqrt{1-\rho}e^{i\theta} \\ \sqrt{1-\rho}e^{i\varphi} & -\sqrt{\rho}e^{i(\theta+\varphi)} \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

onde $0 \leq \rho \leq 1$ é a tendência (ou *bias* no inglês) da moeda, representando portanto, se o operador \hat{C} é justo ou não. Para $\rho = 1/2$, o operador moeda é dito justo, ou seja, gera uma superposição igualitária entre as amplitudes $|L\rangle$ e $|R\rangle$, resultando num novo estado cujas probabilidades de medir $|L\rangle$ ou $|R\rangle$ são iguais. Para $\rho \neq 1/2$, a moeda é dita tendenciosa e não leva naturalmente, a uma superposição igualitária entre $|L\rangle$ e $|R\rangle$ [18, 19, 34]. Já os parâmetros θ e φ determinam as fases relativas entre os estados $|L\rangle$ e $|R\rangle$ tal que $0 \leq \theta, \varphi \leq 2\pi$ [7]. Assim sendo, ρ , θ e φ são quantidades reais, independentes, e que determinam a superposição entre os estados $|L\rangle$ e $|R\rangle$ após a atuação da moeda num certo *qubit* [18]. Esses parâmetros não são necessariamente fixos durante todo o passeio, podendo variar na posição, no tempo, ou ainda em ambos, resultando assim, em caminhadas com mais de um tipo de moeda, conforme será visto no final deste capítulo [7, 34].

Extensamente aplicada em CQs e provavelmente a detentora do título de moeda mais utilizada nos artigos sobre passeios unidimensionais, o operador Hadamard \hat{H} é o exemplo mais simples de moeda encontrada na literatura [4, 24, 47]. A caminhada Hadamard se tornou essencial nos estudos que envolvem CQs, devido ao seu grande poder de generalização, ou seja, inúmeras caminhadas quânticas gerais podem ter seu comportamento

³ $SU(2)$ é a abreviação do termo inglês *Special Unitary Group* e representa o grupo especial das matrizes complexas 2×2 unitárias e com determinante igual a unidade. Esse grupo é geralmente associado a rotações em um espaço de Hilbert bidimensional da mecânica quântica.

reduzido a caminhada Hadamard [47, 55].

Outra moeda justa amplamente utilizada nas pesquisas em CQ é a moeda Fourier (ou Kempe). Enquanto para o operador Hadamard temos $\rho = \frac{1}{2}$ e $\theta = \varphi = 0$, o operador Fourier \hat{F} será dado por $\rho = \frac{1}{2}$ e $\theta = \varphi = \frac{\pi}{2}$ [7, 19]. Ambas moedas podem ser escritas pelos seguintes projetores na base dos estados de moeda como,

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle\langle L| + |L\rangle\langle R| + |R\rangle\langle L| - |R\rangle\langle R|) \quad \text{e} \\ \hat{F} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle\langle L| + i|L\rangle\langle R| + i|R\rangle\langle L| + |R\rangle\langle R|),\end{aligned}$$

ou ainda, na forma matricial, conforme segue

$$\hat{H} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \hat{F} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

É importante ressaltar aqui que o fato das moedas Hadamard e Fourier serem justas não garante que a distribuição de probabilidade das caminhadas sujeitas as mesmas sejam simétricas [24]. Como será visto na Fig. 2.5 que considera uma caminhada Hadamard com 100 passos de tempo, a simetria ou assimetria da distribuição de probabilidade de uma CQ se deve ao estado inicial do caminhante, além da escolha da moeda.

Como mostrado na Fig. 2.5, uma caminhada Hadamard com estado inicial $|\Psi_C\rangle = |L\rangle$ ou $|R\rangle$ a partir da origem, levam a distribuições de probabilidade assimétricas e espelhadas entre elas [19, 22]. Essa discrepância entre as duas distribuições se deve a diferença de fase π adquirida pelo estado quando o operador \hat{H} é aplicado no $|R\rangle$. Devido essa diferença de fase, há um favorecimento de interferências construtivas num sentido com relação ao sentido oposto. Já para o estado $|\Psi_C\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + i|R\rangle)$, a distribuição de probabilidade é simétrica. Isso acontece pois essa superposição inicial de estados leva a uma caminhada que pode ser interpretada como dois caminhantes independentes, que não interferem entre si [52], ou seja, a parte real e imaginária das amplitudes de probabilidade levam a distribuições assimétricas em sentidos opostos cuja superposição resulta numa distribuição simétrica.

Por outro lado, quando consideramos uma moeda Fourier, vemos que o estado inicial que leva a uma distribuição simétrica corresponde a $|\Psi_C\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + |R\rangle)$, sem diferença de fase entre $|L\rangle$ e $|R\rangle$. Uma vez que a moeda Fourier impõe a mesma diferença de fase ao ser aplicada em $|L\rangle$ ou $|R\rangle$, nessa caminhada, tanto a distribuição da parte real

das amplitudes quanto a imaginária levam a distribuições simétricas distintas, resultando também numa superposição simétrica.

Exemplo 1. A aplicação dos operadores (moedas quânticas) Hadamard e Fourier nos *qubits* $|\Psi_C\rangle = |L\rangle$ e $|R\rangle$, resulta em

$$\hat{H} |L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + |R\rangle), \quad (2.15)$$

$$\hat{H} |R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle - |R\rangle), \quad (2.16)$$

$$\hat{F} |L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + i|R\rangle), \quad (2.17)$$

$$\hat{F} |R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(i|L\rangle + |R\rangle). \quad (2.18)$$

Perceba que, conforme abordado anteriormente, o Exemplo 1 evidencia que a aplicação das moedas Hadamard e Fourier nos estados $|L\rangle$ e $|R\rangle$ resultam numa superposição igualitária, ou seja, situada no Equador da esfera de Bloch [19]. O que irá diferenciá-los é a fase relativa entre os estados que pode ser 0 e π para a caminhada Hadamard e de $\pm\pi/2$ para a caminhada Fourier [22].

É interessante ressaltar que a aplicação dos operadores \hat{H} e \hat{F} podem ser facilmente associadas a experimentos renomados. Fisicamente, uma moeda Hadamard simula o efeito de um campo magnético não-uniforme, que aplicado sobre um feixe de partículas de spin-1/2 translada as componentes de spin para sentidos opostos, como no famoso experimento de Stern-Gerlach⁴ [19, 22, 34, 35]. Por sua vez, a moeda de Fourier pode representar um fóton ao atingir um divisor de feixes polarizador considerando-se que o sistema de dois níveis é dado pelas direções de polarização do fóton (horizontal e vertical)

⁴Experimento nomeado em homenagem a seus idealizadores Otto Stern e Walther Gerlach. Consiste em um ímã que produz um campo magnético não uniforme e em um feixe de átomos de prata aquecidos por um forno e colimados. Ao penetrar numa região em uma direção perpendicular ao gradiente do campo magnético, os átomos sofrem uma deflexão. Essa deflexão é resultado da interação do seu spin com o campo magnético.

[18]. Assim sendo, ao atingir o *beam splitter*, o fóton entrará em um estado de superposição entre a parte transmitida e refletida, de modo que, metade de sua intensidade seja transmitida com a polarização original sem nenhuma fase, enquanto a outra metade será refletida com uma polarização ortogonal e fase de $\pi/2$, assim como no interferômetro de Mach-Zehnder [19, 22, 35].

2.4 Operador de translação condicional

O operador de translação condicional representado por \hat{S} é descrito matematicamente como

$$\hat{S} = \sum_j |L\rangle \langle L| \otimes |j-1\rangle \langle j| + |R\rangle \langle R| \otimes |j+1\rangle \langle j|. \quad (2.19)$$

A aplicação desse operador correlaciona o grau de liberdade interno (*qubit*) com o grau de liberdade externo (posição) do caminhante, tornando possível a geração de emaranhamento entre eles [18, 24]. Para tanto, esse operador atuará no espaço de posições e de moeda (\mathcal{H}_P e \mathcal{H}_C), movimentando a partícula do estado de posição $|j\rangle$ para $|j-1\rangle$ se o *ket* for $|L\rangle$ e de $|j\rangle$ para $|j+1\rangle$ se o *ket* for $|R\rangle$ [19, 20, 24]. Uma vez que todos os operadores que compõem \hat{U} dado pela Eq. (2.10) foram abordados, é possível verificar matematicamente como ocorre a evolução temporal de uma caminhada quântica.

Exemplo 2. Calcule os estados dos primeiros três passos de uma CQ Hadamard cujo estado inicial é dado por $|\Psi(0)\rangle = |L\rangle \otimes |0\rangle$. Compare $|\Psi(1)\rangle$ da CQ Hadamard com $|\Psi(1)\rangle$ obtido por uma CQ Fourier.

Partindo da Eq. (2.7) temos que,

$$\begin{aligned} |\Psi(1)\rangle &= \hat{U} |\Psi(0)\rangle \\ &= \hat{S}(\hat{C} \otimes \hat{\mathbb{I}}_P)(|L\rangle \otimes |0\rangle) \\ &= \hat{S}(\hat{H} |L\rangle \otimes \hat{\mathbb{I}}_P |0\rangle). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Como $\hat{\mathbb{I}}_P |0\rangle = |0\rangle$, e uma vez que no Exemplo 1 já foi realizada a operação da moeda \hat{H} sobre o *qubit* $|L\rangle$ podemos escrever que

$$|\Psi(1)\rangle = \hat{S} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + |R\rangle) \otimes |0\rangle \right).$$

Em seguida tomando \hat{S} a partir da Eq. (2.19) e assumindo que a única posição corresponde

ao $j = 0$, temos que

$$\hat{S} = |L\rangle \langle L| \otimes |-1\rangle \langle 0| + |R\rangle \langle R| \otimes |1\rangle \langle 0|,$$

e então,

$$\begin{aligned} |\Psi(1)\rangle &= (|L\rangle \langle L| \otimes |-1\rangle \langle 0| + |R\rangle \langle R| \otimes |1\rangle \langle 0|) \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + |R\rangle) \otimes |0\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle \langle L|L\rangle \otimes |-1\rangle \langle 0|0\rangle + |R\rangle \langle R|R\rangle \otimes |1\rangle \langle 0|0\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle \otimes |-1\rangle + |R\rangle \otimes |1\rangle). \end{aligned} \quad (2.21)$$

A partir do estado $|\Psi(1)\rangle$ é possível calcular $|\Psi(2)\rangle$ usando novamente a Eq. (2.7), logo

$$\begin{aligned} |\Psi(2)\rangle &= \hat{U} |\Psi(1)\rangle \\ &= \hat{S}(\hat{H} \otimes \hat{\mathbb{I}}_P) \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle \otimes |-1\rangle + |R\rangle \otimes |1\rangle) \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{S} \left(\hat{H} |L\rangle \otimes \hat{\mathbb{I}}_P |-1\rangle + \hat{H} |R\rangle \otimes \hat{\mathbb{I}}_P |1\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{S} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes |-1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes |1\rangle \right) \\ &= \frac{1}{2} \hat{S} \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes |-1\rangle + \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \otimes |1\rangle \right) \\ &= \frac{1}{2} \hat{S}((|L\rangle + |R\rangle) \otimes |-1\rangle + (|L\rangle - |R\rangle) \otimes |1\rangle). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Vemos então que o operador \hat{S} deve ser escrito considerando as posições $j = 1$ e -1 conforme segue

$$\hat{S} = |L\rangle \langle L| \otimes (|0\rangle \langle 1| + |-2\rangle \langle -1|) + |R\rangle \langle R| \otimes (|2\rangle \langle 1| + |0\rangle \langle -1|). \quad (2.23)$$

Substituindo o operador de translação condicional \hat{S} dado pela Eq. (2.23)) na Eq. (2.24) resulta em

$$\begin{aligned} |\Psi(2)\rangle &= \frac{1}{2} [|L\rangle \langle L| \otimes (|0\rangle \langle 1| + |-2\rangle \langle -1|) + |R\rangle \langle R| \otimes (|2\rangle \langle 1| + |0\rangle \langle -1|)] \cdot \\ &\quad [(|L\rangle + |R\rangle) \otimes |-1\rangle + (|L\rangle - |R\rangle) \otimes |1\rangle], \end{aligned}$$

e, ao considerarmos somente os termos dos produtos internos não-nulos, vemos que

$$\begin{aligned} |\Psi(2)\rangle &= \frac{1}{2}(|L\rangle \langle L|L\rangle \otimes |-2\rangle \langle -1| - 1\rangle + |L\rangle \langle L|L\rangle \otimes |0\rangle \langle 1|1\rangle \\ &\quad + |R\rangle \langle R|R\rangle \otimes |0\rangle \langle -1| - 1\rangle - |R\rangle \langle R|R\rangle \otimes |2\rangle \langle 1|1\rangle) \\ |\Psi(2)\rangle &= \frac{1}{2}(|L\rangle \otimes |-2\rangle + (|L\rangle + |R\rangle) \otimes |0\rangle - |R\rangle \otimes |2\rangle). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Da mesma maneira, o estado $|\Psi(3)\rangle$ será obtido a partir do *ket* $|\Psi(2)\rangle$ utilizando novamente a Eq. (2.7). Assim sendo,

$$\begin{aligned} |\Psi(3)\rangle &= \hat{U} |\Psi(2)\rangle \\ &= \frac{1}{2} \hat{S}(\hat{H} \otimes \hat{\mathbb{I}}_P) (|L\rangle \otimes |-2\rangle + (|L\rangle + |R\rangle) \otimes |0\rangle - |R\rangle \otimes |2\rangle) \\ &= \frac{1}{2} \hat{S}(\hat{H} |L\rangle \otimes \hat{\mathbb{I}}_P |-2\rangle + \hat{H}(|L\rangle + |R\rangle) \otimes \hat{\mathbb{I}}_P |0\rangle - \hat{H} |R\rangle \otimes \hat{\mathbb{I}}_P |2\rangle) \\ &= \frac{1}{2} \hat{S} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + |R\rangle) \otimes |-2\rangle + \frac{2}{\sqrt{2}} |L\rangle \otimes |0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle - |R\rangle) \otimes |2\rangle \right). \end{aligned} \quad (2.25)$$

Para $t = 3$ o operador \hat{S} deve levar em consideração as posições $j = -2, 0$ e 2 que possuem amplitudes não-nulas, portanto

$$\hat{S} = |L\rangle \langle L| \otimes (|1\rangle \langle 2| + |-1\rangle \langle 0| + |-3\rangle \langle -2|) + |R\rangle \langle R| \otimes (|3\rangle \langle 2| + |1\rangle \langle 0| + |-1\rangle \langle -2|), \quad (2.26)$$

cuja substituição na Eq. (2.25), nos leva a

$$|\Psi(3)\rangle = \frac{\sqrt{2}}{4}(|L\rangle \otimes |-3\rangle + (2|L\rangle + |R\rangle) \otimes |-1\rangle - |L\rangle \otimes |1\rangle - |R\rangle \otimes |3\rangle). \quad (2.27)$$

Esse processo recursivo pode ser repetido $t = n$ vezes para obter o estado $|\Psi(n)\rangle$.

A Eq. (2.21) nos fornece o estado $|\Psi(1)\rangle$ obtido a partir da aplicação do operador moeda (\hat{H}) seguido pela translação condicional (\hat{S}) do estado inicial $|\Psi(0)\rangle = |L\rangle \otimes |0\rangle$ da partícula. Por sua vez, o primeiro passo de uma CQ Fourier partindo de $j = 0$ com mesmo *qubit* inicial é dado por

$$|\Psi(1)\rangle = \hat{S}(\hat{F} \otimes \hat{\mathbb{I}}_P) |\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle \otimes |-1\rangle + i |R\rangle \otimes |1\rangle). \quad (2.28)$$

Comparando a Eq. (2.21) com a Eq. (2.28) é possível notar que, tanto a caminhada Hadamard quanto a Fourier resultam em um estado $|\Psi(1)\rangle$ com 50% de probabilidade de medir $|L\rangle$ na posição $j = -1$ e com 50% de probabilidade de medir $|R\rangle$ na posição $j = 1$, mas com fases relativas distintas entre $|L\rangle$ e $|R\rangle$, sendo nula para o caso Hadamard e $\pi/2$ para Fourier [18, 19].

2.5 Equações de recorrência e desordem

Através do exemplo da última seção, vemos que o cálculo das amplitudes de probabilidade em cada posição j ao longo do tempo t é um procedimento recursivo, no qual repete-se o processo de calcular as amplitudes de probabilidade $L(j, t)$ e $R(j, t)$ no tempo t a partir das amplitudes calculadas anteriormente no tempo $t - 1$ pelo mesmo procedimento. Portanto, essas amplitudes de probabilidade podem ser escritas através de equações de recorrência [19, 56]. Partindo das Eqs. (2.7) e (2.10), temos que $|\Psi(t)\rangle = \hat{S}(\hat{C} \otimes \hat{\mathbb{I}}_P) |\Psi(t - 1)\rangle$ e considerando um operador moeda (Eq. (2.13)) $\hat{C}(j, t)$ que pode variar tanto no tempo quanto na posição, as amplitudes $L(j, t)$ e $R(j, t)$ são dadas através das seguintes equações⁵

$$\begin{aligned} L(j, t) &= c_{LL}(j + 1, t)L(j + 1, t - 1) + c_{LR}(j + 1, t)R(j + 1, t - 1), \\ R(j, t) &= c_{RL}(j - 1, t)L(j - 1, t - 1) + c_{RR}(j - 1, t)R(j - 1, t - 1). \end{aligned} \quad (2.29)$$

Considerando uma CQ a partir de um estado inicial local em $j = 0$, note que em $t = 1$ as amplitudes de probabilidade são calculadas para as posições $j = -1$ e 1 , no passo seguinte em $t = 2$, calculamos as amplitudes para $j = -2, 0$ e 2 e assim sucessivamente⁶. É possível concluir então que, para cada passo de tempo t calculamos as respectivas amplitudes variando suas posições de $j = -t$ até t [19].

Até o presente momento neste trabalho, abordamos somente uma CQ cuja evolução é regida por uma moeda fixa (constante). Nessa situação, temos uma CQ ordenada [56]. No entanto, essa não é a única forma de passeio compreendido pelo modelo de moeda, que pode contar também com caminhadas que tenham alguma dependência com a posição e/ou tempo, ou ainda, que são escolhidas aleatoriamente entre dois ou mais operadores \hat{C} , em cada posição j da rede e/ou em cada passo de tempo t [7, 56, 58]. Nessa última situação temos a introdução de desordem numa caminhada e dizemos que a CQ é desordenada.

A Fig. 2.3 ilustra dois tipos de desordem a serem abordadas neste trabalho. Na linha superior da imagem, os passeios aleatórios levam em conta duas cores de moeda (vermelha e azul). Isso acontece porque a caminhada desordenada em questão escolhe aleatoriamente

⁵Nos trabalhos de dissertação anteriores [18, 19, 22, 34, 57] os estados de spin $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ correspondem respectivamente aos estados $|L\rangle$ e $|R\rangle$ do presente trabalho. No entanto, naquelas dissertações, o operador \hat{S} condicionava a translação do $|\uparrow\rangle$ para a direita e o $|\downarrow\rangle$ para a esquerda em associação direta com as setas e as rotações do volante de um veículo sendo dirigido. Este trabalho considera o contrário: os *kets* $|L\rangle$ e $|R\rangle$ correspondem a translações à esquerda e à direita respectivamente. Por isso, $j + 1$ nas equações de recorrência aqui correspondem a $j - 1$ nas dissertações anteriores e vice-versa.

⁶Note que o caminhante partindo de $j = 0$ em $t = 0$ ocupa somente posições j pares em passos de tempo t pares e posições j ímpares em passos de tempo t ímpares.

entre duas moedas quânticas, tais como, por exemplo, as moedas Hadamard e Fourier. Essa CQ aleatória é denominada RQW_2 (*random quantum walk*), e o seu subíndice indica o número de opções de moedas quânticas sorteadas aleatoriamente. Já na linha inferior da Fig. 2.3, as moedas são representadas por várias cores diferentes. Neste caso, a CQ é denominada RQW_∞ , ou seja, a escolha aleatória do operador \hat{C} explora todas as possibilidades de matrizes 2×2 do espaço $SU(2)$ ⁷. Isso é possível, através de escolhas aleatórias independentes dos parâmetros ρ , θ e φ da moeda quântica (Eq. (2.13)), a partir de uma distribuição uniforme cujos intervalos são dados por $0 \leq \rho \leq 1$ e $0 \leq \theta, \varphi \leq 2\pi$ [7].

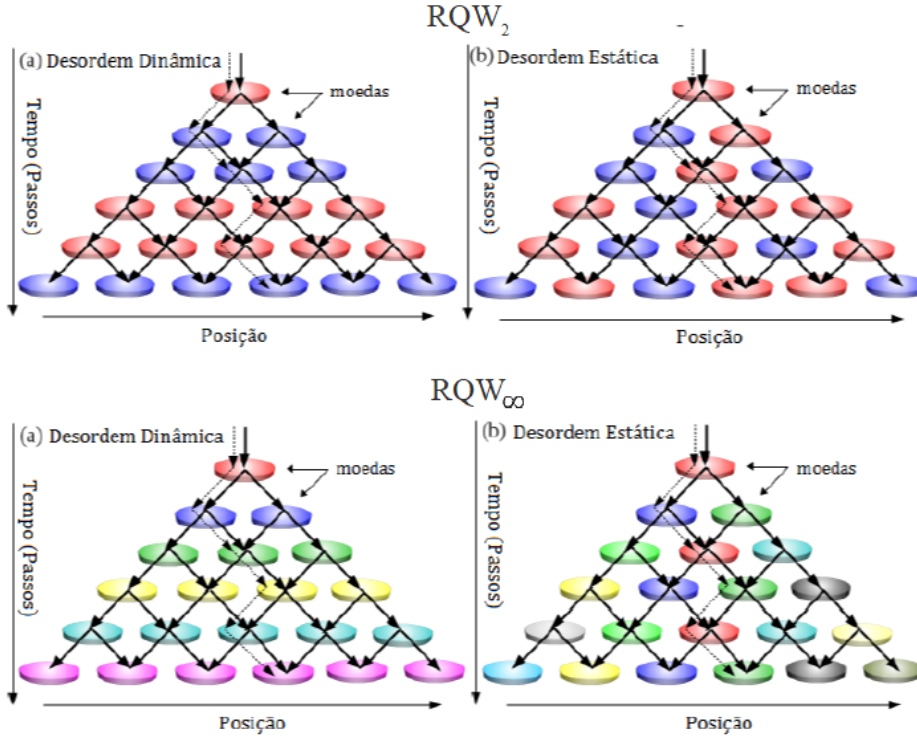


Figura 2.3: Ilustração representativa das desordens dinâmica e estática no contexto de uma CQ. As linhas pontilhadas representam um possível passeio clássico. As curvas sólidas retratam as amplitudes de probabilidade e as diferentes cores representam diferentes moedas. Os termos RQW_2 e RQW_∞ correspondem as caminhadas quânticas desordenadas (aleatórias) e os seus subíndices indicam o número de possíveis opções de moedas a serem escolhidas. As desordens apresentadas aqui são (a) dinâmica na qual as moedas são sorteadas a cada passo de tempo e são fixas na posição e (b) estática na qual as moedas são sorteadas para cada posição e são fixas no tempo. Imagem retirada de [7] com adaptações.

A introdução dos diferentes tipos de desordem empregadas neste estudo, implicam na utilização de variações mais restritivas das relações gerais de recorrência dada pela Eq. (2.29). Embora sejam três as formas fundamentais de desordem em uma CQ (dinâmica,

⁷Podemos dizer que na RQW_2 , a escolha da moeda quântica é determinada por uma moeda clássica de dois lados (jogo de cara ou coroa não necessariamente justo), enquanto na RQW_∞ é dirigido por uma moeda clássica de "infinitos lados".

estática e flutuante), neste trabalho serão abordadas apenas as duas primeiras. A introdução de diferentes tipos de desordens em uma caminhada quântica unidimensional irá, em geral, aumentar seu grau de complexidade e afetar suas propriedades podendo, entre outras situações, fazer com que os valores de distribuição de probabilidade ou dispersão se aproximem dos resultados clássicos [7, 56].

Na desordem dinâmica um novo operador moeda será definido a cada passo de tempo. Dessa maneira, é correto assumir para essa situação que $\hat{C}(j, t) = \hat{C}(t)$, o que culmina no fato de que todas as posições j em um mesmo passo de tempo t terão a mesma moeda $\hat{C}(t)$ tal como ilustrado na Fig. 2.3 (a) para RQW_2 e RQW_∞ . Para esse caso as equações de recorrência obtidas através de Eq. (2.29) se reduzem a

$$\begin{aligned} L(j, t) &= c_{LL}(t)L(j+1, t-1) + c_{LR}(t)R(j+1, t-1), \\ R(j, t) &= c_{RL}(t)L(j-1, t-1) + c_{RR}(t)R(j-1, t-1). \end{aligned} \quad (2.30)$$

Na desordem estática as moedas quânticas serão redefinidas para cada posição da rede j e fixas durante o tempo tal como ilustrado na Fig. 2.3 (b) para RQW_2 e RQW_∞ , de modo que $\hat{C}(j, t) = \hat{C}(j)$ [56]. Para tanto, antes do início da caminhada escolhe-se qual moeda estará em cada posição da rede. Assim sendo, as relações de recorrência para esta situação são

$$\begin{aligned} L(j, t) &= c_{LL}(j+1)L(j+1, t-1) + c_{LR}(j+1)R(j+1, t-1), \\ R(j, t) &= c_{RL}(j-1)L(j-1, t-1) + c_{RR}(j-1)R(j-1, t-1). \end{aligned} \quad (2.31)$$

Por último, o caso ordenado com a moeda fixa implica que não há mais dependência temporal ou espacial na moeda quântica, logo $\hat{C}(j, t) = \hat{C}$. A partir do cálculo das amplitudes podemos obter as probabilidades para cada posição j em um certo tempo t , assim como a dispersão ao longo do tempo, como pode ser visto na próxima seção.

2.6 Distribuição de probabilidade e dispersão

Como visto anteriormente, a principal diferença entre a CQ e a CAC que podemos comparar diretamente, refere-se a propagação da partícula. A partícula quântica tem uma dispersão superior com relação a partícula clássica. A partir da comparação da distribuição de probabilidade $P(j, t)$ e dispersão $\sigma(t)$ entre os dois modelos, podemos verificar diretamente isso. Devido a isso, o cálculo dessas quantidades se torna indispensável para

uma boa análise comparativa da dinâmica entre diferentes modelos de caminhadas [57].

A partir do cálculo das amplitudes $L(j, t)$ e $R(j, t)$ através das equações de recorrência (Eq. (2.29)), podemos obter $|\Psi(t)\rangle$. Afim de obter a distribuição de probabilidades sobre as posições para o $|\Psi(t)\rangle$, devemos tomar as probabilidades associadas a medição dos *kets* $|L\rangle$ e $|R\rangle$ numa posição j , projetando a função de onda do seu estado na base \mathcal{H}_P [19],

$$\begin{aligned} P_L(j, t) &= |(\langle L| \otimes \langle j|) |\Psi(t)\rangle|^2 = |L(j, t)|^2 \text{ e} \\ P_R(j, t) &= |(\langle R| \otimes \langle j|) |\Psi(t)\rangle|^2 = |R(j, t)|^2, \end{aligned} \quad (2.32)$$

e, ao somá-las temos a probabilidade total de medir a partícula numa dada posição j ,

$$P(j, t) = P_L(j, t) + P_R(j, t) = |L(j, t)|^2 + |R(j, t)|^2. \quad (2.33)$$

O cálculo de $P(j, t)$ para as diferentes posições j que o caminhante pode ocupar nos fornece a distribuição de probabilidade $P(j)$ após t passos de tempo [19]. Por sua vez, a dispersão $\sigma(t)$ é obtida usando a Eq. (2.33), tomando a raiz quadrada da variância,

$$\sigma^2(t) = \sum_j j^2 P(j, t) - \left(\sum_j j P(j, t) \right)^2. \quad (2.34)$$

Na Fig. 2.4 são ilustradas três curvas de distribuição de probabilidade de caminhadas Hadamard após 100 passos de tempo. Cada CQ parte da origem com um *qubit* diferente. Para os *qubits* $|R\rangle$ e $|L\rangle$ a evolução temporal leva a uma distribuição assimétrica respectivamente para à direita e para à esquerda. Já para o estado inicial dado pela superposição $\frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + i|R\rangle)$ a distribuição de probabilidade será simétrica [19].

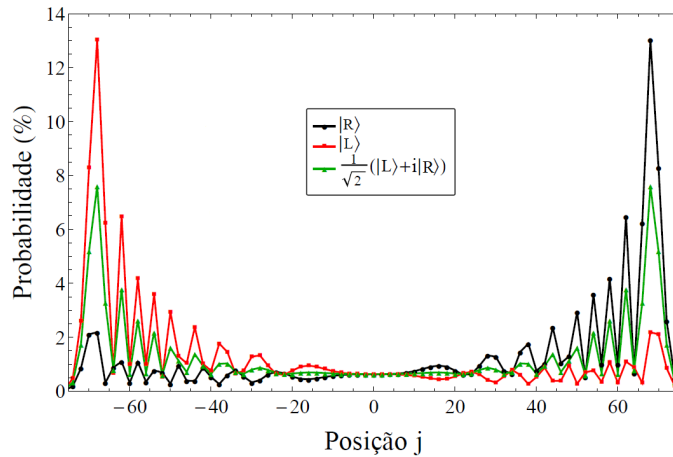


Figura 2.4: Distribuições de probabilidade para $t = 100$ para caminhadas Hadamard cujo estado inicial parte de $j = 0$ com os *qubits* $|R\rangle$, $|L\rangle$ e $\frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + i|R\rangle)$. Imagem retirada de [19] com adaptações.

Em qualquer um dos casos da Fig. 2.4 é possível notar que as distribuições de probabilidade obtidas diferem radicalmente da distribuição gaussiana da CAC. É fácil perceber que $P(j)$ irá variar conforme o estado inicial $|\Psi(0)\rangle$ e, também com a moeda quântica \hat{C} escolhida, como vimos anteriormente. No entanto, em todas as diferentes distribuições de probabilidade, ao contrário do que o modelo clássico apresenta, podemos assumir que a CQ se espalha com certa uniformidade sobre as posições da rede se propagando mais rapidamente do que no caso clássico. Essa diferença é uma das principais motivações para o seu estudo e a base para suas aplicações algorítmicas [12, 47].

A Fig. 2.5 (a) compara as distribuições de probabilidade $P(j)$ após 100 passos de tempo e $\sigma(t)$ para a CAC (em vermelho) e CQ (em azul). Veja que, enquanto no caso clássico a curva de distribuição de probabilidade consiste numa gaussiana, no quântico a distribuição de probabilidade é muito mais espalhada e possui dois picos longe da origem, consistindo nas posições mais prováveis de se detectar uma partícula. Portanto, olhando para a Fig. 2.5 (b) vemos que a dispersão da partícula quântica será proporcional ao tempo ($\sigma \propto t$), o que define um comportamento balístico, que contrasta com a dispersão difusiva da partícula clássica ($\sigma \propto \sqrt{t}$) [19]. Concluimos então que o comportamento balístico de uma partícula quântica é quadraticamente superior em relação ao comportamento difusivo de uma partícula clássica.

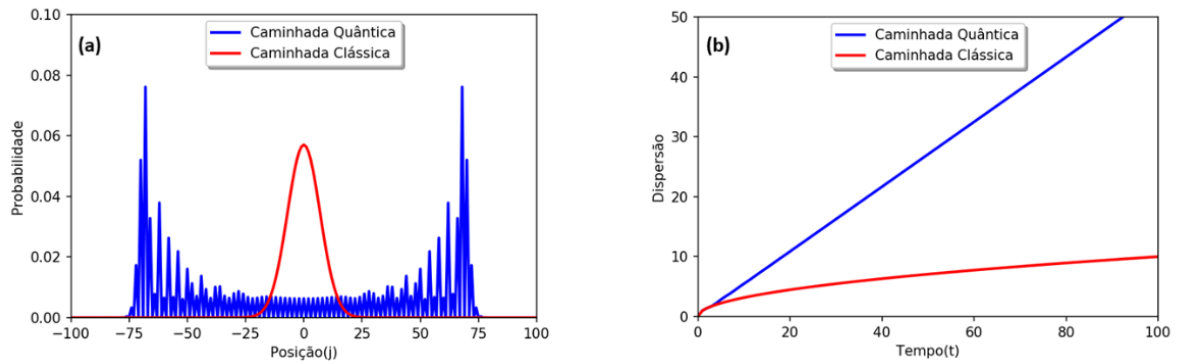


Figura 2.5: (a) Comparação entre a distribuição de probabilidade $P(j)$ para uma CAC (em vermelho) e para uma CQ Hadamard (em azul) cujo estado inicial é dado por $|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + i|R\rangle) \otimes |0\rangle$ levando a uma distribuição simétrica. (b) Comparação entre os valores de dispersão $\sigma(t)$ obtidos para uma CAC e uma CQ. Imagem retirada de [22].

Barreira Absorvedora

Neste capítulo introduziremos o conceito de barreira absorvedora numa CAC e CQ, apresentando as principais diferenças entre os dois modelos. Em particular, mostraremos que a probabilidade de uma dada partícula escapar da absorção pela barreira é radicalmente diferente entre os dois modelos. Em seguida, o principal objetivo deste capítulo é chegar a uma solução analítica para a probabilidade de escape para diferentes posições M da barreira absorvedora, em uma CQ Hadamard unidimensional de tempo discreto partindo de um *qubit* inicial arbitrário. Para tanto, seguiremos o modelo desenvolvido por Bach *et al.* [59] utilizando o método de Fourier cuja descrição da CQ acontece no espaço de momentos k . Uma vez que o operador \hat{U}_k no espaço de Fourier é diagonal, é possível encontrar as autofunções da CQ no limite assintótico $t \rightarrow \infty$. A partir dessas autofunções é possível obter a probabilidade de escape nesse limite, utilizando o método das imagens a fim de garantir o cumprimento da condição de contorno necessária para a correta descrição da barreira absorvedora.

3.1 Barreira absorvedora na caminhada aleatória clássica

Até o momento vimos que a CQ difere fundamentalmente da CAC na propagação da partícula conforme salientado no final do capítulo anterior. Isso leva a uma distribuição de probabilidade radicalmente diferente entre os dois casos e, uma dispersão quadraticamente superior na CQ com relação a CAC. Outra discrepância relevante entre essas caminhadas pode ser observada se as mesmas forem limitadas por uma barreira absorvedora. Para tanto, considere uma CAC na qual a partícula parte da posição $j = 1$ e uma barreira absorvedora é, por exemplo, colocada na posição $j = 0$, como ilustrado na Fig. 3.1. É possível demonstrar que a partícula clássica sempre é absorvida pela barreira [12, 60].

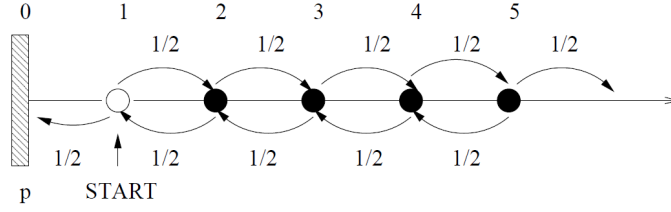


Figura 3.1: CAC com barreira absorvedora na origem. Para esta situação a partícula inicia seu passeio em $j = 1$. O caminhante se movimenta com probabilidades iguais de ir para à esquerda ou direita. Imagem retirada de [12].

Considere que a probabilidade da partícula clássica ir de uma posição i para f é dada por p_{if} . Numa CAC justa, vemos que a partir da posição $j = 1$, a probabilidade p_{10} dela ser absorvida na barreira à esquerda é igual a probabilidade p_{12} dela ir para direita. A partir da posição $j = 2$, a partícula pode ainda voltar para $j = 0$ e ser absorvida novamente com probabilidade $p_{12}p_{21}p_{10}$. Portanto, se coletarmos nesses casos, somente as probabilidades que levam a absorção teremos $p = p_{10} + p_{12}p_{21}p_{10}$. Tanto p_{21} quanto p_{10} são iguais a p uma vez que a caminhada é homogênea no espaço [12], o que nos leva a relação recursiva,

$$p = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}p_{21}p_{10} = \frac{1}{2}(1 + p^2), \quad (3.1)$$

cujas soluções resultam em $p = 1$. Também podemos escrever esse resultado como uma série, tal que a probabilidade P_A da partícula ser absorvida é

$$P_A = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2^n} = 1. \quad (3.2)$$

Portanto, como queríamos demonstrar, vemos que numa CAC a partícula clássica é sempre absorvida pela barreira. O raciocínio contrário pode ser também feito. A probabilidade de uma partícula clássica escapar da barreira é infinitamente pequena, implicando em infinitos passos à direita cuja probabilidade de escape resulta em,

$$P_E = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2^n} = 0. \quad (3.3)$$

Finalmente, é interessante notar ainda que se a partícula clássica estiver infinitamente longe da barreira, ela nunca será absorvida! Na CQ, por sua vez, uma partícula quântica tem probabilidade não-nula de escapar de uma barreira absorvedora, assim como ser absorvida por uma barreira infinitamente longe [47, 60]. Essa probabilidade de escape, depende do estado inicial do caminhante, assim como da moeda quântica utilizada na

caminhada.

3.2 Caminhada quântica no espaço de momento

A descrição da CQ no espaço de Fourier ou espaço de momento k é um passo necessário para obter as autofunções de uma CQ no limite assintótico $t \rightarrow \infty$, uma vez que no espaço- k o operador de translação condicional é diagonal [18]. Assim sendo, seguiremos os passos da Ref. [47] com a finalidade de estudar a probabilidade de escape de uma barreira absorvedora em uma CQ para $t \rightarrow \infty$. Considere a função discreta $f : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{C}$ cuja transformada de Fourier será dada pela relação

$$f_k(k) = \sum_j f(j) e^{ikj}, \quad (3.4)$$

tal que $f_k : [-\pi, \pi] \rightarrow \mathbb{C}$ seja uma função contínua [24]. Para esta situação, a transformada de Fourier inversa será definida pela equação

$$f(j) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} f_k(k) e^{-ikj} \quad (3.5)$$

que representa um caso especial de uma classe mais geral de transformações [24]. Dessa forma, o estado que pertencia anteriormente ao espaço $\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_P$ é agora reescrito no espaço $\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_k$, onde \mathcal{H}_k tem sua base formada pelos vetores $|k\rangle$ obtidos através da transformada de Fourier

$$|k\rangle = \sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{ikj} |j\rangle, \quad (3.6)$$

para a qual k é uma variável contínua definida no intervalo de $[-\pi, \pi]$ [18].

O estado inicial da caminhada quântica dado anteriormente pela Eq. (2.4) poderá então ser expresso a partir da transformada de Fourier inversa como

$$|\Psi_k(0)\rangle = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} [L_k(0,0) |L\rangle + R_k(0,0) |R\rangle] \otimes |k\rangle, \quad (3.7)$$

onde

$$\begin{aligned} L_k(0,0) &= (\langle L| \otimes \langle k|) |\Psi_k(0)\rangle = \sum_j e^{-ikj} L(0,0), \\ R_k(0,0) &= (\langle R| \otimes \langle k|) |\Psi_k(0)\rangle = \sum_j e^{-ikj} R(0,0). \end{aligned}$$

Por sua vez, a ação do operador de translação condicional (Eq. (2.19)) nessa nova base

será dada através das relações

$$\begin{aligned}
\hat{S}(|L\rangle \otimes |k\rangle) &= \left(|L\rangle \langle L| \otimes \sum_j |j-1\rangle \langle j| + |R\rangle \langle R| \otimes \sum_j |j+1\rangle \langle j| \right) \left(|L\rangle \otimes \sum_j e^{ikj} |j\rangle \right) \\
&= |L\rangle \otimes \sum_j e^{ikj} |j-1\rangle \\
&= |L\rangle \otimes e^{ik} \sum_j e^{ik(j-1)} |j-1\rangle \\
&= e^{ik} (|L\rangle \otimes |k\rangle),
\end{aligned} \tag{3.8}$$

e

$$\begin{aligned}
\hat{S}(|R\rangle \otimes |k\rangle) &= \left(|L\rangle \langle L| \otimes \sum_j |j-1\rangle \langle j| + |R\rangle \langle R| \otimes \sum_j |j+1\rangle \langle j| \right) \left(|R\rangle \otimes \sum_j e^{ikj} |j\rangle \right) \\
&= e^{-ik} (|R\rangle \otimes |k\rangle),
\end{aligned} \tag{3.9}$$

De modo semelhante, é possível fazer

$$\begin{aligned}
\hat{S}_k &= |L\rangle \langle L| \otimes \sum_j |j-1\rangle \langle j| + |R\rangle \langle R| \otimes \sum_j |j+1\rangle \langle j| \\
&= |L\rangle \langle L| \otimes \sum_j e^{ik(j-1)} e^{-ik(j-1)} |j-1\rangle \langle j| + |R\rangle \langle R| \otimes \sum_j e^{-ik(j+1)} e^{ik(j+1)} |j+1\rangle \langle j| \\
&= |L\rangle \langle L| \otimes e^{ik} \sum_j e^{ik(j-1)} |j-1\rangle e^{-ikj} \langle j| + |R\rangle \langle R| \otimes e^{-ik} \sum_j e^{ik(j+1)} |j+1\rangle e^{-ikj} \langle j| \\
&= |L\rangle \langle L| \otimes e^{ik} |k\rangle \langle k| + |R\rangle \langle R| \otimes e^{-ik} |k\rangle \langle k|,
\end{aligned} \tag{3.10}$$

onde \hat{S}_k é o operador de translação condicional reescrito no espaço $\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_k$. Seguindo o mesmo raciocínio, para \mathbb{I}_P temos que

$$\hat{\mathbb{I}}_k = \sum_j |j\rangle \langle j| = \sum_j e^{ikj} |j\rangle e^{-ikj} \langle j| = |k\rangle \langle k|. \tag{3.11}$$

Neste trabalho pretende-se desenvolver equações que não estejam atreladas a apenas uma forma de passeio, mas que também não sejam demasiadamente complexas. Para tanto, será utilizada a forma mais geral do operador Hadamard [61],

$$\hat{H}_G = \begin{pmatrix} \sqrt{\rho} & \sqrt{1-\rho} \\ \sqrt{1-\rho} & -\sqrt{\rho} \end{pmatrix}, \tag{3.12}$$

que pode ser obtida pela Eq. (2.13) impondo $\theta = \varphi = 0$. Feita essa consideração acerca da moeda quântica e tendo em vista que já foram escritos no espaço de momento os

operadores \hat{S}_k e $\hat{\mathbb{I}}_k$, resta apenas a obtenção do operador de evolução temporal. Para tanto o operador \hat{H}_G será escrito na base dos projetores conforme mostra a Eq. (2.11).

Dado que $\hat{U}_k = \hat{S}_k(\hat{C} \otimes \hat{\mathbb{I}}_k)$ conforme adaptação da Eq. (2.10) e usando as Eqs. (3.10), (3.11) e (3.12) chegamos a seguinte equação

$$\begin{aligned}
 \hat{U}_k &= (|L\rangle\langle L| \otimes e^{ik}|k\rangle\langle k| + |R\rangle\langle R| \otimes e^{-ik}|k\rangle\langle k|) \\
 &\quad \left[\left(\sqrt{\rho}|L\rangle\langle L| + \sqrt{1-\rho}|L\rangle\langle R| + \sqrt{1-\rho}|R\rangle\langle L| - \sqrt{\rho}|R\rangle\langle R| \right) \otimes (|k\rangle\langle k|) \right] \\
 &= \sqrt{\rho}|L\rangle\langle L| \otimes e^{ik}|k\rangle\langle k| + \sqrt{1-\rho}|L\rangle\langle R| \otimes e^{ik}|k\rangle\langle k| + \sqrt{1-\rho}|R\rangle\langle L| \otimes e^{-ik}|k\rangle\langle k| \\
 &\quad - \sqrt{\rho}|R\rangle\langle R| \otimes e^{-ik}|k\rangle\langle k| \\
 &= \left(\sqrt{\rho}e^{ik}|L\rangle\langle L| + \sqrt{1-\rho}e^{ik}|L\rangle\langle R| + \sqrt{1-\rho}e^{-ik}|R\rangle\langle L| - \sqrt{\rho}e^{-ik}|R\rangle\langle R| \right) \otimes |k\rangle\langle k|
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

que define o operador de evolução temporal no espaço de Fourier. Matricialmente escrevemos que

$$\hat{U}_k = \begin{pmatrix} \sqrt{\rho}e^{ik} & \sqrt{1-\rho}e^{ik} \\ \sqrt{1-\rho}e^{-ik} & -\sqrt{\rho}e^{-ik} \end{pmatrix}. \tag{3.14}$$

Aqui, torna-se desnecessário carregar o operador identidade $|k\rangle\langle k|$, uma vez que \hat{S}_k é diagonal [18].

O desenvolvimento analítico exposto a seguir partirá sempre do caso mais geral para o específico, reproduzindo a linha de raciocínio seguida por Bach *et al.* [59]. Portanto, a investigação sobre a CQ será iniciada sem nenhuma restrição, ou seja, considerando a generalização da CQ Hadamard obtendo seus autoestados no espaço de momento sem barreira absorvedora [47]. Em seguida, estudaremos a CQ com uma barreira absorvedora. Ao final, os valores de probabilidade de escape serão obtidos para CQ Hadamard, ou seja, tomando $\rho = 1/2$ na Eq. (3.14).

A função de onda da CQ responsável por descrever a amplitude de probabilidade da partícula estar numa posição j no tempo t será escrita na notação de espinores¹ de duas componentes [62, 63],

$$\Psi(j, t) = \begin{pmatrix} L(j, t) \\ R(j, t) \end{pmatrix}, \tag{3.15}$$

¹Espinores são entidades que carregam a representação dos grupos de rotações em um espaço de dimensão finita. São fundamentais para a descrição da função de onda de sistemas quânticos com *spin*.

de modo que suas componentes, da primeira para a segunda linha, correspondam respectivamente as amplitudes de probabilidade de medir os estados $|L\rangle$ e $|R\rangle$. Substituindo a forma geral da moeda Hadamard dada pela Eq. (3.12) nas relações de recorrência definidas na Eq. (2.29), obtemos as seguintes equações

$$\begin{pmatrix} L(j, t) \\ R(j, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\rho}L(j+1, t-1) + \sqrt{1-\rho}R(j+1, t-1) \\ \sqrt{1-\rho}L(j-1, t-1) - \sqrt{\rho}R(j-1, t-1) \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

responsáveis por definir a dinâmica da caminhada quântica de interesse [47]. As soluções propostas para a Eq. (3.16) são

$$\begin{pmatrix} L(j, t) \\ R(j, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_k \\ B_k \end{pmatrix} e^{i(kj - \omega_k t)}. \quad (3.17)$$

Dado o operador de evolução temporal definido para o espaço de momento segundo a Eq. (3.14), e tendo em vista que \hat{U}_k é unitário e comuta com \hat{S}_k , de tal modo que, $[\hat{U}_k, \hat{S}_k] = 0$, é correto dizer que Ψ_k será autovetor (ou autoestado) de \hat{U}_k . Dessa maneira é possível escrever a equação de autovetores e autovalores que segue

$$\hat{U}_k \begin{pmatrix} A_k \\ B_k \end{pmatrix} = e^{-i\omega_k} \begin{pmatrix} A_k \\ B_k \end{pmatrix} \rightarrow \Psi_k = \begin{pmatrix} A_k \\ B_k \end{pmatrix}, \quad (3.18)$$

para determinadas frequências de $\omega \in \mathbb{R}$. Perceba que, uma vez que os autovetores evoluem pela simples multiplicação de uma fase, então Ψ_k será tido como um análogo discreto das ondas planas [64] e, conforme a Eq. (3.18), os autovalores de \hat{U}_k serão dados pelo termo $e^{-i\omega_k}$, obtido através das raízes do polinômio característico

$$P(\lambda_k) = \det(\hat{U}_k - \lambda_k \hat{\mathbb{I}}_{2 \times 2}) = \lambda_k^2 - \sqrt{\rho}(e^{ik} - e^{-ik})\lambda_k - 1 = 0, \quad (3.19)$$

para o qual λ_k representará os autovalores e $\hat{\mathbb{I}}_{2 \times 2}$ é a matriz identidade 2×2 . A partir da Eq. (3.19) obtemos que

$$\lambda_{k\pm} = \sqrt{\rho} \left(i \sin k \pm \sqrt{\cos^2 k - 1 + \frac{1}{\rho}} \right). \quad (3.20)$$

E, uma vez que a relação $\lambda_{k\pm} = e^{-i\omega_{k\pm}}$ é verdadeira, pode-se escrever

$$\begin{aligned} \omega_{k+} &= -\sin^{-1}(\sqrt{\rho} \sin k), \\ \omega_{k-} &= \pi - \omega_{k+}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

em concordância com a Eq. (3.20).

Repare que ω_{k+} representa um ângulo contido no intervalo $k \in [-\pi/2, \pi/2]$ e é responsável por definir a relação de dispersão da caminhada, através da qual será possível obter a frequência em termos do número de onda k . Voltando ao paralelo das ondas planas, é possível admitir que $\omega_{k\pm}$ e k sejam interpretadas como grandezas proporcionais a energia da partícula e momento respectivamente [52, 64]. Portanto, $\omega_{k\pm}$ são as auto-energias do sistema e através da sua derivada em relação a k , obtemos a velocidade de grupo do pacote de onda [47].

Por hora, falta apenas obter as autofunções correspondentes aos autovalores encontrados acima. Com essa finalidade impõem-se aos autovetores a condição de normalização $|A_k|^2 + |B_k|^2 = 1/N$ encarregada de garantir que as probabilidades sobre quaisquer N posições consecutivas da rede somem 1. E assim sendo, partindo da Eq. (3.18) e levando em conta que $|A_k|^2 = A_k \bar{A}_k$ e $|B_k|^2 = B_k \bar{B}_k$ onde \bar{A}_k e \bar{B}_k são respectivamente os complexos conjugados de A_k e B_k , após algumas manipulações, chegamos as expressões

$$A_{k\pm} = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sqrt{1 \pm \frac{\cos k}{\sqrt{1/\rho - \sin^2 k}}}, \quad (3.22)$$

$$B_{k\pm} = \pm \frac{e^{-ik}}{\sqrt{2N}} \sqrt{1 \mp \frac{\cos k}{\sqrt{1/\rho - \sin^2 k}}}, \quad (3.23)$$

onde o termo $\pm e^{-ik}$ na Eq. (3.23) é uma fase adicionada arbitrariamente [47].

3.3 Caminhada quântica com condições periódicas de contorno

Vamos tratar o sistema agora considerando condições de contorno periódicas com período N . Qualquer função de onda deste sistema pode ser escrita como uma superposição linear dos autoestados dado pelas Eqs. (3.22) e (3.23) encontradas na seção anterior, da seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} L(j, t) \\ R(j, t) \end{pmatrix} = \sum_{k \in (-\pi, \pi)} \left[C_{k+} \begin{pmatrix} A_{k+} \\ B_{k+} \end{pmatrix} e^{i(kj - \omega_{k+}t)} + C_{k-} \begin{pmatrix} A_{k-} \\ B_{k-} \end{pmatrix} e^{i(kj - \omega_{k-}t)} \right]. \quad (3.24)$$

Para uma condição inicial dada pela Eq. (2.4), temos que

$$\begin{pmatrix} L(j, 0) \\ R(j, 0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L(0, 0) \\ R(0, 0) \end{pmatrix} \delta_{j,0}, \quad (3.25)$$

onde vemos que $C_{k\pm}$ satisfaz

$$\begin{pmatrix} A_{k+} & A_{k-} \\ B_{k+} & B_{k-} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{k+} \\ C_{k-} \end{pmatrix} = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} L(0,0) \\ R(0,0) \end{pmatrix}, \quad (3.26)$$

cujas soluções resultam em

$$C_{k\pm} = A_{k\pm}L(0,0) + \overline{B_{k\pm}}R(0,0). \quad (3.27)$$

Na próxima seção consideraremos um sistema periódico com N muito maior comparado a característica física de interesse, em particular a posição da barreira $j = M$, ou seja, $M \ll N$, de tal forma que possamos considerar $N \rightarrow \infty$.

3.4 Caminhada quântica com barreira absorvedora

Tendo em mente os resultados obtidos até o presente momento, é dada a hora de adicionar um grau a mais de dificuldade ao problema estudado. Isso posto, vamos considerar aqui uma CQ adicionada de uma barreira absorvedora localizada na posição $j = M$, para a qual $M > 0$, tal como ilustrado na Fig. 3.2. Note que as setas sólidas pretas correspondem a caminhada cuja dinâmica é representada pelas Eqs. (3.16). Para esse caso tem-se um passeio que ocorre considerando apenas a moeda Hadamard geral dada pela Eq. (3.12), sem nenhuma influência da barreira. Em $j = M$ temos a representação de uma barreira, para a qual toda amplitude de probabilidade da esquerda para a direita (que chega à barreira) é por ela absorvida, não retornando para uma posição anterior. As setas vermelhas à direita da barreira correspondem a parte da onda que foi absorvida. Repare que no contexto de uma CQ, enquanto que para $j < M$ temos uma moeda $\hat{C}(j)$ Hadamard, para $j \geq M$ temos a Identidade $\hat{\mathbb{I}}$ como moeda quântica², que permite apenas a transmissão à direita sem nenhuma reflexão em sentido contrário.

Para a situação que está sendo proposta, fica convencionado que as amplitudes de probabilidade que chegam à barreira, se movendo para à direita, serão transmitidas para além dela. Da mesma maneira, fica definido que, uma vez que o caminhante ultrapassar a barreira, não existirão amplitudes de probabilidade se movendo para à esquerda. Observe que, na área de influência da barreira, na qual se altera a condução da caminhada, as equações para descrição do movimento do caminhante irão divergir do estabelecido pela

²Note que $\hat{\mathbb{I}}$ corresponde a uma moeda quântica (Eq. (2.12)) tal que $\rho = 1$ e $\theta = \varphi = \pi/2$ na Eq. (2.13).

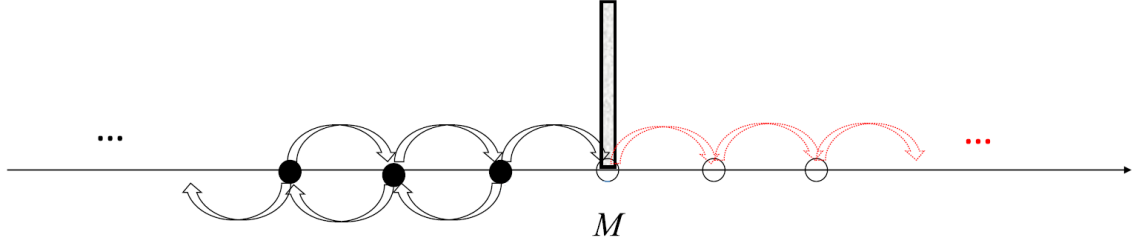


Figura 3.2: Esquema de uma CQ unidimensional com uma barreira absorvedora em $j = M$. A seta preta representa a dinâmica do passeio sem influência da barreira. A seta vermelha pontilhada reproduz a absorção do caminhante pela barreira absorvedora. Retirado de [65] com adaptações.

Eq. (3.16), e portanto deverão ser modificadas a fim de incorporar a barreira. Para tanto, um novo modelo de CQ é necessário, a partir da análise do comportamento do sistema antes, nas proximidades e além da posição $j = M$ da barreira. Diante disso, são estabelecidos os três pares de equações de recorrência que seguem:

* Para $j < M - 1$,

$$\begin{pmatrix} L(j, t) \\ R(j, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\rho}L(j+1, t-1) + \sqrt{1-\rho}R(j+1, t-1) \\ \sqrt{1-\rho}L(j-1, t-1) - \sqrt{\rho}R(j-1, t-1) \end{pmatrix}. \quad (3.28)$$

* Para $j \geq M$,

$$\begin{pmatrix} L(j, t) \\ R(j, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L(j+1, t-1) \\ R(j-1, t-1) \end{pmatrix}. \quad (3.29)$$

* Para $j = M - 1$,

$$\begin{pmatrix} L(M-1, t) \\ R(M-1, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L(M, t-1) \\ \sqrt{1-\rho}L(M-2, t-1) - \sqrt{\rho}R(M-2, t-1) \end{pmatrix}. \quad (3.30)$$

Veja que, se $j < M - 1$ (Eq. (3.28)) a dinâmica da caminhada será idêntica a descrita pela Eq. (3.16). Isso acontece porque para essas posições o ato de caminhar ocorre sem interferência da barreira, ou seja, trata-se de uma caminhada com uma moeda Hadamard geral. Por outro lado, se $j \geq M$ (Eq. (3.29)), então as amplitudes de probabilidade $L(j, t)$ e $R(j, t)$ serão diferentes do modelo dado pela Eq. (3.16), já que para essas posições, \hat{H}_G será substituída pela moeda $\hat{\mathbb{I}}$ dada pela Eq. (2.12). Por fim, para $j = M - 1$ (Eq. (3.30)) a amplitude $L(M, t - 1)$ virá da barreira absorvedora à direita, enquanto a amplitude $R(M - 1, t)$, virá da caminhada Hadamard à esquerda.

Como mencionado anteriormente, quando os caminhanes passam pela barreira eles não retornam à mesma, ou seja, não se movem mais para a esquerda, o que torna necessário assumir $L(M, t - 1) = 0$ para todo t . Assim sendo, ao substituir essa condição na Eq. (3.30), que define a condição de contorno, temos que $L(M - 1, t) = 0$ para todo t . No entanto, como os autoestados do sistema previamente discutido não satisfazem a condição de contorno proposta pela nova abordagem, iremos remodelar a função de onda do sistema [47, 65].

Com isso, é intuitivo admitir que para o mesmo valor de energia devem existir duas funções de onda que representem uma onda se propagando no sentido de j crescente e outra no sentido de j decrescente (respectivamente e^{kj} e e^{-kj}). Desta forma, para que $L(M - 1, t)$ se anule sistematicamente para todo e qualquer tempo t , será necessário que contribuições de diferentes valores de k possuam o mesmo valor de ω a fim de interferirem destrutivamente entre si [47, 65].

Partindo da solução proposta na Eq. (3.17) e uma vez que $\omega_{k\pm} = \omega_{(\pi-k)\pm}$ (conforme mostra a Eq. (3.21)) as autofunções serão reescritas da seguinte forma

$$\begin{pmatrix} \mathcal{L}_{k\pm}(j, t) \\ \mathcal{R}_{k\pm}(j, t) \end{pmatrix} = \mathcal{N}_{k\pm} \left[\begin{pmatrix} A_{k\pm} \\ B_{k\pm} \end{pmatrix} e^{ikj} + \zeta_{k\pm} \begin{pmatrix} A_{(\pi-k)\pm} \\ B_{(\pi-k)\pm} \end{pmatrix} e^{i(\pi-k)j} \right] e^{-i\omega_{k\pm}t}, \quad (3.31)$$

onde $\mathcal{N}_{k\pm}$ são constantes de normalização e $\zeta_{k\pm}$ são fixados de modo a garantir que $\mathcal{L}(M - 1, t) = 0$ para todo t , ou ainda que,

$$A_{k\pm} e^{ik(M-1)} + \zeta_{k\pm} A_{(\pi-k)\pm} e^{i(\pi-k)(M-1)} = 0, \quad (3.32)$$

o que nos leva a,

$$\zeta_{k\pm} = - \left(\sqrt{1 + \frac{\cos^2 k}{1/\rho - 1}} \pm \frac{\cos k}{\sqrt{1/\rho - 1}} \right) e^{-i(\pi-2k)(M-1)}, \quad (3.33)$$

usando $A_{k\pm}$ determinado pela Eq. (3.22).

Sabemos que as funções de onda proporcionais a e^{ikj} com $k \in (-\pi/2, \pi/2)$, se movem para a direita, então podemos interpretar que as componentes $e^{i(\pi-k)j}$ que se movem para a esquerda são geradas pela reflexão fora da condição de contorno [47]. A probabilidade de que uma onda seja refletida é

$$P_r(k) = |\zeta_{k-}|^2 = \left(\sqrt{1 + \frac{\cos^2 k}{(-1 + 1/\rho)}} - \frac{|\cos k|}{\sqrt{-1 + 1/\rho}} \right)^2, \quad (3.34)$$

com $k \in (-\pi/2, \pi/2)$ e o módulo em $\cos k$ acima garante que $P_r(k) \leq 1$.

Todo desenvolvimento descrito até o momento será agora utilizado para que o estado inicial da caminhada quântica seja reescrito como uma superposição de autofunções.

Relembrando o estado inicial dado pela Eq. (3.25),

$$\begin{pmatrix} L(j, 0) \\ R(j, 0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L(0, 0) \\ R(0, 0) \end{pmatrix} \delta_{j,0},$$

vemos que a forma dessa função de onda (não normalizada) sugere que pode ser útil considerar juntos os pares de vetores de onda k e $\pi - k$, portanto escrevemos que

$$\begin{pmatrix} L(0, 0) \\ R(0, 0) \end{pmatrix} \delta_{j,0} = \sum_{\substack{k \in (-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}) \\ s = \pm}} \left[C_{k,s} \begin{pmatrix} A_{k,s} \\ B_{k,s} \end{pmatrix} e^{ikj} + C_{\pi-k,s} \begin{pmatrix} A_{\pi-k,s} \\ B_{\pi-k,s} \end{pmatrix} e^{i(\pi-k)j} \right], \quad (3.35)$$

tal que $C_{k\pm}$ é dado pela Eq. (3.27). No entanto, percebe-se que somente com os coeficientes $C_{k\pm}$ e $C_{(\pi-k)\pm}$ temos que a condição de contorno ainda não é satisfeita. Talvez a maneira mais simples de resolver esse problema seja através do uso do método das imagens [47, 65].

Para tanto, assumimos um sistema sem barreira absorvedora (como visto na seção anterior). Todavia, agora o sistema contará com um segundo caminhante chamado de imagem, que ocupará desde o início da caminhada, uma posição pré-determinada fora do domínio que é ajustada para que a condição de contorno apropriada $L(M-1, t) = 0$ valha para todo t . A imagem deve estar na posição $j = 2(M-1)$ tal que $j \geq M-1^3$, como sugere a forma da Eq. (3.31) [47], de tal forma que podemos reescrever as amplitudes ao longo do tempo como,

$$\begin{pmatrix} L(j, t) \\ R(j, t) \end{pmatrix} = \sum_{\substack{k \in (-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}) \\ s = \pm}} e^{-i\omega_{k,s}t} \left\{ \left[C_{k,s} \begin{pmatrix} A_{k,s} \\ B_{k,s} \end{pmatrix} e^{ikj} + C_{\pi-k,s} \begin{pmatrix} A_{\pi-k,s} \\ B_{\pi-k,s} \end{pmatrix} e^{i(\pi-k)j} \right] \right. \\ \left. + \left[D_{k,s} \begin{pmatrix} A_{k,s} \\ B_{k,s} \end{pmatrix} e^{ik[j-2(M-1)]} + D_{\pi-k,s} \begin{pmatrix} A_{\pi-k,s} \\ B_{\pi-k,s} \end{pmatrix} e^{i(\pi-k)[j-2(M-1)]} \right] \right\}, \quad (3.36)$$

³Note que essa posição faz com que a distância (número de posições) entre o caminhante até $j = M-1$ seja a igual a distância da imagem até essa posição, de maneira que no primeiro passo t que houver amplitude de probabilidade em $j = M-1$ oriunda do caminhante num sentido, a contribuição da imagem vinda do sentido oposto possam interferir destrutivamente e assim sucessivamente para os passos seguintes, garantindo a validade da condição de contorno para todo t .

onde $\omega_{k,s} = \omega_{\pi-k,s}$ e como agora $L(M-1, t) = 0$ para todo tempo t , para cada $k \in (-\pi/2, \pi/2)$ temos as seguintes condições

$$\begin{aligned} C_{k\pm} A_{k\pm} e^{ik(M-1)} + C_{(\pi-k)\pm} A_{(\pi-k)\pm} e^{i(\pi-k)(M-1)} + \\ D_{k\pm} A_{k\pm} e^{-ik(M-1)} + D_{(\pi-k)\pm} A_{(\pi-k)\pm} e^{-i(\pi-k)(M-1)} = 0. \end{aligned} \quad (3.37)$$

que serão satisfeitas apenas se as igualdades abaixo forem verdadeiras

$$\begin{aligned} D_{k\pm} &= -e^{i\pi(M-1)} C_{(\pi-k)\pm} \frac{A_{(\pi-k)\pm}}{A_{k\pm}} \text{ e} \\ D_{(\pi-k)\pm} &= -e^{i\pi(M-1)} C_{k\pm} \frac{A_{k\pm}}{A_{(\pi-k)\pm}}. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Perceba que quando $D_{k\pm}$ for encontrado, basta trocar k por $(\pi - k)$ para obter $D_{(\pi-k)\pm}$. Substituindo $D_{k\pm}$ e $D_{(\pi-k)\pm}$ na função de onda dependente do tempo dada pela Eq. (3.36), dentro do domínio $j < M$ temos que

$$\begin{pmatrix} L(j, t) \\ R(j, t) \end{pmatrix} = \sum_{\substack{k \in (-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}) \\ s = \pm}} \left[\begin{pmatrix} A_{k,s} \\ B_{k,s} \end{pmatrix} e^{ikj} \mathcal{F}_{k,s} + \begin{pmatrix} A_{\pi-k,s} \\ B_{\pi-k,s} \end{pmatrix} e^{i(\pi-k)j} \mathcal{G}_{k,s} \right] \quad (3.39)$$

com

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{k\pm} &= \left[C_{k\pm} - C_{(\pi-k)\pm} \frac{A_{(\pi-k)\pm}}{A_{k\pm}} e^{i(\pi-2k)(M-1)} \right], \\ \mathcal{G}_{k\pm} &= \left[C_{(\pi-k)\pm} - C_{k\pm} \frac{A_{k\pm}}{A_{(\pi-k)\pm}} e^{-i(\pi-2k)(M-1)} \right], \end{aligned} \quad (3.40)$$

que como esperado satisfaz a Eq. (3.33). A função de onda da Eq. (3.39) consiste numa superposição de funções de onda proporcionais a e^{ikj} , que descreve partículas livres se propagando com velocidade constante $d\omega/dk$. No limite de tempos muito grandes, as únicas componentes que estarão no domínio físico $j < M$ são aquelas que se dirigem à esquerda tal que $k \in (-\pi/2, \pi/2)$, ou seja, são aquelas de subíndices $(k, +)$ e $(\pi - k, -)$ [47]. Portanto, a probabilidade de que a partícula escape para $j \rightarrow -\infty$ quando a barreira absorvedora está em M , será dada por

$$P_E(M) = \sum_{k \in (-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})} |\mathcal{F}_{k+}(M)|^2 + |\mathcal{G}_{k-}(M)|^2. \quad (3.41)$$

Substituindo as Eqs. (3.27) e (3.23) na Eq. (3.40), vemos que $\mathcal{G}_{k-}(M) = \overline{\mathcal{F}_{k+}(M)}$, logo

podemos reescrever a Eq. (3.41) como

$$P_E(M) = \sum_{k \in (-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})} 2|\mathcal{F}_{k+}(M)|^2, \quad (3.42)$$

tal que

$$\mathcal{F}_{k+}(M) = \frac{L(0,0)}{A_{k+}} (A_{k+}^2 - e^{i(\pi-2k)(M-1)} A_{k-}^2) + R(0,0) A_{k-} (e^{ik} + e^{i(\pi-2k)(M-1)} e^{-ik}). \quad (3.43)$$

Convertendo o somatório da Eq. (3.42) para uma integral, notando que os termos que são ímpares em k somem, temos que

$$\begin{aligned} P_E(\rho, M) = & \frac{1}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{+\frac{\pi}{2}} l^2 \left(1 - \frac{\cos k}{\sqrt{1/\rho - \sin^2 k}} \right) \left(\frac{1/\rho + \cos(2k)}{1/\rho - 1} + \cos(\pi M) \cos(2k(M-1)) \right) dk \\ & + \frac{1}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{+\frac{\pi}{2}} r^2 \left(1 - \frac{\cos k}{\sqrt{1/\rho - \sin^2 k}} \right) (1 - \cos(\pi M) \cos(2kM)) dk \\ & + \frac{1}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{+\frac{\pi}{2}} 2lr \cos \Phi \left(1 - \frac{\cos k}{\sqrt{1/\rho - \sin^2 k}} \right) \left(\frac{\cos k}{\sqrt{1/\rho - 1}} \right) \\ & \times (\cos k - \cos(\pi M) \cos(k(2M-1))) dk \end{aligned} \quad (3.44)$$

onde consideramos as amplitudes iniciais⁴ $L(0,0) = l e^{i\phi_l}$, $R(0,0) = r e^{i\phi_r}$ e $\Phi = \phi_l - \phi_r$.

A partir da Eq. (3.44) obtemos que

$$\begin{aligned} P_E(\rho, M) = & l^2 \left[-\frac{2}{\pi \sqrt{1/\rho - 1}} + \frac{1}{1 - \rho} \left(1 - \frac{2\rho}{\pi} \sin^{-1} \sqrt{\rho} \right) \right. \\ & \left. - \frac{1}{\pi} (-1)^M \int_{-\frac{\pi}{2}}^{+\frac{\pi}{2}} \frac{\cos k}{\sqrt{1/\rho - \sin^2 k}} \cos(2k(M-1)) dk \right] \\ & + r^2 \left[1 - \frac{2}{\pi} \sin^{-1} \sqrt{\rho} + \frac{1}{\pi} (-1)^M \int_{-\frac{\pi}{2}}^{+\frac{\pi}{2}} \frac{\cos k}{\sqrt{1/\rho - \sin^2 k}} \cos(2kM) dk \right] \\ & + lr \cos \Phi \left[\frac{1}{\sqrt{1/\rho - 1}} - \frac{2}{\pi} \left(1 + \frac{2\rho - 1}{\sqrt{\rho(1 - \rho)}} \sin^{-1} \sqrt{\rho} \right) \right. \\ & \left. + \frac{2}{\pi} \frac{(-1)^M}{\sqrt{1/\rho - 1}} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{+\frac{\pi}{2}} \frac{\cos^2 k}{\sqrt{1/\rho - \sin^2 k}} \cos(k(2M-1)) dk \right], \end{aligned} \quad (3.45)$$

para a qual $\sin^{-1} \sqrt{\rho} = \arcsin \sqrt{\rho}$. De acordo com a Eq. (3.45) é fácil perceber que a probabilidade de escape está relacionada ao estado inicial do caminhante quântico (l , r e Φ), a moeda utilizada (ρ) e que o número de onda k pode ser eliminado via integração ao saber a posição da barreira absorvedora dada por M [65]. É interessante observar

⁴Veja que l e r correspondem respectivamente as amplitudes iniciais $L(0,0)$ e $R(0,0)$ tal que $l^2 + r^2 = 1$, ϕ_l e ϕ_r correspondem as fases dessas amplitudes e Φ é a fase relativa entre elas.

também que a probabilidade de escape não depende das fases θ e φ (Eq. (2.13)) uma vez que elas podem ser removidas através do ajuste da condição inicial (*qubit*) [47]. Vale ressaltar que a Eq. (3.45) se aplica apenas para $M > 1$. Essa restrição é estabelecida uma vez que para $M = 1$, o estado inicial do caminhante dado pela Eq. (3.25) é inconsistente com a condição de contorno $L(M - 1, t) = 0$, já que $L(0, 0) = le^{i\phi_l}$ pode ser diferente de zero. Esta complicação pode ser facilmente resolvida evoluindo o estado por um passo à mão. [47] Para a condição inicial $le^{i\phi_l} |L\rangle + re^{i\phi_r} |R\rangle$, a probabilidade de escape para $-\infty$ quando $M = 1$, $P_E(\rho, 1)$, está relacionada com a probabilidade de escape $P_E(\rho, 2)_L$, isto é, a probabilidade de uma caminhada começando no estado $|L\rangle \otimes |0\rangle$ escapar para $j \rightarrow -\infty$ quando a barreira está na posição $M = 2$,

$$P_E(\rho, 1) = |le^{i\phi_l}\sqrt{\rho} + re^{i\phi_r}\sqrt{1-\rho}|^2 P_E(\rho, 2)_L. \quad (3.46)$$

Na próxima seção, usaremos os resultados das Eqs. (3.45) e (3.46) para calcular as probabilidades de escape para uma caminhada Hadamard ($\rho = 1/2$) para diferentes posições M da barreira.

3.5 Aplicação para uma caminhada Hadamard

Nesta seção, usaremos a Eq. (3.45) com a finalidade de obter os coeficientes que caracterizam a probabilidade de escape para $j \rightarrow -\infty$ em uma caminhada quântica Hadamard iniciada no estado geral $(le^{i\phi_l} |L\rangle + re^{i\phi_r} |R\rangle) \otimes |0\rangle$. Para tanto, tomaremos $\rho = 1/2$ na Eq. (3.45) resultando em

$$\begin{aligned} P_E(1/2, M) = l^2 & \left[2 - \frac{2}{\pi} - \frac{2}{\pi} \sin^{-1} \sqrt{\frac{1}{2}} - \frac{1}{\pi} (-1)^M \int_{-\frac{\pi}{2}}^{+\frac{\pi}{2}} \frac{\cos k}{\sqrt{2 - \sin^2 k}} \cos(2k(M-1)) dk \right] \\ & + r^2 \left[1 - \frac{2}{\pi} \sin^{-1} \sqrt{\frac{1}{2}} + \frac{1}{\pi} (-1)^M \int_{-\frac{\pi}{2}}^{+\frac{\pi}{2}} \frac{\cos k}{\sqrt{2 - \sin^2 k}} \cos(2kM) dk \right] \\ & + lr \cos \Phi \left[1 - \frac{2}{\pi} + \frac{2}{\pi} (-1)^M \int_{-\frac{\pi}{2}}^{+\frac{\pi}{2}} \frac{\cos^2 k}{\sqrt{2 - \sin^2 k}} \cos(k(2M-1)) dk \right], \quad (3.47) \end{aligned}$$

através da qual serão obtidos os coeficientes desejados para as diferentes posições da barreira pela substituição simples dos valores de M , desde que $M > 1$. Já para $M = 1$, a

a partir da Eq. (3.46) chega-se a expressão

$$\begin{aligned} P_E(1/2, 1) &= \frac{1}{2} [l^2 + r^2 + 2lr \cos \Phi] P_E(\rho, 2)_L \\ &= l^2 \left(1 - \frac{2}{\pi}\right) + r^2 \left(1 - \frac{2}{\pi}\right) + lr \cos \Phi \left(2 - \frac{4}{\pi}\right). \end{aligned} \quad (3.48)$$

Para que esse resultado fosse alcançado, $P_E(\rho, 2)_L$ foi obtido a partir da Eq. (3.47) considerando $M = 2$, $l = 1$ e $r = 0$ já que a probabilidade de escape em questão aqui é referente a um caminhante cujo estado inicial é dado por $|L\rangle \otimes |0\rangle$. Para $M > 1$ o procedimento a seguir é substituir M na Eq. (3.47). Os valores numéricos obtidos com a expressão dada pela Eq. (3.48) para $M = 1$, bem como aqueles obtidos para $M = 2, 3, 4, 5$ e $M \rightarrow \infty$ a partir da Eq. (3.47) estão expostos na Tabela 3.1.

M	\mathcal{C}_l	\mathcal{C}_r	\mathcal{C}_{lr}
1	$1 - \frac{2}{\pi} \approx 0,36338$	$1 - \frac{2}{\pi} \approx 0,36338$	$2 - \frac{4}{\pi} \approx 0,72676$
2	$2 - \frac{4}{\pi} \approx 0,72676$	$3 - \frac{8}{\pi} \approx 0,45352$	$3 - \frac{8}{\pi} \approx 0,45352$
3	$4 - \frac{10}{\pi} \approx 0,816901$	$13 - \frac{118}{3\pi} \approx 0,479811$	$11 - \frac{100}{3\pi} \approx 0,38967$
4	$14 - \frac{124}{3\pi} \approx 0,843191$	$65 - \frac{608}{3\pi} \approx 0,489196$	$53 - \frac{496}{3\pi} \approx 0,372765$
5	$66 - \frac{614}{3\pi} \approx 0,852577$	$341 - \frac{16046}{15\pi} \approx 0,493304$	$277 - \frac{13036}{15\pi} \approx 0,367488$
∞	$\frac{3}{2} - \frac{2}{\pi} \approx 0,86338$	$\frac{1}{2}$	$1 - \frac{2}{\pi} \approx 0,36338$

Tabela 3.1: Coeficientes que caracterizam a probabilidade de escape para $j \rightarrow -\infty$ em uma CQ Hadamard iniciada no estado $(L(0, 0) |L\rangle + R(0, 0) |R\rangle) \otimes |0\rangle$ tal que $L(0, 0) = le^{i\phi_l}$, $R(0, 0) = re^{i\phi_r}$ e $\Phi = \phi_l - \phi_r$. Neste modelo, a barreira absorvedora está localizada em $M > 0$. Enquanto a probabilidade de escape é dada por $P_E(1/2, M) = l^2 \mathcal{C}_l(M) + r^2 \mathcal{C}_r(M) + lr \cos \Phi \mathcal{C}_{lr}(M)$, a probabilidade de absorção da barreira é dada por $1 - P_E(1/2, M)$ [47].

3.6 Cálculo numérico da probabilidade de escape

No capítulo anterior vimos que o cálculo das amplitudes de probabilidade para diferentes posições j ao longo do tempo t é dado por um procedimento recursivo que acontece através da utilização das equações de recorrência dadas pela Eq. (2.29). Portanto, a partir do estado inicial $|\Psi(0)\rangle$ é possível calcular o estado $|\Psi(1)\rangle$ e a partir desse estado obtemos $|\Psi(2)\rangle$ e assim sucessivamente.

Como vimos nas seções anteriores neste capítulo, a barreira absorvedora se comporta como uma moeda quântica identidade. Isso significa que, se a barreira está situada numa posição $j = M$, com $M > 0$, ou seja, à direita do caminhante posicionado inicialmente em

$j = 0$, ela permite apenas a transmissão das amplitudes de probabilidades que chegam à sua esquerda, no sentido positivo de j . Essas amplitudes são transmitidas pela barreira, sem nenhuma reflexão no sentido oposto.

A barreira absorvedora pode ser implementada computacionalmente a partir da escolha das moedas em cada posição j e tempo t no código computacional. Assumindo que para todo t , as moedas nas posições $j \geq M$ são $\hat{\mathbb{I}}_{2 \times 2}$ e para as posições $j < M$ são por exemplo, moedas Hadamard, temos uma caminhada Hadamard com uma barreira absorvedora a partir de $j = M$.

O cálculo das probabilidades de escape e absorção nesse contexto, após escolhidas as moedas quânticas, é bem simples se notarmos que toda probabilidade $P(j, t)$ tal que $j < M$ corresponde a probabilidade de escape⁵ $P_E(M)$. Consequentemente, toda probabilidade $P(j, t)$ para $j \geq M$ corresponde a probabilidade absorvida $P_A(M)$ pela barreira. É claro que pela normalização, numericamente devemos encontrar $P_E(M) + P_A(M) = 1$, portanto, basta calcularmos somente uma dessas probabilidades para encontrar a outra. Então, considerando uma caminhada após $t = n$ passos que possui amplitudes de probabilidade de $j = -n$ até n , as probabilidades de escape e absorção são respectivamente,

$$\begin{aligned} P_E(M) &= \sum_{j=-n}^{M-1} P(j, n), \\ P_A(M) &= \sum_{j=M}^n P(j, n) = 1 - P_E(M). \end{aligned} \quad (3.49)$$

Por último, note que a escolha de moedas na CQ é arbitrária. Em outras palavras, em vez de usarmos somente moedas Hadamard em posições à esquerda da barreira, podemos escolher moedas quânticas dentro de um contexto de desordem como mencionado no capítulo anterior. Nesse caso, temos a simulação de caminhadas quânticas desordenadas com barreira absorvedora, tema central desse trabalho, a ser explorado no capítulo a seguir, no qual apresentaremos os principais resultados desse estudo.

⁵Até a seção anterior, nos referíamos a probabilidade de escape como $P_E(\rho, M)$, de tal maneira que para designar uma caminhada Hadamard com $\rho = 1/2$ usávamos $P_E(1/2, M)$. Para simplificar a notação, vamos suprimir $\rho = 1/2$ no argumento de P_E ficando então entendido que se trata de uma caminhada Hadamard, salvo observação explícita contrária.

Resultados

Neste capítulo, estudaremos a probabilidade de escape $P_E(M)$ de uma CQ unidimensional discreta Hadamard em diferentes contextos de desordem. Primeiramente, vamos reinterpretar visualmente o modelo analítico obtido no capítulo anterior para a probabilidade de escape $P_E(M)$ para diferentes posições $j = M$ da barreira, a partir de um *qubit* arbitrário na representação de Bloch, ou seja, em termos dos ângulos polar α e azimutal β . Confrontaremos então o modelo analítico com cálculos numéricos, a fim de determinar para diferentes *qubits* iniciais o quão próximo P_E (considerando um número finito de passos) está do limite assintótico $\lim_{t \rightarrow \infty} P_E$ do modelo analítico. Em seguida, apresentaremos as principais características dinâmicas das caminhadas com desordem no tempo (desordem dinâmica - DD) e ao longo das posições (desordem estática - DE) para dois tipos distintos de desordem. No primeiro tipo, a desordem é introduzida a partir da escolha aleatória de moedas quânticas explorando todo espaço $SU(2)$ (DD_∞ e DE_∞), enquanto no segundo tipo, escolhemos aleatoriamente entre as moedas Hadamard e Fourier (DD_2 e DE_2). A partir de um parâmetro de controle δ responsável por quantificar o nível de desordem, analisaremos o comportamento da probabilidade média de escape $\langle P_E(M) \rangle$ e dispersão $\langle \sigma \rangle$ ao longo do tempo, considerando uma estatística apreciável de caminhadas via simulações numéricas. Por último, considerando a CQ numericamente num regime estável tal que $t \gg 1$, vamos tomar $P_E \propto t^{-n}$, ou seja, como uma lei de potência e quantificar os expoentes n para caracterizar a dinâmica assintótica de tais caminhadas.

4.1 Análise do modelo analítico da probabilidade de escape

No capítulo anterior, apresentamos os coeficientes que caracterizam a probabilidade de escape $P_E(M)$ para $j \rightarrow -\infty$ em uma CQ Hadamard cujo caminhante partia da origem

com o estado inicial $(le^{i\phi_l}|L\rangle + re^{i\phi_r}|R\rangle) \otimes |0\rangle$ e a barreira absorvedora encontrava-se numa posição $j = M$ à sua direita ($M > 0$) [47]. Esse estado pode ser facilmente reescrito na representação de Bloch da Eq. (2.6) para o *qubit*,

$$|\Psi(0)\rangle = \left[\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)|L\rangle + e^{i\beta} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)|R\rangle \right] \otimes |0\rangle, \quad (4.1)$$

se tomarmos $l = \cos(\alpha/2)$, $r = \sin(\alpha/2)$, $\phi_l = 0$ e $\phi_r = \beta$, removendo uma fase global irrelevante do *qubit* inicial. A probabilidade de escape para uma CQ Hadamard é dada então por

$$P_E(M) = \mathcal{C}_l(M) \cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \mathcal{C}_r(M) \sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \mathcal{C}_{lr}(M) \frac{\sin \alpha \cos \beta}{2}, \quad (4.2)$$

cujos coeficientes $\mathcal{C}_l(M)$, $\mathcal{C}_r(M)$ e $\mathcal{C}_{lr}(M)$ estão explicitados na tabela 3.1.

As Figs. 4.1 e 4.2 são complementares e nos mostram diferentes perspectivas da probabilidade de escape $P_E(M)$ do modelo analítico. Na Fig. 4.1 temos as superfícies das probabilidades de escape em função dos ângulos do *qubit* para diferentes posições $j = M$ da barreira, enquanto na Fig. 4.2, extraímos cortes dessas superfícies em função de α e β para valores específicos respectivamente de β e α .

Numa rápida olhada na Fig. 4.1 (a) em comparação com as demais, salta aos olhos que na situação cuja a barreira ocupa a posição $M = 1$, vizinha ao caminhante, o comportamento da probabilidade de escape é significativamente diferente dos demais casos. Isso pode ser facilmente compreendido se tomarmos a Eq. (4.2) com os coeficientes pertinentes a $M = 1$ segundo a tabela 3.1 e, uma vez que $\mathcal{C}_l(1) = \mathcal{C}_r(1)$, temos que

$$P_E(1) = \left(1 - \frac{2}{\pi}\right) (1 + \sin \alpha \cos \beta). \quad (4.3)$$

Note que a Eq. (4.3), assim como as Figs. 4.1 (a) e 4.2 (a), nos mostram que $P_E(1)$ começando a CQ com o *qubit* $|\Psi_C\rangle = |L\rangle$ ou $|R\rangle$ ($\alpha = 0$ ou π) levam à mesma probabilidade de escape. Isso pode ser facilmente entendido, se retomarmos o raciocínio empregado para o desenvolvimento da Eq. (3.48). Repare que numa CQ Hadamard cujo estado inicial é $|L\rangle$ ou $|R\rangle$, ao aplicarmos a moeda Hadamard, teremos respectivamente que $\hat{H}|L\rangle = (|L\rangle + |R\rangle)/\sqrt{2}$ e $\hat{H}|R\rangle = (|L\rangle - |R\rangle)/\sqrt{2}$. Após aplicar o operador \hat{S} de translação condicional, a amplitude $|R\rangle$ em ambos os casos é absorvida pela barreira imediatamente à direita. Portanto, após o primeiro passo temos o estado $|\Psi(1)\rangle \propto |L\rangle \otimes |-1\rangle$ que na prática, conforme enfatizado no capítulo anterior, nos leva a mesma situação da $P_E(2)$ já que agora, temos o *qubit* transladado para a posição $j = -1$ à duas posições

da barreira em $M = 1$. Logo vemos que o estado para $t = 1$ em ambos os casos são fisicamente o mesmo, o que conduz a mesma probabilidade de escape para os *qubits* $|L\rangle$ e $|R\rangle$ diferentemente dos demais casos para $M > 1$.

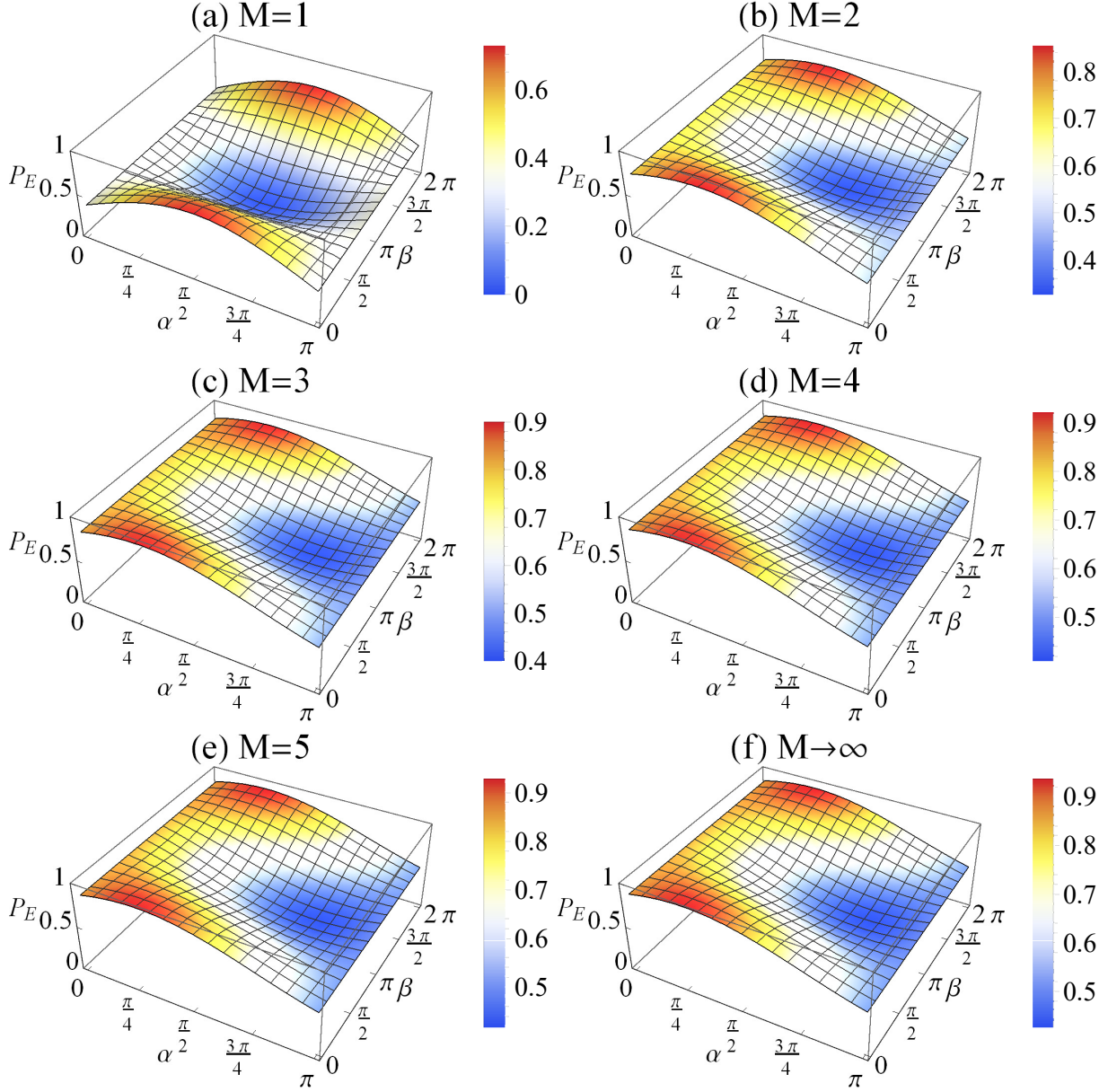


Figura 4.1: Probabilidade de escape $P_E(M)$ para as posições $j = M$ da barreira tal que (a) $M = 1$, (b) $M = 2$ (c) $M = 3$, (d) $M = 4$, (e) $M = 5$ e (f) $M \rightarrow \infty$, com $\alpha \in [0, \pi]$ e $\beta \in [0, 2\pi]$. As regiões em vermelho representam probabilidades de escape altas e as regiões em azul representam probabilidades baixas segundo as diferentes escalas à direita de cada gráfico.

Outro aspecto notável das curvas das Figs. 4.1 (a) e 4.2 (a) é que existe um *qubit* inicial que leva a uma probabilidade de escape nula. Nesse caso, o *qubit* é dado por $\alpha = \pi/2$ e $\beta = \pi$, ou seja, $|\Psi_C\rangle = (|L\rangle - |R\rangle)/\sqrt{2}$ e, ao notarmos que $\hat{H}|\Psi_C\rangle = |R\rangle$ nesse caso, após aplicarmos o operador \hat{S} , o estado resultante $|\Psi(1)\rangle = |R\rangle \otimes |1\rangle$ da caminhada é totalmente absorvido pela barreira em $M = 1$, logo nenhuma probabilidade

escapa para $j \rightarrow -\infty$. Por outro lado, o *qubit* inicial que conduz a probabilidade de escape máxima nesse caso é dado por $\alpha = \pi/2$ e $\beta = 0$, ou seja, $|\Psi_C\rangle = (|L\rangle + |R\rangle)/\sqrt{2}$, tal que $\hat{H}|\Psi_C\rangle = |L\rangle$ resulta após a translação, no estado $|\Psi(1)\rangle = |L\rangle \otimes |-1\rangle$ a duas posições de distância da barreira em $M = 1$. Isso nos remete a mesma probabilidade de

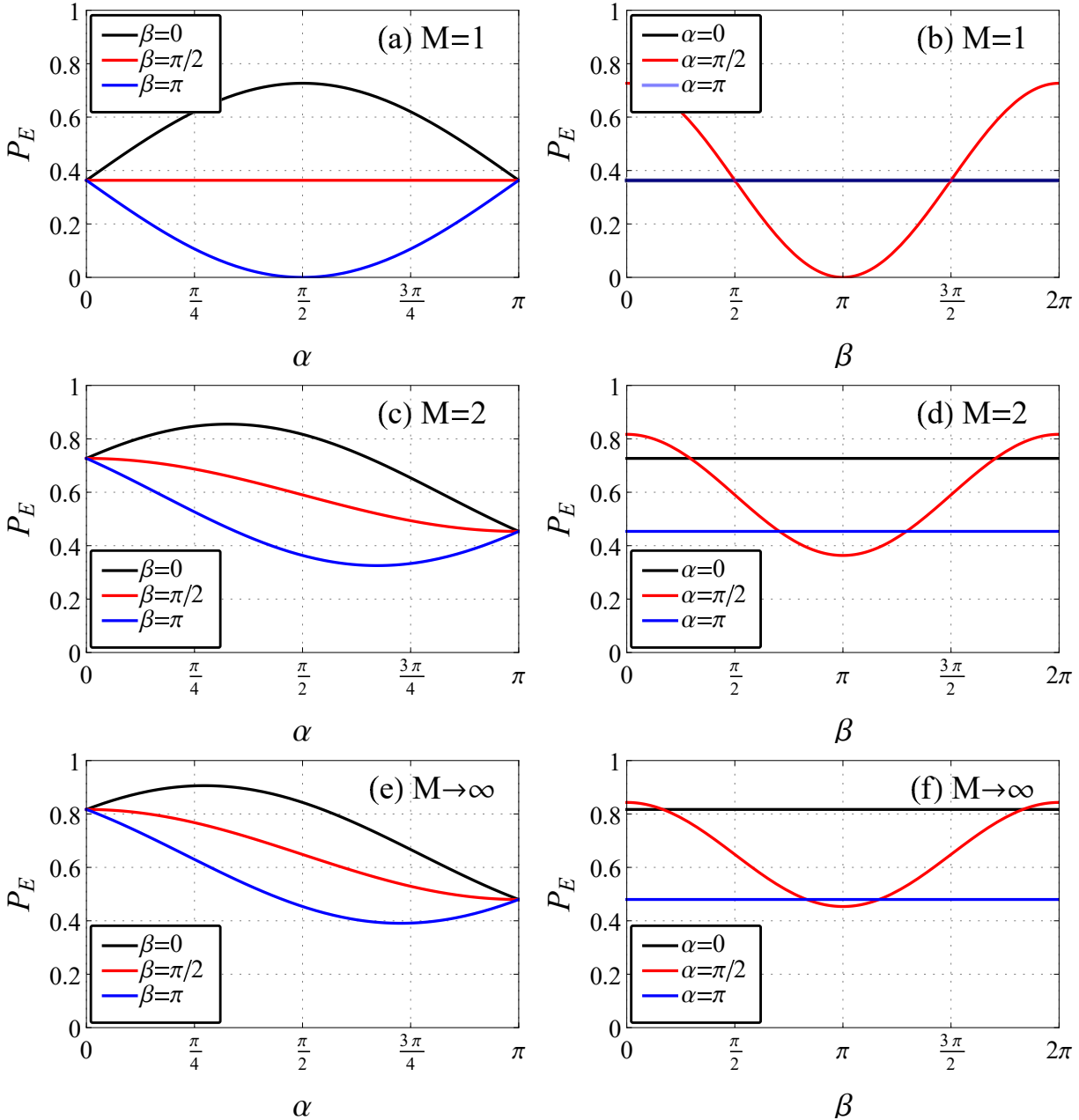


Figura 4.2: Cortes feitos em algumas das superfícies da Fig. 4.1 acima mostrando $P_E(M) \times \alpha$ para $\beta = 0, \pi/2$ e π e $P_E(M) \times \beta$ para $\alpha = 0, \pi/2$ e π respectivamente em (a) e (b) para $M = 1$, (c) e (d) para $M = 2$ e (e) e (f) para $M \rightarrow \infty$.

escape do estado $|\Psi(0)\rangle = |L\rangle \otimes |0\rangle$ ($\alpha = 0$ para $\beta \in [0, 2\pi]$) com a barreira em $M = 2$, já que se trata da mesma situação física explicada anteriormente. Devido a todas essas particularidades, a curva $P_E \times \alpha$ para a barreira em $M = 1$ exibe uma simetria em relação

a um eixo em $\alpha = \pi/2$ que inexistente nos demais casos.

Vamos agora examinar as demais probabilidades de escape. Segundo a Eq. (4.2) e a tabela 3.1, as expressões para $P_E(M)$ tal que $M > 1$ podem ser escritas como

$$\begin{aligned}
 P_E(2) &= \left(2 - \frac{4}{\pi}\right) \cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \left(3 - \frac{8}{\pi}\right) \sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \left(\frac{3}{2} - \frac{4}{\pi}\right) \sin \alpha \cos \beta, \\
 P_E(3) &= \left(4 - \frac{10}{\pi}\right) \cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \left(13 - \frac{118}{3\pi}\right) \sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \left(\frac{11}{2} - \frac{50}{3\pi}\right) \sin \alpha \cos \beta, \\
 P_E(4) &= \left(14 - \frac{124}{3\pi}\right) \cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \left(65 - \frac{608}{3\pi}\right) \sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \left(\frac{53}{2} - \frac{248}{3\pi}\right) \sin \alpha \cos \beta, \\
 P_E(5) &= \left(66 - \frac{614}{3\pi}\right) \cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \left(341 - \frac{16046}{15\pi}\right) \sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \left(\frac{277}{2} - \frac{6518}{15\pi}\right) \sin \alpha \cos \beta, \\
 P_E(\infty) &= \left(\frac{3}{2} - \frac{2}{\pi}\right) \cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \left(\frac{1}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\pi}\right) \sin \alpha \cos \beta.
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

A partir das Eqs. (4.4) é possível observar que a assimetria em α nas curvas (b)-(f) da Fig. 4.1 e também nas curvas $P_E \times \alpha$ em (c) e (e) da Fig. 4.2 é devido a diferença entre os coeficientes $\mathcal{C}_l(1)$ e $\mathcal{C}_r(1)$ que multiplicam respectivamente $\cos^2(\alpha/2)$ e $\sin^2(\alpha/2)$ nas expressões acima¹. Fisicamente, essa assimetria de $P_E \times \alpha$ pode ser explicada se considerarmos que a barreira está sempre à direita da posição inicial do caminhante. Em outras palavras, como vimos na Fig. 2.4, uma CQ partindo de um qubit $|\Psi_C\rangle = |L\rangle$ numa situação sem barreira, leva a uma distribuição de probabilidade assimétrica à esquerda, assim como, $|\Psi_C\rangle = |R\rangle$ leva a uma distribuição assimétrica à direita. Portanto, com exceção da situação cuja barreira está imediatamente à direita do caminhante na posição inicial ($M = 1$), iniciando a CQ no qubit $|\Psi_C\rangle = |L\rangle$ teremos uma maior probabilidade de escape para $j \rightarrow -\infty$ com relação ao $|R\rangle$. Por outro lado, a situação oposta é também verdadeira: ao tomarmos uma barreira a esquerda do caminhante tal que $M < -1$, o qubit $|\Psi_C\rangle = |R\rangle$ teria uma probabilidade de escape para $j \rightarrow \infty$ maior do que o $|L\rangle$.

Ao olharmos as expressões das Eqs. (4.4) e compararmos os diferentes valores numéricos dos coeficientes $\mathcal{C}_l(M)$, $\mathcal{C}_r(M)$ e $\mathcal{C}_{lr}(M)$ (explicitados na tabela 3.1) através das diferenças relativas $\epsilon_x = 1 - \mathcal{C}_x(2)/\mathcal{C}_x(\infty)$, respectivamente para $x = l, r$ e lr , observamos que $\epsilon_l \approx 16\%$, $\epsilon_r \approx 9\%$ e $\epsilon_{lr} \approx -25\%$. Logo, podemos concluir a partir desses resultados e da Fig. 4.1 que as curvas para $M > 1$ são qualitativamente muito parecidas. Portanto, na Fig. 4.2 selecionamos cortes de somente três casos ($M = 1, 2$ e ∞) que apresentam toda a física subjacente relevante a todos os casos. Por último, vemos que as diferenças relativas

¹Ao mesmo tempo, é evidente que a simetria com relação a $\beta = \pi$ em $P_E(M)$ é devido a dependência com $\cos \beta$ tal que $\beta \in [0, 2\pi]$.

nesses coeficientes repercutem num aumento geral da probabilidade de escape P_E para todos os qubits de $M = 2$ para $M \rightarrow \infty$. Isso é fisicamente razoável, uma vez que quanto mais afastada a barreira está da posição inicial do caminhante, maior é a probabilidade que deixa de ser absorvida e escapa para $j \rightarrow -\infty$ em sentido oposto à ela.

4.2 Modelo analítico x cálculo numérico

O modelo analítico estudado no capítulo anterior considera uma moeda fixa ao longo da rede à esquerda da posição da barreira absorvedora ($j < M$). Ainda que nesse modelo o cálculo das autofunções no espaço de momento admita mais de uma moeda nas posições da rede, distinguindo as moedas Hadamard e identidade (barreira), isso é feito às custas de equações de recorrência com um caminhante "imagem" extra que satisfaça adequadamente as condições periódicas de contorno da barreira. Portanto, vemos que a complexidade desse problema escala com o número de moedas diferentes que distribuimos ao longo da rede. Ao mesmo tempo, essa estratégia não comporta a troca aleatória de moedas a cada passo, uma vez que nesse contexto a diagonalização de \hat{U}_k não seria possível.

Afim de estudarmos caminhadas desordenadas com barreiras absorvedoras e ciente das limitações do método analítico, é imprescindível que adotemos uma estratégia de simulação numérica a partir das equações de recorrência no espaço de posições tal como discutida no capítulo 2. Em vista disso, ficamos diante do seguinte problema: como inferir sobre a probabilidade de escape P_E no limite assintótico, ou seja, $\lim_{t \rightarrow \infty} P_E$ uma vez que as simulações numéricas consideram tempos finitos? A resposta é simples: basta compararmos a probabilidade de escape analítica com aquela obtida via simulação numérica após muitos passos tal que $t \gg 1$. É importante ressaltar que vários artigos na literatura que estudaram caminhadas em algum contexto de desordem [56, 58, 66] usam simulação numérica combinada (ou não) com cálculos analíticos.

A Fig. 4.3 mostra como a probabilidade de escape varia numericamente no tempo para diferentes *qubits* iniciais em caminhadas com barreira absorvedora em diferentes posições $j = M$. Vemos que para todos os casos, obtemos uma probabilidade de escape satisfatoriamente estacionária para o tempo t após algumas dezenas de passos. Em particular, nos detalhes de cada gráfico da Fig. 4.3 vemos que o ΔP_E (%) que representa a diferença percentual entre a probabilidade de escape analítica ($t \rightarrow \infty$) e a numérica, é em torno de 0,05% para $M \leq 5$. No entanto, nos casos para $M = 20$ essa diferença percentual é

bem maior. Além do fato evidente que quanto mais longe a barreira está do caminhante, mais passos ela leva para atingir um regime estacionário (longa duração) em P_E , outro aspecto importante é que como não podemos simular uma barreira na posição $M \rightarrow \infty$, a comparação relativa nesse caso específico é feita entre o cálculo numérico para $M = 20$ e o resultado analítico para $M \rightarrow \infty$. Fizemos isso objetivando responder de maneira quantitativa a seguinte pergunta: quão longe a barreira deve estar da origem para dizermos numericamente que é comparável a $M \rightarrow \infty$ do modelo analítico? Numericamente vemos que para $M = 20$ essa diferença para os últimos dez passos é aproximadamente 1%.

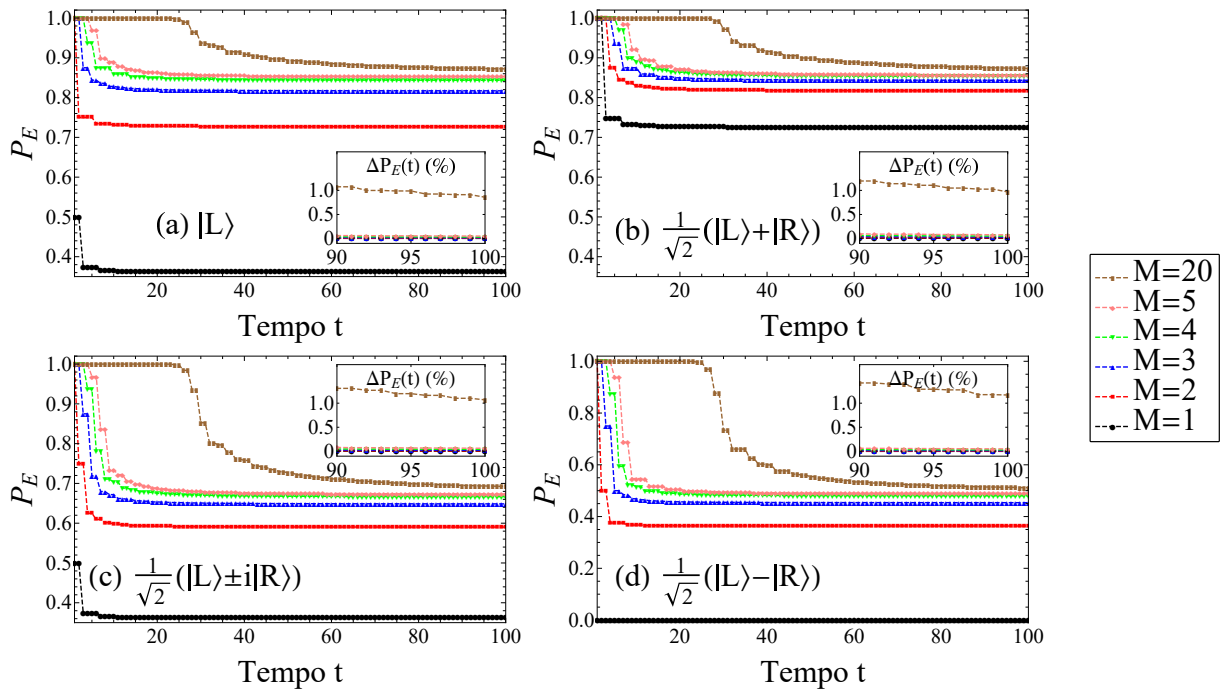


Figura 4.3: Probabilidade de escape para os seguintes *qubits*: (a) $|L\rangle$, (b) $\frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + |R\rangle)$, (c) $\frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle \pm i|R\rangle)$ e (d) $\frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle - |R\rangle)$ considerando diferentes posições da barreira absorvedora variando de $M = 1$ até 5 e $M = 20$ para uma caminhada Hadamard com 100 passos de tempo. Nos detalhes ΔP_E representa a diferença percentual entre os valores analítico e numérico para os dez últimos passos da CQ. Note que ΔP_E para $M = 20$ é comparado a $M \rightarrow \infty$ do modelo analítico.

Desta forma a comparação entre os resultados do modelo analítico com a simulação numérica respondem as seguintes perguntas: quantos passos de simulação numérica são necessários a fim de garantir que a probabilidade de escape P_E atinja um valor aproximadamente constante e comparável ao limite assintótico do modelo analítico? E, qual valor de $M > 0$ é numericamente suficiente para dizermos que a barreira está muito longe do caminhante, sendo comparável ao limite $M \rightarrow \infty$ do modelo analítico? A partir da Fig. 4.3, é possível afirmar que para $t \geq 80$ a probabilidade P_E atinge um regime estacionário e para $M = 20$, a princípio, para uma caminhada Hadamard, podemos assumir que a bar-

reira está suficientemente longe se admitirmos uma diferença percentual entre o modelo analítico e o cálculo numérico de aproximadamente 1% para os últimos dez passos de uma CQ de 100 passos de tempo. Por fim, restringindo nosso estudo numérico daqui em diante aos casos $M = 1, 2$ e 20 somente para os qubits $|\Psi_C\rangle = |L\rangle$ e $|\Psi_C\rangle = (|L\rangle + i|R\rangle)/\sqrt{2}$, acreditamos que essas escolhas² são suficientes para contemplarmos todos os aspectos físicos mais relevantes das caminhadas com barreira num contexto de desordem através de simulações numéricas.

4.3 Caminhadas quânticas desordenadas

É bem estabelecido na literatura que a CQ desordenada possui características dinâmicas radicalmente diferentes da CQ cuja moeda é fixa (constante) ao longo de toda caminhada [56, 58, 66]. Na CQ Hadamard observamos que a partícula exibe um comportamento balístico, que se reflete numa distribuição de probabilidade de duplo pico e variância proporcional ao quadrado do número de passos, $\sigma^2 \propto t^2$, ou seja, quadraticamente superior ao correspondente clássico. Por outro lado, em meio a uma situação de desordem dinâmica (DD), na qual uma moeda quântica é escolhida aleatoriamente³ em cada passo de tempo t e mantida fixa para as posições, vemos que o comportamento da partícula é difusivo, logo, a distribuição de probabilidade é gaussiana $P(j) \propto e^{-j^2/(2\sigma^2)}$ com variância variando linearmente com o número de passos, $\sigma^2 \propto t$, tal como na dinâmica de uma partícula clássica. Por outro lado, a introdução de desordem estática (DE) ou espacial, na qual a moeda é escolhida aleatoriamente em cada posição j e mantida fixa para todos os passos de tempo, vemos uma localização da partícula cuja distribuição de probabilidade segue $P(j) \propto e^{-|j|}$ e a variância tende a uma constante $\sigma^2 \propto \text{cte}$ ao longo do tempo.

Conforme visto no capítulo 2 deste trabalho, vamos considerar dois tipos específicos de desordens. No primeiro tipo de desordem com subíndice infinito (DD_∞ e DE_∞), a escolha da moeda quântica explora infinitas possibilidades de matrizes unitárias 2×2 do espaço $\text{SU}(2)$. Isso significa que a moeda é dada a partir de escolhas aleatórias independentes dos parâmetros ρ , θ e φ da moeda quântica (Eq. (2.13)). Cada parâmetro é escolhido a partir de uma distribuição uniforme contínua dentro de um intervalo determinado. Note por exemplo, que o parâmetro ρ que define a tendência da moeda, pode assumir valores

²Esses *qubits* fornecem numa CQ Hadamard respectivamente uma distribuição de probabilidade assimétrica favorecendo o sentido de escape da partícula (esquerda) e uma distribuição simétrica.

³A escolha da moeda a cada passo ou em cada posição são eventos probabilísticos independentes, ou seja, não há nenhum tipo de correlação entre duas escolhas seguidas de moedas quânticas.

de 0 a 1, assim como, os parâmetros de fase da moeda $\theta \in [0, 2\pi]$ e $\varphi \in [0, 2\pi]$ [7]. No segundo tipo de desordem com subíndice 2 (DD₂ e DE₂), a escolha da moeda é dada entre as moedas quânticas Hadamard e Fourier. Portanto, neste caso, o parâmetro ρ é fixo, uma vez que ambas as moedas são justas, e $\theta = \varphi$, tal que ambas as fases podem assumir os valores 0 ou $\pi/2$ que correspondem respectivamente a escolha de uma moeda Hadamard ou Fourier.

A fim de observarmos a transição da situação cuja moeda é fixa (caminhada ordenada) para a caminhada desordenada, podemos introduzir um parâmetro de controle δ cujo objetivo é restringir os intervalos de escolha de parâmetros nas desordens DD_∞ e DE_∞, considerando

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{1}{2} + \delta r_q \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right), \\ \theta &= \delta \pi r_\theta(-1, 1), \\ \varphi &= \delta \pi r_\varphi(-1, 1),\end{aligned}\tag{4.5}$$

ou ainda, mudar a probabilidade de sair as moedas Hadamard e Fourier nas desordens DD₂ e DE₂, tomando

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{1}{2}, \\ \theta &= \frac{\pi}{2} R \left[\frac{\delta}{2} + r_\theta \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) \right], \\ \varphi &= \theta,\end{aligned}\tag{4.6}$$

tal que $r_{\rho, \theta, \varphi}(r_i, r_f)$ são três números aleatórios escolhidos independentemente a partir de um intervalo contínuo de r_i até r_f , ou seja, $r_{\rho, \theta, \varphi} \in [r_i, r_f]$ e a função $R[x]$ arredonda o número real x para o inteiro mais próximo. Portanto, note que para os dois casos acima, quando $\delta = 0$ nas Eqs. (4.5) temos que $\rho = 1/2$ e $\theta = \varphi = 0$ (moeda Hadamard) e na Eq. (4.6), vemos que $\theta = \frac{\pi}{2} R[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}] = 0$, uma vez que nesse intervalo o inteiro mais próximo é sempre 0, logo $\theta = \varphi = 0$ resultando novamente numa caminhada Hadamard. É fácil então concluir que para $\delta = 0, 1$ na Eq. (4.5) os parâmetros ficam restritos a $\rho \in [0, 45; 0, 55]$, θ e $\varphi \in [-\frac{\pi}{10}, \frac{\pi}{10}]$, já para $\delta = 0, 5$, $q \in [0, 25; 0, 75]$, θ e $\varphi \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ e para $\delta = 1$, $q \in [0, 1]$, θ e $\varphi \in [-\pi, \pi]$, explorando todas as possibilidades de moedas do SU(2). Portanto, podemos dizer que $\delta = 0, 1, 0, 5$ e 1 restringem respectivamente em

10%, 50% e 100% as possibilidades de moedas do SU(2) em torno da moeda Hadamard⁴. Já nas Eqs. (4.6) vemos que o papel de δ é deslocar o intervalo do argumento da função arredondamento, de tal forma a favorecer mais uma moeda em detrimento da outra. Veja que para $\delta = 0, 1$, o intervalo da função de arredondamento é $[-0, 45; 0, 55]$. Portanto, só se o número escolhido for maior que 0, 50 resulta num arredondamento para 1 (moeda Fourier) e qualquer número menor que 0, 50 resulta em 0 (moeda Hadamard), resumindo: temos então 95% de chance de ter uma moeda Hadamard e somente 5% de obter uma Fourier. Para $\delta = 0, 5$, essas probabilidades são 75% para Hadamard e 25% para Fourier e para $\delta = 1$ as probabilidades de escolha são iguais, ou seja, 50% de chance para Hadamard e 50% para Fourier⁵.

A Fig. 4.4 mostra como as desordens dinâmica e estática influenciam nos perfis de distribuição de probabilidade $\langle P(j) \rangle$ e na dispersão ao longo do tempo $\langle \sigma(t) \rangle$ médias. Vale a pena mencionar que uma vez que cada CQ desordenada evolui dinamicamente por meio de uma escolha particular de moedas aleatórias no tempo ou na posição, cada caminhada leva a características dinâmicas ligeiramente diferentes uma das outras. Portanto, é necessário tirar uma média dos observáveis sobre várias caminhadas, a fim de termos curvas mais suaves, além de determinar o comportamento geral da dinâmica em função de um parâmetro δ específico. Feito essa ressalva, no geral vemos que conforme a desordem aumenta ($\delta \rightarrow 1$), é possível perceber que os picos de probabilidade nas extremidades longe da origem diminuem, ao mesmo tempo que acontece um maior acúmulo de probabilidade nas posições próximas a origem da caminhada. Portanto, como foi enfatizado no início dessa seção, essas mudanças podem ser entendidas como uma transição do comportamento balístico inerente a CQ para o comportamento difusivo na desordem dinâmica, assim como, para uma localização na desordem estática.

Em particular, vemos claramente na Fig. 4.4 em (a) e (c), que a medida que δ aumenta, existe uma transição de uma distribuição de probabilidade quântica para uma distribuição clássica (gaussiana) em ambos os tipos de desordem dinâmica. Entretanto é interessante notar que, mesmo no caso $\delta = 1$ em (c) DD₂, vemos que há ainda resquícios de características quânticas na dispersão média $\langle \sigma(t) \rangle$, que exhibe um comportamento

⁴Observe que propositalmente em todos os casos de desordem infinita, o meio dos intervalos dos parâmetros correspondem a moeda Hadamard.

⁵Note que em ambos os casos podemos dizer que quanto maior δ , maiores são as opções de moeda na desordem _{∞} e maiores são as chances de obter uma moeda Fourier na desordem₂ em meio a uma caminhada Hadamard. Podemos dizer que quanto maior δ , maior é o grau de desvio de uma caminhada Hadamard, ou ainda, de maneira informal, maior será o grau de desordem em ambos os casos.

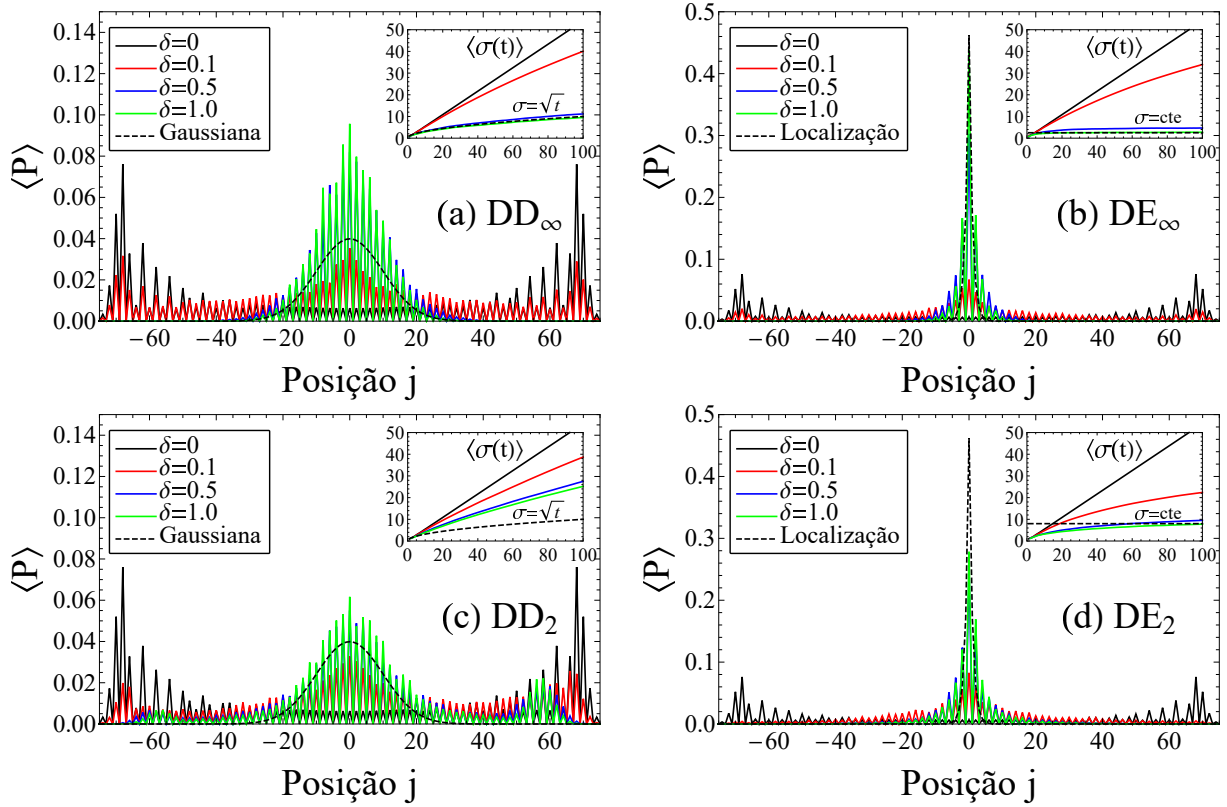


Figura 4.4: Distribuição de probabilidade $\langle P(j) \rangle$ após $t = 100$ passos de tempo e dispersão $\langle \sigma(t) \rangle$ médias sobre 100 caminhadas partindo do estado inicial $|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + i|R\rangle) \otimes |0\rangle$ com as seguintes desordens: (a) dinâmica DD $_{\infty}$, (b) estática DE $_{\infty}$, (c) dinâmica DD $_2$ e (d) estática DE $_2$. A desordem $_{\infty}$ possibilita a escolha de infinitas possibilidades de moedas quânticas dentro de um intervalo contínuo definido por δ tal que $\delta = 0$ corresponde a uma caminhada Hadamard, $\delta = 0,1$ e $\delta = 0,5$ restringem respectivamente em 10% e 50% as possibilidades de moeda, enquanto $\delta = 1$ permite a escolha de qualquer moeda do SU(2). Já a desordem $_2$ possibilita escolhas entre as moedas Hadamard e Fourier tal que a probabilidade de escolher uma ou outra é determinada pelo parâmetro δ tal que $\delta = 0$ resulta numa caminhada Hadamard, $\delta = 0,1$ e $\delta = 0,5$ correspondem respectivamente a 95% e 75% de chance de sair uma moeda Hadamard, enquanto que para $\delta = 1$ as moedas Hadamard e Fourier ocorrem com a mesma probabilidade. As curvas com linhas pontilhadas à esquerda correspondem a uma gaussiana $P(j) \propto e^{-j^2/(2\sigma^2)}$ e à direita correspondem a uma localização $P(j) \propto e^{-|j|}$ normalizadas segundo $\sum_j P(j) = 1$ com j variando de -100 até 100 .

intermediário entre o caso quântico $\sigma \propto t$ e clássico $\sigma \propto \sqrt{t}$, o que também se reflete, na distribuição de probabilidade $\langle P(j) \rangle$, uma vez que a distribuição ainda tem alguma probabilidade significativa longe da origem dada por picos secundários assimétricos em ambos os lados. Acontece que, uma vez que a caminhada Hadamard partindo do *qubit* $|\Psi_C\rangle = (|L\rangle + i|R\rangle)/\sqrt{2}$ leva a uma distribuição simétrica, podemos explicar essa diferença entre os picos nas extremidades se observarmos que numa caminhada Fourier, este mesmo *qubit* inicial leva a uma distribuição assimétrica à direita. Como no caso $\delta = 1$ temos a mesma chance de sair uma moeda Hadamard e Fourier, é compreensível essa diferença que, por outro lado, inexistente no caso (a) DD $_{\infty}$ no qual as opções de moedas são infinitas e na média levam a uma distribuição simétrica, já que a probabilidade de obtermos uma

distribuição enviesada à esquerda ou à direita é a mesma. Já nos casos, ilustrados na Fig. 4.4 em (b) e (d), vemos que, embora não haja visualmente muita diferença na localização, a dispersão tende a uma constante em (b) DE_∞ num tempo bem menor do que no caso (d) DE_2 , em outras palavras, a localização do estado quântico acontece mais rapidamente quando temos infinitas opções de moedas nas posições do que quando restringimos para somente duas possibilidades.

Finalmente, ao admitirmos que no comportamento aqui apresentado na Fig. 4.4 quanto mais rapidamente a CQ perder suas características dinâmicas propriamente quânticas (comportamento balístico e dispersão linear), maior é o nível de desordem representado por $\delta \rightarrow 1$, podemos concluir que o grau de desordem introduzido ao ter muitas opções de moedas (desordem_∞) é maior do que aquele introduzido quando se tem somente duas opções de moeda (desordem_2) pelo menos no que tange as propriedades dinâmicas⁶.

4.4 Probabilidade de escape para caminhadas desordenadas

Vimos na seção anterior que a introdução de desordem na CQ afeta profundamente suas características dinâmicas. Enquanto a desordem ao longo do tempo (dinâmica) leva a um comportamento difusivo, no qual a partícula se comporta como uma partícula clássica, na desordem espacial (estática) o estado fica totalmente localizado em torno da posição de origem da caminhada. A partir desses comportamentos dinâmicos bem distintos, podemos estabelecer duas hipóteses possíveis para serem testadas sobre o comportamento da probabilidade de escape para $t \rightarrow \infty$ de uma partícula quântica numa CQ desordenada:

- * Numa CQ desordenada dinamicamente, a partícula quântica é totalmente absorvida pela barreira, uma vez que seu comportamento dinâmico corresponde ao de uma partícula clássica.
- * Numa CQ desordenada estaticamente, a partícula é absorvida somente se a barreira estiver numa posição M suficientemente próxima da partícula, de tal forma que as amplitudes de probabilidade cheguem à barreira antes da partícula estar localizada.

Para testarmos essas hipóteses, devemos lembrar que na Fig. 4.3 mostramos que numa CQ, a probabilidade de escape tende a um regime estacionário ou de longa duração

⁶Essa conclusão aparentemente óbvia quando se trata do comportamento dinâmico, não pode ser estendida para o emaranhamento entre o *qubit* e o estado de posição introduzido pela translação condicional em tais caminhadas. Em outras palavras, curiosamente uma DD_2 leva a emaranhamento máximo mais rapidamente do que na DD_∞ ! Para mais detalhes veja as Refs. [56, 58, 66].

para $t \geq 80$. No contexto de uma CQ desordenada, entendemos que nesse regime a probabilidade de escape média da partícula $\langle P_E \rangle$ não varia mais abruptamente como nos primeiros passos, ou seja, possui derivada $d\langle P_E \rangle/dt$ aproximadamente contínua e suave, além de seguir uma lei de potência do tipo $\langle P_E \rangle \propto t^{-n}$, semelhante ao observado na CQ Hadamard.

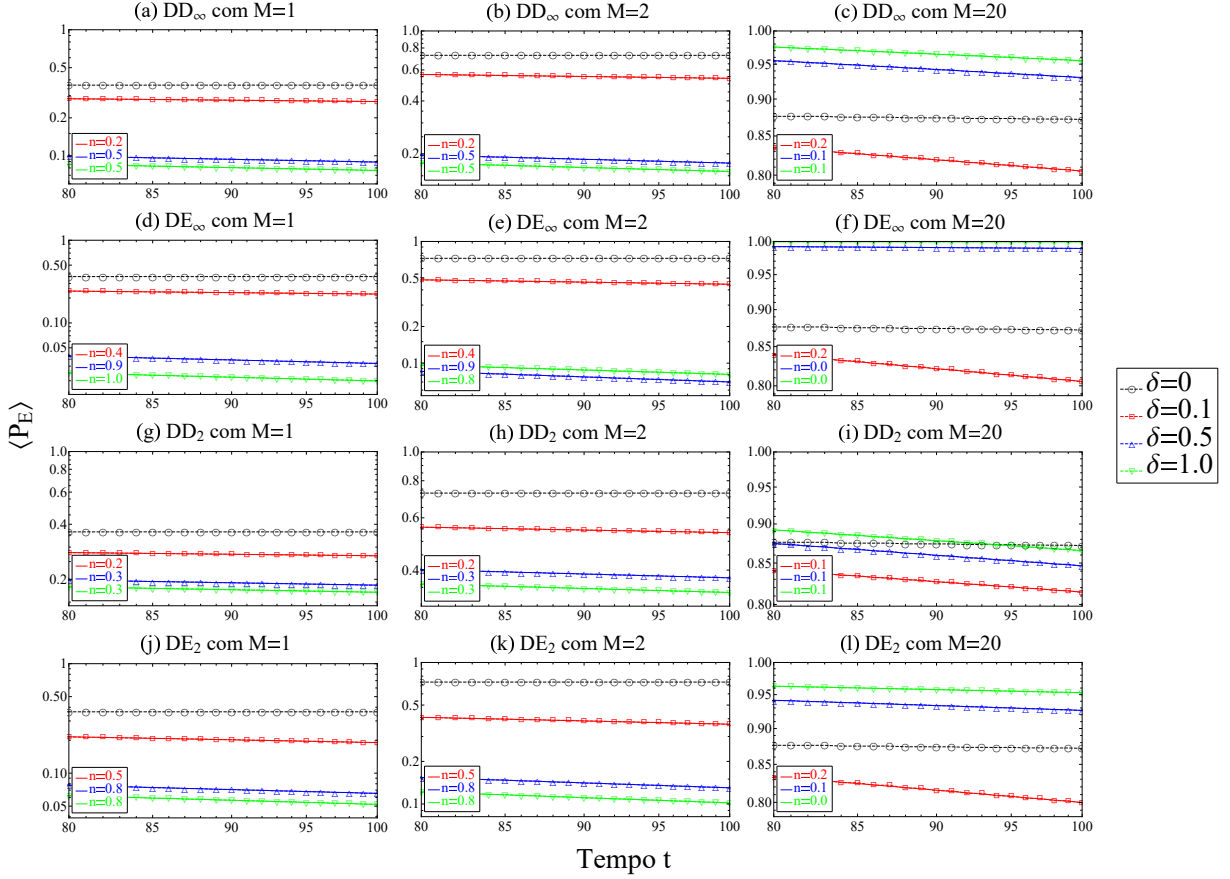


Figura 4.5: Probabilidade de escape $\langle P_E(t) \rangle$ média sobre 1000 caminhadas ($t = 80$ até 100) partindo do estado inicial $|\Psi(0)\rangle = |L\rangle \otimes |0\rangle$ com as seguintes desordens: (a)-(c) DD_∞ , (d)-(f) DE_∞ , (g)-(i) DD_2 e (j)-(l) DE_2 , tal que $\delta = 0$ (caminhada Hadamard), 0, 1, 0, 5 e 1. A primeira, segunda e terceira colunas referem-se as situações cujas barreiras absorvedoras estão posicionadas em $M = 1, 2$ e 20 respectivamente. Nas legendas internas dos gráficos, temos os expoentes n de $\langle P_E(t) \rangle \propto t^{-n}$ obtidos via ajuste cujas cores correspondem as respectivas curvas. Note que $n = 0$ para a caminhada Hadamard (em preto).

Além disso, é necessário estabelecer dentro do contexto de desordem, qual posição M da barreira é suficientemente próxima (ou não) da partícula na origem. Ao olharmos na Fig. 4.4 os casos de desordem estática, (b) DE_∞ e (d) DE_2 , vemos que quando $\delta = 0, 5$ ou 1, grosseiramente falando, σ é aproximadamente constante e $\sigma < 10$ para $t = 100$. Sabendo que $P(-2\sigma < j < 2\sigma) \approx 0,95$ (veja Fig. 1.3), é possível especular que uma barreira posicionada em $M = 20$ nesses casos, é suficientemente distante para que a partícula localize antes de alcançá-la e escape à absorção, ou ainda, caso não esteja longe

o suficiente, ela seja absorvida bem lentamente à uma taxa muito baixa⁷.

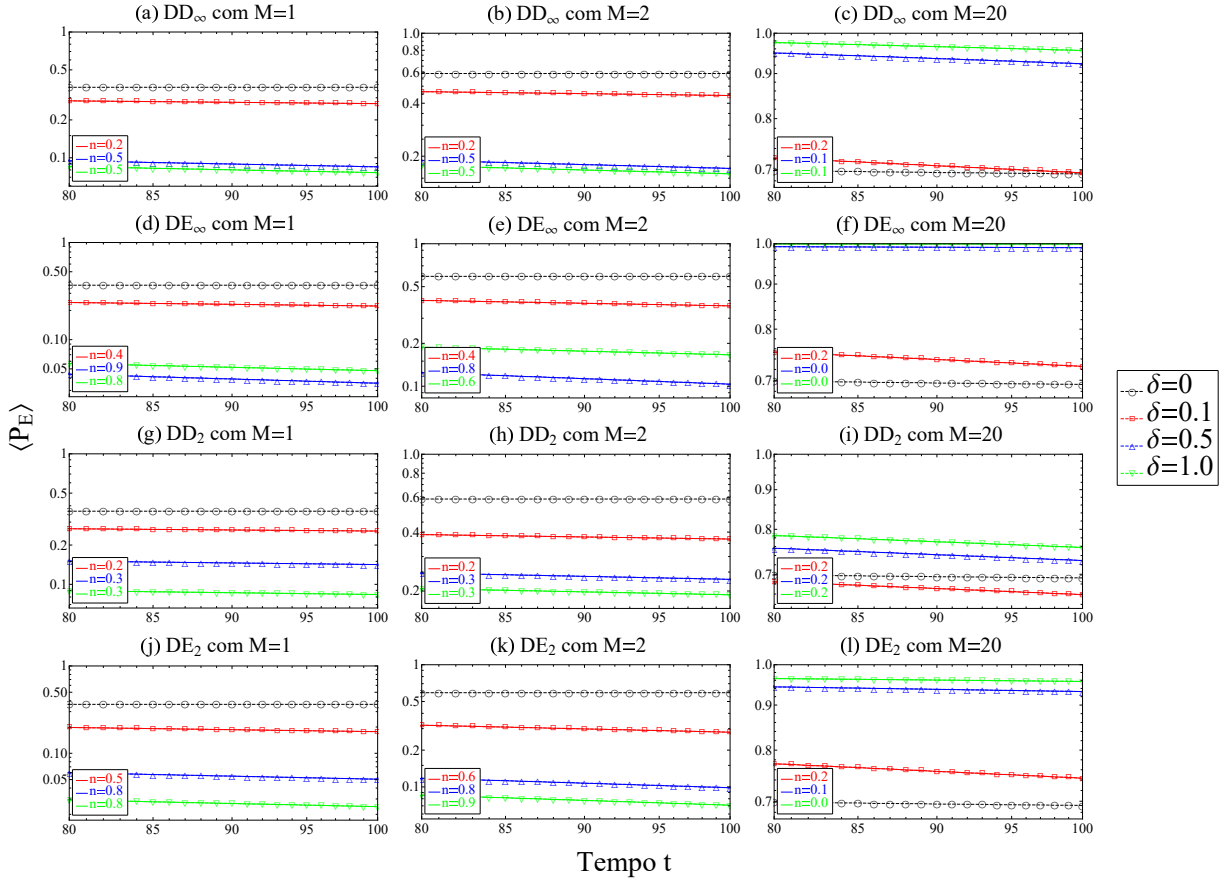


Figura 4.6: Probabilidade de escape $\langle P_E(t) \rangle$ média sobre 1000 caminhadas ($t = 80$ até 100) cujo estado inicial é $|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + i|R\rangle) \otimes |0\rangle$ com as seguintes desordens: (a)-(c) DD_∞ , (d)-(f) DE_∞ , (g)-(i) DD_2 e (j)-(l) DE_2 , para $\delta = 0$ (caminhada Hadamard), $0, 1, 0, 5$ e 1 . A primeira, segunda e terceira colunas referem-se as situações cujas barreiras absorvedoras estão em $M = 1, 2$ e 20 respectivamente. Nas legendas internas dos gráficos, temos os expoentes n de $\langle P_E(t) \rangle \propto t^{-n}$ obtidos via ajuste cujas cores correspondem as respectivas curvas ($n = 0$ para a caminhada Hadamard na cor preta).

As Figs. 4.5 e 4.6 mostram a probabilidade média de escape $\langle P_E(t) \rangle$ de CQ desordenadas cuja barreira está posicionada em três posições diferentes ($M = 1, 2$ e 20). Repare que o *qubit* inicial da CQ na Fig. 4.5 é $|\Psi_C\rangle = |L\rangle$, enquanto que na Fig. 4.6, $|\Psi_C\rangle = (|L\rangle + i|R\rangle)/\sqrt{2}$. Observe que para fins de ajuste ao modelo $\langle P_E(t) \rangle \propto t^{-n}$, assumimos somente os últimos passos de cada CQ variando de $t = 80$ até 100 , uma vez que neste intervalo podemos assumir com alguma confiança que estamos no regime estacionário de $\langle P_E(t) \rangle$ conforme enfatizado anteriormente. Nesse regime, podemos extrapolar um comportamento assintótico que leva $\langle P_E(t \rightarrow \infty) \rangle$ para um valor constante entre 0 e 1 . Portanto, em escala logarítmica temos comportamentos lineares cujos coeficientes angulares correspondem à $-n$ do modelo. Logo, temos que para $n = 0$ há uma proba-

⁷Podemos supor isso ao considerarmos que a primeira amplitude do *ket* $|R\rangle$ típica que chega à posição $j = 20$ é $R(20, 20) = 2^{-10}$ cuja probabilidade média resulta em $\langle P(20, 20) \rangle \approx 10^{-6}$.

bilidade finita da partícula escapar a barreira, por outro lado, para $n > 0$, a partícula é totalmente absorvida tal que para $0 > n > 1$ a taxa de absorção é menor do que no caso clássico ($n = 1$). Portanto, uma análise cuidadosa das Figs. 4.5 e 4.6 nos revela que quando a barreira está muito próxima do caminhante quântico ($M = 1$ e 2), no geral, ele é totalmente absorvido pela barreira absorvedora em taxas cada vez maiores a medida que $\delta \rightarrow 1$, sendo muito semelhante ao caso clássico em alguns casos. No entanto, quando afastamos a barreira até $M = 20$, vemos que as taxas de absorção diminuem significativamente, ao ponto que em alguns casos de desordem estática, a partícula escapa parcialmente $\langle P_E \rangle < 1$ ou totalmente da barreira $\langle P_E \rangle = 1$, como nos casos DE_∞ com $\delta = 1$ para ambos os *qubits*. A partir dos resultados das simulações numéricas aqui apresentados, podemos concluir então que ambas as hipóteses iniciais desse estudo foram corroboradas.

Finalmente, algumas considerações importantes sobre as limitações das simulações numéricas devem ser feitas. Primeiro, as CQ desordenadas não foram evoluídas dinamicamente por passos de tempo suficientes a fim de checarmos se as probabilidades de escape $\langle P_E(t \gg 1) \rangle$ realmente evoluem até serem numericamente nulas. Portanto, para que a consideração do regime estacionário e a consequentemente extrapolação para o comportamento assintótico sejam mais robustas, devemos judiciosamente em vários dos casos mostrados, realizar simulações com mais passos de tempo. Segundo, observe que os valores de n tem somente um ou dois algarismos significativos. Para incrementarmos a precisão desses valores, é necessário tomar uma média sobre um número de caminhadas maior do que somente 1000, como foi feito. Terceiro, não foi feita uma estatística apropriada sobre os valores de n , o qual foi obtido diretamente a partir da curva de $\langle P_E(t) \rangle$ para $t \in [80, 100]$. A fim de analisarmos estatisticamente n , o ideal seria que para cada CQ desordenada extraíssemos o valor de n a partir do seu ajuste, e ao final de todas as caminhadas, tomássemos a média dos diferentes valores de n e seu respectivo desvio padrão. Observe que todos esses refinamentos para melhorar os cálculos demandam um tempo computacional consideravelmente maior.

Conclusões

A proposta inicial de investigação deste trabalho foi analisar o comportamento da probabilidade de escape P_E em uma CQ unidimensional discreta Hadamard e em diferentes contextos de desordem em relação aos seguintes fatores: posição M da barreira absorvedora, estado interno do caminhante quântico $|\Psi_C\rangle$ (*qubit*) e passos de tempo necessários para alcançar em P_E um regime estacionário. Foi utilizado um modelo analítico para o cálculo da probabilidade de escape em um passeio Hadamard a partir de um *qubit* arbitrário. Em seguida, simulações numéricas de caminhadas foram realizadas com a intenção de verificar a validade dos resultados obtidos analiticamente, bem como, simular caminhadas desordenadas com barreiras absorvedoras, situação inviável via método analítico. Foram estudados numericamente caminhadas desordenadas no tempo (desordem dinâmica - DD) e ao longo das posições (desordem estática - DE) em dois tipos distintos de desordem, ambas controladas pelo parâmetro δ . Esses dois modelos de desordem consistem respectivamente em escolher aleatoriamente moedas quânticas a partir de todo espaço $SU(2)$ (DD_∞ e DE_∞) onde δ define o tamanho dos intervalos dos parâmetros da moeda e escolher aleatoriamente entre as moedas Hadamard e Fourier (DD_2 e DE_2) tal que δ define a porcentagem da moeda Hadamard em detrimento da Fourier.

Considerando primeiramente uma caminhada Hadamard, observamos que quando a barreira absorvedora ocupa a posição $M = 1$, vizinha à origem do passeio, o comportamento da probabilidade de escape é significativamente diferente dos demais casos, uma vez que nessa situação as caminhadas a partir dos estados internos iniciais $|\Psi_C\rangle = |L\rangle$ e $|R\rangle$ levam ao mesmo valor de P_E , enquanto uma CQ a partir do *qubit* $|\Psi_C\rangle = (|L\rangle - |R\rangle)/\sqrt{2}$ evolui para uma probabilidade de escape nula. Por outro lado, se a barreira estiver numa posição $M > 1$, observamos diferentes probabilidades de escape para os *qubits* $|\Psi_C\rangle = |L\rangle$

e $|R\rangle$. Analisando a superfície P_E em função do *qubit* inicial para diferentes posições M da barreira, foi possível perceber ainda que, quanto mais afastada a barreira está da posição inicial do caminhante, maior é a probabilidade da partícula não ser absorvida e escapar para $j \rightarrow -\infty$ em sentido oposto à barreira. Da mesma forma, obtemos também que, para a caminhada Hadamard, iniciando em cinco estados iniciais com diferentes posições M da barreira, a probabilidade de escape tende a um regime estacionário após algumas dezenas de passos. Através da diferença percentual entre a probabilidade de escape analítica ($t \rightarrow \infty$) e a numérica, que foi de aproximadamente 1% para $M \leq 20$ em $t = 100$, determinamos a partir de simulações com um número finito de passos, o quão próximo P_E está do limite assintótico $\lim_{t \rightarrow \infty} P_E$ do modelo analítico para uma CQ Hadamard. Veja que, enquanto a abordagem numérica é feita no espaço de posições através de cálculos recursivos, a abordagem analítica é feita a partir dos autoestados da CQ no espaço de momento e tomando analiticamente o limite assintótico de P_E . Portanto, chegamos a conclusão que as simulações numéricas da CQ Hadamard corroboraram com os resultados obtidos analiticamente.

Após essa confrontação do modelo analítico com cálculos numéricos, concluímos que as curvas de probabilidade de escape P_E para $M > 1$ são qualitativamente muito parecidas, de modo que podemos reduzir toda a física relevante do problema ao considerarmos somente $M = 1, 2$ e 20 e iniciar a caminhada a partir de apenas dois *qubits*. Escolhemos então $|\Psi_C\rangle = |L\rangle$ que leva a uma distribuição de probabilidade $P(j)$ assimétrica para a esquerda e $|\Psi_C\rangle = (|L\rangle + i|R\rangle)/\sqrt{2}$ que evolui para uma distribuição simétrica numa caminhada Hadamard. Além disso, extrapolamos o regime estacionário observado na P_E para $t \geq 80$ numa CQ Hadamard, para a CQ desordenada considerando nesse caso, uma média $\langle P_E \rangle$ sobre várias caminhadas desordenadas. A partir de um ajuste considerando $\langle P_E \rangle \propto t^{-n}$ obtivemos o expoente n das diferentes caminhadas desordenadas, que permitiu a análise da taxa de absorção do caminhante. O comportamento de $\langle P_E \rangle$ nos mostra que quando a barreira está muito próxima do caminhante quântico ($M = 1$ e 2), no geral, ele é totalmente absorvido pela barreira absorvedora em taxas cada vez maiores à medida que o nível de desordem aumenta ($\delta \rightarrow 1$), sendo muito semelhantes ao caso clássico em alguns casos. Quando a barreira está bem afastada da origem, ou seja, $M = 20$, as taxas de absorção diminuem significativamente, ao ponto que em alguns casos de desordem estática a partícula escapa parcialmente ($\langle P_E \rangle < 1$) ou totalmente da barreira ($\langle P_E \rangle = 1$).

Por último, considerando todos os resultados alcançados, observamos que podemos refinar os cálculos numéricos, considerando caminhadas com mais passos de tempo e uma média sobre mais caminhadas desordenadas, bem como realizar um estudo mais aprofundado do tipo de localização presente na desordem estática.

Bibliografia

- ¹A. R. Rocha, A. M. P. Resende e A. T. C. Júnior, «Desenvolvimento de um Simulador de Algoritmos Quânticos Utilizando a Computação Convencional», tese de mestrado (Universidade Estadual de Campinas, 2003).
- ²M. A. Nielsen e I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, 2010).
- ³O. d. S. Conceição Jr, *Computação Quântica - Algoritmos Quânticos*, Trabalho de conclusão de Curso (TCC), Cruz das Almas/BA, 2016.
- ⁴S. E. Venegas-Andraca, «Quantum walks: a comprehensive review», *Quantum Information Processing* **11**, 1015–1106 (2012).
- ⁵I. S. Oliveira e R. S. Sarthour, «Computação Quântica e Informação Quântica», V Escola do Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (2004).
- ⁶W. J. N. d. Silva, *Uma Introdução à Computação Quântica*, Trabalho de conclusão de Curso (TCC), São Paulo, 2018.
- ⁷R. Vieira, «Emaranhamento em Caminhadas Quânticas Desordenadas», tese de mestrado (Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville/SC, 2014).
- ⁸P. Benioff, «The computer as a physical system: a microscopic quantum mechanical Hamiltonian model of computers as represented by Turing Machines», *Journal of Statistical Physics* **22**, 563–591 (1980).
- ⁹R. P. Feynman, «Simulating physics with computers», *International Journal of Theoretical Physics*, 467–488 (1982).
- ¹⁰Y. Aharonov, L. Davidovich e N. Zagury, «Quantum random walks», *Physical Review A* **48**, 1687 (1993).
- ¹¹E. Farhi e S. Gutmann, «Quantum computation and decision trees», *Physical Review A* **58**, 915 (1998).
- ¹²J. Kempe, «Quantum random walks: an introductory overview», *Contemporary Physics* **44**, 307–327 (2003).
- ¹³J. R. Busemeyer, Z. Wang e J. T. Townsend, «Quantum dynamics of human decision-making», *Journal of Mathematical Psychology* **50**, 220–241 (2006).
- ¹⁴G. S. Engel et al., «Evidence for wavelike energy transfer through quantum coherence in photosynthetic systems», *Nature* **446**, 782–786 (2007).
- ¹⁵A. M. Childs, «Universal computation by quantum walk», *Physical review letters* **102**, 180501 (2009).

- ¹⁶N. B. Lovett et al., «Universal quantum computation using the discrete-time quantum walk», *Physical Review A* **81**, 042330 (2010).
- ¹⁷J. Wang e K. Manouchehri, *Physical implementation of quantum walks* (Springer, 2013).
- ¹⁸A. C. Orthey Jr, «Caminhadas Quânticas a partir de Estados Deslocalizados», tese de mestrado (Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville/SC, 2018).
- ¹⁹P. J. d. L. Barbosa, «Caminhadas Quânticas com Defeitos Fourier Simétricos», tese de mestrado (Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville/SC, 2022).
- ²⁰C. M. Maciel, «Caminhadas Quânticas de Tempo Contínuo: um tratamento na rede dendrímero modificado», tese de mestrado (Universidade Federal do Amazonas, Manaus/AM, 2018).
- ²¹K. Pearson, «The problem of the random walk», *Nature* **72**, 295 (1905).
- ²²A. M. d. Silva, «Localização e Emaranhamento em Caminhadas Quânticas com Defeito de Fase», tese de mestrado (Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville/SC, 2020).
- ²³R. C. B. d. Silva, «Simulação de uma Caminhada Quântica para Simetrias Bosônica e Fermiônica em Redes Desordenadas», tese de mestrado (Universidade Federal Rural de Pernambuco, Recife/PE, 2019).
- ²⁴R. Portugal, *Quantum Walks and Search Algorithms* (Springer, 2018).
- ²⁵D. Ceperley e B. Alder, «Quantum monte carlo», *Science* **231** (1986).
- ²⁶C. Anteneodo e W. Morgado, «Critical scaling in standard biased random walks», *Phys. Rev. Lett.* **99**, 180602 (2007).
- ²⁷B. A. Berg, «Locating global minima in optimization problems by a random-cost approach», *Nature* **361**, 708–710 (1993).
- ²⁸J. Schöll e E. Schöll-Paschinger, «Classification by restricted random walks», *Pattern Recognition* **36**, 1279–1290 (2003).
- ²⁹H. C. Berg, *Random walks in biology* (Princeton University Press, 1993).
- ³⁰P.-G. De Gennes, *Scaling concepts in polymer physics* (Cornell university press, 1979).
- ³¹I. Stewart, «Mathematics: Where drunkards hang out», *Nature* **413**, 686–687 (2001).
- ³²P. Krapivsky e S. Redner, «Random walk with shrinking steps», *American Journal of Physics* **72**, 591–598 (2004).
- ³³S. d. S. V. Santos et al., «Caminhadas Quânticas em Redes Unidimensionais Não-Homogêneas», (2018).
- ³⁴H. S. Ghizoni, «Caminhadas Quânticas Troianas», tese de mestrado (Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville/SC, 2019).
- ³⁵A. C. Orthey Jr e E. P. Amorim, «Assumptotic entanglement in quantum walks from delocalized initial states», 224 (2017).
- ³⁶J. Muelaner, *Standard Deviation Diagram*, Disponível em: <https://www.muelaner.com/wp-content/uploads/2013/07/Standard_deviat_diagram.png>.
- ³⁷A. A. Pedrosa, *A Tábua de Galton como Ferramenta para Ensino de Fenômenos Probabilísticos*, Trabalho de conclusão de Curso (TCC), Caruaru/PE, 2020.

- ³⁸L. Sansoni, *Integrated devices for quantum information with polarization encoded qubits* (Springer, 2014).
- ³⁹F. Marquezino e R. Portugal, «QWalk: Simulador de Caminhadas Quânticas», Laboratório Nacional de Computação Científica LNCC.
- ⁴⁰V. M. Kendon, «A random walk approach to quantum algorithms», *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **364**, 3407–3422 (2006).
- ⁴¹N. Konno, «Quantum random walks in one dimension», *Quantum Information Processing* **1**, 345–354 (2002).
- ⁴²A. Ambainis et al., «One-dimensional quantum walks», In proceedings of the 33th ACM Symposium on The Theory of Computation, 60–69 (2001).
- ⁴³J. P. Engster, «Transferência de estado em grafos via caminhadas quânticas contínuas no tempo», tese de mestrado (Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville/SC, 2021).
- ⁴⁴T. F. Ricci, F. Ostermann e S. D. Prado, «O tratamento clássico do interferômetro de Mach-Zehnder: uma releitura mais moderna do experimento da fenda dupla na introdução da física quântica», *Revista Brasileira de Ensino de Física* **29**, 79–88 (2007).
- ⁴⁵F. Ostermann e S. D. Prado, «Interpretações da mecânica quântica em um interferômetro virtual de Mach-Zehnder», *Revista Brasileira de Ensino de Física* **27**, 193–203 (2005).
- ⁴⁶D. Bouwmeester et al., «Optical galton board», *Physical Review A* **61**, 013410 (1999).
- ⁴⁷E. Bach et al., «One-dimensional Quantum Walks with Absorbing Boundaries», arXiv preprint arXiv:quant-ph/0207008 v3 **3** (2006).
- ⁴⁸G. G. Rigolin, «Estados Quânticos Emaranhados», Tese (Universidade Estadual de Campinas, Campinas/SP, 2005).
- ⁴⁹L. M. Carvalho e C. S. Costa, *Representação de um bit quântico na esfera de Bloch - visualização em Maple*, Monografia, 2005.
- ⁵⁰G. Abal et al., «Quantum walk on the line: Entanglement and nonlocal initial conditions», *Physical Review A* **73**, 042302 (2006).
- ⁵¹L. M. Carvalho, C. Lavor e V. S. Motta, «Caracterização Matemática e Visualização da Esfera de Bloch: ferramentas para a computação quântica», *Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional* **8**, 351–360 (2007).
- ⁵²P. R. N. Falcão, «Dinâmica do pacote de ondas em caminhadas quânticas discretas com três estados», tese de mestrado (Universidade Federal de Alagoas - UFAL, 2021).
- ⁵³F. Green, «Review of quantum walks and search algorithms by Renato Portugal», *ACM SIGACT News* (2017).
- ⁵⁴A. S. M. d. Castro e A. Drinko, *Estrutura do grupo $SU(2)$ em sistemas discretos*, XXV Encontro Anual de Iniciação Científica - EAIC, Disponível em: <http://apps.uepg.br/prosp/pesquisa/eaic/public/storage/uploads/2016/08442089900/2016-09-20_12-12-22.pdf>, 2016.
- ⁵⁵A. Nayak e A. Vishwanath, «Quantum walk on the line», arXiv preprint quant-ph/0010117 (2000).

- ⁵⁶R. Vieira, E. P. Amorim e G. Rigolin, «Entangling power of disordered quantum walks», *Physical Review A* **89**, 042307 (2014).
- ⁵⁷L. I. d. S. Teles, «Localização em caminhadas quânticas com um único defeito de rede», (2021).
- ⁵⁸R. Vieira, E. P. Amorim e G. Rigolin, «Dynamically disordered quantum walk as a maximal entanglement generator», *Physical review letters* **111**, 180503 (2013).
- ⁵⁹E. Bach et al., «One-dimensional quantum walks with absorbing boundaries», *Journal of Computer and System Sciences* **69**, 562–592 (2004).
- ⁶⁰P. Kuklinski e M. Kon, «Absorption probabilities of quantum walks», *Quantum Information Processing* **17**, 1–34 (2018).
- ⁶¹T. Yamasaki, H. Kobayashi e H. Imai, «Analysis of absorbing times of quantum walks», *Physical Review A* **68**, 012302 (2003).
- ⁶²R. da Rocha Jr., «Sobre spinors e a estrutura do espaço tempo», *Revista Physicae* **2** (2001).
- ⁶³J. J. Ximenes, «Caminhadas quânticas em tempo discreto em rede de pequeno mundo», tese de mestrado (Universidade Federal do Sergipe, São Cristóvão/SE, 2020).
- ⁶⁴D. A. Meyer, «Quantum mechanics of lattice gas automata: One-particle plane waves and potentials», *Physical Review E* **55**, 5261 (1997).
- ⁶⁵F. Wang et al., «Quantum Walk with One Variable Absorbing Boundary», *Physics Letters A*, 65–69 (2017).
- ⁶⁶A. C. Orthey e E. P. Amorim, «Weak disorder enhancing the production of entanglement in quantum walks», *Brazilian Journal of Physics* **49**, 595–604 (2019).