

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE PONTA GROSSA  
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS  
PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM CIÊNCIAS  
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: FÍSICA

**SANDRO DA SILVA VANZ SANTOS**

**CAMINHADAS QUÂNTICAS EM REDES  
UNIDIMENSIONAIS NÃO-HOMOGÊNEAS**

Ponta Grossa

2018

**SANDRO DA SILVA VANZ SANTOS**

**CAMINHADAS QUÂNTICAS EM REDES  
UNIDIMENSIONAIS NÃO-HOMOGÊNEAS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciências, com área de concentração em Física, da Universidade Estadual de Ponta Grossa, como requisito parcial para obtenção do título de mestre em Ciências/Física.

Orientador: Prof. Dr. Fabiano Manoel de Andrade

Ponta Grossa

2018

**Ficha Catalográfica**  
**Elaborada pelo Setor de Tratamento da Informação BICEN/UEPG**

S237 Santos, Sandro da Silva Vanz  
Caminhadas quânticas em redes  
unidimensionais não-homogêneas/ Sandro da  
Silva Vanz Santos. Ponta Grossa, 2018.  
65f.

Dissertação (Mestrado em Ciências -  
Área de Concentração: Física),  
Universidade Estadual de Ponta Grossa.  
Orientador: Prof. Dr. Fabiano Manoel de  
Andrade.

1.Espalhamento. 2.Moeda quântica.  
3.Potenciais. I.Andrade, Fabiano Manoel  
de. II. Universidade Estadual de Ponta  
Grossa. Mestrado em Ciências. III. T.

CDD: 530.12

## TERMO DE APROVAÇÃO

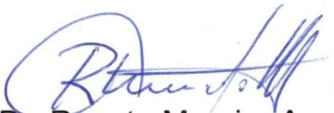
**SANDRO DA SILVA VANZ SANTOS**

**“CAMINHADAS QUÂNTICAS EM REDES UNIDIMENSIONAIS NÃO-HOMOGÊNEAS”.**

Dissertação aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre no Programa de Pós-Graduação em Ciências - Física da Universidade Estadual de Ponta Grossa, pela seguinte banca examinadora.

Orientador:

  
Prof. Dr. Fabiano Manoel de Andrade  
Departamento de Matemática - UEPG/PR.

  
Prof. Dr. Renato Moreira Angelo  
Departamento de Física - UFPR.

  
Prof. José Danilo Szezech Junior  
Departamento de Matemática - UEPG/PR.

**Ponta Grossa, 02 de abril de 2018.**

# Resumo

Santos, Sandro S. V. CAMINHADAS QUÂNTICAS EM REDES UNIDIMENSIONAIS NÃO-HOMOGÊNEAS. 2018. 63p. Dissertação (Mestrado em Ciências-Física) - Universidade Estadual de Ponta Grossa. Ponta Grossa, 2018

Nessa dissertação apresentamos uma análise da evolução das caminhadas quânticas discretas unidimensionais usando o método de caminhada quântica de espalhamento. Esse fenômeno ocorre quando uma partícula com uma certa quantidade de energia  $E$ , se choca com barreiras de potenciais do tipo delta, com intensidades que variam ao longo do perfil da rede. Em paralelo, também pudemos comprovar a equivalência entre os modelos de caminhada quântica com moeda e caminhada quântica de espalhamento. No método de caminhada quântica de espalhamento, o qual é baseado em uma analogia interferométrica, ocorre um processo de espalhamento em cada vértice de um grafo unidimensional. Na literatura, temos estudos que mostram o comportamento da partícula em um sistema em que a intensidade do potencial delta é constante ao longo de um grafo unidimensional, mas para a nossa proposta, avaliamos o comportamento da caminhada quântica de espalhamento onde a intensidade desse mesmo potencial varia ao longo da rede, conforme três funções matemáticas: seno, cosseno e aritmética modular. Com o método de espalhamento, verificamos também sua equivalência perante o modelo de caminhada quântica com moeda, ao reproduzir resultados referentes a trabalhos já publicados, onde a configuração do sistema é definida pelo uso de moedas quânticas não-uniformes. Como resultado, obtivemos a representação gráfica do modelo de caminhadas quântica de espalhamento para diferentes perfis de redes, o gráfico de probabilidades e o desvio padrão das caminhadas quânticas, sendo o perfil cosseno obtendo o maior desvio padrão e também pudemos verificamos sua equivalência com o modelo das caminhadas quânticas com moedas.

**Palavras Chaves:** Espalhamento, Moeda Quântica, Potenciais.

# Abstract

In this work we present an analysis of the evolution of the discrete quantum walks using the quantum walk scattering method, which occurs when a particle with a certain amount of energy  $E$ , collides with  $\delta$ -type potentials, with intensities that vary along the network profile. In parallel, we could also verify the equivalence between the quantum walk with coin and quantum walk models. In the quantum walk scattering method, which is based on an interferometric analogy, a scattering process occurs at each vertex of a one-dimensional graph. In the literature, we have studies that show the behavior of the particle in a system whose intensity of the  $\delta$  potentials are constant along a unidimensional graph, but in our proposal, we evaluated the behavior of the scattering quantum walk where the intensity of the same potential varies according to three mathematical functions: sine, cosine and modular arithmetic. With the scattering method, we also verified its equivalence to the coin quantum walk model, when reproducing results referring to works already published, where the configuration of the system is defined by the use of non-uniform quantum coins. As a result, we obtained the graphical representation of the spreading pattern for different network profiles, the probability graph and the standard deviation of the quantum walks being the cosine profile obtaining the highest standard deviation and verified its equivalence with the coin quantum walk model.

Keywords: Scattering, Quantum Coin, Potentials.

# Lista de Figuras

2.1	Representação de uma rede onde ocorre a caminhada aleatória clássica. Nela, o caminhante translada entre os vértices a passos de comprimento $l$ condicionadas ao resultado do lançamento de uma moeda não viciada. Fonte: O autor. . . . .	16
2.2	Gráfico da distribuição de probabilidade das caminhadas aleatórias clássicas após uma caminhada de 100 passos, onde $p = q = 0.5$ . Como é possível observar, a maior probabilidade de encontrar a partícula situa-se na origem. Fonte: O autor. . . . .	18
2.3	Gráficos de dispersão de uma caminhada aleatória clássica após um caminhante transladar 100 passos. Fonte: O autor. . . . .	19
3.1	Representação esquemática de onde ocorre uma caminhada quântica sob um grafo unidimensional em uma rede infinita. O distância entre dois vértices é representado por $\Delta j$ . Fonte: Adaptado de [1]. . . . .	23
3.2	Representação da caminhada quântica com o uso de uma moeda <i>Hadamard</i> em um passo. Em (a), inicia-se uma caminhada em um tempo $t$ , onde o estado da partícula é para à esquerda ou para à direita. Após a transformação unitária com o uso de um operador Hadamard, na Figura (b), mostramos que a partícula encontra-se em uma superposição de estados com amplitudes iguais em módulo. Após isso, em (c), ocorre um deslocamento condicional ao estado de moeda. Fonte: Adaptado de [2]. . .	27
3.3	Representação gráfica de uma caminhada quântica com moeda (azul) utilizando o estado inicial $ \psi\rangle$ sendo $ 0\rangle \otimes  +\rangle$ , e o gráfico de uma caminhada aleatória clássica (preto) após uma caminhada de 100 passos. O eixo horizontal representa a posição $j$ da partícula, enquanto o eixo vertical representa a probabilidade de encontrar a partícula no vértice $j$ . Fonte: O autor. . . . .	31
3.4	Gráfico do desvio padrão em relação ao número de passos em uma caminhada quântica com moeda após 100 passos. Fonte: O autor. . . . .	32

3.5	Distribuição de probabilidade de uma caminhada quântica após uma evolução de $n = 100$ usando uma moeda balanceada $\mathbf{Y}_c$ . Para iniciar a caminhada, usamos como estado inicial $ j\rangle \otimes  +\rangle$ . Fonte: O autor. . . . .	33
3.6	Distribuição de probabilidade de uma caminhada quântica após uma evolução de 1000 passos cujos os operadores moedas variam na rede. O estado inicial adotado para essa caminhada foi $( -\rangle +  +\rangle)/\sqrt{2}$ Fonte: O autor. . . . .	34
3.7	Representação esquemática de uma caminhada quântica de espalhamento num grafo unidimensional. Observa-se que a caminhada quântica de espalhamento inicia no estado $ j - 1, j\rangle$ . Quando o caminhante quântico chega no vértice $j$ , ocorre um espalhamento, onde o caminhante pode ser transmitido com amplitude $t$ no sentido do vértice $j + 1$ ou ser refletido com uma amplitude $r$ sentido ao vértice $j - 1$ . Fonte: Adaptado de [1]. . . . .	35
3.8	Representação gráfica da distribuição de probabilidade de uma caminhada quântica de espalhamento após uma evolução de 100 passos utilizando o estado inicial $ \psi\rangle =  +, 0\rangle$ . O eixo horizontal representa o número de passos da caminhada, enquanto o eixo vertical representa a probabilidade de encontrar a partícula na posição $j$ . Fonte: O autor. . . . .	37
4.1	Representação esquemática do processo de espalhamento em quatro potenciais do tipo delta. Na seta entre os vértices $j - 2$ e $j - 1$ , incide-se uma onda com estado $ +, j - 1\rangle$ . Chegando se depara com o potencial no vértice $j - 1$ , ocorre um processo de espalhamento, onde há uma amplitude de reflexão $r$ e seguindo do potencial em $j - 1$ até o potencial em $j - 2$ , e uma amplitude de transmissão $t$ , permitindo que a onda saia do potencial em $j - 1$ até o potencial no vértice $j$ . Assim se repetindo demais potenciais. Fonte: O autor. . . . .	40
4.2	Representação esquemática de uma onda incidente sob potenciais deltas com intensidades diferentes para cada vértices. A dinâmica esquemática das setas é análoga à apresentada na Figura (4.1). Nessa representação, podemos observar que as intensidades dos potenciais deltas são diferentes. Fonte: O autor. . . . .	40
4.3	Representação gráfica da amplitude do potencial ( $\gamma$ ) para cada vértice de uma rede que segue a uma função seno. Fonte: O autor. . . . .	43
4.4	Gráfico do comportamento da distribuição de probabilidade dos coeficientes de transmissão e reflexão em função do número de onda $k$ , Figura (a), e o gráfico da comportamento da probabilidade em função da intensidade do potencial delta $\gamma$ em um perfil que segue a uma função seno. Em azul, mostramos o comportamento da reflexão, enquanto a linha laranja representa o comportamento da transmissão. Fonte: O autor. . . . .	44



4.5	Gráficos da distribuição de probabilidade para uma caminhada de espalhamento para 100 passos cuja intensidade do potencial delta em cada vértice segue o perfil $\gamma =  \sin(2\pi\alpha j) $ com $\alpha = 2\pi$ . Fonte: O autor. . . . .	46
4.6	Fonte: Gráfico do desvio padrão em relação número de passos. Fonte: O autor. . . . .	47
4.7	Representação gráfica da amplitude do potencial $\gamma$ em função da posição de cada vértice de uma função cosseno. Fonte: O autor. . . . .	48
4.8	Comportamento dos coeficientes de transmissão e reflexão em função do número de onda $k$ e da intensidade do potencial delta $\gamma$ em um perfil de rede cosseno. Em azul, o comportamento da reflexão, enquanto a linha laranja representa o comportamento da transmissão. . . . .	49
4.9	Gráficos da distribuição de probabilidade para uma caminhada de espalhamento cujo o potencial delta associado a cada vértice segue a configuração gráfica de uma função cosseno após 100 passos. Fonte: O autor. . . . .	50
4.10	Gráfico do desvio padrão em relação ao número de passos. Fonte: O autor.	51
4.11	Gráfico de uma função aritmética modular. As amplitudes variam de 0 até 1 divididas em 10 vértices. Ao fim de cada ciclo de 10 vértices, o potencial volta a ter intensidade 0 até chegar a 1 no décimo passo. Fonte: O autor. . . . .	52
4.12	Comportamento dos coeficientes de transmissão e reflexão em função do número de onda $k$ e da intensidade do potencial delta $\gamma$ para o perfil aritmética modular. Em azul, o comportamento da reflexão, enquanto a linha laranja representa o comportamento da transmissão. . . . .	53
4.13	Gráficos da distribuição de probabilidade para uma caminhada de espalhamento cujo o potencial delta associado a cada vértice segue a uma função aritmética modular para $n = 10$ após 100 passos. Fonte: O autor. . . . .	55
4.14	Gráfico do desvio padrão em relação ao número de passos. Fonte: O autor.	55
4.15	Representação esquemática de duas redes que ilustram a posição onde se obtém as probabilidades das caminhadas quânticas com moeda e de espalhamento. Junto a seu vértice (rede a)), seus respectivos estados e quanto as arestas, (rede b)), também seus estados. A rede a) nos mostra que a probabilidade da partícula de uma caminhada quântica com moeda ocorre nos vértices, enquanto que na rede em b) obtemos suas probabilidades nas arestas. Fonte: O autor. . . . .	58
4.16	O gráfico 4.16(a), mostra os resultados da caminhada quântica de 1000 passos pelo método de espalhamento, enquanto o gráfico 4.16(b), mostra o resultado numérico obtido pela caminhada quântica com moeda não homogênea. . . . .	60

# Lista de Tabelas

2.1	Distribuição de probabilidade após um caminhante transladar 5 passos. Observa-se que no decorrer da evolução da caminhada clássica, a probabilidade de se encontrar o caminhante nas franjas da pirâmide vai diminuindo. Também podemos observar que os elementos não nulos coincidem com os elementos do triângulo de pascal dividido por $2^N$ , sendo $N$ o número total de passos. Fonte: O autor. . . . .	18
3.1	Distribuição de probabilidade de um caminhante quântico após uma evolução de 5 passos. Quando comparado tais probabilidades com os valores de uma caminhada aleatória clássica (tabela 2.1), podemos observar que inicialmente, para os dois primeiros passos, os valores são iguais, porém, a partir do terceiro passo, nota-se uma mudança nos valores. Fonte: O autor.	30
3.2	Distribuição de probabilidade de uma caminhada quântica de espalhamento após uma evolução de 5 passos. . . . .	37

# Símbolos e Abreviaturas

$\Psi(x, t)$  - Função de onda

$\nu$  - Frequência

$\sigma^2$  - Variância

$\sigma$  - Desvio Padrão

$\mathcal{H}$  - Espaço de Hilbert

$\gamma$  - Amplitude do Potencial

$\alpha$  - Valor inverso do Período

$\otimes$  - Produto tensorial

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>11</b>
1.1	Objetivos . . . . .	13
1.2	Organização da dissertação . . . . .	14
<b>2</b>	<b>Caminhadas aleatórias clássicas</b>	<b>15</b>
2.1	Caminhada clássica unidimensional . . . . .	16
2.1.1	Cadeias de Markov . . . . .	19
<b>3</b>	<b>Caminhadas quânticas</b>	<b>22</b>
3.1	Definindo as caminhadas quânticas com tempo discreto . . . . .	22
3.2	Caminhada quântica com moeda . . . . .	23
3.3	Desenvolvimento analítico de uma caminhada quântica com moeda . . . . .	27
3.4	Moeda balanceada e estado inicial simétrico . . . . .	32
3.5	Caminhada quântica com moeda não-homogênea . . . . .	33
3.6	Caminhada Quântica Em Uma Analogia Interferométrica . . . . .	35
<b>4</b>	<b>Caminhadas quânticas de espalhamento em redes unidimensionais não-homogêneas</b>	<b>39</b>
4.1	Caminhadas quânticas de espalhamento dependentes da energia . . . . .	41
4.1.1	Caminhada quântica de espalhamento em uma rede de potenciais do tipo delta com intensidade seguindo o perfil de uma função seno . . . . .	42
4.1.2	Caminhada quântica de espalhamento em uma rede de potenciais do tipo delta com intensidade seguindo o perfil de uma função cosseno . . . . .	48
4.1.3	Caminhada quântica de espalhamento em uma rede de potenciais do tipo delta com intensidade seguindo o perfil de uma aritmética modular . . . . .	51
4.2	Equivalência entre caminhada quântica com moeda e espalhamento . . . . .	56
4.2.1	Exemplo de equivalência . . . . .	58

<b>5 Conclusão</b>	<b>61</b>
5.1 Perspectivas Futuras . . . . .	61
<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>63</b>

## Introdução

Após três séculos de domínio da mecânica newtoniana (*XVII até XIX*), a mecânica quântica revolucionou o séc. XX como uma poderosa ferramenta que propõe compreender e justificar a física na escala atômica. Não há um consenso de quem foi o fundador da teoria quântica, embora a literatura credita essa descoberta a *Max Planck (1858 - 1947)* [3], quando o mesmo explicou o espectro de radiação térmica acrescentando a constante  $h$  (constante de Planck) no cálculo da radiação de um corpo negro cuja radiância espectral de um corpo negro é especificada pela quantidade  $R_T(\nu)$  [3].

A evolução da mecânica quântica foi rápida quando comparada com algumas áreas da física. Contemporâneos a Planck, os físicos *Maurice de Broglie (1892 - 1987)* e *Arthur Holly Compton (1892 - 1962)* já convergiam suas teorias em relação à natureza corpuscular da radiação [3, 4]. Estando a comunidade científica convencida quanto à natureza corpuscular da matéria, tão logo foi observado experimentalmente o comportamento da radiação quando interagia com a matéria, levando a identificar três efeitos: Efeito fotoelétrico (emissão de elétrons de uma superfície devida à incidência de luz sobre uma superfície), Efeito Compton (diminuição da energia de um fóton devido a interação com a matéria), e Produção de Pares (produção do par elétron-pósitron devida à transferência de energia de um fóton para um núcleo atômico). Em sua tese de doutorado de 1924, o irmão de *Maurice de Broglie*, o físico *Louis de Broglie*, propôs que o comportamento corpuscular da radiação também se aplica à matéria, isto é, se existe uma onda luminosa que governa o movimento de um fóton, para a matéria, também existe uma onda que governa seu movimento, conhecida como onda de matéria. Segundo *Maurice de Broglie*, tanto para a matéria quanto para a radiação, a energia total  $E$  da partícula está diretamente relacionada com a frequência  $\nu$ , e o momento  $p$  está relacionado com o comprimento  $\lambda$  da onda associada. Anos mais tarde, Erwin Schrödinger (1887 - 1961), propôs que o estado de uma partícula em um instante de tempo  $t$ , era definido por uma quantidade complexa

chamada função de onda  $\Psi(x, t)$ <sup>1</sup>, e era governada pela equação de Schrödinger [4].

Paralelo com a compreensão e consolidação da mecânica quântica, o qual mudava a compreensão da física dos níveis atômicos, migrando de uma visão determinística clássica para uma radical interpretação probabilística das funções de onda, o matemático *Alan Turing* (1912-1954) contribuiu significativamente para o desenvolvimento da computação clássica, construindo uma máquina cujo funcionamento operava por sequências lógicas de unidades de informação, sendo cada uma dessas unidades conhecidas como *bits* (*binary digit*), permitindo que toda a informação pudesse ser codificada em símbolos binários, 0 e 1 [5].

Com a evolução do sistema de sequências lógicas binárias que inicialmente visou a decodificação de mensagens da máquina alemã Enigma na Segunda Guerra Mundial, muitos outros algoritmos foram desenvolvidos, entre eles alguns algoritmos baseavam-se no formalismo das caminhadas aleatórias clássicas, que consistiam de processos estocásticos, como as cadeias de Markov [6? ]. Um processo dito estocástico é um processo onde o estado futuro depende apenas do estado presente, e não dos estados passados e as variáveis aleatórias que dependem do tempo estão definidas em um espaço de estados discretos [? ]. Alguns exemplos da aplicação das caminhadas aleatórias clássicas consiste na construção de algoritmos que resolvam problemas de 2-SAT<sup>2</sup> e problemas de conectividade em grafos [8].

Anos mais tarde, mais precisamente meados da década de 80, em uma conferência apresentada no MIT, o físico *Richard Feynman* (1918 - 1988) propôs a construção de um computador quântico, o qual substitui as sequências lógicas binárias pelas leis da mecânica quântica, unificando assim duas áreas aparentemente distintas: mecânica quântica e a computação clássica. Desta forma, deu origem à área de computação quântica [8]. Dentro da perspectiva de Feynman, do uso das ferramentas da mecânica quântica na computação, surgem as *Caminhadas Quânticas* [9]. As mesmas podem ser compreendidas como uma versão análoga às caminhadas aleatórias clássicas [10], porém, desenvolvidas por meio dos preceitos e formalismo da mecânica quântica.

As caminhadas quânticas são ferramenta relevantes que fomentam várias áreas de estudos na ciência [11], tais como a computação quântica e a construção de algoritmos quânticos [12], plataformas para estudos de fases topológicas [13], transição de fase quântica em redes ópticas [14], entre outras.

---

<sup>1</sup>Verificar o apêndice B - Postulados da mecânica quântica

<sup>2</sup>SAT: Problema da satisfazibilidade booleana. O problema visa encontrar uma solução verdade para uma dada fórmula booleana, e caso encontrada, a fórmula é considerada “satisfazível” [7]

Apesar da proposta do estudo das caminhadas quânticas surgir com Feynman, apenas em 1993 foi publicado o primeiro artigo a respeito do tema, por *Y. Aharonov, L. Davidovich e N. Zagury* [15]. Nesse artigo, os autores mostraram que devido a interferência quântica, o desvio padrão da caminhada quântica é maior quando comparado com o desvio padrão da caminhada clássica.

Um fator determinante que caracteriza a discrepância entre caminhadas clássicas e quânticas, se dá pelo fato das caminhadas aleatórias clássicas serem definidas em termos de probabilidade de um caminhante transladar em um passo para à esquerda **O**U para à direita. Diferentemente, as caminhadas quânticas são descritas em amplitudes de probabilidade de um caminhante transladar para à esquerda **E** direita em superposição, e assim, dando o caráter quântico à caminhada [15]. Foi constatado também que, no caso de uma caminhada em uma dimensão, enquanto a caminhada clássica o desvio padrão é da ordem da raiz quadrada do número de passos, no seu correspondente quântico o desvio padrão é da ordem do número de passos [16].

No que tange a implementação experimental das caminhadas quânticas, podemos citar o seu uso em: caminhada quântica discreta em um sistema de 2 q-bits [17], caminhada quântica discreta em sistema de 3 q-bits em ressonância magnética nuclear [18], cavidades em eletrodinâmica quântica [15] e armadilhas de íons [19].

## 1.1 Objetivos

O objetivo desta dissertação é estudar o modelo das caminhadas quânticas discretas. Na tese de Andrade [16] foi elaborado uma dinâmica de caminhada onde uma partícula interage com barreiras de potenciais do tipo delta com amplitudes constantes, sendo que em cada vértice ocorria um espalhamento condicional às amplitudes de transmissão  $t$  e reflexão  $r$  em uma rede unidimensional. Porém, para a nossa proposta, vamos aplicar a essa mesma rede, potenciais do tipo delta cujas as suas intensidades variam ao longo do grafo, segundo algumas funções dependentes da posição de cada vértice.

Outro objetivo é estudar a equivalência entre os modelos de caminhadas quânticas discretas (caminhada com moeda e caminhada de espalhamento), já provada em [20], em sistemas descritos por grafos contendo  $V$  vértices e  $A$  arestas. A diferença entre as duas abordagens é que, enquanto a evolução da caminhada quântica com moeda ocorre nos vértices, as caminhadas de espalhamento ocorrem nas arestas de um grafo. Para isso, usaremos como comparativo o artigo [11] que descreve uma caminhada quântica onde as moedas quânticas não são homogêneas na rede, e reproduzir os mesmos dados com o modelo de espalhamento.



## 1.2 Organização da dissertação

A presente dissertação está organizada em cinco capítulos. O capítulo 1 apresenta uma breve introdução, que parte da origem da mecânica quântica até o surgimento da computação quântica e das caminhadas quânticas. No capítulo 2 é feita uma abordagem sobre as caminhadas clássicas unidimensionais e as cadeias de Markov. Passando para o capítulo 3, entraremos nas caminhadas quânticas com tempo discreto. Nele, apresentaremos os seus dois modelos. Como as caminhadas quânticas são uma representação quântica das caminhadas aleatórias clássicas. No capítulo 4, apresentamos uma análise do comportamento de uma partícula quântica sob interação de potenciais do tipo delta  $\delta$ , assim, também, mostraremos um comparativo entre modelos de caminhadas em um perfil cujas moedas não são homogêneas, como proposto por [11]. Por fim, finalizaremos com as conclusões da pesquisa e algumas perspectivas futuras.

## Caminhadas aleatórias clássicas

As caminhadas clássicas são sistemas amplamente estudadas dentro do campo das ciências exatas (física, matemática e química), assim como ferramenta para outras áreas da ciência, como biologia (genética) [21] e economia (econofísica) [22], tornando-as uma ferramenta interdisciplinar. O problema da caminhada aleatória clássica só se concretizou no início do século *XX*, quando *Karl Pearson*, para a revista *Nature* [23], levantou a seguinte questão:

“Um homem do ponto 0 caminha uma jarda em uma linha estreita; ele então gira para um ângulo qualquer e caminha outra jarda em uma segunda linha estreita. Ele repete esse processo  $n$  vezes. Qual a sua probabilidade que após  $n$  o trechos, ele esteja a uma distância entre  $r$  e  $r + dr$  do ponto inicial 0? O problema é de interesse considerável, mas tenho apenas a intenção de obter a solução integral para duas direções. Penso, entretanto que a solução pode ser encontrada apenas uma série de potências de  $\frac{1}{n}$  quando  $n$  é grande [23]”.

Em resposta a esse problema, Lord Rayleigh respondeu que a distribuição de probabilidade é uma gaussiana. Paralelo à descoberta do comportamento gaussiano, em 1905, *Albert Einstein* publicou um artigo, baseado em uma equação parabólica, sobre o movimento Browniano <sup>1</sup>. O movimento Browniano é um movimento estocástico nomeado por *Robert Brow*, após o mesmo identificar o movimento do pólen em seu microscópio [24]. Assim, com base na solução do problema proposto pro *Karl Pearson*, foi imediata a aplicação nas demais áreas da ciência; foram, por exemplo, utilizadas para resolver problemas de analogia a difusão gasosa e para o uso de modelagem molecular [25].

A caminhada aleatória foi como um protótipo para outros modelos que surgiram posteriormente, mais bem elaborados, como as caminhadas aleatórias em malhas (unidimensio-

<sup>1</sup>Nessa dissertação, o tratamento difusivo browniano proposto por *Einstein* é apresentado no apêndice A.

nal, bidimensional e processo de Wiener [26]) e caminhadas aleatórias gaussianas (difusão anômala) [27]. Porém todos esses modelos carregam os mesmos objetivos iniciais: descrever o comportamento estatístico de um ente físico em sistemas cujo comportamento é aleatório [25]. A seguir, apresentamos alguns exemplos em maiores detalhes, com o intuito de mostrar os resultados, para que assim possamos fazer um contraponto com os resultados encontrados com as caminhadas quânticas.

## 2.1 Caminhada clássica unidimensional

A ideia central no estudo da caminhada clássica unidimensional, consiste em calcular a probabilidade de um caminhante ser encontrado em uma determinada posição  $j$  no percurso de uma linha reta cujos os passos do caminhante tem comprimento  $l$ . Para isso, partiremos do exemplo de um ente físico que, com uma moeda não viciada em mãos, define seu destino a partir do resultado do lançamento da mesma: se o resultado for *cara*, desloca-se para à esquerda, se for *coroa*, move-se para à direita [19, 27]. Partindo da origem, o caminhante tem uma probabilidade  $p$  de deslocar para à esquerda e  $q = 1 - p$  para à direita ( $p + q = 1$ ). Em um total de  $N$  passos, sendo  $N_1$  passos para à esquerda e  $N_2$  para à direita, a posição final do caminhante é representada pelo produto entre o comprimento do passo  $l$  e a diferença entre o número de passos que vão pra a esquerda e pra a direita  $x$ :

$$x = ml, \quad \text{onde} \quad m = N_1 - N_2, \quad (2.1)$$

onde  $m$  representa o número líquido de passos.

A posição inicial da caminhante (origem), define-se em  $j$ . Após o lançamento da moeda, a partícula se posicionará em  $j + 1$  caso o resultado seja coroa, ou  $j - 1$  se for cara. Na Figura 2.1 ilustramos a rede onde acontece a caminhada.

Figura 2.1: Representação de uma rede onde ocorre a caminhada aleatória clássica. Nela, o caminhante translada entre os vértices a passos de comprimento  $l$  condicionadas ao resultado do lançamento de uma moeda não viciada. Fonte: O autor.



A probabilidade de uma determinada sequência, sendo passos  $N_1$  para à esquerda e  $N_2$  para à direita, é definida pelo produto entre as sucessivas probabilidades de se deslocar

para à esquerda e para à direita, sendo definida por

$$(p\dots p)(q\dots q) = p^{N_1}q^{N_2}. \quad (2.2)$$

O número de sequências possíveis sob as condições do número de passos em  $N_1$  para à esquerda e  $N_2 = N_1 - N$ , é dado por um fator combinatório

$$\frac{N!}{N_1!N_2!}. \quad (2.3)$$

Com isso, a probabilidade de um caminhante ao total de  $N$  passos, dar  $N_1$  passos à esquerda e  $N_2$  passos para à direita, é definida por uma distribuição binomial

$$W_N = \frac{N!}{N_1!N_2!}p^{N_1}q^{N_2}. \quad (2.4)$$

A probabilidade  $P_N(m)$  é muito parecida com a representação do fator binomial, com a diferença que  $W_N$  depende explicitamente no número de passos  $N_1$  e  $N_2$ , enquanto a primeira depende do número total de passos  $N$  e do número líquido de passos  $m$ :

$$P_N(m) = \frac{N!}{\left(\frac{N+m}{2}\right)! \left(\frac{N-m}{2}\right)!} p^{\frac{N+m}{2}} q^{\frac{N-m}{2}}. \quad (2.5)$$

Podemos também escrever a probabilidade por meio de uma relação de recorrência, onde o problema de caminhada parte de uma sequência estocástica, e que cada passo é dado em sequência de tempo  $\tau$  [1]:

$$P(N, m) = pP(m+1, n-1) + qP(m-1, n-1). \quad (2.6)$$

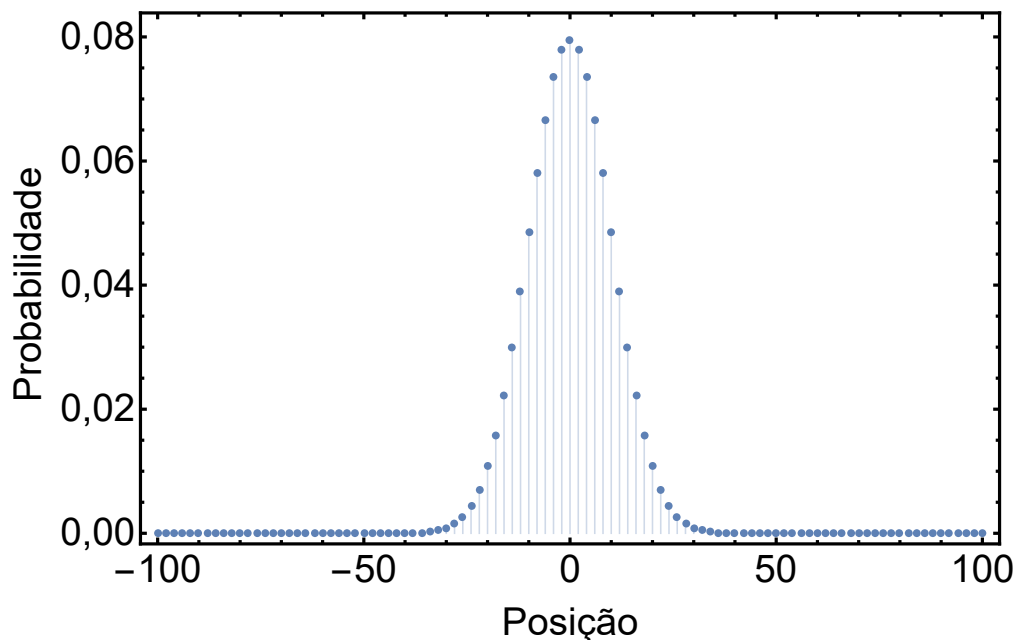
Na Tabela (2.1) mostramos a evolução de uma caminhada clássica onde seu estado inicial encontra-se na origem, e nela podemos observar que quanto maior a distância do caminhante estiver da origem, menor é a sua probabilidade.

Tabela 2.1: Distribuição de probabilidade após um caminhante transladar 5 passos. Observa-se que no decorrer da evolução da caminhada clássica, a probabilidade de se encontrar o caminhante nas franjas da pirâmide vai diminuindo. Também podemos observar que os elementos não nulos coincidem com os elementos do triângulo de pascal dividido por  $2^N$ , sendo  $N$  o número total de passos. Fonte: O autor.

	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
0						1					
1					1/2		1/2				
2				1/4		1/2		1/4			
3			1/8		3/8		3/8		1/8		
4		1/16		4/16		6/16		4/16		1/16	
5	1/32		5/32		10/32		10/32		5/32		1/32

Após a uma evolução de 100 passos, a representação gráfica de uma caminhada clássica é mostrada na Figura (2.2). Nesse gráfico, podemos observar que as probabilidades do caminhante clássico se concentram em torno da origem, gerando uma curva gaussiana, conforme já previsto por *Lord Rayleigh* em resposta ao problema de *Karl Person*.

Figura 2.2: Gráfico da distribuição de probabilidade das caminhadas aleatórias clássicas após uma caminhada de 100 passos, onde  $p = q = 0.5$ . Como é possível observar, a maior probabilidade de encontrar a partícula situa-se na origem. Fonte: O autor.



Uma informação relevante a ser mencionada, que tange tanto o estudo das caminhadas aleatórias clássicas quanto o das caminhadas quânticas, diz respeito ao cálculo de dispersão. De uma maneira geral, a medida de dispersão de uma caminhada é um índice que mede o grau de variabilidade dos elementos de uma distribuição [28]. Ocorre que existem vários cálculos que medem a dispersão, porém, para o propósito do nosso trabalho, vamos

apresentar apenas à variância e desvio padrão. Para uma caminhada clássica, a variância é definida por [1? ]:

$$\sigma_{N_1}^2 = \langle N_1^2 \rangle - \langle N_1 \rangle^2 = Npq, \quad (2.7)$$

enquanto o seu desvio padrão, definido por

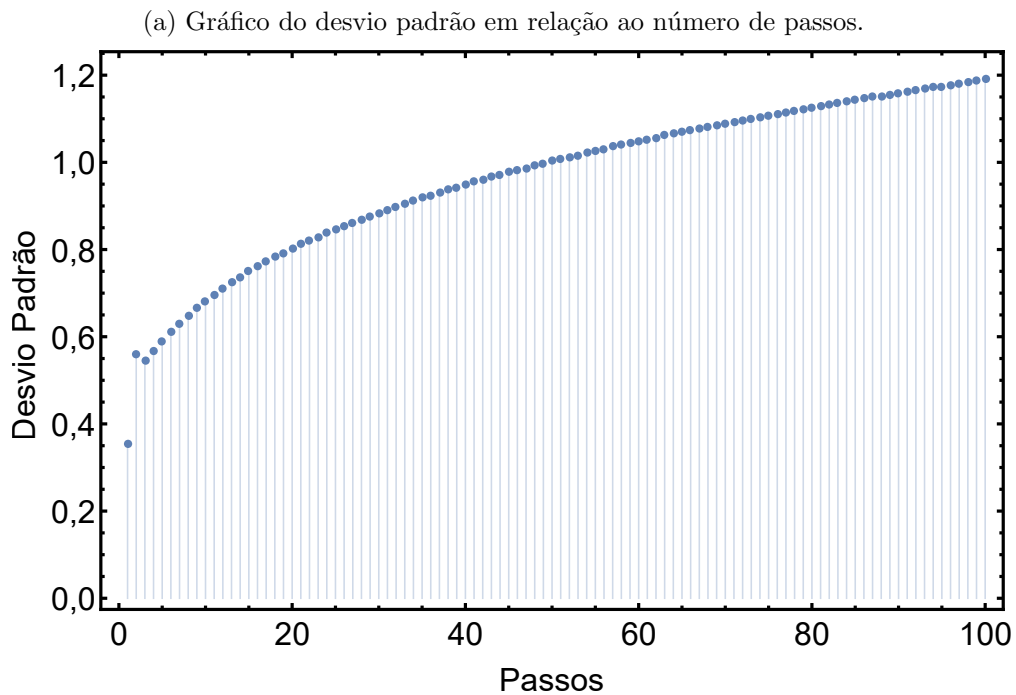
$$\sigma_{N_1} = \sqrt{\langle N_1^2 \rangle - \langle N_1 \rangle^2} = \sqrt{Npq}, \quad (2.8)$$

onde  $\langle N_1 \rangle$  e  $\langle N_2 \rangle$  representam o número médio de passos

$$\langle N_1 \rangle = qN, \quad \langle N_2 \rangle = pN. \quad (2.9)$$

Com isso, o gráfico de desvio padrão da caminhada clássica após uma evolução de 100 passos é mostrada na Figura (2.3).

Figura 2.3: Gráficos de dispersão de uma caminhada aleatória clássica após um caminhante transladar 100 passos. Fonte: O autor.



### 2.1.1 Cadeias de Markov

As *Cadeias de Markov* são processos estocásticos em que a distribuição de probabilidade do estado seguinte depende apenas do estado atual [1, 6].

Consideremos um sistema  $P = (p_1, p_2, p_3, \dots, p_n)$  e  $p_i$  a probabilidade de transição entre um estado e outro, sofrendo transições aleatórias entre um grupo discreto de posições. A mudança de um estado  $i$  para o estado  $j$ , para cada unidade de tempo, é descrita por

uma matriz  $A$ , chamada de matriz de transição, e cada elemento dessa matriz descreve a probabilidade do caminhante clássico ir do estado  $i$  até o estado  $j$ .

A seguir descrevemos, a título de exemplo, uma matriz de transição de um sistema de três estados,

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

onde elementos  $a_{ij}$  representam a probabilidade de transição do estado  $i$  para o estado  $j$ .

O sistema é definido por um vetor em forma de coluna

$$P_0 = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

que nos diz a distribuição de probabilidade inicial dos estados, onde a soma dos elementos de  $P_0$  é sempre igual a 1:  $p_1 + p_2 + p_3 = 1$

Assim, a representação matemática para o estado  $p_1$  após aplicação de um processo aleatório de três níveis é definida pelo produto entre a matriz de transição  $A$  e o vetor de estado inicial  $P_0$

$$P_1 = AP_0 = \begin{pmatrix} a_{11}p_1 + a_{12}p_2 + a_{13}p_3 \\ a_{21}p_1 + a_{22}p_2 + a_{23}p_3 \\ a_{31}p_1 + a_{32}p_2 + a_{33}p_3 \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Com isso, a soma de cada uma das linhas representam a probabilidade do caminhante estar no estado 1, 2 ou 3, respectivamente.

Para o caso geral de uma caminhada clássica, quando o caminhante translada  $N$  passos de comprimento fixo  $l$ , ao longo de uma linha unidimensional, com  $p$  sendo a probabilidade de um passo ser dado para à esquerda e  $q$  e a probabilidade do passo para à direita, podemos obter a probabilidade do caminhante em uma posição  $j$  da seguinte forma:

- Se  $j + N$  for ímpar, então a probabilidade é  $P_N(j) = 0$ ;
- Se  $j + N$  for par, então a probabilidade é  $P_N(j) = \binom{N}{\frac{j+N}{2}} p^{N_2} q^{j-N_1}$ .

Se a probabilidade do caminhante se deslocar para à esquerda e para à direita forem iguais,  $\frac{1}{2}$ , então matriz  $A$  se reduz a

$$A = \begin{pmatrix} \ddots & & & & & & \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & & & \\ & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & & \\ & & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & \\ & & & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \\ & & & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

de tal forma que a equação de probabilidade acima, se resume a:

$$P_N(j) = \frac{1}{2^N} \binom{N}{\frac{j+N}{2}}. \quad (2.14)$$

Uma conexão que podemos fazer com os processos estocásticos markovianos, são com as caminhadas quânticas. As caminhadas quânticas são sistemas que evoluem por sucessivas aplicações de um operador de evolução  $U$ , e que quando realizada uma medida fazendo projeção nos estados de base em uma determinada posição, obtemos um resultado análogo a um processo estocástico, isto é, podendo ser escrito através de uma cadeia Markoviana. Desta forma, podemos definir uma matriz de transição  $M$  para as caminhadas quânticas sendo

$$M_{i,j} = U_{i,j}U^* = |U_{i,j}|^2, \quad (2.15)$$

que corresponde ao  $i$ -jésimo termo de  $U$ .

Nos capítulos a seguir, abandonaremos a abordagem das caminhadas clássicas, embora que, em alguns momentos, as citaremos em forma de comparativo, e entraremos no âmbito do propósito desse trabalho, as caminhadas quânticas. Neles, propomos ver os modelos de caminhadas quânticas, as características que as diferem e uma análise de caminhadas cujo caminhante quântico se depara com interações pontuais em redes unidimensionais.



## Caminhadas quânticas

Existem basicamente dois modelos de caminhadas quânticas no que concerne à evolução temporal [9, 15]: caminhada quântica com tempo contínuo e caminhada quântica com tempo discreto. No primeiro modelo, a dinâmica do sistema é descrita através de um operador Hamiltoniano. Já no segundo modelo, são utilizadas regras de transição que definem a dinâmica do sistema. Adicionalmente, no modelo discreto, duas abordagens de caminhadas quânticas são possíveis: a primeira é baseada em estados de moeda [29], conhecidas como caminhadas quânticas com moedas; e a segunda é baseada em um modelo físico de multiportas ópticas [30, 31], que são nominadas de caminhadas quânticas de espalhamento. Para o escopo desse trabalho, focaremos apenas nas caminhadas quânticas com tempo discreto. Para o leitor interessado nas definições e estudos das caminhadas quânticas com tempo contínuo, indicamos os trabalhos de Y. Shikano [32], A. Childs [10] e O. Muelken [33] para mais detalhes.

### 3.1 Definindo as caminhadas quânticas com tempo discreto

A caminhada quântica com tempo discreto é um modelo de caminhada que descreve a evolução e os estados de um caminhante quântico em posições ou valores específicos de um sistema. Na literatura, comumente esse modelo de caminhada quântica é descrita nos vértices de um grafo  $G(V,A)$  com  $V$  vértices e  $A$  arestas [34], conforme a Figura (3.1), mas pode, também, ser utilizado para outros sistemas, como, por exemplo, a transição orbital de elétron. Na caminhada quântica, o sistema evolui a passos unitários pela ação de um operador unitário  $U$  atuando em um estado inicial  $|\psi_0\rangle$ . Assim, o estado posterior ao estado inicial é definido por:

$$|\psi_1\rangle = U|\psi_0\rangle, \quad (3.1)$$

onde

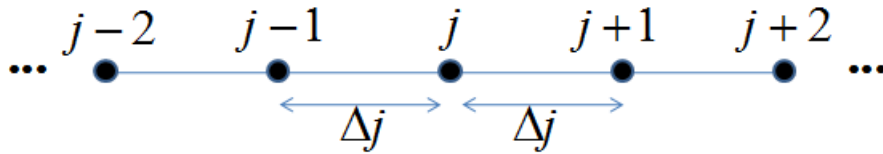
$$U^\dagger U = U U^\dagger = I, \Rightarrow U^\dagger = U^{-1}, \quad (3.2)$$

e  $U^\dagger$  o operador adjunto e  $U^{-1}$  o inverso do operador  $U$ .

Sabendo-se que em uma transformação unitária preserva-se a norma, o produto escalar do estado do caminhante  $\langle \psi_n | \psi_n \rangle$  deve ser igual a 1. A dinâmica de evolução do caminhante quântico definido na equação (3.1), é similar aos usados nas cadeias de Markov, onde a transição da partícula depende de um vetor de estado inicial  $P_0$ , que descreve a distribuição de probabilidade inicial dos estados, junto a uma matriz de transição  $A$ . Dessa forma, a evolução de uma caminhada quântica para  $n$  passos é dada pela sucessiva aplicação do operador  $U$  em seus respectivos estados anteriores, conforme descreve a equação a seguir:

$$|\psi_n\rangle = U^n |\psi_0\rangle. \quad (3.3)$$

Figura 3.1: Representação esquemática de onde ocorre uma caminhada quântica sob um grafo unidimensional em uma rede infinita. O distância entre dois vértices é representado por  $\Delta j$ . Fonte: Adaptado de [1].



Sabendo-se que os dois modelos de caminhadas quânticas discretas (moeda e espalhamento) evoluem da ação de um operador  $U$ , o mesmo é definido de maneira diferente para cada modelo. Para o modelo de moeda, a ação de  $U$  depende tanto de um operador moeda, que tem como finalidade de executar uma rotação no espaço de *Hilbert* de moeda, quanto de um operador deslocamento, que translada condicionalmente o caminhante do estado  $j$  para o estado  $j \pm 1$ . Já no modelo de espalhamento,  $U$  é definido por regras de transição descritos por amplitudes de transmissão  $t$  e reflexão  $r$ .

## 3.2 Caminhada quântica com moeda

A caminhada quântica com moeda é definida em um espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$ . Esse espaço é a resultante do produto direto entre dois espaços: Espaço de Hilbert de moeda  $\mathcal{H}_c$  e o espaço de Hilbert de posição  $\mathcal{H}_p$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_p \otimes \mathcal{H}_c. \quad (3.4)$$

Cada vértice do grafo está associado a um estado quântico  $|j\rangle$ , o qual gera o espaço de Hilbert de posição  $\mathcal{H}_p$ , e somado a isso, para qualquer  $j$ , existe dois estados de moeda,  $|+\rangle$  e  $|-\rangle$ . Esses dois estados de moeda geram um segundo espaço, o espaço de Hilbert bidimensional da moeda  $\mathcal{H}_c$ . Cada um dos dois estados de moeda é representado por uma matriz, sendo o sentido de deslocamento definido conforme o seu respectivo sinal: para à esquerda  $|-\rangle$  e para à direita  $|+\rangle$ . Matricialmente, os dois estados são normalizados podendo ser escritos da seguinte maneira:

$$|-\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |+\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

Nota-se aqui, a inversão de  $|-\rangle$  e  $|+\rangle$  na notação usual para sistemas de spin 1/2, usado na física [35].

Com base nisso, o estado do caminhante quântico  $|\psi\rangle$  é definido pelo produto direto entre o estado quântico  $|j\rangle$  em um determinado vértice e o estado de moeda, com isso temos

$$|\psi(0)\rangle = |j\rangle \otimes |\sigma\rangle,$$

onde  $j$  pertence ao conjunto dos números inteiros  $\mathbb{Z}$  e  $\sigma = \pm$  representa o estado quântico do caminhante em uma posição (vértice)  $j$  do grafo.

Podemos simplificar a dinâmica da caminhada quântica com moeda em duas etapas:

1. Uma rotação no espaço  $\mathcal{H}_c$  com um operador unitário de moeda  $C_c$ . Essa operação tem a finalidade de rotacionar de moeda tem a finalidade de definir o sentido de deslocamento na rede;
2. Após a rotação, um segundo operador,  $S_p$ , fará um deslocamento condicional ao estado de moeda  $|\sigma\rangle$ .

O operador evolução  $U$  é definido sendo o produto direto entre o operador que rotaciona a moeda quântica e o operador que faz um deslocamento condicional do caminhante:

$$U = S_p \cdot (1_p \otimes C_c). \quad (3.6)$$

Substituindo a equação (3.5) em (3.1), encontramos a equação que define o estado do caminhante quântico após um passo

$$|\psi_1\rangle = S_p \cdot (1_p \otimes C_c)(|j\rangle \otimes |\sigma\rangle). \quad (3.7)$$

Para atender a primeira etapa da caminhada quântica, precisamos definir os elementos que podem representar matematicamente o espaço de moeda bidimensional  $\mathcal{H}_c$  após a aplicação do operador moeda.

O operador moeda  $C_c$  é uma matriz<sup>1</sup> unitária  $2 \times 2$  dada por

$$C_c = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in U(2), \quad (3.8)$$

com  $a, b, c$  e  $d \in \mathbf{C}$ , onde  $\mathbf{C}$  é um conjunto de números complexos.

Quando  $C_c$  age nos estados  $|-\rangle$  e  $|+\rangle$ , a operação nos fornece uma combinação linear dos estados de moeda

$$\begin{aligned} C_c|-\rangle &= a|-\rangle + c|+\rangle \\ C_c|+\rangle &= b|-\rangle + d|+\rangle. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Para que o operador  $C_c$  seja uma matriz unitária, os elementos  $a, b, c$  e  $d$  devem satisfazer as seguintes condições:

$$|a|^2 + |c|^2 = |b|^2 + |d|^2 = 1; \quad ac^* + bd^* = 0; \quad c = -\Delta b^*, \quad d = \Delta a^*. \quad (3.10)$$

onde  $\Delta = \det C_c = ad - bc$ , com  $|\Delta| = 1$ .

Existem vários exemplos de matrizes unitárias, mas podemos representar todas elas em função de uma moeda de três parâmetros [16]

$$C_c^{(\rho, \theta, \phi)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\rho} & \sqrt{1-\rho}e^{i\theta} \\ \sqrt{(1-\rho)}e^{i\theta} & -\sqrt{\rho}e^{i(\theta+\phi)} \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Das três variáveis,  $\rho$  representa o parâmetro que controla a tendência do operador moeda. Para que a moeda não seja tendenciosa,  $\rho$  deve ter o valor de  $\frac{1}{2}$ , porém ela pode assumir qualquer valor dentro dos limites de  $0 \leq \rho \leq 1$ .  $\theta$  e  $\phi$  são ângulos arbitrários, sendo seus domínios:  $0 \leq \theta$  e  $\phi \leq \pi$  respectivamente.

Uma moeda unitária muito mencionada na literatura no estudo de caminhadas quânticas é a moeda *Hadamard*. Esse operador moeda é conhecido devido ao seu comportamento honesto, isto é, ao aplica-la em um estado  $\mathcal{H}_c$ , o caminhante quântico tem amplitudes de probabilidades iguais de transladar nos dois sentidos. Sendo assim, o operador

---

<sup>1</sup>SU(2) é a abreviação para Grupo Especial de Grau 2. Trata-se de um grupo de matrizes 2x2 pertencendo ao grupo e álgebra de Lie

moeda *Hadamard* é representado por [9, 19]

$$H_c = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Com isso, a moeda  $C_c$  será substituída pela matriz  $H_c$ . Assim, a primeira etapa da caminhada é definido pela ação do operador  $H_c$  nos estados de moeda  $|\pm\rangle$

$$H_c|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-\rangle + |+\rangle), \quad (3.13)$$

quando o estado de moeda é  $|-\rangle$ , e

$$H_c|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-\rangle - |+\rangle), \quad (3.14)$$

para o estado de moeda  $|+\rangle$ .

Unindo os dois resultados obtidos nas equações (3.14) e (3.15) em uma só equação, encontramos a combinação linear definida na equação (3.9)

$$H_c|\mp\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-\rangle \pm |+\rangle). \quad (3.15)$$

Com o uso da moeda *Hadamard*, mostra-se a transformação unitária que o operador executa, de modo que o deslocamento para à esquerda e para à direita tem amplitudes iguais.

Finalizada a primeira etapa da evolução da caminhada quântica, devemos agora deslocar à partícula do estado quântico  $|j\rangle$  para os estados  $|j \pm 1\rangle$ . O operador deslocamento é definido por

$$S_p = \sum_j |j+1\rangle\langle j| \otimes |+\rangle\langle +| + \sum_j |j-1\rangle\langle j| \otimes |-\rangle\langle -|, \quad (3.16)$$

ou

$$S_p = S \otimes |+\rangle\langle +| + S^\dagger \otimes |-\rangle\langle -|. \quad (3.17)$$

Onde

$$S|j\rangle = |j+1\rangle \quad e \quad S^\dagger|j\rangle = |j-1\rangle.$$

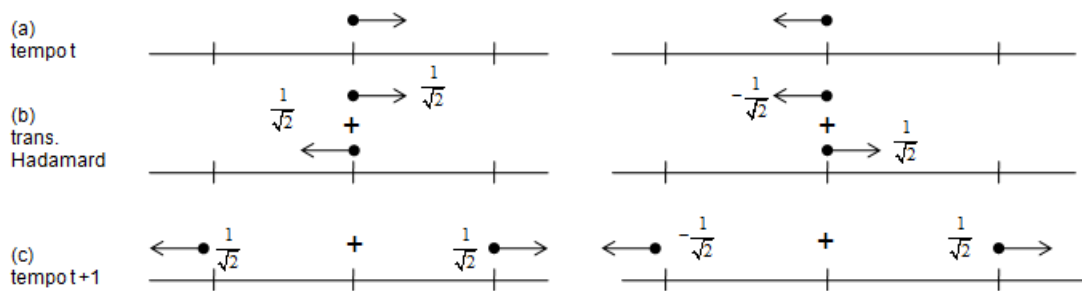
Ao aplicar o operador  $S_p$ , ele translada o caminhante quântico do estado  $|-\rangle \otimes |j\rangle$  para  $|j-1\rangle \otimes |-\rangle$  e do estado  $|+\rangle \otimes |j\rangle$  para  $|j+1\rangle \otimes |+\rangle$ , conforme mostra as condições abaixo

$$S_p|j\rangle \otimes |-\rangle = |j-1\rangle \otimes |-\rangle \quad (3.18)$$

$$S_p|j\rangle \otimes |+\rangle = |j+1\rangle \otimes |+\rangle$$

Assim, conclui-se a segunda etapa da caminhada quântica. Na Figura (3.2) mostramos uma representação esquemática da caminhada quântica com o uso de uma moeda *Hadamard*.

Figura 3.2: Representação da caminhada quântica com o uso de uma moeda *Hadamard* em um passo. Em (a), inicia-se uma caminhada em um tempo  $t$ , onde o estado da partícula é para à esquerda ou para à direita. Após a transformação unitária com o uso de um operador Hadamard, na Figura (b), mostramos que a partícula encontra-se em uma superposição de estados com amplitudes iguais em módulo. Após isso, em (c), ocorre um deslocamento condicional ao estado de moeda. Fonte: Adaptado de [2].



Uma vez apresentado a dinâmica da evolução junto a seus operadores, iniciamos agora o processo analítico, isto é, apresentaremos os resultados para as primeiras evoluções a fim verificar diferenças de resultado entre as caminhadas quânticas com moeda e a caminhada clássica.

### 3.3 Desenvolvimento analítico de uma caminhada quântica com moeda

Para melhor compreensão do uso das caminhadas com o uso de uma moeda quântica, vamos agora realizar o desenvolvimento analítico para as três primeiras evoluções do caminhante, para fins de mostrar que a partir da terceira evolução a caminhada quântica passa a obter valores diferentes dos valores obtidos na caminhada clássica. Conforme comentado anteriormente, a evolução quântica do caminhante depende de sucessivas aplicações do operador  $U$  (equação 3.2), e com isso, por exemplo, para que o caminhante faça uma caminhada quântica de cinco passos, necessariamente precisamos aplicar cinco vezes o operador  $U$ , e sempre com base no estado anterior. Assim, por exemplo, para saber o estado quântico no terceiro passo  $|\psi_3\rangle$ , devemos necessariamente saber o seu estado anterior  $|\psi_2\rangle$ .

Partindo da equação (3.7), devemos em primeiro um momento, definir o estado inicial, representado por  $|j\rangle \otimes |\sigma\rangle$ . Nota-se que nessa definição, devemos optar ou pelo estado  $\sigma = +$  ou por  $\sigma = -$ . Para essa caminhada, optamos por utilizar  $|j\rangle \otimes |+\rangle$ . Lembrando que independente do estado de moeda utilizado, ambos os estados deslocam o caminhante para os dois sentidos da rede com amplitudes iguais mas com fases diferentes, vide as equações (3.13) e (3.14). Assim, a equação (3.7) é reescrita da seguinte maneira

$$|\psi_1\rangle = S_p(1_p \otimes H_c)(|j\rangle \otimes |+\rangle). \quad (3.19)$$

Fazendo a distributiva e utilizando as propriedades do produto direto, chegamos em

$$|\psi_1\rangle = (S_p|j\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|-\rangle - |+\rangle). \quad (3.20)$$

Desenvolvendo algebricamente, já percebemos que o estado da evolução da caminhada é composta de dois possíveis estados

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(S_p|j\rangle \otimes |-\rangle) - \frac{1}{\sqrt{2}}(S_p(|j\rangle \otimes |+\rangle)). \quad (3.21)$$

Isto é, até o momento foi aplicado uma rotação no espaço de moeda e que nos permite observar que o estado quântico da partícula é construída por uma superposição de estados: uma com estado de moeda  $|-\rangle$  com amplitude de  $\frac{1}{2}$ , e outra parte com estado de moeda  $|+\rangle$ , também com amplitude  $\frac{1}{2}$ , o sinal negativo representa a fase do caminhante. Nota-se que na equação (3.21), ainda não ocorreu a ação do operador deslocamento  $S_p$ . Para isso, usamos as definições da equação (3.18) de modo que chegamos em

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|j-1\rangle \otimes |-\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|j+1\rangle \otimes |+\rangle. \quad (3.22)$$

Considerando a posição inicial na origem, e substituindo em (3.22), o estado  $|\psi_1\rangle$  é definido por

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1\rangle \otimes |-\rangle - |1\rangle \otimes |+\rangle). \quad (3.23)$$

O que podemos concluir desse resultado é que saindo da origem, as probabilidades do ente físico estar na posição 1 e -1, são iguais a  $\frac{1}{2}$ , análogo aos valores obtidos na caminhada clássica (Tabela 2.1). Observa-se que os sinais dos estados são diferentes, e tais sinais representam a fase e não o sentido de propagação.

Para as evoluções seguintes, segue-se da mesma metodologia:

$$|\psi_2\rangle = U|\psi_1\rangle.$$

Seguindo a mesma dinâmica, aplicando o operador de evolução temporal, temos

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}[|-2\rangle \otimes |-\rangle + |0\rangle \otimes |+\rangle - |0\rangle \otimes |-\rangle + |2\rangle \otimes |+\rangle]. \quad (3.24)$$

Seguindo para o terceiro passo, temos  $|\psi_3\rangle = U|\psi_2\rangle$ . Do resultado anterior (3.24) e substituindo na equação (3.1), temos

$$|\psi_3\rangle = S_p(1_p \otimes H_c)\left(\frac{1}{\sqrt{4}}[|-2\rangle \otimes |-\rangle + |0\rangle \otimes |+\rangle - |0\rangle \otimes |-\rangle + |2\rangle \otimes |+\rangle]\right),$$

e assim, obtemos o estado para o terceiro passo

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}}[|-3\rangle \otimes |-\rangle - 2|1\rangle \otimes |+\rangle + |-1\rangle \otimes |+\rangle + |1\rangle \otimes |-\rangle - |3\rangle \otimes |+\rangle]. \quad (3.25)$$

Com base nesse resultado, observamos a primeira divergência de valores das caminhadas quânticas e caminhadas clássicas, visto que, se comparado com a tabela (2.1), observa-se uma probabilidade de 5/8 para o vértice 1 e de 1/8 o vértice -1, enquanto que para a caminhada clássica, nessas respectivas posições, ambos tem o valor de 3/8. Observa-se que em (3.25) temos um número dois multiplicando o estado  $|1\rangle \otimes |+\rangle$ , e isso nos diz que temos interferência construtiva, e tal interferência fornece um caráter quântico da caminhada.

Após  $n$  passos, teremos  $2^n$  termos, sendo cada um desses com uma amplitude de  $\pm \frac{1}{\sqrt{2^n}}$ . Cada um desses caminhos correspondem a um possível caminho assumido em uma caminhada aleatória clássica. Para obter a amplitude para um determinado estado  $j$ , devemos fazer uma análise combinatória para todas as amplitudes de todos os caminhos que terminam nessa mesma posição  $j$  [36]. Para a partícula chegar na posição  $j$  após um tempo  $t$ , o caminhante deve-se mover  $e = \frac{n-j}{2}$  passos para à esquerda, e  $d = \frac{n+j}{2}$  passos para à direita [16, 36]. Assim, as amplitudes para uma caminhada com uso de uma moeda Hadamard para um estado em um vértice  $j$ , para os respectivos estados  $|-\rangle$  e  $|+\rangle$ , são [36]:

$$\begin{aligned} a_-(j, n) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k \binom{e-1}{k} \binom{d}{k} (-1)^{e-k-1} \\ a_+(j, n) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k \binom{e-1}{k-1} \binom{d}{k} (-1)^{e-k}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

onde  $-j \leq n < j$ , e quando  $j = n$ , a amplitude é  $\frac{1}{\sqrt{2^n}}$ .

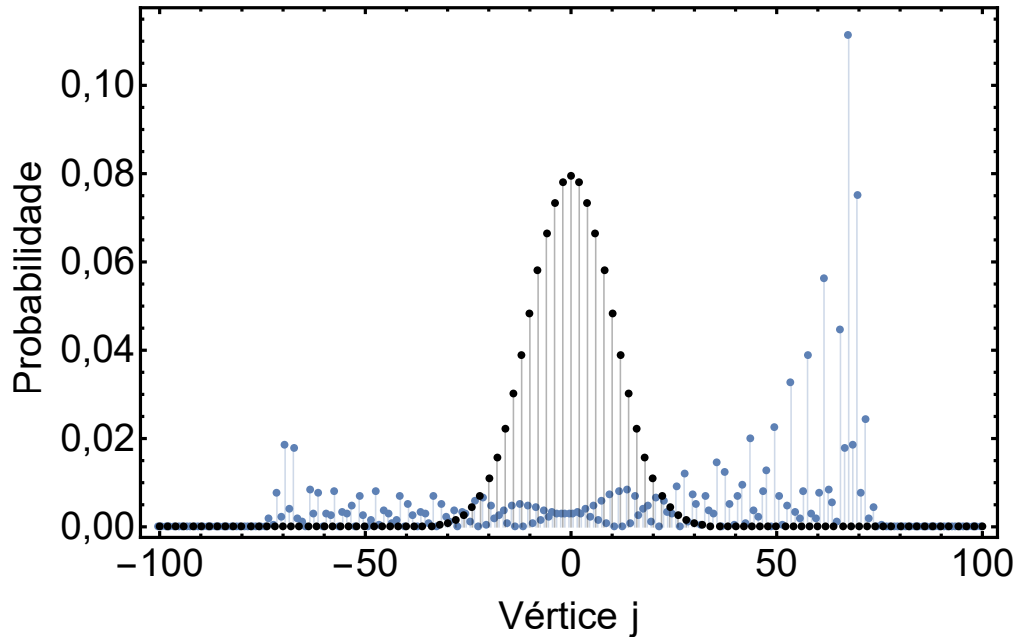


Com base na Tabela 3.1, observamos que os valores associados aos estados positivos de posição são maiores que ao seu respectivo estados negativos, nos leva a construção de um gráfico assimétrico (azul), conforme mostra a Figura (3.3). Podemos observar então, como objetivo proposto inicialmente, que quando comparado com a tabela de distribuição de probabilidade da caminhada clássica, à partir do terceiro passo, há diferença em seus valores. Nesse mesmo gráfico, para título de comparação, mostramos os dados de uma caminhada clássica, para que possamos ver que, em uma caminhada após 100 passos, à diferença entre os formalismos clássicos e quânticos.

Tabela 3.1: Distribuição de probabilidade de um caminhante quântico após uma evolução de 5 passos. Quando comparado tais probabilidades com os valores de uma caminhada aleatória clássica (tabela 2.1), podemos observar que inicialmente, para os dois primeiros passos, os valores são iguais, porém, a partir do terceiro passo, nota-se uma mudança nos valores. Fonte: O autor.

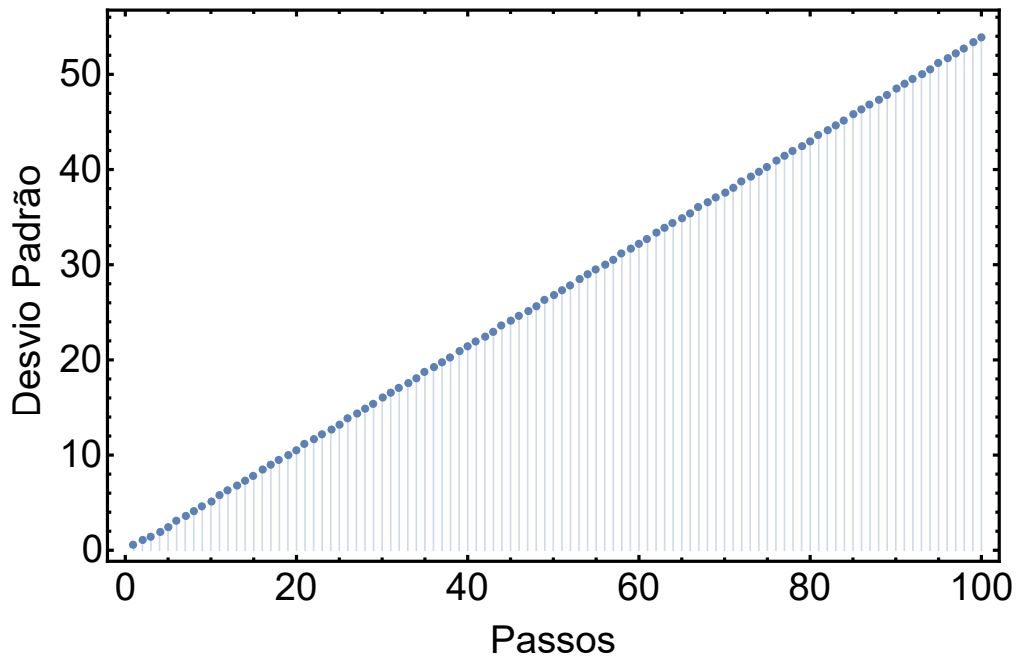
$\frac{j \Rightarrow}{n \Downarrow}$	j-5	j-4	j-3	j-2	j-1	j	j+1	j+2	j+3	j+4	j+5
0						1					
1					1/2		1/2				
2				1/4		1/2		1/4			
3			1/8		1/8		5/8		1/8		
4		1/16		2/16		2/16		10/16		1/16	
5	1/32		5/32		4/32		4/32		17/32		1/32

Figura 3.3: Representação gráfica de uma caminhada quântica com moeda (azul) utilizando o estado inicial  $|\psi\rangle$  sendo  $|0\rangle \otimes |+\rangle$ , e o gráfico de uma caminhada aleatória clássica (preto) após uma caminhada de 100 passos. O eixo horizontal representa a posição  $j$  da partícula, enquanto o eixo vertical representa a probabilidade de encontrar a partícula no vértice  $j$ . Fonte: O autor.



A Figura (3.4) mostra as medidas de dispersão da caminhada quântica com moeda. Nela, para o caso de uma caminhada em 1D, o desvio padrão da posição da partícula em uma caminhada quântica, aumenta linearmente com o número de passos dados, diferentemente da caminhada clássica, cujo o desvio aumenta com a raiz quadrada do número de passos (Figura 2.3)

Figura 3.4: Gráfico do desvio padrão em relação ao número de passos em uma caminhada quântica com moeda após 100 passos. Fonte: O autor.



Como já mencionamos anteriormente, a evolução da caminhada quântica com moeda ocorre nos vértices, logo, a obtemos as probabilidades do caminhante quântico também nos vértices. Para cada vértice, as probabilidades são definidas pela soma das amplitudes ao quadrado dos estados  $|j\rangle \otimes |-\rangle$  e  $|j\rangle \otimes |+\rangle$ . Na seção (4.2), quando avaliarmos a equivalência entre modelos de caminhadas, expomos matematicamente o cálculo das probabilidades. Mencionamos também que ao construir o gráfico de uma caminhada quântica com moeda, nos leva a um gráfico assimétrico. Na próxima seção, vamos apresentar duas alternativas para resolver tal assimetria, que consiste ou de uma moeda balanceada ou de um estado inicial simétrico.

### 3.4 Moeda balanceada e estado inicial simétrico

Como pudemos observar no gráfico da Figura (3.3), a evolução da caminhada quântica com uma moeda *Hadamard* gera um gráfico assimétrico, que se justifica pelo fato da caminhada quântica com moeda tratar os estados do espaço de moeda de maneira diferente, conforme podemos observar nas equações (3.9) e (3.15). Para obtermos uma distribuição simétrica da caminhada quântica, é necessário fazer uso de uma moeda que corrija essa assimetria. Para isso, utilizamos a moeda  $\mathbf{Y}_c$ , que a chamaremos de moeda balanceada, definida por uma matriz que também faz parte do grupo de moedas unitárias definidas pela equação (3.8)

$$\mathbf{Y}_c = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

Utilizando uma moeda balanceada nos leva a um gráfico simétrico mesmo iniciando a caminhada em um estado assimétrico.

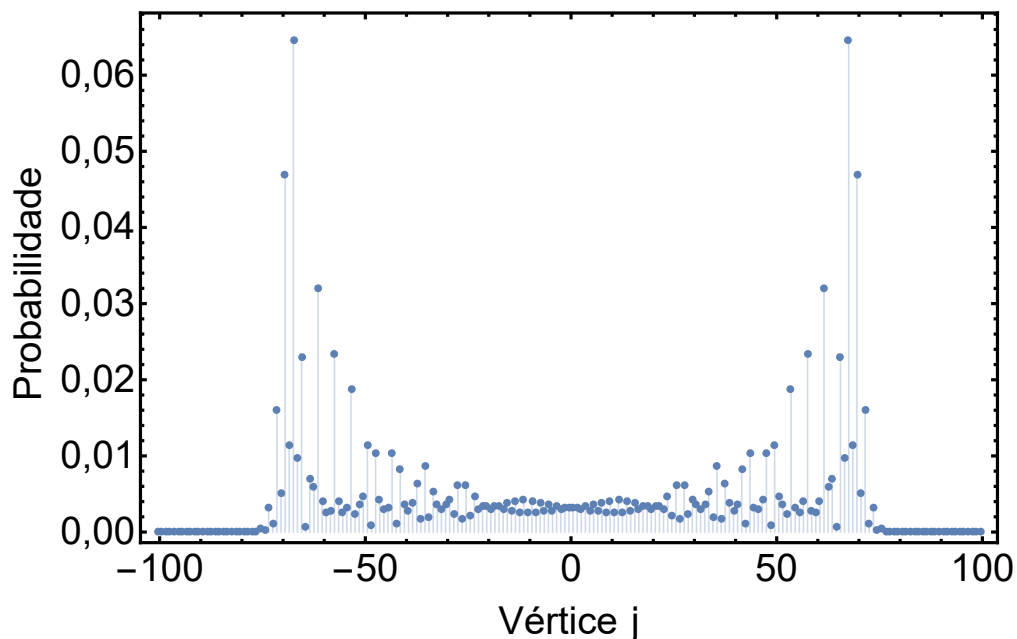
Outra maneira de corrigir essa assimetria é fazer uso de um estado inicial simétrico, definido por

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|j\rangle \otimes |+\rangle + \imath|j\rangle \otimes |-\rangle). \quad (3.28)$$

Diferentemente da moeda *Hadamard* onde os elementos da matriz são todos reais, o estado simétrico introduz uma amplitude complexa. Assim as trajetórias de  $|+\rangle$  permanecem reais e as trajetórias de  $|-\rangle$  continuam puramente imaginárias, e conseqüentemente não interferindo uma com a outra, produzindo uma distribuição simétrica [16].

Com base no estado (3.28) ou uso da moeda balanceada, a evolução de uma caminhada quântica após 100 passos é representada pela Figura (3.5).

Figura 3.5: Distribuição de probabilidade de uma caminhada quântica após uma evolução de  $n = 100$  usando uma moeda balanceada  $\mathbf{Y}_c$ . Para iniciar a caminhada, usamos como estado inicial  $|j\rangle \otimes |+\rangle$ . Fonte: O autor.



### 3.5 Caminhada quântica com moeda não-homogênea

Até o presente utilizamos um único operador moeda atuando em cada vértice, a moeda *Hadamard*. Agora mostraremos o caso em que as moedas podem ser diferentes em cada vértice. As caminhadas quânticas discretas com o uso de moedas não-homogêneas foram mostradas por *Yutaka Shikano et. al.* em [11]. A dinâmica de evolução da caminhada

quântica é semelhante ao já utilizado até o momento, porém, usa-se uma moeda para cada vértice.

Sendo o operador  $C_c$  difere ao longo do perfil da rede, e sua ação nos estados de posição e de moeda e definido por [11]

$$C_c = \sum_j [\cos(2\pi\alpha j)|j, -\rangle + \text{sen}(2\pi\alpha j)|j, +\rangle]\langle j, -| \quad (3.29)$$

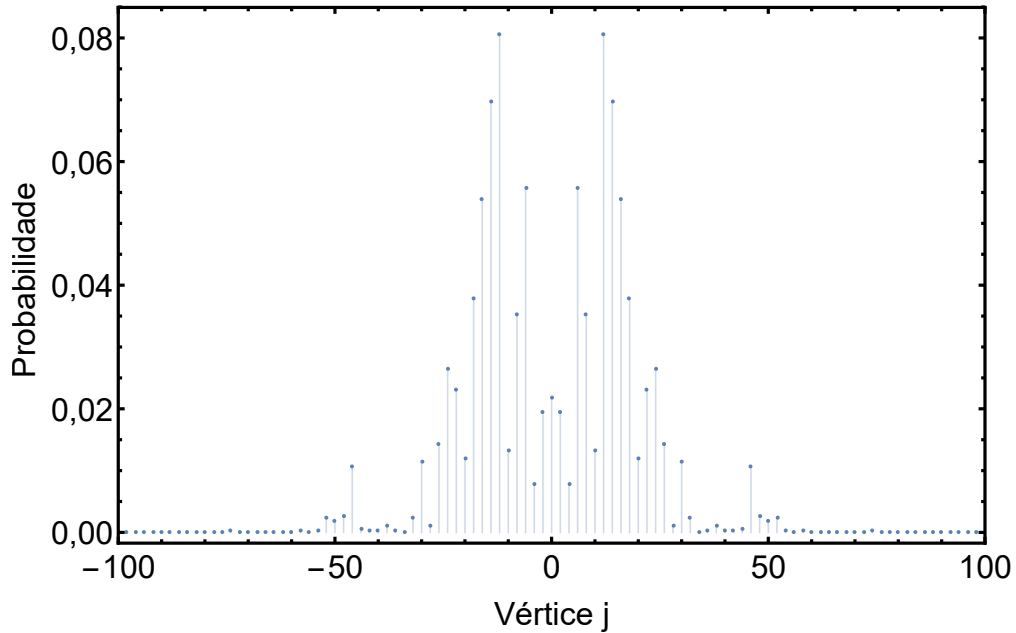
$$+ [\cos(2\pi\alpha j)|j, +\rangle - \text{sen}(2\pi\alpha j)|j, -\rangle]\langle j, +|,$$

ou, na forma matricial

$$C_c = \sum_j \left[ |j\rangle\langle j| \otimes \begin{pmatrix} \cos(2\pi\alpha j) & -\text{sen}(2\pi\alpha j) \\ \text{sen}(2\pi\alpha j) & \cos(2\pi\alpha j) \end{pmatrix} \right] = \sum_j [|j\rangle\langle j| \otimes C_j]. \quad (3.30)$$

Sendo  $\alpha$  um número real ( $\alpha \in \mathfrak{R}$ ) que representa o inverso período do operador moeda.

Figura 3.6: Distribuição de probabilidade de uma caminhada quântica após uma evolução de 1000 passos cujos os operadores moedas variam na rede. O estado inicial adotado para essa caminhada foi  $(|-\rangle + |+\rangle)/\sqrt{2}$  Fonte: O autor.



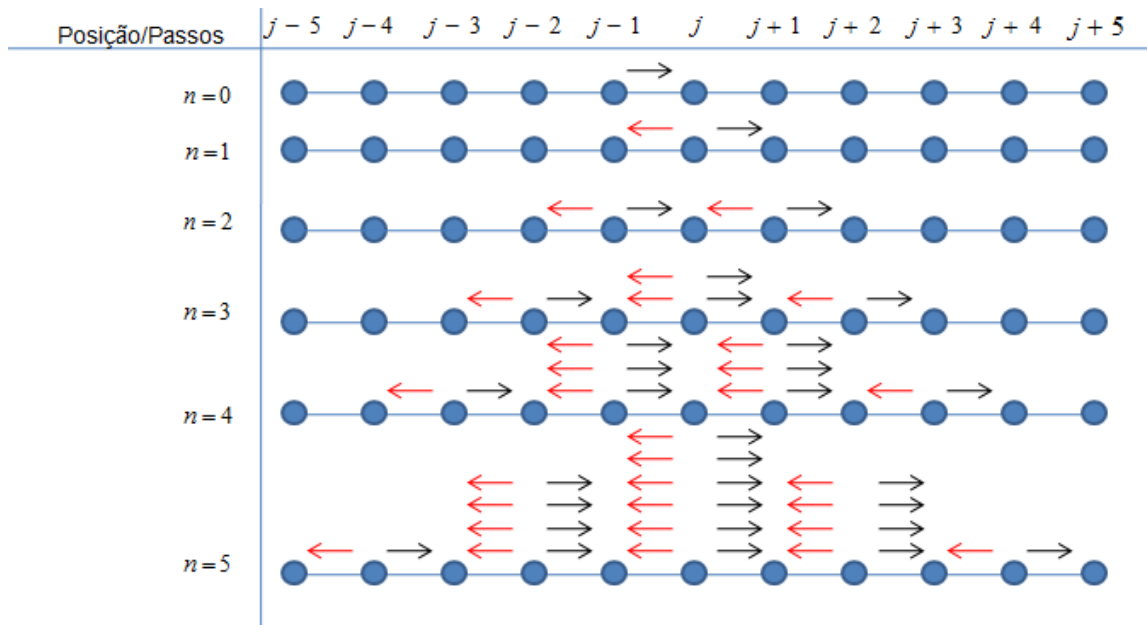
Assim, obtemos um conjunto de moeda  $C_j$  que variam para cada vértice.

O gráfico da Figura (3.6) mostra a distribuição de probabilidade de uma caminhada quântica com moedas não-homogêneas após 1000 passos. Para obter esses dados, o estado inicial foi definido como  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|-\rangle + |+\rangle)$  e o inverso do período  $\alpha = \frac{\pi}{2}$ . Apesar do sistema evoluir 1000 passos, obtemos dados diferente de zero apenas até  $j = 50$ , após isso, não há valores significativos a serem considerados.

### 3.6 Caminhada Quântica Em Uma Analogia Interferométrica

Agora apresentamos o segundo modelo de caminhada quântica discreta, conhecido como caminhadas quânticas de espalhamento, que é baseada numa analogia interferométrica, foi proposta em 2003 por *Hillery. M et.al* [30, 31]. Quando avaliamos essa caminhada quântica de espalhamento, cada vértice da rede é visto como um elemento óptico multiporta chamado  $2N$  portas, sendo  $N$  o número de ligações em cada vértice, ao passo que as arestas, ou ligações, correspondem ao caminho que o fóton percorre através do interferômetro. Diferentemente da caminhada quântica com moeda, não existem moedas nos vértices. Cada vértice possui dois estados, um estado que representa a partícula indo do vértice  $j$  para  $j + 1$  sendo representado por  $|j, j + 1\rangle$ , ou sentido contrário, de  $j + 1$  para  $j$  e representada por  $|j + 1, j\rangle$ , conforme ilustra a Figura (3.7).

Figura 3.7: Representação esquemática de uma caminhada quântica de espalhamento num grafo unidimensional. Observa-se que a caminhada quântica de espalhamento inicia no estado  $|j - 1, j\rangle$ . Quando o caminhante quântico chega no vértice  $j$ , ocorre um espalhamento, onde o caminhante pode ser transmitido com amplitude  $t$  no sentido do vértice  $j + 1$  ou ser refletido com uma amplitude  $r$  sentido ao vértice  $j - 1$ . Fonte: Adaptado de [1].



Quando o fóton se desloca sob a aresta, em cada vértice, ele se deparará com um divisor de feixes vertical. Cada divisor possui dois canais de entrada (direito e esquerdo) e dois de saída (direito e esquerdo). O fóton navega com certa amplitude  $t$  podendo continuar deslocando-se na direção inicial, e assim ser transmitido, e também com uma amplitude  $r$  para mudar a direção, e assim ser refletido, ocorrendo um processo de espalhamento. O

fóton pode entrar por qualquer um dos canais de entrada e sair por qualquer um dos dois canais de saída.

A dinâmica de evolução de um estado para outro também começa pela necessidade de um operador unitário  $U$ , que avança a partícula em um passo, mas antes de definir o operador  $U$ , precisamos saber como é conhecido por regra de transição da partícula. A regra de transição é necessária pelo fato de que a definição das portas de entrada e saída advém de uma transformação unitária entre os modos de entrada e saída, sendo representada por

$$|j, j + 1\rangle \longrightarrow r|j, j + 1\rangle + t|j, j + 1\rangle. \quad (3.31)$$

Para ilustrar a regra de transição, imaginemos que, como ilustrado na Figura (3.6), um fóton esteja na aresta entre os vértices  $(j - 1)$  e  $j$  indo em direção de  $j$ . Se transmitido em  $j$ , o fóton sai de  $j$  para  $j + 1$ , caso seja refletido, desloca-se de  $j$  para  $j - 1$ . Visto que é um processo unitário, a relação entre  $r$  e  $t$  implica na seguinte relação:  $|r|^2 + |t|^2 = 1$ . Na equação (3.31), assumimos que a partícula vem da esquerda para à direita, porém, nada impede que ocorra o processo contrário, da partícula vir da direita para à esquerda. Com base nisso, definimos a regra de transição de um deslocamento da direita para à esquerda por

$$|j + 1, j\rangle \longrightarrow -r^*|j, j + 1\rangle + t^*|j, j - 1\rangle. \quad (3.32)$$

Assumindo que  $r$  seja igual a 0 e  $t = 1$  no estado  $|j, j + 1\rangle$ , a partícula possui um deslocamento livre para transladar em um passo para à direita. Agora, se  $r$  e  $t$  forem diferentes de 0 e 1, significa que existe um espalhamento onde a partícula tem certa amplitude associada ao movimento de ser refletida e ser transmitida. Assim, a equação que representa a ação do operador  $U$  que governa uma partícula para as duas direções, é representada por

$$\begin{aligned} \mathbf{U}|j - 1, j\rangle &= r|j, j - 1\rangle + t|j, j + 1\rangle \\ \mathbf{U}|j + 1, j\rangle &= -r^*|j, j + 1\rangle + t^*|j, j - 1\rangle. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Para simplificar a notação dos estados do sistema, usaremos a seguinte representação utilizada em [1, 16]

$$|j - \sigma, j\rangle \equiv |\sigma, j\rangle, \quad (3.34)$$

onde  $\sigma \pm 1$ . Isto é, reduziremos a notação em  $\pm 1$  para indicar direção de propagação ao longo da aresta e  $j$  para o vértice de destino. Assim, se o estado for  $|j, j + 1\rangle$  a nova notação será  $|+1, j + 1\rangle$ . Caso o sentido do caminhante for contrário, vindo a partícula da esquerda para à direita com estado  $|j + 1, j\rangle$ , a nova notação será  $|-1, j\rangle$ .

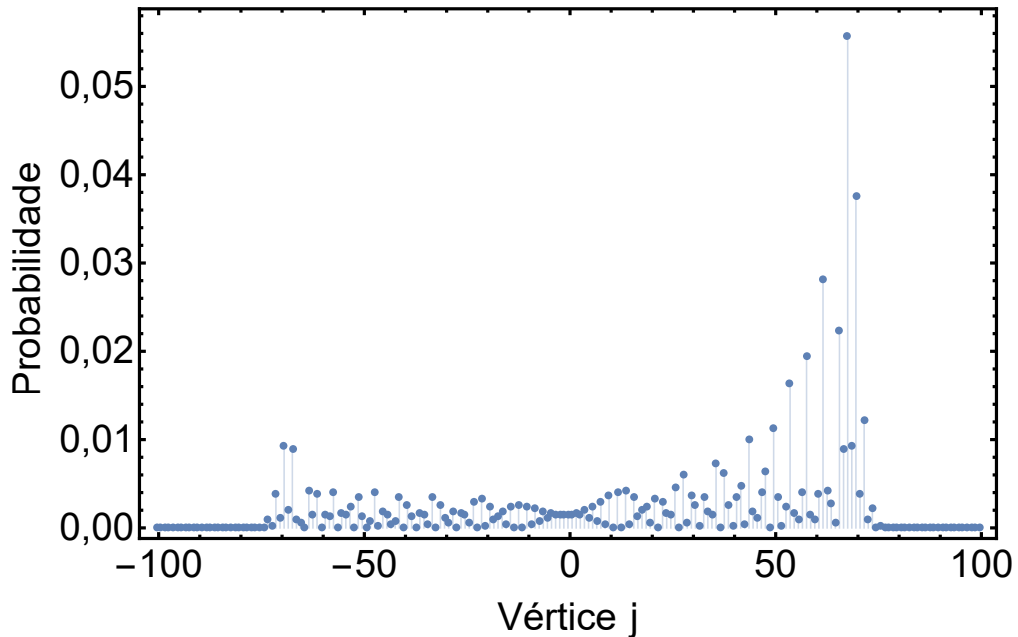
Tabela 3.2: Distribuição de probabilidade de uma caminhada quântica de espalhamento após uma evolução de 5 passos.

$Estado \Rightarrow$	$ +1, -4\rangle$	$ +1, -3\rangle$	$ +1, -2\rangle$	$ +1, -1\rangle$	$ +1, 0\rangle$	$ +1, 1\rangle$	$ +1, 2\rangle$	$ +1, 3\rangle$	$ +1, 4\rangle$	$ +1, 5\rangle$	$ +1, 6\rangle$	
	$ -1, -5\rangle$	$ -1, -4\rangle$	$ -1, -3\rangle$	$ -1, -2\rangle$	$ -1, -1\rangle$	$ -1, 0\rangle$	$ -1, 1\rangle$	$ -1, 2\rangle$	$ -1, 3\rangle$	$ -1, 4\rangle$	$ -1, 5\rangle$	
$n \downarrow$												
0	1											
1						1/2	1/2					
2					1/4	1/4	1/4	1/4				
3				1/8	1/8	0	4/8	1/8	1/8			
4			1/16	0	2/16	1/16	1/16	9/16	1/16	1/16		
5	1/32	1/32	4/32	0	4/32	0	4/32	16/32	1/32	1/32	1/32	

A Tabela 3.2 nos mostra a distribuição de probabilidade de uma caminhada quântica de espalhamento após cinco passos. Nela podemos observar que não estamos mais falando de probabilidade nos vértices, mas sim nas arestas.

A evolução da caminhada quântica de espalhamento após 100 passos, utilizando o estado inicial  $|+, 0\rangle$  é mostrada na Figura (3.8).

Figura 3.8: Representação gráfica da distribuição de probabilidade de uma caminhada quântica de espalhamento após uma evolução de 100 passos utilizando o estado inicial  $|\psi\rangle = |+, 0\rangle$ . O eixo horizontal representa o número de passos da caminhada, enquanto o eixo vertical representa a probabilidade de encontrar a partícula na posição  $j$ . Fonte: O autor.



Com base nesse gráfico, podemos verificar que os resultados de distribuição de probabilidade em uma caminhada quântica de espalhamento é equivalente ao gráfico da caminhada quântica com moeda. No que tange a obtenção das probabilidades, as mesmas são



definidas nos vértices, e são definidas pelas somas das amplitudes ao quadrado de cada estado para um mesmo vértice.

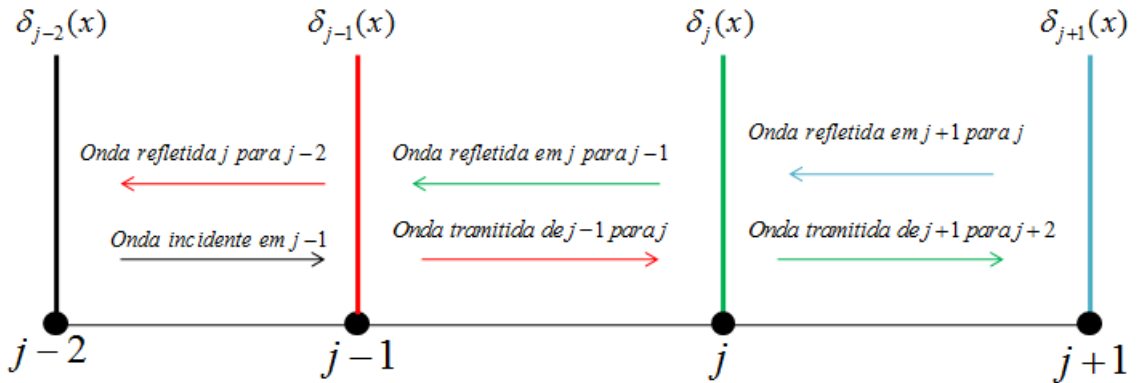
A analogia da caminhada quântica em interferômetro apresentado nessa seção, nos permite abordar as caminhadas quânticas de espalhamento através da teoria de espalhamento, conforme [37]. Nos casos mais gerais, o espalhamento é representado por uma matriz de espalhamento  $S_e$ , cujos elementos dessa matriz são amplitudes de transmissão e reflexão os quais são dependentes da energia. No capítulo a seguir, abordaremos esse tema em sistemas em que para cada vértice de uma rede unidimensional, há um potencial do tipo delta, e quando o caminhante se depara com o mesmo, ocorre um processo de espalhamento.

## Caminhadas quânticas de espalhamento em redes unidimensionais não-homogêneas

Apresentado os dois modelos de caminhada quântica com tempo discreto, propomos agora uma análise de uma caminhada quântica utilizando o método de espalhamento.

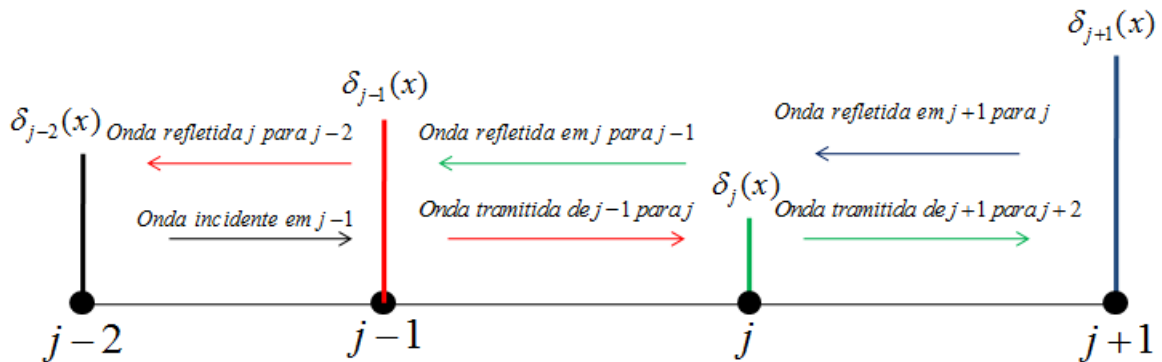
Quando um caminhante quântico interage com o divisor de feixes nos vértices, ocorre um processo espalhamento, assim, os vértices são vistos como interações pontuais (espalhadores). Sendo os vértices espalhadores, podemos traduzí-los em termos de amplitude de transmissão  $t$  e reflexão  $r$ . Na literatura, precisamente em [16], foi proposta uma caminhada quântica cujas interações pontuais nos vértices eram potenciais do tipo delta, com todas as interações pontuais com intensidade iguais ao longo da rede, como mostrado de maneira esquemática na Figura (4.1).

Figura 4.1: Representação esquemática do processo de espalhamento em quatro potenciais do tipo delta. Na seta entre os vértices  $j - 2$  e  $j - 1$ , incide-se uma onda com estado  $|+, j - 1\rangle$ . Chegando se depara com o potencial no vértice  $j - 1$ , ocorre um processo de espalhamento, onde há uma amplitude de reflexão  $r$  e seguindo do potencial em  $j - 1$  até o potencial em  $j - 2$ , e uma amplitude de transmissão  $t$ , permitindo que a onda saia do potencial em  $j - 1$  até o potencial no vértice  $j$ . Assim se repetindo demais potenciais. Fonte: O autor.



Neste trabalho, totalmente inédito, vamos analisar a caminhada quântica de espalhamento, porém, com as intensidades das interações pontuais do tipo delta variando no decorrer da rede, conforme ilustra a Figura (4.2). Nesse sentido, utilizaremos três diferentes perfis ao longo da rede, são eles: seno, cosseno e aritmética modular.

Figura 4.2: Representação esquemática de uma onda incidente sob potenciais deltas com intensidades diferentes para cada vértices. A dinâmica esquemática das setas é análoga à apresentada na Figura (4.1). Nessa representação, podemos observar que as intensidades dos potenciais deltas são diferentes. Fonte: O autor.



## 4.1 Caminhadas quânticas de espalhamento dependentes da energia

De maneira geral, as amplitudes de transmissão  $t$  e reflexão  $r$  dependem da energia. Entretanto, no modelo de caminhada quântica de espalhamento desenvolvido por *Hillery* em [31], nada se fala de tal dependência. Como já mencionado na seção (3.5), em cada vértice do grafo há um divisor de feixe que define uma transformação unitária os modos de saída do fóton. Assim, podemos definir tal transformação unitária por uma matriz de espalhamento  $S_e$  [38].

$$\begin{pmatrix} \psi_k^{out}(0^-) \\ \psi_k^{out}(0^+) \end{pmatrix} = S_e \begin{pmatrix} \psi_k^{in}(0^-) \\ \psi_k^{in}(0^+) \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

Onde  $\psi_k^{in/out}(0^\pm)$  representam as ondas de entrada (in) e saída (out). Tal matriz respeita a conservação de probabilidade na origem, sendo assim, definido por

$$|\psi_k^{ent.}(0^+)|^2 + |\psi_k^{ent.}(0^-)|^2 = |\psi_k^{saida}(0^+)|^2 + |\psi_k^{saida}(0^-)|^2. \quad (4.2)$$

Como é bem conhecido [39], a solução da equação de Schrödinger para um potencial delta localizado na origem é equivalente a uma condição de contorno ( $\psi'(x) \equiv d\psi/dx$ ) [40]

$$\Phi(0^+) = \Gamma\Phi(0^-), \quad (4.3)$$

onde

$$\Phi = \begin{pmatrix} \psi(x) \\ \psi'(x) \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

e

$$\Gamma = \omega \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

sendo  $a = d = \omega = 1$ ,  $b = 0$  e  $c = \gamma$  os parâmetros da função delta  $\delta(x)$  onde  $\gamma$  é a intensidade do potencial.

Assim, podemos construir a matriz de espalhamento  $S_e$

$$\begin{pmatrix} \psi^+(0) \\ \psi'^+(0) \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi^-(0) \\ \psi'^-(0) \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

Para qualquer interação pontual arbitrária, nós podemos escrever a solução do espalhamento assumindo que uma função de onda  $\psi^{(\pm)}$ , com um número de onda  $k$ , incide pela

direita (+) e pela esquerda (-) do vértice

$$\psi^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} e^{\pm[ikx]} + r^{\pm}e^{\mp[ikx]}, & \text{se } x < 0 \\ t^{\pm}e^{\pm[ikx]}, & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (4.7)$$

Observando que  $e^{\pm[ikx]}$  é a onda incidente, e os termos  $r$  e  $t$  são os coeficientes de definem as amplitudes de transmissão e reflexão. Das equações em (4.6) e (4.7), encontramos as amplitudes de espalhamento nas seguintes equações

$$r^{(\pm)} = \frac{c \pm ik(d-a) + bk^2}{-c + ik(d+a) + bk^2}, \quad t^{(\pm)} = \frac{2ik\omega}{-c + ik(d+a) + bk^2}. \quad (4.8)$$

Substituindo os valores dos parâmetros  $a = d = \omega = 1$ ,  $b = 0$  e  $c = \gamma$ , chegamos em

$$S_e = \begin{pmatrix} r_j^{(+)}(k) & t_j^{(+)}(k) \\ t_j^{(-)}(k) & r_j^{(-)}(k) \end{pmatrix}, \text{ onde } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (4.9)$$

e

$$S_e = \begin{pmatrix} \frac{\gamma}{ik - \gamma} & \frac{ik}{ik - \gamma} \\ \frac{ik}{ik - \gamma} & \frac{\gamma}{ik - \gamma} \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

A partir do trabalhado [20], o qual mostra a equivalência entre as caminhadas quânticas com moeda e de espalhamento, podemos encontrar o operador moeda associado a uma matriz de espalhamento (equação 4.9). E esse operador tem a seguinte forma

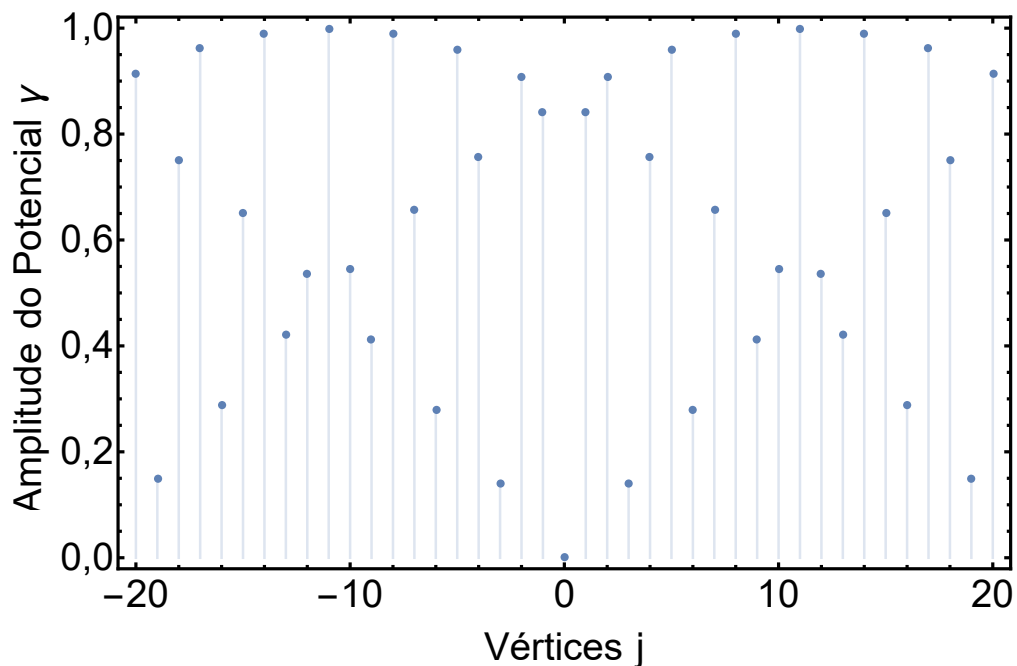
$$C_e = \begin{pmatrix} t_j^-(k) & r_j^+(k) \\ r_j^-(k) & t_j^+(k) \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Com isso, agora temos um operador moeda dependente da energia.

#### 4.1.1 Caminhada quântica de espalhamento em uma rede de potenciais do tipo delta com intensidade seguindo o perfil de uma função seno

Partindo com a função seno, o perfil que ilustra a amplitude da intensidade da delta ao longo da rede está representado pela Figura (4.4).

Figura 4.3: Representação gráfica da amplitude do potencial ( $\gamma$ ) para cada vértice de uma rede que segue a uma função seno. Fonte: O autor.

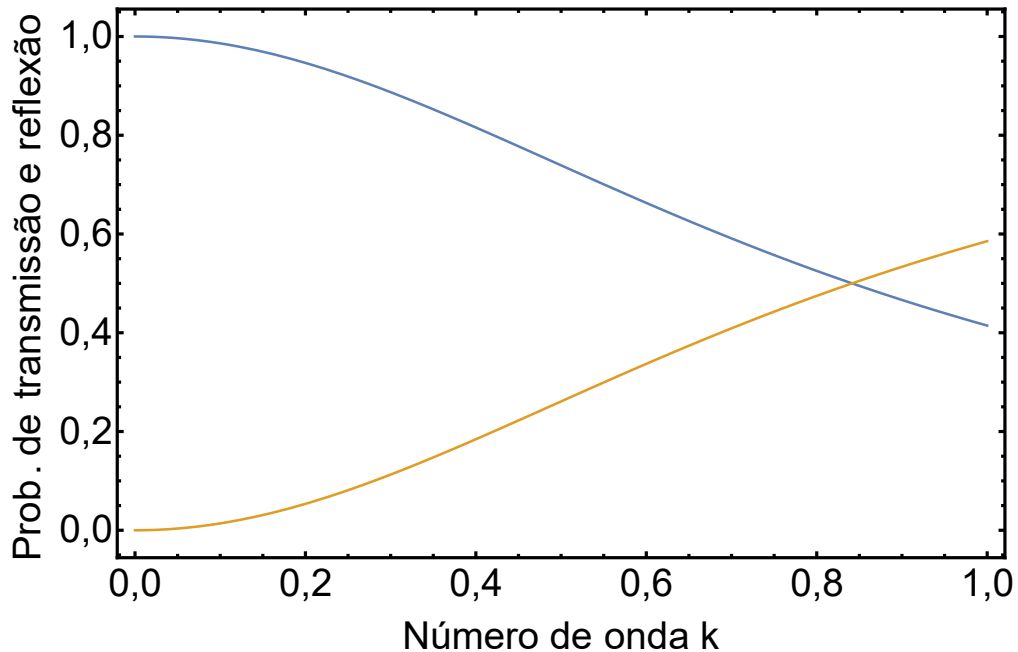


Nela podemos observar que a amplitude do potencial, se observado a partir do vértice 0, a intensidade do potencial cresce de 0 até chegar em um valor máximo de 1 e decresce de 1 até chegar novamente em 0. Uma observação importante é que usamos apenas os valores absolutos da função seno, de modo que permite que do perfil da rede, todos os valores das intensidades do potencial seguem sempre valores positivos.

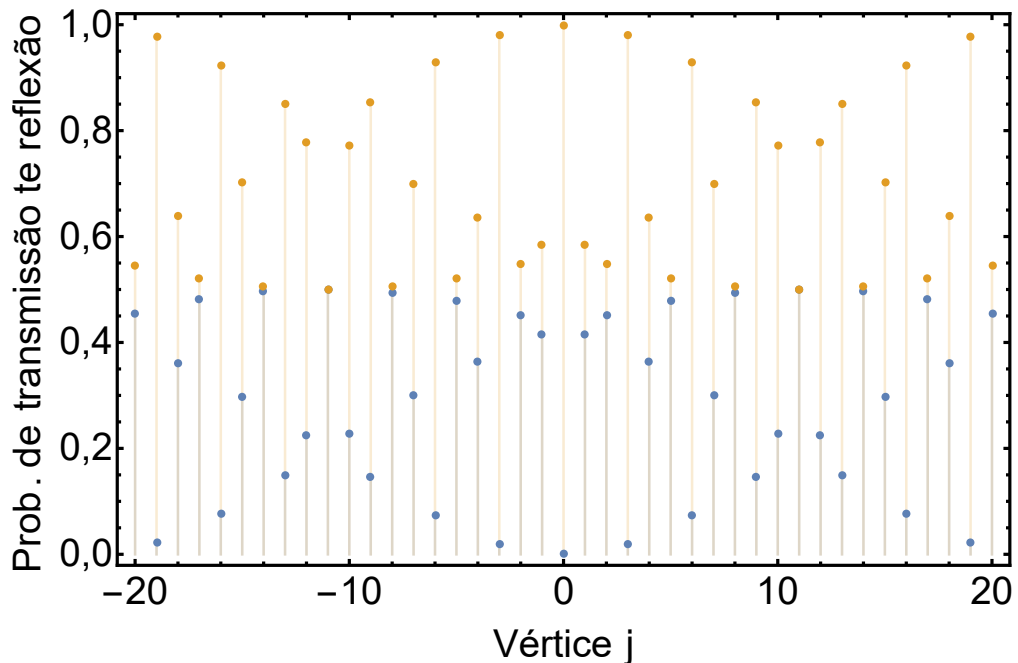
Com isso, apresentamos o comportamento dos coeficientes  $r$  e  $t$  onde avaliamos a distribuição de probabilidade sob duas perspectivas, conforme mostra na Figura (4.4).

Figura 4.4: Gráfico do comportamento da distribuição de probabilidade dos coeficientes de transmissão e reflexão em função do número de onda  $k$ , Figura (a), e o gráfico da comportamento da probabilidade em função da intensidade do potencial  $\gamma$  em um perfil que segue a uma função seno. Em azul, mostramos o comportamento da reflexão, enquanto a linha laranja representa o comportamento da transmissão. Fonte: O autor.

(a) Gráfico da probabilidade de transmissão e reflexão em um potencial associado ao vértice 1. Nele, analisamos seu comportamento a medida que atribuímos valores para o número de onda de 0 até 1.



(b) Gráfico das probabilidades de transmissão e reflexão sob potenciais que variam dos vértices -20 até 20. Nele analisamos seu comportamento cuja partícula tem um número de onda  $k = 1$ .



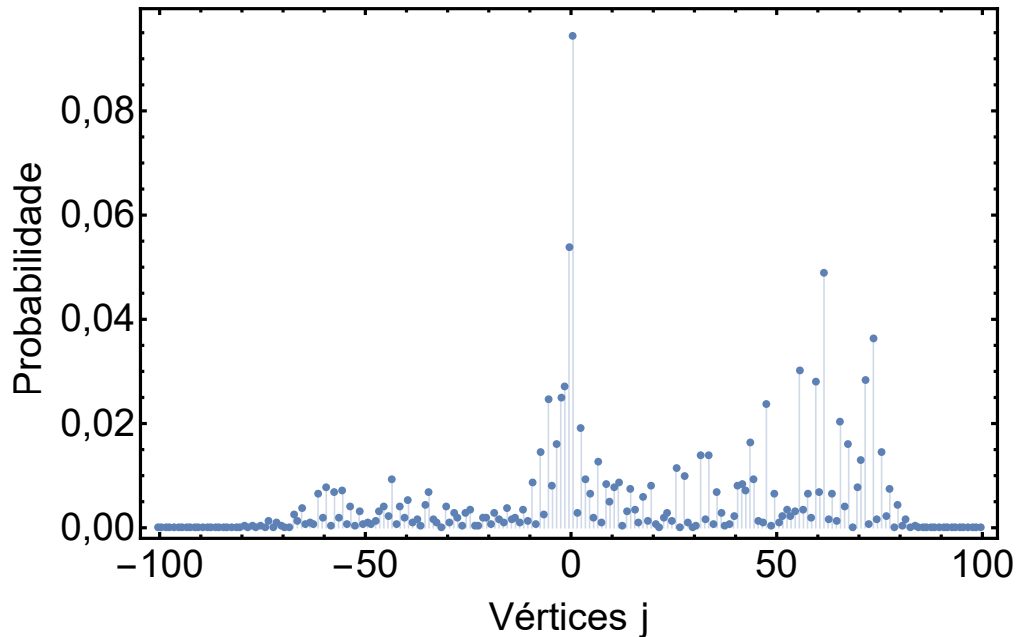
Para reproduzir a distribuição de probabilidade das amplitudes  $r$  e  $t$  em função do número de onda  $k$  e do potencial  $\gamma$  associado aos vértices, temos: para gráfico 4.4(a), definimos que a amplitude do  $\gamma$  está associado ao vértice 1, isto é, avaliamos as probabilidades de  $r$  e  $t$  no primeiro vértice após a origem. Podemos observar que inicialmente a probabilidade de reflexão é máxima, visto que quando  $k = 0$  a energia associada ao número de onda  $k$  é nula. Com isso, a probabilidade de reflexão diminui à medida em que se aumenta o número de onda  $k$ . Podemos observar também, com base nessa figura, que as probabilidades de transmissão e reflexão tem o mesmo valor quando o número de onda atinge o valor próximo de 0,85. Tal comportamento justifica-se porque a amplitude do potencial é definida pelo valor de seno de 1 radiano, que é 0.83 (caso fosse no segundo potencial, seriam 2 radianos). Com isso, a partícula tem valor  $1/2$  de ser transmitida e  $1/2$  de ser refletida. A partir desse valor de onda  $k$ , a probabilidade de transmissão é maior que a de reflexão até chegar em seu valor máximo de  $k = 1$ .

Já o gráfico 4.4(b) mostra o comportamento de  $t$  e  $r$  quando definimos um valor constante do número de onda,  $k = 1$ . Tendo definido o valor do número de onda, avaliamos a distribuição de probabilidade nos vértices que variam de  $-20$  até  $20$ . Inicialmente, temos uma amplitude nula para o potencial para o vértice 0, com isso, a probabilidade de transmissão é máxima nesse ponto. Podemos perceber também esse mesmo comportamento a cada múltiplo inteiro de  $\pi$ , visto que a para cada um desses pontos, a amplitude do potencial também é nula. Com isso, observa-se que a probabilidades de reflexão e transmissão têm as mesmas probabilidades de  $1/2$  a cada múltiplo de  $\pi/2$ , posições cujo valor de seus respectivos valores de seno serão iguais a 1.

Visto o comportamento da reflexão e transmissão, resta agora executar a caminhada quântica de espalhamento para esse perfil. A representação gráfica da caminhada quântica de espalhamento para 100 passos é mostrada pela Figura (4.5).

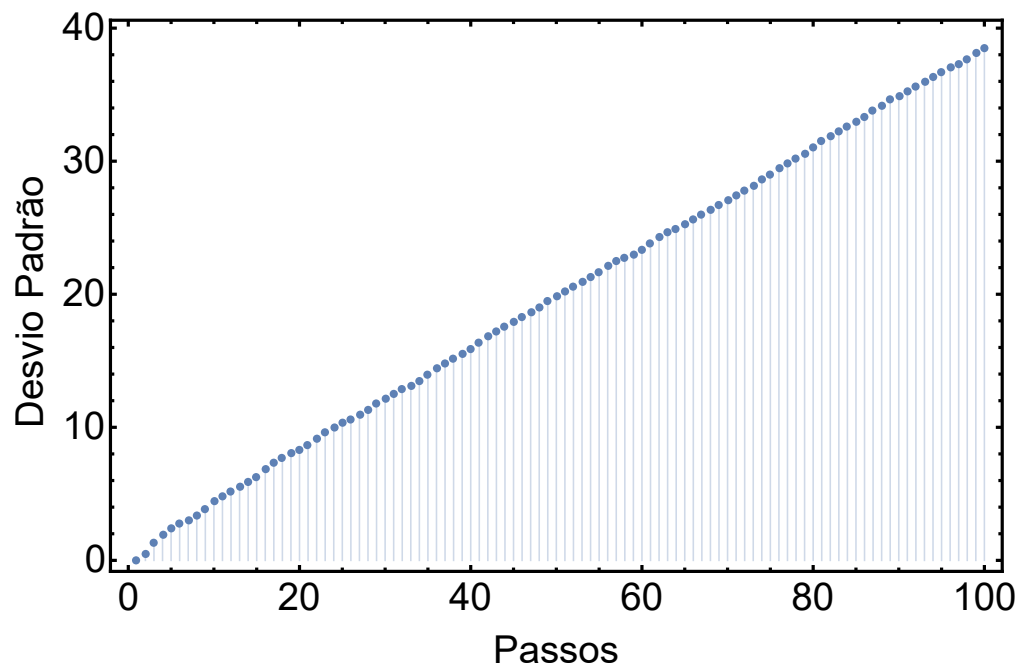


Figura 4.5: Gráficos da distribuição de probabilidade para uma caminhada de espalhamento para 100 passos cuja intensidade do potencial delta em cada vértice segue o perfil  $\gamma = |\sin(2\pi\alpha j)|$  com  $\alpha = 2\pi$ . Fonte: O autor.



Com base nesse resultado, podemos observar que a maior densidade de probabilidade, após 100 passos é próximo da origem. Porém observa-se comportamento super difuso na distribuição de probabilidade. Para essa caminhada usamos como estado inicial  $|\psi\rangle = | + 1, 0\rangle$ . Esse comportamento mostrado na Figura (4.5) se justifica pela configuração da rede (período de  $2\pi$ ) e pela intensidade dos potenciais próximos à origem. Para a função seno, os potenciais associados aos primeiros vértices são de altas intensidades, conforme mostra a Figura (4.3), e à medida que se aumenta a intensidade do potencial, diminui a amplitude de transmissão do caminhante até o próximo vértice, conforme mostra a Figura (4.4 (b)), fazendo com a partícula se espalhe lentamente no decorrer da rede. Seguindo esses resultados, podemos apresentar dados de dispersão da caminhada de desvio padrão, conforme mostra a Figura (4.6).

Figura 4.6: Fonte: Gráfico do desvio padrão em relação número de passos. Fonte: O autor.

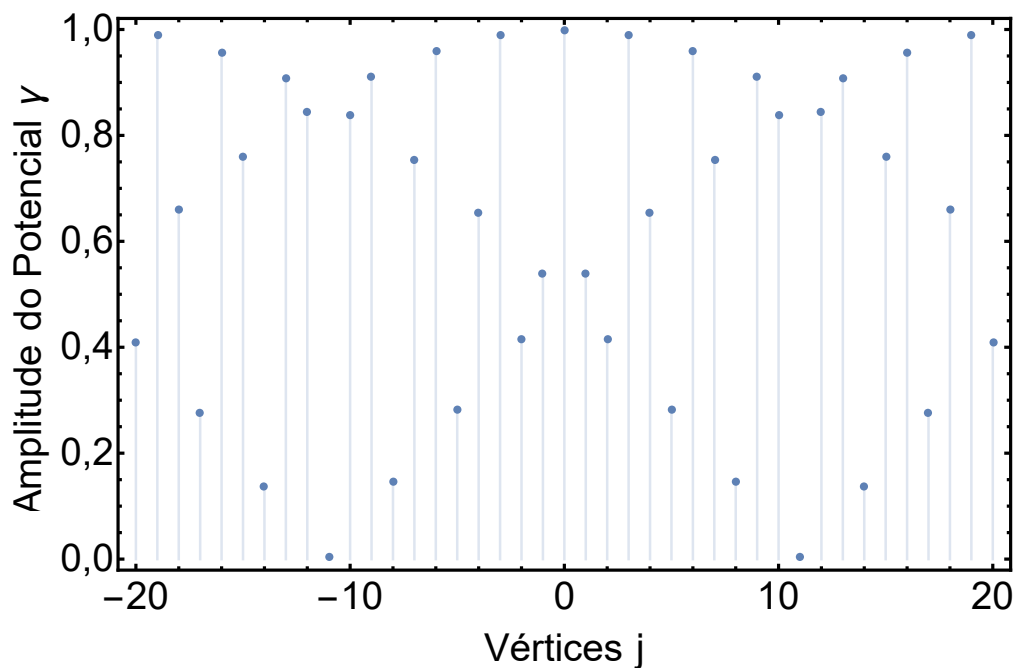


Com base nesse gráfico, podemos afirmar que o desvio padrão da caminhada quântica de espalhamento cujos potenciais seguem a uma função senoidal, apresenta um caráter linear.

### 4.1.2 Caminhada quântica de espalhamento em uma rede de potenciais do tipo delta com intensidade seguindo o perfil de uma função cosseno

Para o segundo perfil, propomos uma caminhada quântica cujo o perfil da amplitude  $\gamma$  associado aos vértices segue a uma função cosseno. Seguindo um perfil semelhante apresentado para a função seno, a intensidade do potencial  $\gamma$  é ilustrada conforme a Figura (4.7).

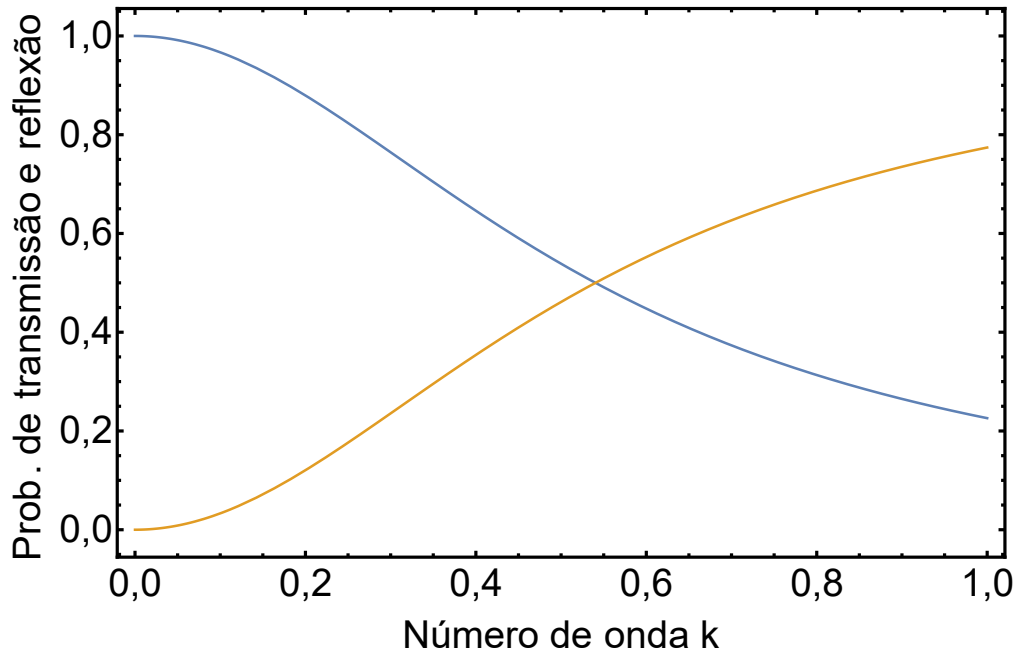
Figura 4.7: Representação gráfica da amplitude do potencial  $\gamma$  em função da posição de cada vértice de uma função cosseno. Fonte: O autor.



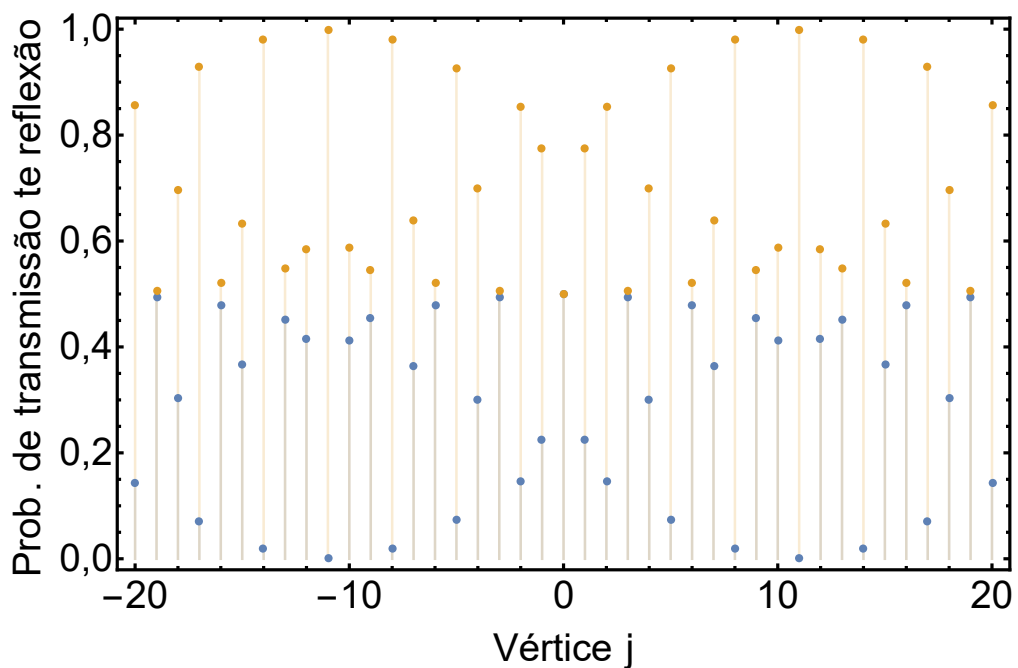
Nesse perfil, a amplitude do potencial  $\gamma$ , quando observado a partir da origem, a amplitude desse potencial é 1, seguindo uma semelhante dinâmica periódica mostrada na Figura (4.4) para a função senoidal, porém com a diferença que enquanto na origem da função seno amplitude é nula, para a função cosseno, a amplitude é máxima. Seguindo o modelo apresentado para a função seno, apresentamos o comportamento de transmissão e reflexão em função do número de onda  $k$  e também em função dos vértices em um período de  $2\pi$ , conforme ilustra a Figura (4.8).

Figura 4.8: Comportamento dos coeficientes de transmissão e reflexão em função do número de onda  $k$  e da intensidade do potencial delta  $\gamma$  em um perfil de rede cosseno. Em azul, o comportamento da reflexão, enquanto a linha laranja representa o comportamento da transmissão.

(a) Gráfico da probabilidade de transmissão e reflexão em um potencial associado ao vértice 1. Nele, avaliamos seu comportamento a medida que atribuímos valores do número de onda de 0 até 1. Fonte: O autor.



(b) Gráfico das probabilidades de transmissão e reflexão sob potenciais cujos vértices vão de -20 até 20 na rede. Nele avalizamos seu comportamento cuja partícula tem um número de onda  $k = 1$ . Fonte: O autor.



Na Figura 4.8(a), avaliamos a distribuição de probabilidade quando a partícula se depara com o potencial cuja amplitude é associada ao vértice 1. A amplitude do vértice é cosseno de 1 radiano. Observando o gráfico, vemos que quando o número de onda é 0, ocorre uma reflexão total da partícula (linha azul), e a medida que aumentamos o valor de  $k$ , a probabilidade de transmissão aumenta (linha laranja). Assim, quando  $k$  tem o mesmo valor que intensidade do potencial, as probabilidades de transmissão e reflexão são iguais a  $1/2$ .

Quanto a Figura 4.8(b), avaliamos a distribuição de probabilidade quando definimos uma partícula, com um número de onda  $k = 1$ , se deparar com potenciais dentro de um período de  $2\pi$ . Iniciando pelo vértice 0, a intensidade desse potencial é 1, visto que cosseno de 0 radianos é 1, permitindo observar através do gráfico, que temos iguais probabilidades de transmissão e reflexão. Devido as características da função cosseno, podemos afirmar que tais probabilidades se repetem a cada múltiplo inteiro de  $\pi$ . Porém, a cada múltiplo inteiro de  $\pi/2$ , a probabilidade de transmissão é máxima e a de reflexão nula.

Quanto a caminhada quântica para esse perfil, a sua representação gráfica é dado pela Figura (4.9) com o estado inicial  $|\psi\rangle = | + 1, 0\rangle$ .

Figura 4.9: Gráficos da distribuição de probabilidade para uma caminhada de espalhamento cujo o potencial delta associado a cada vértice segue a configuração gráfica de uma função cosseno após 100 passos. Fonte: O autor.

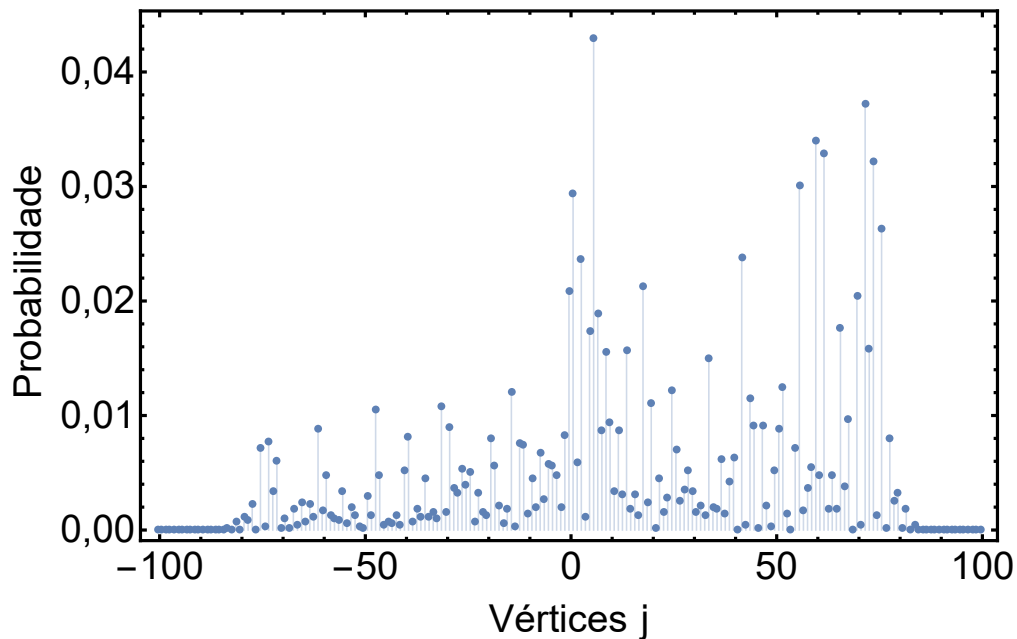
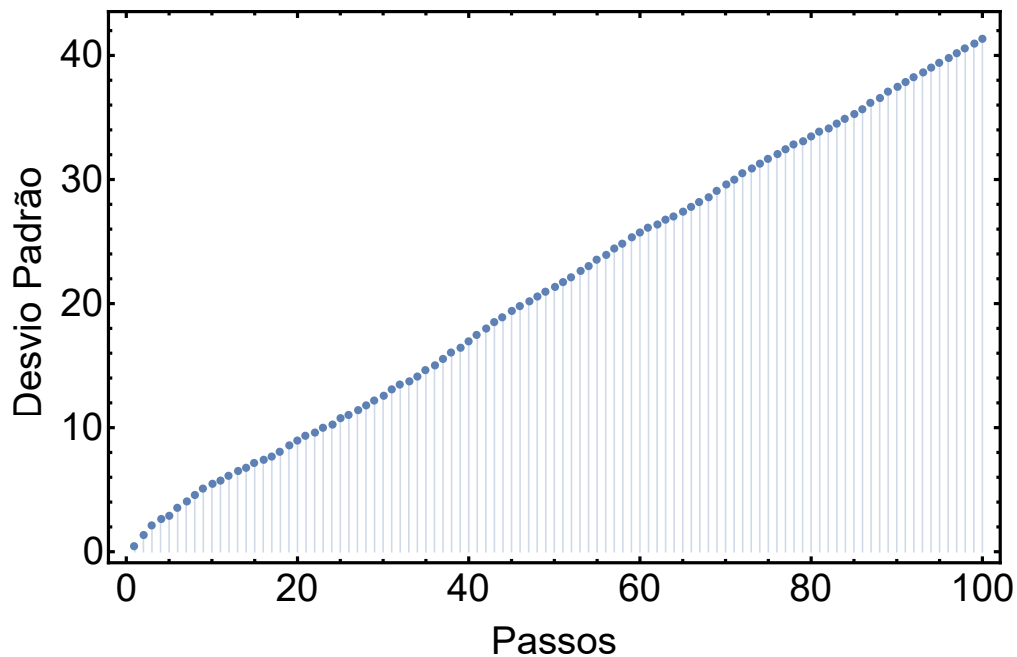


Figura 4.10: Gráfico do desvio padrão em relação ao número de passos. Fonte: O autor.

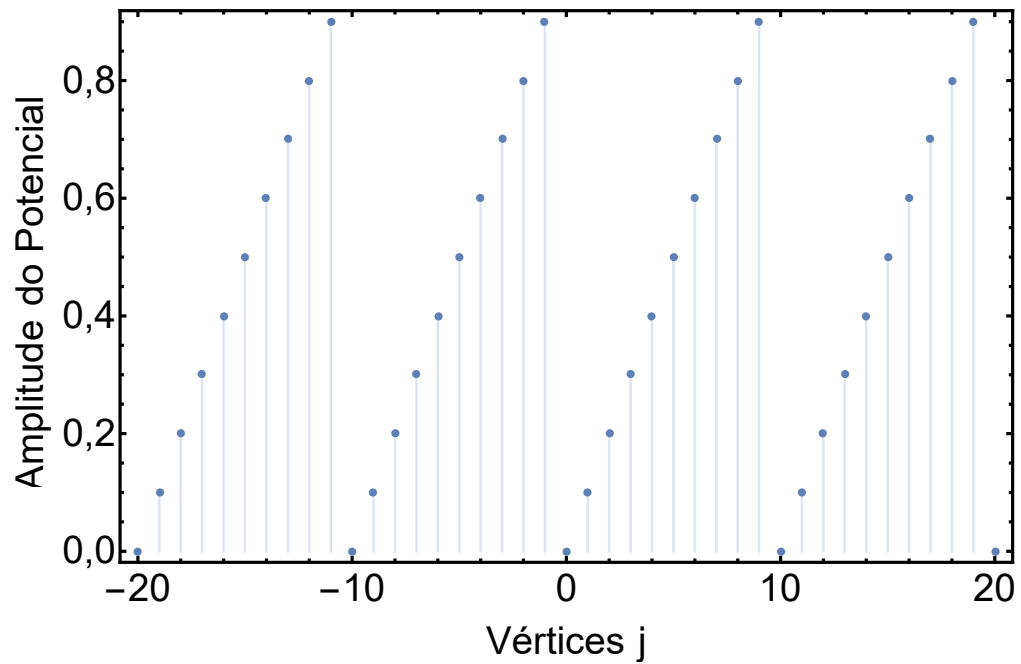


Podemos, através dos gráficos da caminhada quântica e de dispersão, fazer as seguintes observações: a primeira diz respeito no que tange a Figura (4.9) que nos mostra que a densidade probabilidade do caminhante quântico é maior próximo à origem, porém não podemos deixar de observar que existe uma significativa densidade de probabilidade do caminhante estar entre os vértices 50 até 80. Tal comportamento se justifica pelo fato das intensidades dos potenciais entorno da origem serem baixos, conforme ilustra a Figura (4.7). Sendo um  $k$  tendo valor fixo, quanto menor for a intensidade do potencial  $\gamma$ , maior a amplitude de transmissão do caminhante (Figura 4.8), fazendo assim, que o mesmo se espalhe mais rapidamente. A segunda observação é quanto a Figura (4.10), que nos permite observar que, assim como na Figura (4.6) que mostra os gráficos de desvio padrão para a função seno, o desvio padrão para a função cosseno segue um crescimento linear.

### 4.1.3 Caminhada quântica de espalhamento em uma rede de potenciais do tipo delta com intensidade seguindo o perfil de uma aritmética modular

Por último, apresentamos um perfil de amplitudes que segue conforme a função aritmética modular. A aritmética modular, conhecida como função relógio, é um sistema cuja dinâmica é dos números voltarem ao valor inicial quando atingem um certo valor, como por exemplo, o relógio que sempre quando chega no número 12, o mesmo volta ao zero. Assim, na Figura (4.11), apresentamos um perfil para ilustrar a amplitude do potencial que começa com 0 até chegar a 1. Sempre que a amplitude do potencial chegar no valor 1, após 10 vértices, a mesma retorna a um potencial com intensidade 0.

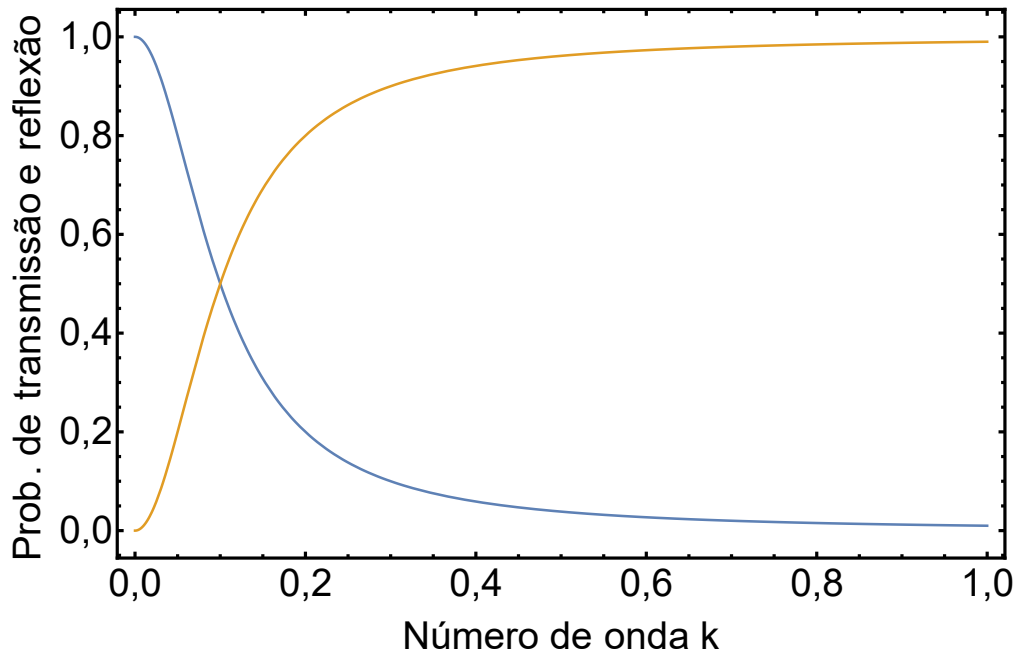
Figura 4.11: Gráfico de uma função aritmética modular. As amplitudes variam de 0 até 1 divididas em 10 vértices. Ao fim de cada ciclo de 10 vértices, o potencial volta a ter intensidade 0 até chegar a 1 no décimo passo. Fonte: O autor.



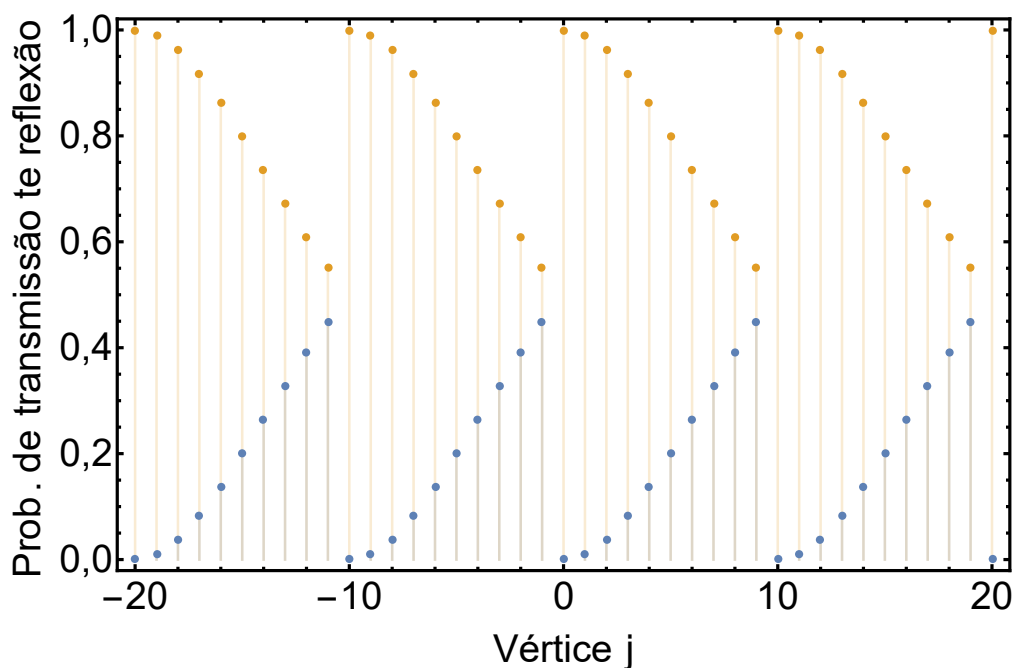
Apresentamos também as probabilidades de reflexão para esse perfil na Figura (4.12), conforme fizemos para os perfis anteriores.

Figura 4.12: Comportamento dos coeficientes de transmissão e reflexão em função do número de onda  $k$  e da intensidade do potencial delta  $\gamma$  para o perfil aritmética modular. Em azul, o comportamento da reflexão, enquanto a linha laranja representa o comportamento da transmissão.

(a) Comportamento da distribuição de probabilidade dos coeficientes de transmissão e reflexão em função do número de onda  $k$  e em função de  $\gamma = 1$  em um perfil aritmética modular. Em azul, mostramos o comportamento da reflexão, enquanto a linha laranja representa o comportamento do transmissão. Fonte: O autor.



(b) Gráfico das probabilidades de transmissão e reflexão sob potenciais que segue uma função aritmética modular de 10 potenciais cuja intensidade varia de 0 até 1,0. Nele avalizamos seu comportamento cuja partícula tem um número de onda  $k = 1$ . Fonte: O autor.





No gráfico 4.12(a), podemos observar que a intensidade  $\gamma$  para o vértice 1 é de 0,1. Logo, quando o número de onda é 0, a probabilidade de reflexão é máxima, enquanto a probabilidade de transmissão é nula. As probabilidades de transmissão e de reflexão são iguais logo quando  $k$  tem o mesmo valor da intensidade do potencial, isto é, 0,1. A medida que se aumenta o valor de  $k$ , observa-se que a probabilidade de transmissão cresce enquanto que a de reflexão diminui.

No segundo gráfico, 4.12(b), avaliamos a distribuição de probabilidade entres os vértices -20 até 20. Nele, podemos observar que a cada 10 vértices, apresenta-se o mesmo comportamento, isso se justifica porquê a ao final de 10 vértices, inicia-se uma nova sequência de potenciais com as mesmas amplitudes que a sequência anterior. Agora vamos analisar uma única sequência, do vértice 0 até o vértice 9, de modo que a análise se aplique a todas as demais sequências. Para o vértice 0, cuja a amplitude do potencial é 0 (Figura 4.12), a probabilidade de transmissão é máxima enquanto a probabilidade de reflexão é nula. Tal característica muda a medida que seguimos para o segundo potencial, vértice 1, onde aumenta probabilidade de reflexão enquanto diminui a de transmissão. As probabilidades só terão o mesmo valor quando a amplitude do potencial tiver o mesmo valor de  $k$ , isto é, no vértice 9.

Por fim, executamos a caminhada quântica para esse perfil. Com estado inicial  $|\psi\rangle = |+, 0\rangle$ , após 100 passos, a distribuição de probabilidade é representada pela figura 4.13, junto a ele, os gráficos de dispersão do desvio padrão da caminhada quântica de espalhamento, figura 4.14.

Figura 4.13: Gráficos da distribuição de probabilidade para uma caminhada de espalhamento cujo o potencial delta associado a cada vértice segue a uma função aritmética modular para  $n = 10$  após 100 passos. Fonte: O autor.

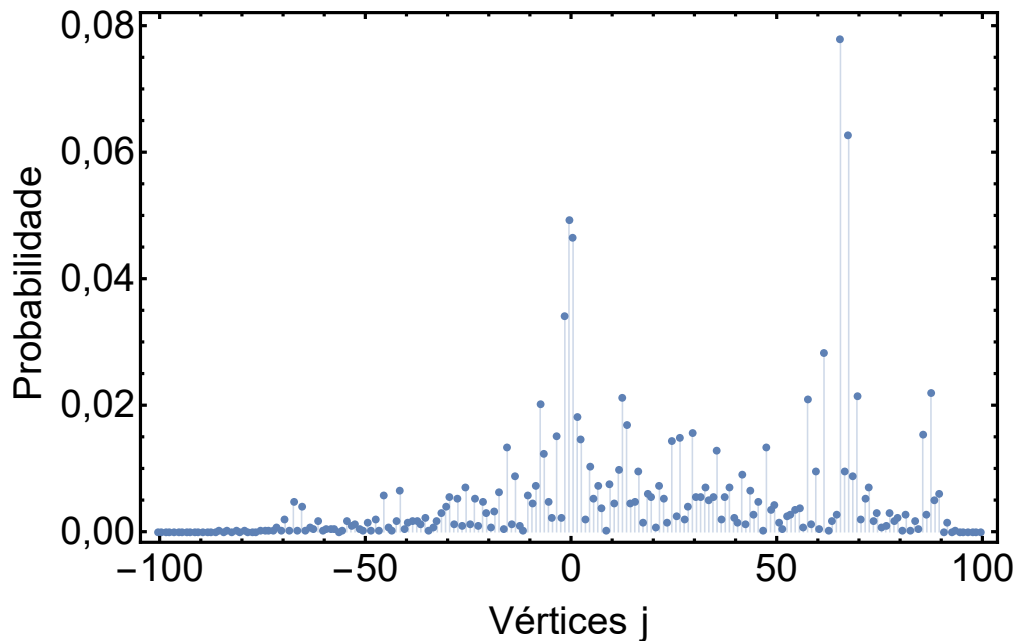
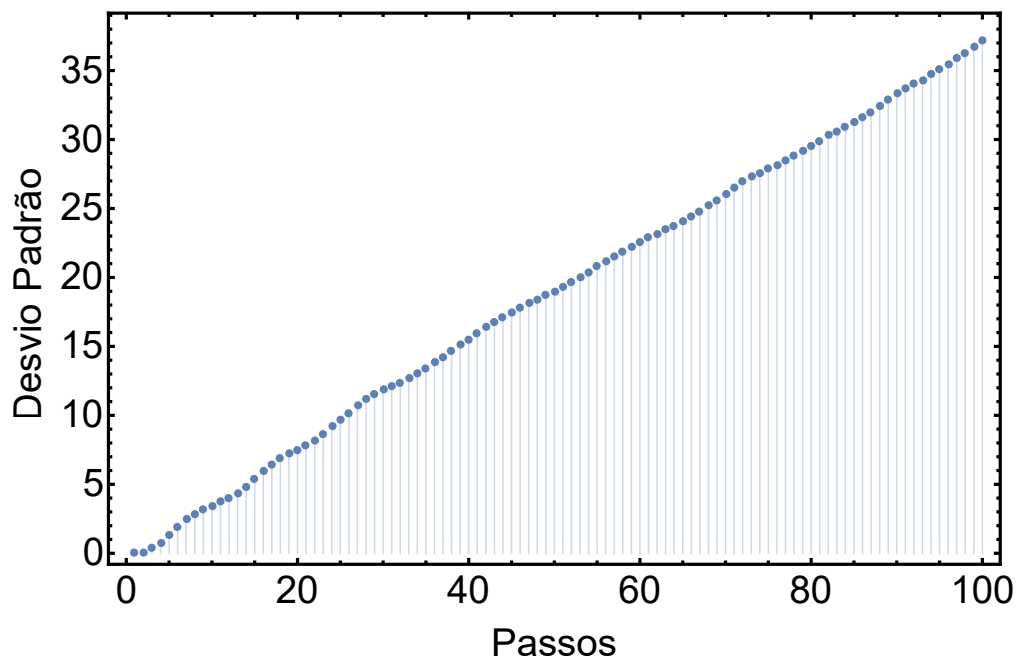


Figura 4.14: Gráfico do desvio padrão em relação ao número de passos. Fonte: O autor.



Nessa caminhada quântica, observa-se que, diferentemente dos outros dois perfis de rede, a maior densidade de probabilidade de se encontrar o caminhante, é próximo do vértice 70. Em compensação, iguais para os demais perfis, os gráficos de dispersão do desvio padrão da caminhada quântica de espalhamento, também apresenta um caráter linear. Esse comportamento se justifica pelo fato dos primeiros passos, o caminhante

se deparar com barreiras de potenciais com intensidades baixas (Figura 4.11), de modo que a amplitude de transmissão é alta (Figura 4.12), assim, permitindo que o mesmo se espalhe com maior velocidade, fazendo que, dentre os três perfis apresentados, para a função aritmética modular, seja o único que não apresente maior densidade em torno na origem.

## 4.2 Equivalência entre caminhada quântica com moeda e espalhamento

Nas seções anteriores apresentamos dois modelos de caminhadas quânticas (moeda e espalhamento). Agora, resta-nos apresentar uma prova analítica da equivalência de tais modelos, isto é, independente do modelo de caminhada quântica escolhido, os resultados obtidos para cada posição do vértice serão os mesmos, embora que. Tal equivalência foi provada em [41] para um caso particular, porém em [20] foi demonstrada para casos gerais. Para desenvolver essa prova analítica, foi usado um operador isomorfo  $E$  de projeção, que tem a função de mapear os estados das caminhadas quânticas tanto nas ligações (arestas), quanto nos vértices,  $\mathcal{H} \mapsto \mathcal{H}_c$ :

$$E|\mp, j\rangle = |j\rangle \otimes |\mp\rangle, \quad (4.12)$$

onde  $|\mp, j\rangle$  é o estado do caminhante quântico nas arestas enquanto que  $|j\rangle \otimes |\mp\rangle$  é os estados do caminhante quântico nos vértices.

Obtemos a equivalência entre as caminhadas provando a igualdade do produto entre do operador projetor  $E$  e o seus respectivos operadores de evolução  $U$

$$U_c E = U E, \quad (4.13)$$

sendo  $U$  e o operador de evolução da caminhada quântica de espalhamento e  $U_c$  operador de evolução da caminhada quântica com moeda.

Do lado esquerdo da equação (3.36), usaremos as equações definidas nos capítulos anteriores que, para facilitar a compreensão, as reescrevemos como:

$$U_c = S_p \otimes (1_p \otimes C_c).$$

Para o lado direito da equação (3.36), lembremos que o operador de evolução da caminhada de espalhamento  $\mathbf{U}$  é

$$\begin{aligned}\mathbf{U}|+1, j\rangle &= a|-1, j-1\rangle + c|+1, j+1\rangle \\ \mathbf{U}|+1, j\rangle &= b|-1, j-1\rangle + d|+1, j+1\rangle\end{aligned}\quad (4.14)$$

Além disso, para fazer a demonstração, vamos fazer as seguintes substituições na notação já escrita:

$$a = \alpha^-, \quad b = \alpha^+ \quad c = \beta^- \quad d = \beta^+$$

Aplicando o operador  $\mathbf{E}$  no lado esquerdo da equação (3.36), temos

$$\mathbf{E}\mathbf{U}_c| \mp 1, j\rangle = U_c|j\rangle \otimes | \mp \rangle \quad (4.15)$$

$$\begin{aligned}\mathbf{U}_c\mathbf{E}| \mp 1, j\rangle &= (\mathbf{S} \otimes |+\rangle\langle +| + \mathbf{S}^\dagger \otimes |-\rangle\langle -|)(1_p \otimes C_c)(|j\rangle \otimes | \mp \rangle) \\ \mathbf{U}_c\mathbf{E}| \mp 1, j\rangle &= (\mathbf{S} \otimes |+\rangle\langle +| + \mathbf{S}^\dagger \otimes |-\rangle\langle -|)(|j\rangle \otimes (\alpha^\mp |-\rangle + \beta^\mp |+\rangle)) \\ \mathbf{U}_c\mathbf{E}| \mp 1, j\rangle &= \alpha^\mp |j-1\rangle \otimes |-\rangle + \beta^\mp |j+1\rangle \otimes |+\rangle.\end{aligned}\quad (4.16)$$

Agora para o lado direito:

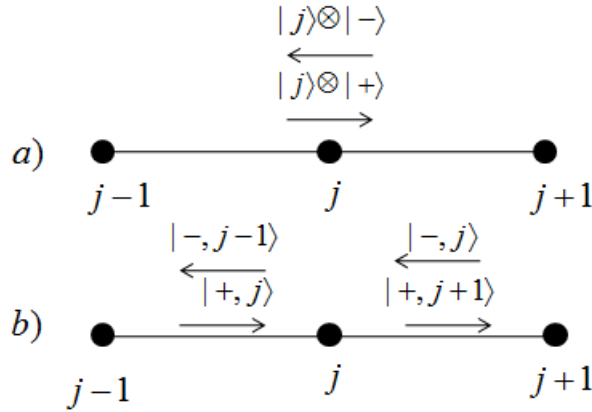
$$\mathbf{U}\mathbf{E}| \mp 1, j\rangle = \mathbf{E}(\alpha^\mp |-1, j-1\rangle + \beta^\mp |+1, j+1\rangle) \quad (4.17)$$

$$\begin{aligned}\mathbf{U}\mathbf{E}| \mp 1, j\rangle &= (|j\rangle \otimes | \mp \rangle)(\alpha^\mp |-1, j-1\rangle + \beta^\mp |+1, j+1\rangle) \\ \mathbf{U}\mathbf{E}| \mp 1, j\rangle &= \alpha^\mp |j-1\rangle \otimes |-\rangle + \beta^\mp |j+1\rangle \otimes |+\rangle.\end{aligned}\quad (4.18)$$

Comparando as equações (4.16) e (4.18), nota-se que elas são iguais. Portanto, a caminhada quântica de espalhamento é unitariamente equivalente à caminhada quântica com moeda.

Embora equivalentes, existem diferenças nas probabilidades, vide as Tabelas (3.1 e 3.2). Tais diferenças não estão associadas à dinâmica da caminhada quântica, mas sim com a forma com que fazemos a projeção nos estados de base para se obter as probabilidades [16]. Para ilustrar, vejamos a figura a seguir

Figura 4.15: Representação esquemática de duas redes que ilustram a posição onde se obtém as probabilidades das caminhadas quânticas com moeda e de espalhamento. Junto a seu vértice (rede a)), seus respectivos estados e quanto as arestas, (rede b)), também seus estados. A rede a) nos mostra que a probabilidade da partícula de uma caminhada quântica com moeda ocorre nos vértices, enquanto que na rede em b) obtemos suas probabilidades nas arestas. Fonte: O autor.



Com base na Figura (4.13) rede a), a probabilidade no vértice  $j$  é obtida pela adição dos quadrados das amplitudes dos estados  $|j\rangle \otimes |+\rangle$  e  $|j\rangle \otimes |-\rangle$ , e assim definido por

$$P_{j;n} = |\langle j| \otimes \langle -|\psi(n)\rangle|^2 + |\langle j| \otimes \langle +|\psi(n)\rangle|^2, \quad (4.19)$$

enquanto que a obter a probabilidade na caminhada quântica de espalhamento, conforme ilustra a Figura (4.13) rede b) entre os vértices  $(j-1, j)$ , as probabilidades são obtidas pela soma do quadrado das amplitudes dos estados presentes no mesmo vértice.

$$P_{j-1,j}(n) = |\langle -1, j-1|\psi(n)\rangle|^2 + |\langle +1, j|\psi(n)\rangle|^2, \quad (4.20)$$

e entre os vértices  $(j, j+1)$

$$P_{j,j+1}(n) = |\langle -1, j|\psi(n)\rangle|^2 + |\langle +1, j+1|\psi(n)\rangle|^2. \quad (4.21)$$

### 4.2.1 Exemplo de equivalência

Para ilustrar a equivalência entre os modelos, vamos propor reproduzir os resultados obtidos em [11] o qual o autor utilizou o método de caminhada quântica com moeda, e executar essa mesma caminhada agora com o modelo de caminhada quântica de espalhamento. Neste trabalho foi analisado o comportamento de uma caminhada quântica com um operador moeda que varia no decorrer da rede e suas especificações são mostradas na seção (3.4).

Sabendo que, como anunciado na seção (4.1), devido à equivalência entre os modelos de caminhadas quânticas (mostrado no tópico anterior), e conhecida a matriz de espalhamento dependente da energia (equação 4.9), podemos obter um operador moeda dependente da energia  $C_j$ . Com isso, para esse exemplo, devemos fazer o processo contrário, de  $C_j$  devemos encontrar a matriz de espalhamento  $S_e$ .

Sendo  $C_j$  definido em [11] como

$$C_j = \begin{pmatrix} \cos(2\pi\alpha j) & -\text{sen}(2\pi\alpha j) \\ \text{sen}(2\pi\alpha j) & \cos(2\pi\alpha j) \end{pmatrix}. \quad (4.22)$$

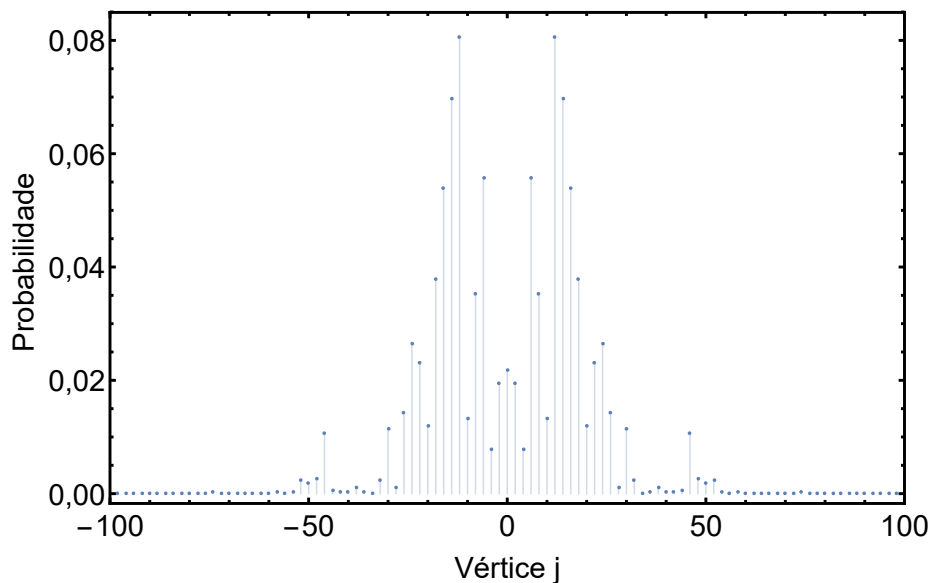
onde  $j$  representa o vértice e  $\alpha$  é o inverso do período ( $\alpha = \pi/2$ ), com o uso do operador isomorfo  $E$ , obtemos a seguinte matriz de espalhamento

$$S_e = \begin{pmatrix} -\text{sen}(2\pi\alpha j) & \cos(2\pi\alpha j) \\ \cos(2\pi\alpha j) & \text{sen}(2\pi\alpha j) \end{pmatrix}. \quad (4.23)$$

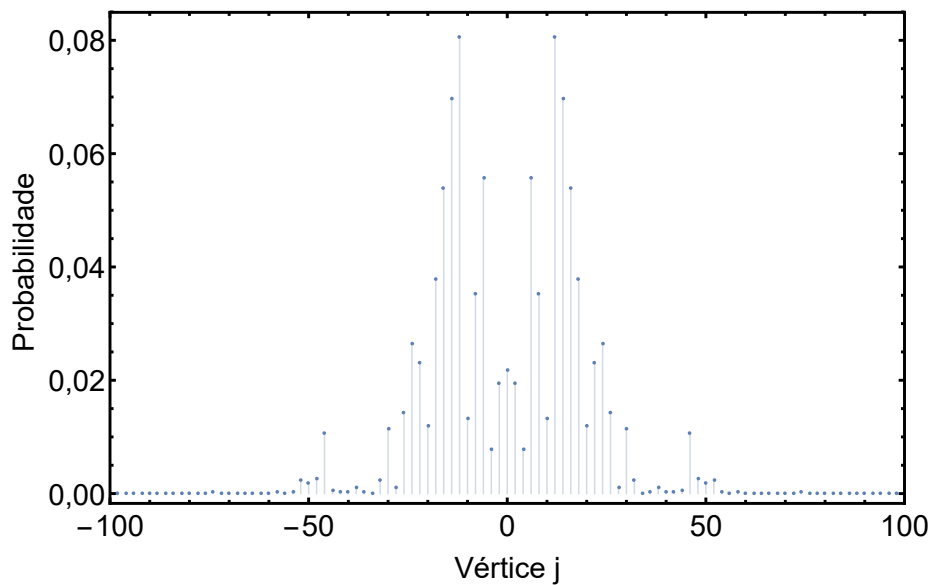
Para iniciar a caminhada quântica de espalhamento com essa configuração, usamos o estado inicial  $|\psi_0\rangle = | + 1, j \rangle$ . O resultado para ambas as caminhadas quânticas (de moeda e espalhamento), são mostradas na Figura (4.16). Com base nesses dois gráficos, podemos observar que os resultados obtidos foram equivalentes, podendo assim verificar que independente do método de caminhada utilizada, os resultados são iguais. Também observamos que no gráfico apresentado, a probabilidade  $j$  limita-se a uma evolução de 100 passos, porém à evolução da caminhada quântica foi para 1000 passos. Fora desse espaço entre -100 e 100 passos, não há nenhum valor diferente de 0 observado.

Figura 4.16: O gráfico 4.16(a), mostra os resultados da caminhada quântica de 1000 passos pelo método de espalhamento, enquanto o gráfico 4.16(b), mostra o resultado numérico obtido pela caminhada quântica com moeda não homogênea.

(a) Caminhada quântica de espalhamento. Fonte: O autor.



(b) Caminhada quântica com moeda. Fonte: O autor.



## Conclusão

Nesse trabalho, propomos o estudo das caminhadas quânticas de tempo discreto. Ao fim dele, chegamos a duas conclusões:

Primeiramente, na seção (4.3) pudemos avaliar a dinâmica da caminhada com base na distribuição de probabilidade para alguns perfis de rede. Com os resultados obtidos, observamos que a distribuição de probabilidade varia significativamente a medida que muda o perfil da rede. Observamos também, que a densidade de probabilidade é maior para os perfis seno e cossenos se encontram próximos da origem. Já para o terceiro perfil, a densidade de probabilidade é maior próximo do vértice 70. Observa-se que para todos os perfis, os gráficos de desvio padrão apresentam resultados que seguem um crescimento linear em relação ao número de passos.

Na seção (4.4) pudemos verificar que os nossos resultados numéricos obtidos pelo uso da caminhada quântica de espalhamento convergem com resultados obtidos em [11], e assim, pudemos verificar a validade da equivalência entre os modelos de caminhada quântica com tempo discreto, proposto por [20].

Com isso, podemos concluir nesse trabalho que é possível verificar sua equivalência no estudo das caminhadas quânticas em diferentes configurações. Concluímos também que, quando comparada caminhada quântica de espalhamento para os três perfis propostos, com uma caminhada onde não há presença de barreiras de potenciais, a caminhada apresenta um amplo espalhamento na distribuição de probabilidade, um comportamento superdifuso.

### 5.1 Perspectivas Futuras

Quanto as perspectivas do estudo das caminhadas quânticas com tempo discreto, propomos três estudos: a primeira é avaliar e descrever uma caminhada quântica de es-



palhamento, em uma linha unidimensional infinita, o comportamento de duas ou mais partículas sob influência de potenciais em cada vértice; a segunda, sob uma rede unidimensional finita, descrever o comportamento de um caminhante quântico cuja as bordas da rede interajam com o sistema, de modo que quando a partícula chegue na borda, a mesma remeta a partícula novamente para o sistema; e por terceiro, estudar os modelos de caminhada quântica e várias topologias, fazendo paralelos entre elas.

## Referências Bibliográficas

- [1] B. F. Venâncio. Caminhadas quânticas em redes regulares 2d. um tratamento geral. Master's thesis, Universidade Federal do Paraná. 2013. , 17, 19, 23, 35, 36
- [2] A. Ambainis, E. Bach, A. Nayak, and A. Vishwanath e J. Watrous. One-dimensional quantum walks. In *Proceedings of the thirty-third annual ACM symposium on Theory of computing - STOC '01*. ACM Press, 2001. , 27
- [3] R. Eisberg e Resnick R. *Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos e Partículas*. (7º ed.), Rio de Janeiro: Campus, 1988. 11
- [4] D J. Griffiths. *Mecânica Quântica*. 2ed. São Paulo: Person Prentice Hall, 2011. 11, 12
- [5] S. Oliveira. Computação quântica: Manipulando a informação oculta do mundo quântico. *Ciência Hoje* 193, 2003. 12
- [6] R. J. Santos. *Um Curso de Geometria Analítica e Álgebra Linear*. Departamento de Matemática, ICEX, UFMG. 2003. 12, 19
- [7] L. Ferreira. O problema da satisfatibilidade booleana (sat), 2016. 12
- [8] R. P. Feynman. Mechanical computers. foundations of physics. *Foundations of physics Springer*, v. 16, n. 6, p. 507531, 1986. 12
- [9] J. Kempe. Quantum random walks: an introductory overview. *Contemporary Physics* 44, 307, 2003. 12, 22, 26
- [10] A. M. Childs and E. Farhi e S. Gutmann. An example of the difference between quantum and classical random walks. *Quantum Information Processing* 1, 35. 12, 22
- [11] Y. Shikano e H Katsura. Localization and factality in inhomogeneous quantum walks with self-duality. *Physical Review E* 82, 2010. 12, 13, 14, 33, 34, 58, 59, 61

- [12] A.M. Childs. Universal computation by quantum walk. *Physical Review Letters*, 2009. **12**
- [13] C. M. Chandrashekar. *Discrete-Time Quantum Walk - Dynamics and Applications*. PhD thesis, 2009. **12**
- [14] T. Kitagawa, M. Rudner, and E. Berg e E. Demler. Exploring topological phases with quantum walks. *e-print arXiv:1003.1729*, 2010. **12**
- [15] Y. Aharonov and I. Davidovich e N. Zagury. Quantum random walks. *Physical Review A* *48*, *2*, 1687, 1993. **13, 22**
- [16] F. M. de Andrade. *Métodos de Função de Green na Análise de Grafos Quânticos e Caminhadas Quânticas*. PhD thesis, Universidade Federal do Paraná. 2009. **13, 25, 29, 33, 36, 39, 57**
- [17] J. Du, H. Li, X. Xu, M. Shi, J. Wu, and X. Zhou e R. Han. Experimental implementation of the quantum random-walk algorithm. *Physical Review A*, *67*, 2003. **13**
- [18] C. A. Ryan, M. Laforest, and J. C. Boileau e R. Laflamme. Experimental implementation of discrete time quantum random walk on an quantum information processor. *Physical Review A*, *72*, 2005. **13**
- [19] B. C. Travaglione e G. J. Milburn. Implementing the quantum random walk. *Physical Review. A* *65*, 2002. **13, 16, 26**
- [20] F. M. Andrade e M. G. E. da Luz. Equivalence between discrete quantum walk models in arbitrary topologies. *Physical Review. A*, *v. 80*, *p. 052301*. **13, 42, 56, 61**
- [21] J. E. Neigel e J. C. Avise. Application of a random walk model to geographic distributions of animal mitochondrial dna variation. *Genetics*, *135*, 1209–1220, 1993. **15**
- [22] R. Mantegna e H. Stanley. Introduction to econophysics: Correlations and complexity in finance. *Cambridge University Press*, 1999. **15**
- [23] K. Pearson. The problem of the random walk. *Nature* *72*, *294; 318; 342*, 1905. **15**
- [24] Movimento browniano, Disponível em: [www.portalaction.com.br/processo-estocastico/movimento-browniano2018](http://www.portalaction.com.br/processo-estocastico/movimento-browniano2018). **15**
- [25] J.M. Silva e J.A.S. Lima. Quatro abordagens para o movimento browniano. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, *25-35*, 2007. **15, 16**
- [26] N. Wiener. Differential space. *Journal of Mathematical Physics*. *131-174*, 1923. **16**

- [27] S. R. A. Salinas. *Introdução à Física Estatística*. EdUSP 2005. 16
- [28] A. M. L. C. de Feijoo. *Estatística Descritiva: Medidas de Dispersão*. 2010. 18
- [29] J. Watrous. Quantum algorithms for solvable groups. In *STOC '01: Proceedings of the thirty-third annual ACM symposium on Theory of computing*, page 60, New York, NY, USA, 2001. ACM. 22
- [30] E. Feldman e M. Hillery. Scattering theory and discrete-time quantum walks. *Physical Review. A* 324, 277-281, 2004. 22, 35
- [31] M. Hillery and J. Bergou e E. Feldman. Quantum walks based on an interferometric analogy. *Physical. Review. A* 68, 3, 032314, 2003. 22, 35, 41
- [32] Y. Shikano. From discrete time quantum walk to continuous time quantum walk in limit distribution. *J. Comput. Theor. Nanosci.* 10, 1558-1570 2013, 2013. 22
- [33] O. Mulken e A. Blumen. Continuous-time quantum walks: Models for coherent transport on complex networks. *Physics Reports* 502, 37-87, 2011. 22
- [34] D. Aharonov, A. Ambainis, and J. Kempe e U. Vazirani. Quantum walks on graphs. *Proceedings of ACM Symposium on Theory of Computation (STOC'01), July*, p. 50-59, 2001. 22
- [35] J.J. Sakurai. e J. Napolitano. *Mecânica Quântica Moderna*. Ed BookMan 2.Edição, Porto Alegre. Bookman, 2013. 24
- [36] Todd A. Brun and Hilary A. Carteret e A. Ambainis. Quantum walks driven by many coins. *Physical Review. A* 67, 052317. 29
- [37] A. Bondarenko e V. Dedok. Anderson localization in 1-d quantum random walk. *Science and Technology*. 38
- [38] F. M. de Andrade, A.G.M. Schmidt, E. Vicentini, and B.K. Cheng e M.G.E da Luz. Green's function approach for quantum graphs: An overview. *Physics Reports*, 2016. 41
- [39] S. Albeverio, F. Gesztesy, and R. Hoegh-Krohn e H. Holden. *Solvable Models in Quantum Mechanics*. AMS Chelsea Publishing, second edition, 2004. 41
- [40] A. G. M. Schmidt and B Kang e M. G. E. da Luz. Green functions for generalized point interactions in 1d: A scattering approach. *Physical Review A*, 2002. 41
- [41] M. Hillery and J. Bergou e E. Feldman. Quantum walks based on an interferometric analogy. *Physical Review. A* 68, 3, 032314 (2003). 56