

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE PONTA GROSSA
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIAS**

ALANA SPAK DOS SANTOS

EMARANHAMENTO EM CAMINHADAS QUÂNTICAS

**PONTA GROSSA
2022**

ALANA SPAK DOS SANTOS

EMARANHAMENTO EM CAMINHADAS QUÂNTICAS

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

Orientador: Prof. Dr. Fabiano Manoel de Andrade

Ponta Grossa
2022

S237 Santos, Alana Spak dos
Emaranhamento em caminhadas quânticas / Alana Spak dos Santos. Ponta
Grossa, 2022.
55 f.

Dissertação (Mestrado em Ciências - Área de Concentração: Física),
Universidade Estadual de Ponta Grossa.

Orientador: Prof. Dr. Fabiano Manoel de Andrade.

1. Caminhadas quânticas. 2. Caminhadas quânticas não homogêneas. 3.
Emaranhamento. I. Andrade, Fabiano Manoel de. II. Universidade Estadual de
Ponta Grossa. Física. III.T.

CDD: 530.1

TERMO DE APROVAÇÃO

ALANA SPAK DOS SANTOS

“Emaranhamento em caminhadas quânticas”

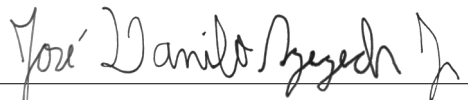
Dissertação aprovada como requisito parcial para obtenção no grau de Mestre no Programa de Pós-Graduação em Ciências – Física da Universidade Estadual de Ponta Grossa, pela seguinte banca examinadora.



Prof. Dr. Fabiano Manoel de Andrade - UEPG
Orientador



Prof. Dr. Renato Moreira Angelo - UFPR
Examinador



Prof. Dr. José Danilo Szezech Junior - UEPG
Examinador

Para as meninas que sonham em fazer ciência.

AGRADECIMENTOS

À minha família, em especial minha mãe Cecília, por todo apoio, incentivo e presença ao longo de toda a minha trajetória.

Ao professor Fabiano Manoel de Andrade por todo conhecimento compartilhado, paciência e orientação, desde a primeira iniciação científica até a dissertação, e principalmente, por me apresentar a beleza da mecânica quântica.

Aos meus amigos, em especial à Jessica, pelo apoio, conversas e momentos de descontração.

Ao grupo de pesquisa de Física Quântica e Informação Quântica (FQIQ) pelas discussões.

À todos que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

À Capes pelo fomento.

“Eu, um universo de átomos, um átomo no universo.” (Richard P. Feynman)

RESUMO

Neste trabalho, estudamos as caminhadas quânticas analisando suas principais propriedades. Inicialmente, revisamos o conceito de caminhadas aleatórias clássicas, nas quais as caminhadas quânticas são baseadas. Assim, apresentamos dois modelos de caminhadas quânticas de tempo discreto, as caminhadas quânticas com moeda e de espalhamento, e a equivalência entre eles. A partir do mapeamento de um modelo no outro, obtemos uma caminhada quântica com moeda dependente da energia. Em seguida, introduzimos duas propriedades bastante exploradas na literatura para esses sistemas, o emaranhamento e desvio padrão. Após, incluímos não homogeneidade no âmbito espacial, primeiramente baseando-nos em trabalhos já desenvolvidos para o modelo de caminhadas quânticas com moeda e estendendo a análise para as caminhadas quânticas de espalhamento considerando interações pontuais como centros espalhadores variando de acordo com a posição na rede. Para todos os casos considerados, analisamos o emaranhamento e desvio padrão. Para o desvio padrão, por exemplo, notamos que ao aumentar a não homogeneidade, a dispersão diminui quando comparada a versão homogênea mas continua sendo maior do que a obtida para a caminhada clássica, apresentando comportamento superdifusivo na maior parte dos casos. Da mesma forma, o emaranhamento vai perdendo estabilidade e apresentando oscilações sem aproximação a valores limites à medida que a não homogeneidade é introduzida.

Palavras-chave: Caminhadas quânticas. Caminhadas quânticas não homogêneas. Emaranhamento.

ABSTRACT

In this work, we study the quantum walks analyzing their main properties. First, we revise the notion of classical random walks, on which the quantum walks are based. Thus, we present two models of discrete-time quantum walks, the coined and scattering quantum walks, and then the equivalence between them. From mapping one model onto the other, we obtain an energy-dependent coined quantum walk. Then, we introduce the two most explored properties in the literature for these systems, entanglement and standard deviation. After that, we include inhomogeneity in the spatial degree of freedom, firstly based on works already developed for the coined quantum walks and extending the analysis for the scattering quantum walks considering point interactions as scattering centers that vary with the position on the network. In all the cases considered, we analyze the entanglement and standard deviation. For example, for the standard deviation, we notice that by increasing the inhomogeneity, the dispersion decreases compared to the homogeneous case. Still, it keeps being larger than the random walk, featuring a superdiffusive behavior in most cases. Similarly, the entanglement goes losing stability and presents oscillation without approaches a limit value as the inhomogeneity is introduced in the networks.

Keywords: Quantum walks. Inhomogeneous quantum walks. Entanglement.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Distribuição de probabilidade para a caminhada aleatória clássica considerando posição inicial $j = 0$ e $p = q = 1/2$ após $n = 100$ passos.	15
Figura 2.2 – Grafo unidimensional representando as redes fictícias nas quais as caminhadas quânticas ocorrem.	16
Figura 2.3 – Distribuição de probabilidade para a caminhada Hadamard com estado inicial $ \psi(0)\rangle = 0\rangle \otimes -\rangle$ para $n = 100$ passos.	19
Figura 2.4 – Distribuição de probabilidade para a caminhada utilizando a moeda Hadamard (linha cheia) com estado inicial simétrico $ \psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(0\rangle \otimes -\rangle + i 0\rangle \otimes +\rangle)$ ou utilizando a moeda balanceada da Eq. (2.20) e a caminhada clássica (linha tracejada) para $n = 100$ passos.	20
Figura 2.5 – (a) Divisão de feixes em um vértice qualquer da rede, onde r indica amplitude de reflexão e t de transmissão e (b) estados da caminhada quântica de espalhamento na aresta entre os vértices j e $j + 1$	21
Figura 2.6 – Distribuição de probabilidade para a caminhada quântica por uma analogia interferométrica para $r = t = 1/\sqrt{2}$ e $ \psi(0)\rangle = - 1,0\rangle$	22
Figura 2.7 – Comparação da caminhada quântica com a moeda Hadamard (linha tracejada) e com a caminhada quântica por uma analogia interferométrica (linha cheia) para $r = t = 1/\sqrt{2}$	23
Figura 2.8 – Amplitudes de transmissão (linha cheia) e reflexão (linha tracejada) considerando potenciais do tipo: (a) δ ; (b) δ' ; (c) cruzado; e (d) assimétrico.	25
Figura 2.9 – Evolução da caminhada quântica com moeda em função da energia (k), considerando os potenciais: (a) δ ; (b) δ' ; (c) caso cruzado; e (d) assimétrico.	26
Figura 3.1 – Desvio padrão da caminhada clássica (CC) e da caminhada quântica com a moeda Hadamard (CQ-H).	29
Figura 3.2 – Emaranhamento entre estado de posição e de moeda, utilizando o operador Hadamard para os estados iniciais assimétrico $ \psi(0)\rangle = 0\rangle \otimes -\rangle$ (linha tracejada) e simétrico $ \psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(0\rangle \otimes -\rangle + i 0\rangle \otimes +\rangle)$ (linha contínua).	33
Figura 4.1 – Distribuição dos operadores moeda $C(\alpha)$ e $C(\beta)$ na rede de acordo com a segunda geração de Fibonacci ($\alpha\beta$) espelhada em relação a origem.	36
Figura 4.2 – Distribuição de probabilidade para redes variando segundo sequência de Fibonacci, considerando as gerações: (a) α ; (b) $\alpha\beta$; (c) $\alpha\beta\alpha$; (d) $\alpha\beta\alpha\beta$; (e) $\alpha\beta\alpha\alpha\beta\alpha$ e (f) assintótica, para $\alpha = \pi/3$ e $\beta = \pi/6$	37
Figura 4.3 – Emaranhamento entre estados de posição e moeda para redes variando segundo sequência de Fibonacci, considerando as gerações: (a) 1ª; (b) 2ª; (c) 3ª; (d) 4ª; (e) 5ª; e (f) sobreposição da geração assintótica (pontos azuis) com a 5ª geração (pontos vermelhos), para $\alpha = \pi/3$ e $\beta = \pi/6$	38

Figura 4.4 – Desvio padrão considerando redes variando segundo sequência de Fibonacci, considerando as 5 primeiras gerações e a geração assintótica, para $\alpha = \pi/3$ e $\beta = \pi/6$	39
Figura 4.5 – (a) Distribuição de probabilidade e (b) emaranhamento entre os estados moeda e posição, utilizando o operador moeda não homogêneo da Eq. (4.2), para $\alpha = \pi/2$ e $n = 100$ passos.	40
Figura 4.6 – Intensidade γ variando com funções: (a) linear; (b) quadrática ; (c) exponencial; (d) transferência perfeita de estado; (e) modular; e (f) seno, em termos da posição j	41
Figura 4.7 – Amplitudes de reflexão (linha tracejada) e transmissão (linha cheia) para interações pontuais δ e δ' com $k = 1$. Intensidade $\gamma(j)$ variando segundo funções: (a) linear; (b) quadrática ; (c) exponencial; (d) TPE; (e) modular; e (f) seno.	42
Figura 4.8 – Distribuição de probabilidade com interações pontuais do tipo δ de Dirac. Intensidade γ variando com funções: (a) linear; (b) quadrática ; (c) exponencial; (d) TPE; (e) modular; e (f) seno.	43
Figura 4.9 – Emaranhamento entre os estados de moeda e posição da partícula com interações pontuais do tipo delta de Dirac. Intensidade γ variando com funções: (a) linear; (b) quadrática ; (c) exponencial; (d) TPE; (e) modular; e (f) seno.	44
Figura 4.10–Desvio padrão para interações pontuais do tipo δ variando ao longo da rede.	45
Figura 4.11–Distribuição de probabilidade com interações pontuais do tipo δ' . Intensidade γ variando com funções: (a) linear; (b) quadrática ; (c) exponencial; (d) segundo TPE; (e) modular; e (f) seno.	46
Figura 4.12–Emaranhamento entre os estados de moeda e posição da partícula com interações pontuais δ' . Intensidade γ variando com funções: (a) linear; (b) quadrática ; (c) exponencial; (d) segundo TPE; (e) modular; e (f) seno.	47
Figura 4.13–Desvio padrão para interações pontuais do tipo δ' variando ao longo da rede.	48

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
2	CAMINHADAS QUÂNTICAS HOMOGÊNEAS	14
2.1	Caminhadas aleatórias clássicas	14
2.2	Caminhadas quânticas discretas	15
2.3	Caminhadas quânticas com moeda	16
2.3.1	Operador Hadamard	18
2.4	Caminhada quântica por uma analogia interferométrica	20
2.5	Equivalência entre os modelos de caminhada quântica com moeda e de espalhamento	22
2.6	Operador moeda dependente da energia	24
3	PROPRIEDADES EM CAMINHADAS QUÂNTICAS	28
3.1	Desvio padrão	28
3.2	Emaranhamento em caminhadas quânticas	29
3.2.1	Emaranhamento na caminhada quântica com a moeda Hadamard	33
4	CAMINHADAS QUÂNTICAS EM REDES NÃO HOMOGÊNEAS	35
4.1	Redes segundo a sequência de Fibonacci	35
4.2	Modelo do Shikano e Katsura	39
4.3	Redes com variações nas interações pontuais	40
4.3.1	Interação pontual delta de Dirac	42
4.3.2	Interação pontual δ'	45
5	CONCLUSÃO	49
5.1	Perspectivas futuras	50
	REFERÊNCIAS	51
	APÊNDICE A – CÁLCULO ANALÍTICO DO EMARANHAMENTO EM CAMINHADAS QUÂNTICAS	54

1 INTRODUÇÃO

Desde a descoberta da mecânica quântica, no começo do século XX, a comunidade científica vem tentando explicar fenômenos com características totalmente contra-intuitivas que governam as leis da natureza. Apesar de ter havido resistências às suas aplicações, a mecânica quântica foi sendo aceita pelos cientistas com o tempo, uma vez que, efeitos como dualidade onda-partícula, superposição, discretização de energia e outros, somente conseguiam ser explicados de acordo com seus princípios e resultados práticos (1). Além disso, a cada novo experimento com resultados consistentes com as previsões teóricas, a mecânica quântica foi sendo consolidada de tal forma que hoje é responsável por diversos avanços tecnológicos e com perspectivas futuras bastante promissoras.

Pelo fato dos resultados previstos pela teoria serem contra-intuitivos, é natural buscar estender problemas bem entendidos e com aplicabilidade na física clássica para a física quântica, a fim de expandir a compreensão dos princípios da nova teoria. Por esse motivo, há o interesse em analisar a versão quântica de um problema conhecido como caminhadas aleatórias clássicas, o qual se denomina caminhadas quânticas (2).

As caminhadas aleatórias clássicas são processos nos quais caminhantes partem de um ponto do espaço e tomam sucessivos passos em direções aleatórias (3). Normalmente, o interesse está em saber a distância a partir do ponto inicial, ou a probabilidade de se encontrar o caminhante em uma dada posição, ou o número de vezes em que um ponto foi revisitado, em função do número de passos em que o caminhante realizou. Além do interesse na teoria de probabilidade pura, as caminhadas aleatórias clássicas possuem aplicações em quase todo campo científico, do movimento Browniano na escala molecular (4), até a criação de estrelas e galáxias na escala cósmica (5). Em escalas intermediárias, exemplos de aplicações estão em biologia (6), medicina (7), ciência da computação (8) e até no mercado financeiro (9).

Na ciência da computação, é sabido que algoritmos baseados nas caminhadas clássicas são utilizados para resolver diversos problemas computacionais. A fim de obter resultados computacionais mais complexos e rápidos, surge o interesse da criação de um computador quântico universal (10). Assim, é razoável procurar inspirações para novos algoritmos quânticos, partindo das caminhadas clássicas e “quantizando-as”. Apesar de Richard Feynman propor um computador baseado nos fundamentos da mecânica quântica no ano de 1986, e que estava diretamente relacionada com as caminhadas quânticas (11), somente em 1993, o termo “*quantum walks*” foi utilizado pela primeira vez por Aharonov *et al.* (12).

Além da utilização na ciência da computação, as caminhadas quânticas podem ser aplicadas em criptografia quântica (13), realização de fases topológicas (14), transições de

fases quânticas (15), memória quântica segura (16), rede neural artificial (17) e metrologia quântica (18). Devido às suas aplicações, novas implementações experimentais surgem a cada dia considerando, por exemplo, átomos neutros presos em redes óticas (19), íons aprisionados (20, 21), ou fóton interagindo com interferômetros (15, 22, 23, 24).

Desde a sua descoberta, as caminhadas quânticas vem sendo amplamente exploradas, de tal forma que surgiram diferentes versões do modelo, como por exemplo: “caminhadas quânticas não homogêneas”, nas quais o caminhante sofre efeitos de não homogeneidade, podendo ser espacial (25) ou temporal (26); “caminhada quântica do elefante” (27), no qual o caminhante possui memória dos eventos que precederam um dado momento, influenciando assim, o movimento futuro; e as “caminhadas quânticas não-hermitianas” (28), nas quais o caminhante possui interação com o ambiente externo. Dessa forma, é um sistema quântico versátil relativo às possibilidades em sua dinâmica.

Os modelos de caminhadas quânticas existentes exploram propriedades que dependem do propósito para o sistema. Podemos citar: localização de Anderson, para o interesse no transporte eficiente da partícula (16); espectro de energia, para uma abordagem alternativa da dinâmica (29); e propriedades de transporte, para a otimização da transferência de estados quânticos (30). Neste trabalho, vamos analisar o emaranhamento (31) e o desvio padrão (26).

O interesse no comportamento de emaranhamento está na possibilidade de quantificação da informação presente no sistema. É por esse motivo que todos os algoritmos quânticos conhecidos que mostram um ganho exponencial comparado com as versões clássicas exploram os efeitos de emaranhamento induzido no sistema. Portanto, o emaranhamento desempenha um papel importante em tornar a computação quântica mais poderosa comparada com a computação clássica, e permite tarefas de informação quântica que são impossíveis no contexto clássico (32). Da mesma forma, o interesse no desvio padrão é devido aos estudos que abordam como principal vantagem em se utilizar a versão quântica do problema, o fato da caminhada quântica ter dispersão quadraticamente mais rápida que o caso clássico na análise unidimensional (2).

O objetivo deste trabalho é revisar dois modelos de caminhadas quânticas homogêneas explorados na literatura e estender o estudo para casos em que a partícula sofre mudanças com não homogeneidade espaciais. Para os cenários considerados, investigamos a dispersão, a partir do desvio padrão da posição, e o emaranhamento entre os graus de liberdade do sistema. As perguntas que gostaríamos de responder são: Caminhadas quânticas não homogêneas permanecem apresentando dispersão quadraticamente maior que a versão clássica? E ainda, existe conexão entre o comportamento do emaranhamento e a dispersão da partícula?

Este trabalho será apresentado da seguinte forma. No capítulo 2 introduzimos dois modelos de caminhadas quânticas de tempo discreto baseadas nas caminhadas aleatórias clássicas, as caminhadas quânticas com moeda e as caminhadas quânticas de espalhamento. Apresentando as principais características de cada caso, como por exemplo distribuição de probabilidade, e

comparando um modelo com o outro, mostramos a equivalência entre eles. A partir do mapeamento entre os modelos, apresentamos as caminhadas quânticas com moedas dependentes da energia. No capítulo 3, apresentamos duas propriedades comumente investigadas nos problemas de caminhadas quânticas, o desvio padrão e o emaranhamento. Tais propriedades são investigadas para todos os casos considerados na dissertação. Em seguida, no capítulo 4, introduzimos não homogeneidade nas caminhadas quânticas no contexto espacial. Para isso, consideramos dois modelos da literatura, um que considera não homogeneidade segundo sequência de Fibonacci (26) e o segundo que considera um operador moeda variando com a posição (25). Expandimos a ideia para o caso no qual as interações pontuais, δ e δ' , variam ao longo da rede, gerando redes não homogêneas. No capítulo 5, apresentamos as conclusões deste trabalho e as perspectivas futuras no estudo das caminhadas quânticas.

2 CAMINHADAS QUÂNTICAS HOMOGÊNEAS

Neste capítulo introduzimos as caminhadas aleatórias clássicas e sua versão quântica, conhecida como caminhadas quânticas. Para o caso quântico, dois modelos de tempo discreto são abordados, as caminhadas quânticas com moeda e as caminhadas quânticas de espalhamento. Em seguida, mostramos que os modelos são duas formas diferentes de tratar o problema porém equivalentes, de tal forma que é possível mapear um modelo no outro. Por fim, obtemos um operador moeda dependente da energia.

2.1 Caminhadas aleatórias clássicas

Uma caminhada aleatória clássica consiste de um caminhante se deslocando em uma rede de forma aleatória, como o nome sugere (3). O objetivo consiste em determinar o valor da probabilidade de encontrar o caminhante em uma dada posição após um número fixo de passos, considerando as condições em que o caminhante está sujeito. Para tratar o problema, vamos considerar um sistema Markoviano, no qual o estado futuro depende apenas do estado presente, não possuindo qualquer correlação com os eventos que o precederam.

Seja o caso unidimensional, no qual o caminhante possui probabilidade p de se deslocar para a direita, e $q = 1 - p$ de se deslocar para a esquerda. Após n passos, todos de mesmo comprimento, a probabilidade de encontrar o caminhante em uma posição j é dada por

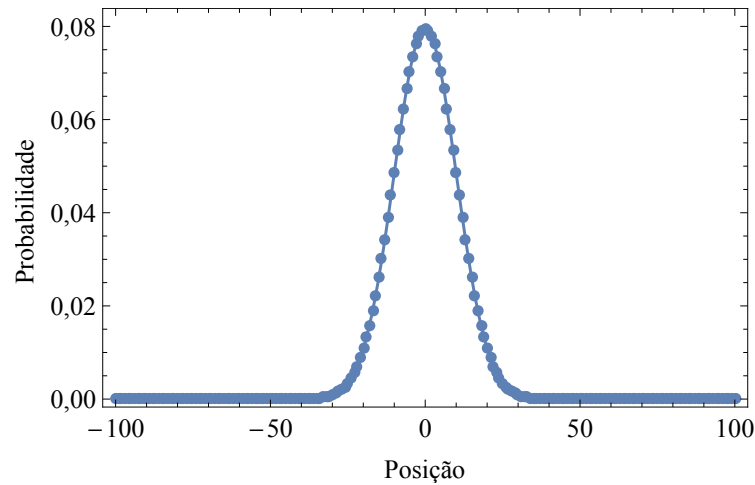
$$P_n(j) = \begin{cases} 0, & \text{se } j + n \text{ é ímpar} \\ \binom{n}{\frac{n+j}{2}} p^{\frac{n+j}{2}} q^{\frac{n-j}{2}}, & \text{se } j + n \text{ é par,} \end{cases} \quad (2.1)$$

onde o termo entre parênteses representa o binômio de Newton, tal que a Eq. (2.1) indica uma distribuição binomial.

Analisando o caso especial no qual o caminhante possui mesma probabilidade de ir tanto para a esquerda quanto para a direita, ou seja, $p = q = \frac{1}{2}$, podemos entender a escolha da direção de deslocamento de acordo com o lançamento de uma moeda não viciada. Por exemplo, se a face obtida for cara, o caminhante se desloca para a direita, e se for coroa para a esquerda, ou vice-versa. Neste caso, a Eq. (2.1) se reduz à forma

$$P_n(j) = \begin{cases} 0, & \text{se } j + n \text{ é ímpar} \\ \frac{1}{2^n} \binom{n}{\frac{n+j}{2}}, & \text{se } j + n \text{ é par.} \end{cases} \quad (2.2)$$

Figura 2.1 – Distribuição de probabilidade para a caminhada aleatória clássica considerando posição inicial $j = 0$ e $p = q = 1/2$ após $n = 100$ passos.



Fonte: A autora.

A distribuição de probabilidade considerando um caminhante partindo da posição $j = 0$ e sob condição de $p = q = \frac{1}{2}$ é mostrada na Figura 2.1. Observamos uma probabilidade grande de encontrar o caminhante em torno da origem, enquanto que nas posições extremas a probabilidade é próxima de zero. Portanto, tipicamente, a partícula acaba não se espalhando por toda a rede e fica próxima da posição inicial da caminhada.

2.2 Caminhadas quânticas discretas

Uma caminhada quântica é entendida como a análoga quântica da caminhada aleatória clássica introduzida na seção 2.1. As caminhadas quânticas podem ser descritas em termos de tempo contínuo ou de tempo discreto (2). Neste trabalho temos interesse no segundo caso, no qual são considerados dois modelos: o definido pelas caminhadas quânticas com moeda, no qual se leva em conta dois sistemas mecânicos quânticos (33), um para o caminhante e outro para a moeda; o outro definido pelas caminhadas quânticas de espalhamento, as quais são baseadas em uma analogia interferométrica (34).

Seja $|\psi\rangle$ o estado de uma partícula sujeita a uma caminhada quântica, de modo que o estado, após a evolução temporal, é descrito como

$$|\psi'\rangle = \mathbf{U}|\psi\rangle, \quad (2.3)$$

onde \mathbf{U} é um operador unitário determinando a evolução temporal do sistema. O operador \mathbf{U} deve ser aplicado para cada passo dado, sucessivamente, sem que se façam medições no sistema nos passos intermediários, efetuando-se a medição somente ao final do processo de

Figura 2.2 – Grafo unidimensional representando as redes fictícias nas quais as caminhadas quânticas ocorrem.



Fonte: A autora.

evolução temporal (2). Isso se deve ao fato de medições em cada processo de sistemas quânticos introduzirem decoerência, resultando desta forma uma caminhada clássica usual.

Para facilitar o entendimento do sistema, associamos as redes fictícias, nas quais ocorrem as caminhadas quânticas, aos grafos conforme (35). Na Figura 2.2 temos um grafo unidimensional composto por um conjunto de vértices, representados pelos pontos, e por um conjunto de arestas, representadas pelas linhas unindo os pontos. Neste trabalho, vamos analisar apenas caminhadas quânticas unidimensionais, para as quais os grafos considerados são sempre da forma da Figura 2.2.

Nas próximas seções vamos introduzir os dois modelos de caminhadas quânticas de tempo discreto mencionados.

2.3 Caminhadas quânticas com moeda

Na analogia da rede fictícia com grafos, a caminhada quântica com moeda considera os vértices representando as posições possíveis para a partícula e as arestas como as distâncias entre as posições, constantes neste caso, como representada na Figura 2.2.

Para descrever o modelo, precisamos levar em conta dois sistemas mecânicos quânticos, um para a partícula e outro para a moeda. Isso significa que devemos considerar dois espaços de Hilbert distintos. O primeiro consiste no espaço de Hilbert de posição, \mathcal{H}_p , no qual se define o estado quântico $|j\rangle$, com $j \in \mathbb{Z}$, onde \mathbb{Z} representa o conjunto dos números inteiros. O segundo, associado a um sistema quântico adicional, é o espaço de Hilbert de moeda, \mathcal{H}_c , correspondente aos estados de escolha da direção para a qual a partícula deslocar-se-á. O espaço de Hilbert de moeda é um espaço bidimensional, porque para cada posição j existem dois estados moedas $|+\rangle$ e $|-\rangle$, correspondentes a direita e esquerda, respectivamente. A cada rotação no espaço de moeda, teremos combinações lineares dos estados $|+\rangle$ e $|-\rangle$, o que remete ao lançamento de uma moeda na caminhada aleatória clássica para a escolha de direção da partícula. Porém, no problema clássico as possibilidades de direção são esquerda **ou** direita, enquanto que no caso quântico existe uma combinação linear dos sentidos, ou seja, a partícula se desloca para esquerda e direita simultaneamente.

O espaço de Hilbert do sistema total é dado por $\mathcal{H} = \mathcal{H}_p \otimes \mathcal{H}_c$, com \otimes representando o produto direto entre os espaços considerados. Dessa forma, o estado de uma partícula é descrito como

$$|\psi\rangle = |j\rangle \otimes |\sigma\rangle, \quad (2.4)$$

com $\sigma = \pm$. Os estados moedas $|+\rangle$ e $|-\rangle$ normalizados são definidos como

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Notamos a inversão na notação utilizada em sistema de spin-1/2 (36). O operador unitário responsável pela evolução temporal é dado por

$$\mathbf{U}_c = \mathbf{S}_p(\mathbb{I}_p \otimes \mathbf{C}_c), \quad (2.6)$$

onde \mathbf{S}_p é o operador deslocamento, \mathbb{I}_p é a matriz identidade no espaço das posições e \mathbf{C}_c é o operador moeda.

O operador moeda associado a uma rotação no espaço moeda, pode ser, de maneira geral, representado na forma

$$\mathbf{C}_c = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

com a, b, c e $d \in \mathbb{C}$, em que \mathbb{C} representa o conjunto dos números complexos. Podemos ainda escrever \mathbf{C}_c como

$$\mathbf{C}_c|-\rangle = a|-\rangle + c|+\rangle, \quad (2.8a)$$

$$\mathbf{C}_c|+\rangle = b|-\rangle + d|+\rangle. \quad (2.8b)$$

Para que \mathbf{C}_c seja unitário, é necessário que seus parâmetros satisfaçam as seguintes relações

$$|a|^2 + |c|^2 = |b|^2 + |d|^2 = 1, \quad ac^* + bd^* = 0, \quad c = -\Delta b^*, \quad d = \Delta a^* \quad (2.9)$$

onde $\Delta = \det \mathbf{C}_c = ad - bc$ e $|\Delta| = 1$.

O operador de deslocamento \mathbf{S}_p é um operador condicionado ao estado moeda da partícula. Isso significa que dependendo do estado moeda em uma dada posição, o operador \mathbf{S}_p atua de forma diferente. Podemos escrever \mathbf{S}_p da seguinte forma

$$\mathbf{S}_p|j\rangle \otimes |-\rangle = |j-1\rangle \otimes |-\rangle, \quad (2.10a)$$

$$\mathbf{S}_p|j\rangle \otimes |+\rangle = |j+1\rangle \otimes |+\rangle. \quad (2.10b)$$

Uma vez que a norma do estado da partícula é preservada no curso da evolução, o operador \mathbf{S}_p é necessariamente um operador unitário, podendo ser escrito como

$$\mathbf{S}_p = \sum_j |j-1\rangle \langle j| \otimes |-\rangle \langle -| + \sum_j |j+1\rangle \langle j| \otimes |+\rangle \langle +|. \quad (2.11)$$

Pela Eq. (2.6) notamos que em cada passo de evolução temporal devemos aplicar o operador moeda C_c e em seguida o operador de deslocamento S_p , necessariamente nessa ordem. Assim, a evolução temporal U_c , para a caminhada quântica com a moeda genérica da Eq. (2.7), é dada por

$$U_c|j\rangle \otimes |-\rangle = a|j-1\rangle \otimes |-\rangle + c|j+1\rangle \otimes |+\rangle, \quad (2.12)$$

e, da mesma forma,

$$U_c|j\rangle \otimes |+\rangle = b|j-1\rangle \otimes |-\rangle + d|j+1\rangle \otimes |+\rangle. \quad (2.13)$$

Portanto, sendo $|\psi(0)\rangle$ o estado inicial da partícula, a evolução temporal do sistema é dada por

$$|\psi(n)\rangle = U_c^n |\psi(0)\rangle, \quad (2.14)$$

onde o operador de evolução temporal é aplicado n vezes sobre o estado inicial. A probabilidade $\text{Pr}(j)$ de encontrar a partícula na posição j , após n passos, é dada por

$$\text{Pr}(j) = |\langle j| \otimes \langle +|\psi(n)\rangle|^2 + |\langle j| \otimes \langle -|\psi(n)\rangle|^2, \quad (2.15)$$

onde o primeiro termo é referente a probabilidade de encontrar a partícula considerando o estado moeda $|+\rangle$, e o segundo termo é referente ao estado moeda $|-\rangle$.

2.3.1 Operador Hadamard

Um operador moeda bastante conhecido nas caminhadas quânticas é o operador Hadamard, por se tratar de uma moeda não tendenciosa, definindo igual probabilidade da partícula se deslocar para a esquerda e direita (2). É representado na forma

$$\mathbf{H}_c = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Para exemplificar a caminhada quântica utilizando o operador Hadamard, vamos partir do estado inicial $|\psi(0)\rangle = |0\rangle \otimes |-\rangle$. Utilizando as Eqs. (2.12) e (2.13), temos

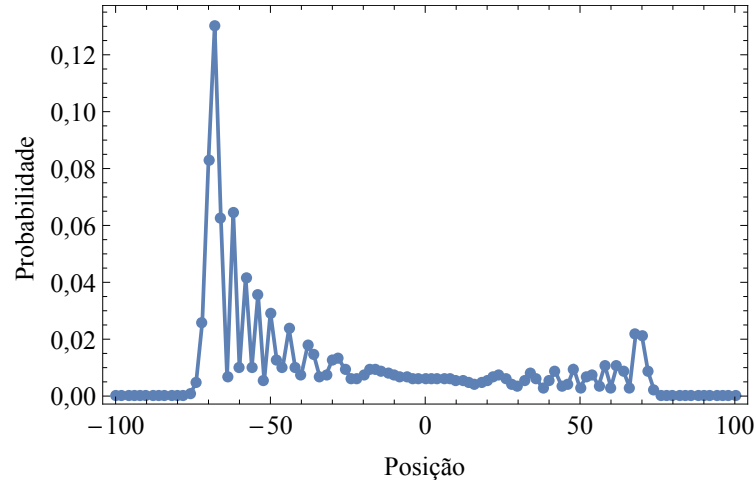
- $n = 1$: o estado após um passo é dado por

$$|\psi(1)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|-1\rangle \otimes |-\rangle + |1\rangle \otimes |+\rangle \right). \quad (2.17)$$

- $n = 2$: da mesma forma para o segundo passo

$$|\psi(2)\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} \left(|-2\rangle \otimes |-\rangle + |0\rangle \otimes |+\rangle + |0\rangle \otimes |-\rangle - |2\rangle \otimes |+\rangle \right). \quad (2.18)$$

Figura 2.3 – Distribuição de probabilidade para a caminhada Hadamard com estado inicial $|\psi(0)\rangle = |0\rangle \otimes |-\rangle$ para $n = 100$ passos.



Fonte: A autora.

- $n = 3$: neste caso, aplicando primeiramente a moeda Hadamard, temos

$$|\psi(3)\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}} \mathbf{S}_p \left[\underline{|-2\rangle \otimes |-\rangle} + \underline{|-2\rangle \otimes |+\rangle} + \overline{|0\rangle \otimes |-\rangle} - \overline{|0\rangle \otimes |+\rangle} + \underline{|0\rangle \otimes |-\rangle} + \overline{|0\rangle \otimes |+\rangle} - \underline{|2\rangle \otimes |-\rangle} + \underline{|2\rangle \otimes |+\rangle} \right],$$

$$|\psi(3)\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}} \mathbf{S}_p \left[\underline{|-2\rangle \otimes |-\rangle} + \underline{|-2\rangle \otimes |+\rangle} + 2 \overline{|0\rangle \otimes |-\rangle} - \underline{|2\rangle \otimes |-\rangle} + \underline{|2\rangle \otimes |+\rangle} \right],$$

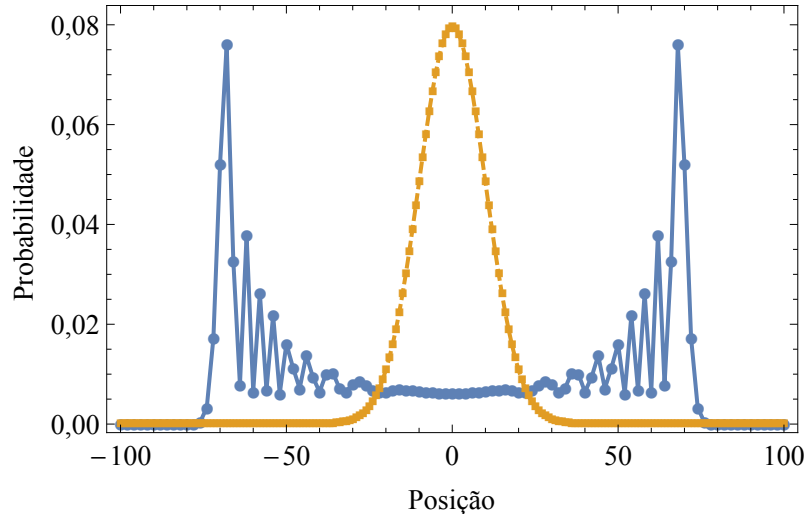
em seguida, o operador de deslocamento condicional, ficamos com

$$|\psi(3)\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}} \left[\underline{|-3\rangle \otimes |-\rangle} + \underline{|-1\rangle \otimes |+\rangle} + 2 \underline{|-1\rangle \otimes |-\rangle} - \underline{|1\rangle \otimes |-\rangle} + \underline{|3\rangle \otimes |+\rangle} \right]. \quad (2.19)$$

Ao aplicar a moeda Hadamard \mathbf{H}_c no terceiro passo, notamos que para o estado $\underline{|0\rangle \otimes |-\rangle}$, indicado com uma linha inferior, ocorre uma interferência construtiva, enquanto que para o estado $\overline{|0\rangle \otimes |+\rangle}$, indicado com uma linha superior, ocorre uma interferência destrutiva. Ao comparar a caminhada quântica com a caminhada clássica, em termos de suas respectivas probabilidades em cada posição, notamos que elas começam a diferir a partir de $n = 3$, devido às interferências. Portanto, a superposição de estados gerando interferências construtivas e destrutivas é a primeira característica quântica do modelo.

A Figura 2.3 mostra a distribuição de probabilidade para a caminhada Hadamard com estado inicial $|\psi(0)\rangle = |0\rangle \otimes |-\rangle$ após $n = 100$ passos. Notamos uma maior probabilidade de encontrar a partícula deslocada para a esquerda devido à escolha de um estado inicial assimétrico. É possível obter uma distribuição de probabilidade simétrica, conforme Figura 2.4, a partir de um estado inicial simétrico dado por $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |-\rangle + i|0\rangle \otimes |+\rangle)$, onde as trajetórias do estado $|-\rangle$ são reais e as trajetórias de $|+\rangle$ são imaginárias, não interferindo entre si, ou ainda,

Figura 2.4 – Distribuição de probabilidade para a caminhada utilizando a moeda Hadamard (linha cheia) com estado inicial simétrico $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |-\rangle + i|0\rangle \otimes |+\rangle)$ ou utilizando a moeda balanceada da Eq. (2.20) e a caminhada clássica (linha tracejada) para $n = 100$ passos.



Fonte: A autora.

a partir de um operador moeda balanceado escrito como

$$\mathbf{Y}_c = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

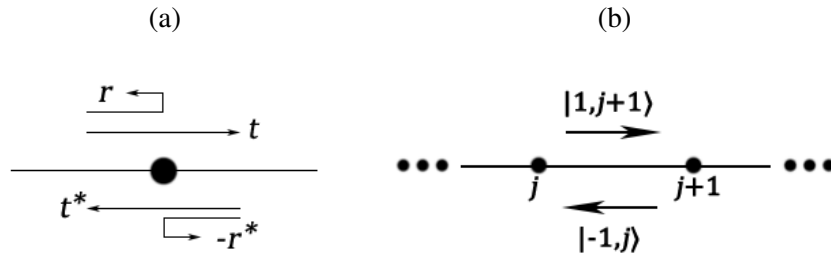
Comparando as distribuições de probabilidade das caminhadas clássica e quântica com a moeda Hadamard, conforme Figura 2.4, notamos um espalhamento ao longo da rede muito maior para a versão quântica considerando o mesmo número de passos. De fato, é possível quantificar o grau de dispersão em cada caso, mas falaremos disso no próximo capítulo.

2.4 Caminhada quântica por uma analogia interferométrica

O modelo de caminhada quântica com moeda, introduzido na seção anterior, é o mais utilizado na literatura. Porém, existem outras formas de tratar o sistema de caminhadas quânticas. Um desses modelos alternativos, proposto por Hillery *et al.* (34), considera a rede onde a partícula se movimenta como um interferômetro. Os vértices são entendidos como elementos óticos conhecidos como $2N$ portas, com N sendo o número de conexões em cada vértice, e cada ligação estando associada aos caminhos que um fóton pode seguir.

Para o caso unidimensional, o modelo considera um fóton seguindo na direção horizontal e, em cada vértice, encontra um divisor de feixes vertical, conforme representado na Figura 2.5(a). Em cada divisor de feixes, existe uma amplitude do fóton permanecer no mesmo sentido,

Figura 2.5 – (a) Divisão de feixes em um vértice qualquer da rede, onde r indica amplitude de reflexão e t de transmissão e (b) estados da caminhada quântica de espalhamento na aresta entre os vértices j e $j + 1$.



Fonte: A autora.

ou seja, ser transmitido e, uma amplitude associada à mudança de sentido, ou seja, ser refletido. Notamos, então, um processo de espalhamento nos vértices da rede.

O estado da partícula considerando a caminhada quântica de espalhamento é dado por

$$|\psi\rangle = |\sigma, j\rangle, \quad (2.21)$$

onde $\sigma = \pm 1$ indica o sentido de propagação, sendo +1 para a direita e -1 para esquerda, e j é o vértice de destino, conforme Figura 2.5(b). A aplicação do operador de evolução temporal U para a caminhada quântica de espalhamento é dada por

$$U|+1, j\rangle = r|-1, j-1\rangle + t|+1, j+1\rangle, \quad (2.22)$$

e

$$U|-1, j\rangle = t^*|-1, j-1\rangle - r^*|+1, j+1\rangle, \quad (2.23)$$

onde z^* representa o complexo conjugado de z . Para que a norma do estado seja unitária, é necessário que $|r|^2 + |t|^2 = 1$. Assim, o estado após n passos é dado por

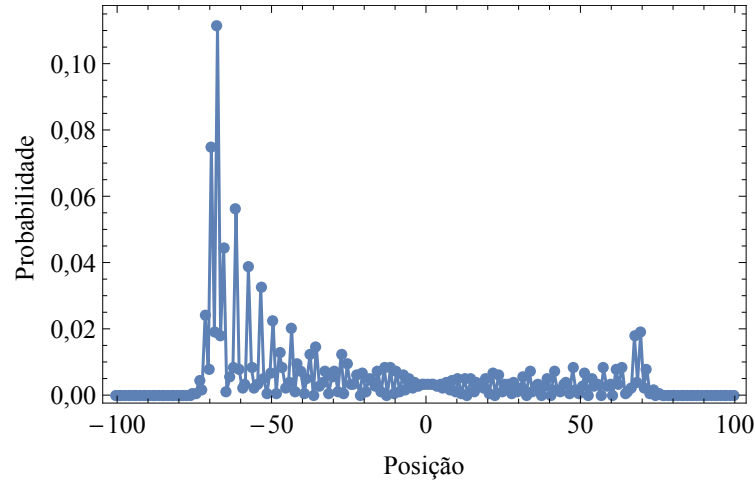
$$|\psi(n)\rangle = U^n |\psi(0)\rangle. \quad (2.24)$$

Para a análise da probabilidade após n passos, devemos considerar os dois sentidos possíveis de deslocamento em uma dada ligação, uma vez que a caminhada quântica de espalhamento acontece nas arestas do grafo. Portanto, a probabilidade de encontrar a partícula entre os vértices j e $j + 1$, é

$$P_{(j, j+1)} = |\langle +1, j+1 | \psi(n) \rangle|^2 + |\langle -1, j | \psi(n) \rangle|^2, \quad (2.25)$$

onde o primeiro termo é referente à amplitude da partícula no estado $|+1, j+1\rangle$ (deslocamento para a direita) e o segundo termo é referente a amplitude da partícula no estado $|-1, j\rangle$ (deslocamento para a esquerda), conforme observamos na Figura 2.5(b).

Figura 2.6 – Distribuição de probabilidade para a caminhada quântica por uma analogia interferométrica para $r = t = 1/\sqrt{2}$ e $|\psi(0)\rangle = |-1,0\rangle$.



Fonte: A autora.

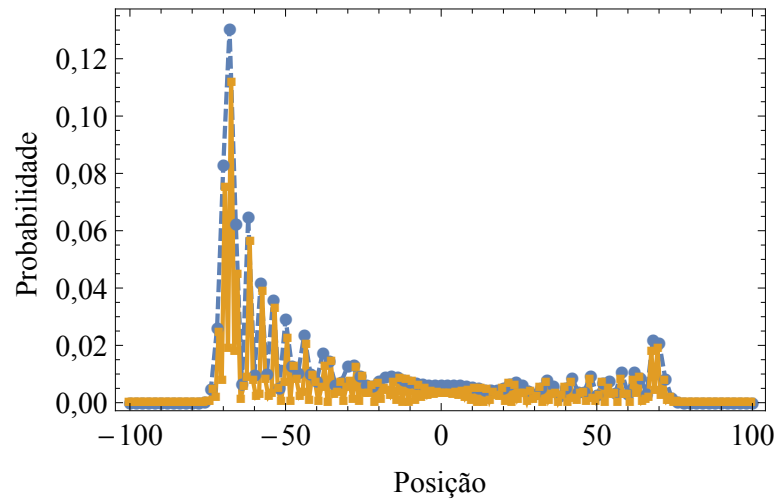
A Figura 2.6 mostra a distribuição de probabilidade considerando $r = t = 1/\sqrt{2}$ e estado inicial $|\psi(0)\rangle = |-1,0\rangle$ para $n = 100$ passos. A maior probabilidade de encontrar a partícula está situada na região entre $-|t|n$ e $|t|n$, ou seja, para $n = 100$ entre as posições -70 e 70 . Novamente, a distribuição é assimétrica e deslocada para a esquerda devido ao estado inicial utilizado. Para uma distribuição simétrica em relação a origem, o estado inicial deve ser $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1,0\rangle + |1,1\rangle)$, de modo que a partícula considere tanto a direção esquerda como direita para o deslocamento inicial.

A caminhada quântica de espalhamento com $r = t = 1/\sqrt{2}$ é o caso equivalente à caminhada Hadamard no modelo com moeda, uma vez que, em ambos os casos a partícula possui mesma probabilidade de ir para a esquerda e direita. Na próxima seção, veremos que de fato, existe uma equivalência entre os dois modelos tratados.

2.5 Equivalência entre os modelos de caminhada quântica com moeda e de espalhamento

Os modelos de caminhadas quânticas de tempo discreto apresentados são duas formas distintas de tratar o mesmo problema, porém, equivalentes. Ao comparar as distribuições de probabilidade considerando a caminhada Hadamard e a caminhada de espalhamento para $r = t = 1/\sqrt{2}$, mostradas na Figura 2.7, notamos um comportamento geral bem parecido mas com algumas diferenças locais. Essa diferença se deve ao fato da caminhada quântica com moeda calcular as probabilidades nos vértices, conforme Eq. (2.15), enquanto que na caminhada quântica de espalhamento elas são calculadas nas ligações, conforme Eq. (2.25). E, de fato, existe uma equivalência entre os dois modelos.

Figura 2.7 – Comparação da caminhada quântica com a moeda Hadamard (linha tracejada) e com a caminhada quântica por uma analogia interferométrica (linha cheia) para $r = t = 1/\sqrt{2}$.



Fonte: A autora.

A equivalência foi demonstrada por Andrade *et al.* em (37), no qual os autores seguem os seguintes passos para a prova: (i) estabelecer uma correspondência entre os estados das caminhadas quânticas e (ii) associar adequadamente suas evoluções temporais.

Para o passo (i), consideram um operador isomorfo \mathbf{E} , tal que, $\mathbf{E} : \mathcal{H}_{\text{esp}} \rightarrow \mathcal{H}$, definido como

$$\mathbf{E}|\pm 1, j\rangle = |j\rangle \otimes |\pm\rangle, \quad (2.26)$$

indicando que \mathbf{E} mapeia os estados da caminhada quântica de espalhamento nos estados da caminhada quântica com moeda.

Para o passo (ii), utilizam as definições dos operadores de evolução temporal de cada modelo, de tal forma a obter a seguinte relação de equivalência

$$\mathbf{E}\mathbf{U} = \mathbf{U}_c\mathbf{E}, \quad (2.27)$$

onde \mathbf{U} é o operador de evolução temporal da caminhada quântica de espalhamento, definida pelas Eqs. (2.22) e (2.23), e \mathbf{U}_c é o operador de evolução temporal da caminhada quântica com moeda, dado pela Eq. (2.6).

O mapeamento, segundo Eq. (2.27), traz a possibilidade de tratar as caminhadas quânticas utilizando um dos modelos mas, em um dado momento, devido ao interesse de analisar determinadas propriedades, é possível mapear para o outro de forma direta.

2.6 Operador moeda dependente da energia

As caminhadas quânticas de espalhamento trazem a ideia de um divisor de feixes em cada vértice, ou seja, funcionam como centros espalhadores. Apesar disso, o modelo representa apenas um caso especial de espalhamento. Para o caso geral, as amplitudes de reflexão e transmissão são dependentes da energia da partícula (35). Quem carrega as informações da onda espalhada é a matriz de espalhamento \mathbf{S}_{esp} , que para o caso unidimensional, é dada por

$$\mathbf{S}_{\text{esp}}(k) = \begin{pmatrix} r_j^{(+)}(k) & t_j^{(+)}(k) \\ t_j^{(-)}(k) & r_j^{(-)}(k) \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

onde os índices (+) e (-) indicam a partícula incidindo pela esquerda ou direita do vértice j , respectivamente. O termo k é o número de onda, o qual possui dependência com a energia E pela relação $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, onde m é a massa da partícula e \hbar é a constante de Planck dividida por 2π . Portanto, a partir da Eq. (2.28) observamos uma dependência explícita dos coeficientes de reflexão e transmissão com a energia (k).

A partir da matriz de espalhamento, é possível obter um operador moeda dependente da energia. Para isso, utilizamos a ideia de mapeamento apresentada na seção anterior, com as seguintes substituições $\mathbf{U}_c \rightarrow \mathbf{C}_{\text{esp}}$ e $\mathbf{U} \rightarrow \mathbf{S}_{\text{esp}}$, de tal forma que $\mathbf{C}_{\text{esp}} = \mathbf{E}\mathbf{S}_{\text{esp}}\mathbf{E}^{-1}$. Assim, o operador moeda de espalhamento dependente da energia é

$$\mathbf{C}_{\text{esp}}(k) = \begin{pmatrix} t_j^{(-)}(k) & r_j^{(+)}(k) \\ r_j^{(-)}(k) & t_j^{(+)}(k) \end{pmatrix}, \quad (2.29)$$

o qual, para ser um operador unitário, satisfaz as seguintes relações (38)

$$|r_j^{(\pm)}(k)|^2 + |t_j^{(\pm)}(k)|^2 = 1 \quad r_j^{(+)}(k)^* t_j^{(+)}(k) + t_j^{(-)}(k)^* r_j^{(-)}(k) = 0 \quad (2.30)$$

$$r_j^{(\pm)}(k)^* = t_j^{(\pm)}(-k) \quad t_j^{(\pm)}(k)^* = t_j^{(\mp)}(-k). \quad (2.31)$$

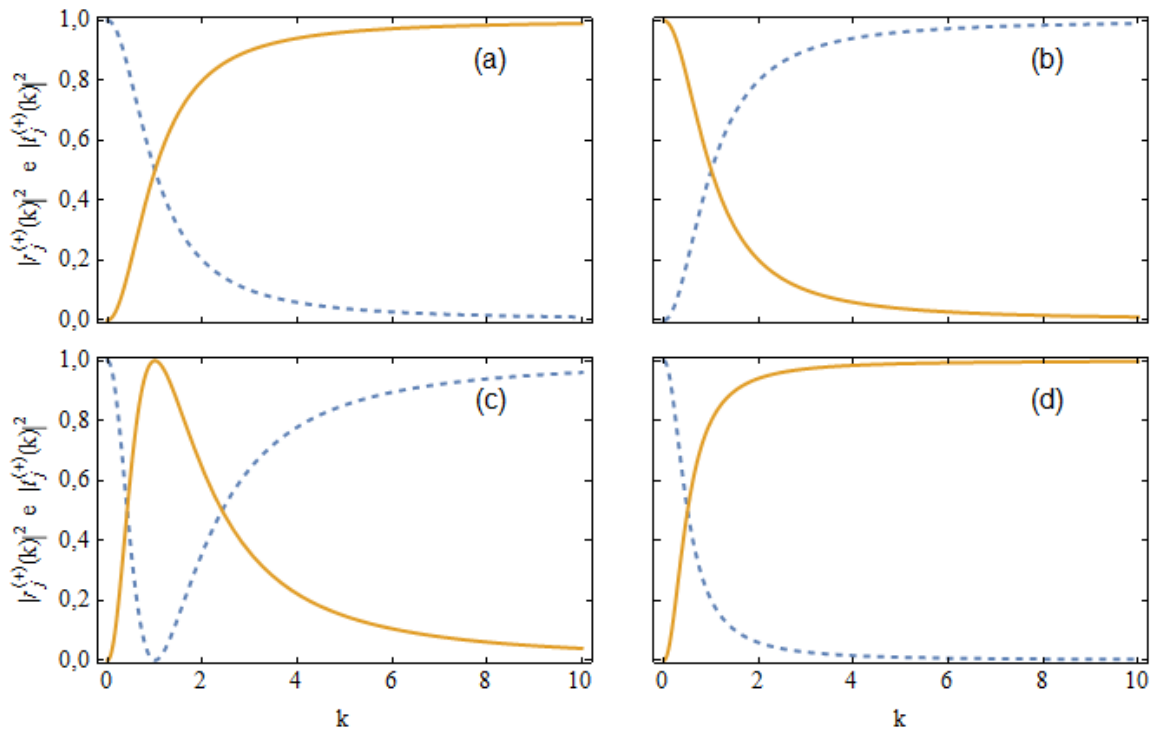
Os coeficientes de reflexão e transmissão para casos gerais de interações pontuais abordando todas as condições de contorno possíveis em uma rede unidimensional com centros espalhadores em seus vértices, podem ser escritos de seguinte forma (39)

$$r^{(\pm)}(k) = \frac{c \pm ik(d-a) + bk^2}{c + ik(d+a) + bk^2}, \quad t^{(\pm)}(k) = \frac{2ik\omega^{\pm 1}}{c + ik(d+a) + bk^2}, \quad (2.32)$$

com a, b, c e d reais e $|\omega| = 1$.

Algumas interações pontuais conhecidas são a δ , δ' , caso cruzado e assimétrico (39). Para a interação pontual δ de Dirac, a função de onda é contínua e sua derivada descontínua, de modo que os parâmetros assumem os seguintes valores: $a = d = \omega = 1$, $b = 0$ e $c = 2\gamma$.

Figura 2.8 – Amplitudes de transmissão (linha cheia) e reflexão (linha tracejada) considerando potenciais do tipo: (a) δ ; (b) δ' ; (c) cruzado; e (d) assimétrico.

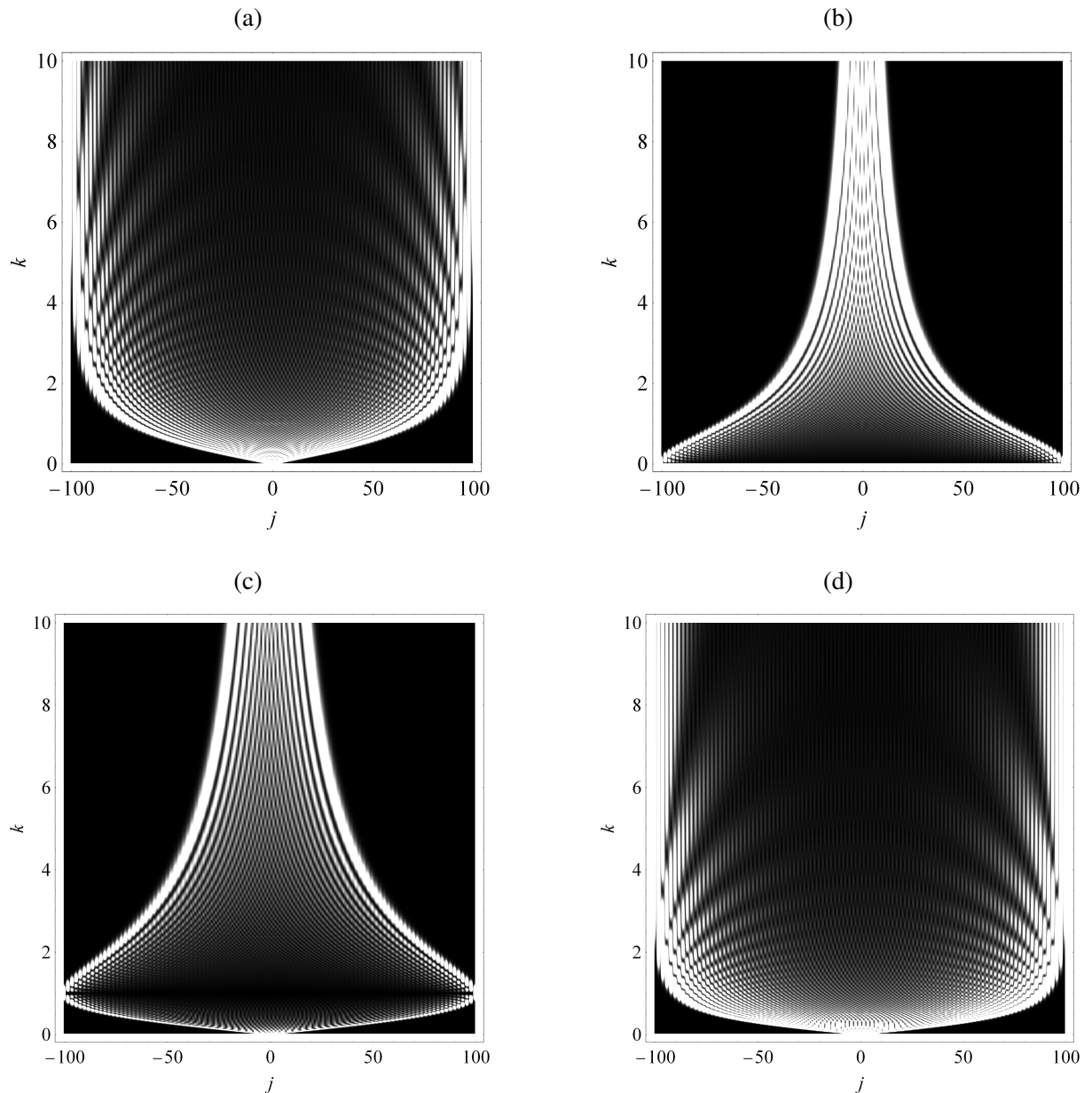


Fonte: A autora.

Já para a interação pontual do tipo delta linha δ' , a função de onda da partícula é descontínua e a sua derivada contínua, de maneira que, $a = d = \omega = 1$, $b = 2\gamma$ e $c = 0$. Para o caso cruzado, a condição de contorno na qual a função de onda está submetida é $\psi(j^+) = \gamma\psi'(j^-)$ e $\psi'(j^+) = -\gamma^{-1}\psi(j^-)$. O termo $j^+(j^-)$ é referente a partícula incidindo pela esquerda (direita) do vértice j , tal que os parâmetros assumem valores $a = d = 0$, $\omega = 1$, $b = \gamma$ e $c = -\gamma^{-1}$. Por fim, para o caso assimétrico, as amplitudes de reflexão e transmissão são diferentes à esquerda e direita, de modo que os parâmetros assumem os seguintes valores $a = c = d^{-1} = \gamma$, $\omega = -i$ e $b = 0$. Na Figura 2.8 temos o comportamento da reflexão e transmissão para k variando considerando as interações pontuais mencionadas.

Na Figura 2.9 mostramos a densidade de probabilidade da caminhada quântica com moeda considerando os potenciais apresentados partindo do estado inicial $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |-\rangle + i|0\rangle \otimes |+\rangle)$ com k variando no intervalo $[0,10]$ e $\gamma = 1$. Nesta figura, cada valor de k representa uma distribuição de probabilidade, como obtido nas seções anteriores, mas agora analisando em termos de densidade de probabilidade, onde preto representa probabilidade 0 e branco probabilidade 1. Para a interação delta, notamos que ao aumentar a energia k , a probabilidade de encontrar a partícula está deslocada para as extremidades. Isso acontece devido ao comportamento das amplitudes de reflexão e transmissão para este caso. Conforme observamos na Figura 2.8, a transmissão para o potencial delta aumenta com k , o que implica

Figura 2.9 – Evolução da caminhada quântica com moeda em função da energia (k), considerando os potenciais: (a) δ ; (b) δ' ; (c) caso cruzado; e (d) assimétrico.



Fonte: Adaptado de (35).

num deslocamento cada vez mais longe da posição inicial. Para o caso da δ' , a amplitude de transmissão diminui com o aumento de k , significando que a partícula permanece cada vez mais confinada próxima da origem. No caso cruzado, a amplitude de transmissão possui um valor máximo em $k = 1$, no qual apenas transmite, e à medida que k aumenta, a amplitude de transmissão diminui, gerando uma maior localização para o caminhante em torno da origem. Por fim, no caso assimétrico o comportamento é semelhante ao da delta, porém com um espalhamento mais rápido, uma vez que a transmissão aumenta de forma mais rápida com k do que no caso da δ . Na Figura 2.9 também é possível observar a formação de franjas de interferência à medida

que k varia. Isso acontece devido à superposição dos estados conforme o estado do sistema evolui. Portanto, fica evidente a formação de padrões de interferência no modelo das caminhadas quânticas.

3 PROPRIEDADES EM CAMINHADAS QUÂNTICAS

Neste capítulo, vamos apresentar e discutir duas propriedades usualmente investigadas em caminhadas quânticas: o desvio padrão e o emaranhamento. O desvio padrão caracteriza o grau de espalhamento da partícula à medida que o número de passos aumenta. O emaranhamento, uma propriedade essencialmente quântica, diz respeito ao grau de coerência quântica no sistema, de tal forma que, quanto maior o emaranhamento maior a coerência quântica.

3.1 Desvio padrão

A primeira propriedade a ser investigada em caminhadas quânticas é o desvio padrão da posição. O desvio padrão é a medida do quanto a partícula se dispersou ao longo da rede. Considerando o estado após n passos, é dado por

$$\sigma(n) = \sqrt{\langle j^2 \rangle_n - \langle j \rangle_n^2}, \quad (3.1)$$

onde $\langle a \rangle$ é o valor médio da variável a . Utilizando a definição usual de média para variáveis discretas, temos (3)

$$\sigma(n) = \sqrt{\sum_{i=1}^n j^2 \Pr(j) - \left(\sum_{i=1}^n j \Pr(j) \right)^2}, \quad (3.2)$$

onde j é a posição da partícula e $\Pr(j)$ é a probabilidade de encontrarmos a partícula nesta posição. No caso da caminhada quântica com moeda, $\Pr(j)$ é dada pela Eq. (2.15).

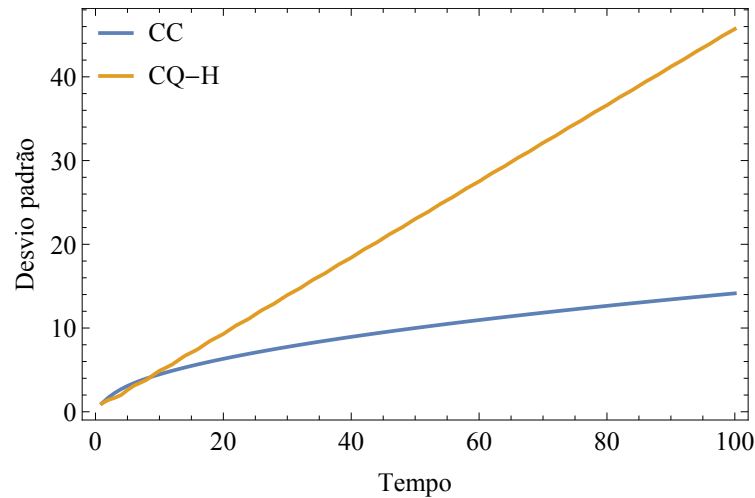
A fim de categorizar a dispersão nos sistemas, consideramos o desvio padrão proporcional a uma potência do tempo, o qual é discretizado no nosso trabalho pelo número de passos n , ou seja

$$\sigma(n) \sim n^\alpha, \quad (3.3)$$

onde \sim significa da ordem. O parâmetro α na Eq. (3.3) determina a dinâmica da partícula, de tal forma que, quanto maior for α , mais espalhada a partícula está. Os comportamentos podem ser classificados como

- subdifusivo: $0 < \alpha < 0,5$;
- difusivo: $\alpha = 0,5$;
- superdifusivo: $0,5 < \alpha < 1$;
- balístico: $\alpha = 1$;
- superbalístico: $1 < \alpha$.

Figura 3.1 – Desvio padrão da caminhada clássica (CC) e da caminhada quântica com a moeda Hadamard (CQ-H).



Fonte: A autora.

Na Figura 3.1 mostramos o comportamento do desvio padrão para a caminhada clássica e para a caminhada quântica com a moeda Hadamard apresentadas no capítulo anterior. As caminhadas aleatórias clássicas, por exemplo, seguem uma distribuição binomial com $\alpha = 0,5$. Neste caso, o comportamento é difusivo, apresentando $\sigma \sim \sqrt{n}$. A caminhada quântica com a moeda Hadamard, por outro lado, possui $\alpha = 1$, gerando um movimento balístico para a partícula, ou seja, $\sigma \sim n$. Ao comparar os comportamentos de dispersão da partícula para as caminhadas clássica e quântica, é evidente o ganho quadrático para o caso quântico. Seja, por exemplo, uma lista com n elementos e o objetivo é encontrar um determinado item o mais rápido possível. Neste caso, a vantagem está em utilizar a versão quântica da caminhada aleatória, uma vez que, a partícula se desloca por mais pontos da rede, indicando conhecimento de um maior número de elementos da lista comparado a versão clássica. O algoritmo de Grover, é um exemplo de algoritmo quântico de busca que demonstra o ganho quadrático da dispersão na versão quântica de um sistema (40). No próximo capítulo, veremos que dependendo das condições da rede, o parâmetro α muda, gerando dinâmicas diferentes para a partícula.

3.2 Emaranhamento em caminhadas quânticas

O emaranhamento é um recurso essencialmente quântico resultado de correlações quânticas entre diferentes partes de um sistema descrito no contexto da mecânica quântica. Isso significa que um processo clássico não pode replicar os efeitos do emaranhamento quântico, a menos que sejam consideradas variáveis ocultas que forçam as correlações a serem tão fortes quanto o emaranhamento requer. É por isso que computadores clássicos não podem simular verdadeiramente sistemas quânticos sem “trapacear”, forçando correlações, via variáveis ocultas,

que com simulações clássicas não ocorreriam naturalmente (32).

Quando um sistema quântico está em um estado emaranhado, realizações em um subsistema terão efeito não-local em outro subsistema mesmo que nada tenha sido feito no segundo subsistema. Além disso, mesmo que os subsistemas sejam separados, desde que nenhum deles seja medido, o emaranhamento continuará existindo. Esse é um fenômeno bastante contra-intuitivo que Einstein chamou de “ação fantasmagórica à distância” (41).

Sistemas quânticos compostos, nos quais o emaranhamento é possível, são sistemas que podem ser decompostos em dois ou mais subsistemas ou graus de liberdade. Formalmente, o espaço de Hilbert \mathcal{H} associado a um sistema composto, ou multipartido, é dado pelo produto tensorial $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$ dos espaços correspondentes a cada subsistema (41). Aqui, focamos a descrição para sistemas quânticos bipartidos, ou seja, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, tal que \mathcal{H}_A é o espaço de Hilbert relativo ao subsistema A e \mathcal{H}_B é o espaço de Hilbert relativo ao subsistema B .

Um estado de um sistema bipartido pode ser emaranhado e puro, ou emaranhado e misto. Um estado puro $|\psi\rangle$, situação na qual temos conhecimento total do estado quântico, pode ser definido como uma superposição de estados ortogonais entre si, baseado-se na decomposição de Schmidt, da seguinte forma

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle_A \otimes |i\rangle_B, \quad (3.4)$$

onde c_i corresponde às amplitudes de probabilidade, tal que $\sum_i |c_i|^2 = 1$. Os estados mistos, por outro lado, representam sistemas quânticos com probabilidade de ocorrer em cada estado puro, ou seja, são misturas estatísticas de estados puros. Neste caso, o estado misto é melhor descrito pelo operador densidade como

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|, \quad (3.5)$$

onde cada p_i corresponde à propabilidade de ocorrência do estado $|\psi_i\rangle$ ocorrer, tal que $\sum_i p_i = 1$. Aqui, os estados não precisam ser necessariamente ortogonais entre si.

A partir da descrição dos estados puros e mistos, um estado bipartido é definido como emaranhado, ou não, da seguinte forma (42)

- Estados puros: $|\psi\rangle$ é dito separável se $|\psi\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$, caso contrário, o estado é dito emaranhado;
- Estados mistos: ρ é dito separável se $\rho = \sum_n p_n \rho_n^A \otimes \rho_n^B$, caso contrário, o estado é dito emaranhado.

Em termos das caminhadas quânticas apresentadas, o modelo com moeda possui espaço de Hilbert definido como $\mathcal{H} = \mathcal{H}_p \otimes \mathcal{H}_c$, de tal forma que podemos investigar o emaranhamento entre os estados de posição e moeda no sistema. Já para no modelo de espalhamento, o estado não pode ser escrito em termos do produto direto entre dois subespaços de Hilbert, dificultando

então a análise nesse sistema. Porém, devido à possibilidade de mapear a caminhada quântica de espalhamento no modelo com moeda, podemos considerar todas as possibilidades da teoria de espalhamento e então realizar a análise do emaranhamento na caminhada quântica de espalhamento. Para as caminhadas quânticas com moeda, o sistema é composto por superposições de estados puros. Assim, os estados são emaranhados se $|\psi\rangle \neq |\psi_p\rangle \otimes |\psi_c\rangle$ onde $|\psi_p\rangle$ é o estado relativo ao subsistema de posições, e $|\psi_c\rangle$ é o estado relativo ao subsistema de moeda.

Sejam, por exemplo, o estado inicial $|\psi(0)\rangle = |0\rangle \otimes |-\rangle$ e, utilizando-se a moeda Hadamard, o estado evoluído em um passo $|\psi(1)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1\rangle \otimes |-\rangle + |1\rangle \otimes |+\rangle)$. A pergunta que podemos fazer é $|\psi(0)\rangle$ e $|\psi(1)\rangle$, tratados individualmente, são estados separáveis ou estados emaranhados? É fácil notar que $|\psi(0)\rangle$ é um estado separável, uma vez que, $|\psi(0)\rangle = |\psi_p\rangle \otimes |\psi_c\rangle$ de forma direta. Agora, para $|\psi(1)\rangle$, devemos ter $|\psi_p\rangle = a|-1\rangle + b|1\rangle$ e $|\psi_c\rangle = c|+\rangle + d|-\rangle$, tal que

$$|\psi_p\rangle \otimes |\psi_c\rangle = ac|-1\rangle \otimes |+\rangle + ad|-1\rangle \otimes |-\rangle + bc|1\rangle \otimes |+\rangle + bd|1\rangle \otimes |-\rangle. \quad (3.6)$$

Para que $|\psi(1)\rangle$ seja igual a $|\psi_p\rangle \otimes |\psi_c\rangle$, é necessário $ac = 0$, $ad = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $bc = \frac{1}{\sqrt{2}}$ e $bd = 0$, simultaneamente. Porém, o sistema de equações não admite tais soluções. Portanto, sendo o estado não separável, ou seja, $|\psi(1)\rangle \neq |\psi_p\rangle \otimes |\psi_c\rangle$, dizemos que $|\psi(1)\rangle$ é um estado emaranhado.

Mais do que saber se o estado quântico é emaranhado ou não, estamos interessados em quantificar o grau desse emaranhamento. É necessário uma análise quantitativa para a compreensão do fenômeno de forma adequada e como ele se altera sob determinadas situações. Saber a quantidade de emaranhamento inerente a um estado quântico composto significa saber quão bem uma tarefa pode ser realizada.

Monótonos ou quantificadores de emaranhamento são boas medidas de emaranhamento, uma vez que, sua principal característica é relativa a capacidade de distinguir entre correlações quânticas e clássicas (43). Alguns exemplos de medidas monótonos de emaranhamento são: emaranhamento de formação, entropia relativa de emaranhamento e negatividade (42). Desde que satisfaça as seguintes relações:

1. Para qualquer medida de emaranhamento $E(\rho)$, é necessário $0 \leq E(\rho) \leq 1$, com $E(\rho) = 0$ correspondendo a um estado não emaranhado, e $E(\rho) = 1$ a um estado maximamente emaranhado;
2. A medida de emaranhamento deve ser imune a operações locais e comunicação clássica (44), ou seja,

$$E(\rho) = E((\mathbf{U}_p \otimes \mathbf{U}_c)\rho(\mathbf{U}_p \otimes \mathbf{U}_c)^\dagger); \quad (3.7)$$

3. A medida de emaranhamento de um operador densidade completo, $E(\rho) = E(\sum_i p_i \rho_i)$, não pode ser maior que a soma ponderada das medidas de emaranhamento de suas partes, ou seja, $E(\rho) = E(\sum_i p_i \rho_i) \leq \sum_i p_i E(\rho_i)$.

onde ρ é o operador densidade do estado $|\psi(n)\rangle$ após n passos. Apesar do operador densidade ser usualmente utilizado para descrever estados mistos, também é possível usá-lo para descrever estados puros. Neste caso, ρ é dado da seguinte forma

$$\rho(n) = |\psi(n)\rangle\langle\psi(n)|. \quad (3.8)$$

Como o estado que descreve a partícula realizando uma caminhada quântica com moeda é puro, e sendo o operador de evolução temporal U_c unitário, significa que o estado após n passos continuará sendo um estado puro. Dessa forma, é possível quantificar o emaranhamento através do cálculo da entropia de von Neumann do operador densidade reduzido. A entropia de von Neumann é uma generalização da entropia de Shannon, a qual é utilizada na teoria da informação clássica para medição de informação (32). A entropia de von Neumann é dada por

$$S_v = -\text{Tr}(\rho \log_2 \rho). \quad (3.9)$$

A medida de emaranhamento baseada na entropia de von Neumann é dada a partir do estado reduzido. Por simplicidade, vamos considerar o operador densidade reduzido de moeda, o qual é obtido da seguinte forma

$$\rho_c(n) = \text{Tr}_p(\rho(n)), \quad (3.10)$$

onde Tr_p representa o traço parcial sobre o espaço das posições.

A operação de traço parcial, utilizada na Eq. (3.10), é um procedimento usado para o cálculo do estado quântico de parte de um sistema composto. No nosso caso, estamos interessados no efeito das posições no subsistema de moeda, uma vez que, o espaço de Hilbert de posição aumenta sua dimensão em 2^n à medida que o sistema evolui. Dessa forma, trabalhamos apenas com o subconjunto de moeda, o qual é um espaço bidimensional. Para a realização do traço parcial no espaço das posições, é necessário levar em conta todos os autoestados possíveis no espaço das posições, de tal forma que pode ser escrito como

$$\text{Tr}_p(\rho(n)) = \sum_j \langle j | \rho(n) | j \rangle. \quad (3.11)$$

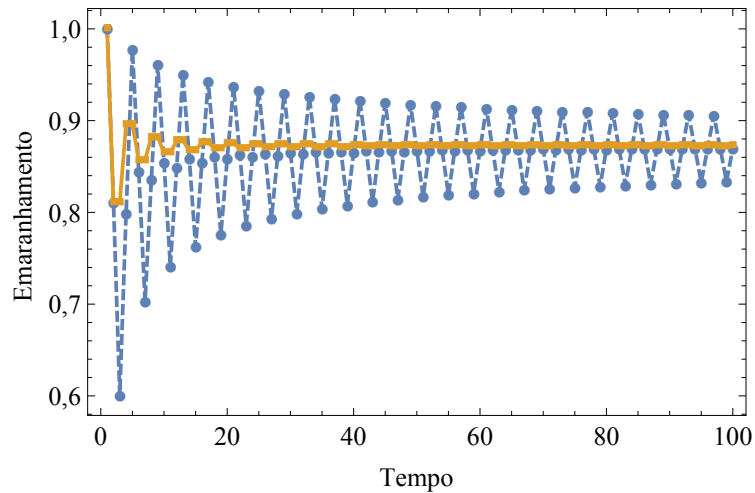
Assim, a partir da entropia de von Neumann, o emaranhamento entre os estados de posição e de moeda da partícula é

$$E_c(n) = - \sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i, \quad (3.12)$$

onde λ_i são os autovalores do operador densidade reduzido de moeda $\rho_c(n)$, dada pela Eq. (3.10). Como $\rho_c(n)$ é um estado de qubit, ou seja, possui dois graus de liberdade $\{|+\rangle, |-\rangle\}$, as matrizes geradas por ele são de dimensão 2×2 , de modo que existem dois autovalores λ_1 e λ_2 . Portanto,

$$E_c(n) = -\lambda_1 \log_2 \lambda_1 - \lambda_2 \log_2 \lambda_2. \quad (3.13)$$

Figura 3.2 – Emaranhamento entre estado de posição e de moeda, utilizando o operador Hadamard para os estados iniciais assimétrico $|\psi(0)\rangle = |0\rangle \otimes |-\rangle$ (linha tracejada) e simétrico $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |-\rangle + i|0\rangle \otimes |+\rangle)$ (linha contínua).



Fonte: A autora.

É importante ressaltar que o cálculo do emaranhamento poderia ser feito a partir da realização do traço parcial no espaço de moeda, uma vez que o emaranhamento entre posição e moeda precisa ser o mesmo independente do subconjunto considerado para as medidas. Neste caso, o operador levado em conta para obter os autovalores seria o operador densidade reduzido de posição, $\rho_p(n) = \text{Tr}_c \rho(n)$, tal que, teríamos uma matriz $(2 \times 2)^n$ devido aos graus de liberdade $\{|j\rangle, j \in \mathbb{Z}\}$. Portanto, é por questão de simplicidade que escolhemos quantificar o emaranhamento a partir do operador densidade reduzido de moeda.

3.2.1 Emaranhamento na caminhada quântica com a moeda Hadamard

Para exemplificar o comportamento do emaranhamento entre os estados de posição e moeda da partícula nas caminhadas quânticas, utilizamos o operador moeda Hadamard considerando tanto o estado inicial assimétrico $|\psi(0)\rangle = |0\rangle \otimes |-\rangle$, quanto o estado inicial simétrico $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |-\rangle + i|0\rangle \otimes |+\rangle)$, o qual é mostrado na Figura 3.2 para $n = 100$ passos.

É possível notar que o emaranhamento para o operador moeda não tendencioso se aproxima do valor limite $E_c(n \rightarrow \infty) \simeq 0,872$ à medida que o tempo passa, independente do estado inicial utilizado. Porém, a taxa de convergência é sensível a escolha de $|\psi(0)\rangle$, sendo os estados iniciais simétricos com convergências mais rápidas (31). Portanto, com o propósito de investigar comportamentos com aproximações a valores limites, a partir de agora vamos considerar apenas estados iniciais simétricos.

No Apêndice A, mostramos o cálculo analítico do emaranhamento para o estado $|\psi(1)\rangle$

considerando a caminhada quântica com o operador Hadamard e estado inicial $|\psi(0)\rangle = |0\rangle \otimes |-\rangle$. Obtemos como resultado um estado maximamente emaranhado, ou seja, $E_c(t = 1) = 1$. Estados puros maximamente emaranhados tem uma utilidade prática em processamento de informação quântica ideal (sem ruídos) (32).

Agora, tendo introduzido as propriedades de desvio padrão e emaranhamento, somos capazes de investigar, quantitativamente e qualitativamente, as características relativas ao quão bem a partícula se dispersa no sistema em função do número de passos, e a quantidade de informação inerente ao sistema quântico. A análise e controle dessas propriedades, em especial do emaranhamento, são fundamentais para o desenvolvimento e progresso da informação quântica, uma vez que, atuam diretamente no ganho temporal em se utilizar o sistema quântico em questão (32).

4 CAMINHADAS QUÂNTICAS EM REDES NÃO HOMOGÊNEAS

Neste capítulo, introduzimos não homogeneidade nas caminhadas quânticas considerando variações espaciais, a partir da formação de redes não homogêneas. Primeiramente, trabalhamos com redes variando segundo sequência de Fibonacci, a qual é caracterizada como uma sequência aperiódica, de modo que podemos analisar a não homogeneidade sendo introduzida progressivamente. Em seguida, consideramos um operador moeda dependente da posição que se altera ao ser aplicado. Por fim, utilizando o modelo de espalhamento, apresentamos as caminhadas quânticas em redes nas quais as interações pontuais, δ e δ' , são dependentes das posições da partícula.

4.1 Redes segundo a sequência de Fibonacci

Existem vários trabalhos na literatura que consideram sequências de Fibonacci nas caminhadas quânticas (45, 46, 47). No trabalho de Ribeiro *et al.* (26), os autores propõem a sequência de Fibonacci como forma de incluir não homogeneidade no sistema. Para isso, introduzem um operador moeda constante no espaço das posições, dado por

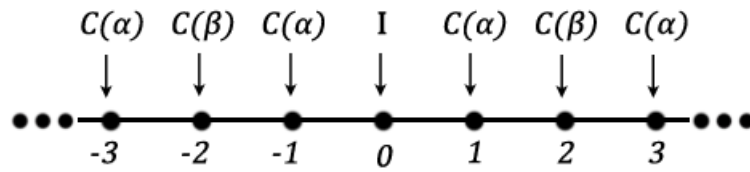
$$\mathbf{C}(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha) & \sin(\alpha) \\ \sin(\alpha) & -\cos(\alpha) \end{pmatrix}, \quad (4.1)$$

onde $\alpha \in [0, \frac{\pi}{2}]$. Essa é uma moeda interessante de se trabalhar, uma vez que, para determinados valores de α , obtemos operadores conhecidos em mecânica quântica. Para $\alpha = \pi/4$, por exemplo, temos o operador Hadamard, utilizado no capítulo 2, o qual expressa uma partícula com mesma probabilidade de se deslocar para a direita e esquerda. Já para $\alpha = \pi/2$, temos a conhecida matriz de Pauli σ_x , na qual a partícula permanece confinada. Para $\alpha = 0$, obtemos a matriz de Pauli σ_z , na qual o movimento da partícula é totalmente desacoplado, de modo que, a partícula se desloca somente para a direita se o estado moeda for $|+\rangle$, e somente para a esquerda se o estado for $|-\rangle$ (26).

A ideia utilizada no trabalho é adicionar um operador moeda extra $\mathbf{C}(\beta)$ de modo a combinar $\mathbf{C}(\alpha)$ e $\mathbf{C}(\beta)$ em sequências infinitas. Alguns exemplos de sequências que podem ser construídas a partir dos operadores são a sequência periódica, Fibonacci, Thue-Morse e Rudin-Shapiro (45). Aqui, vamos considerar apenas a sequência de Fibonacci, a mais conhecida delas.

A sequência de Fibonacci é obtida pela interação da regra recursiva $\mathbf{S}_{n+1} = \mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n-1}$, sendo os termos de partida $\mathbf{S}_0 = \mathbf{C}(\alpha)$ e $\mathbf{S}_1 = \mathbf{C}(\alpha)\mathbf{C}(\beta)$. As primeiras gerações da sequência

Figura 4.1 – Distribuição dos operadores moeda $C(\alpha)$ e $C(\beta)$ na rede de acordo com a segunda geração de Fibonacci ($\alpha\beta$) espelhada em relação a origem.



Fonte: A autora.

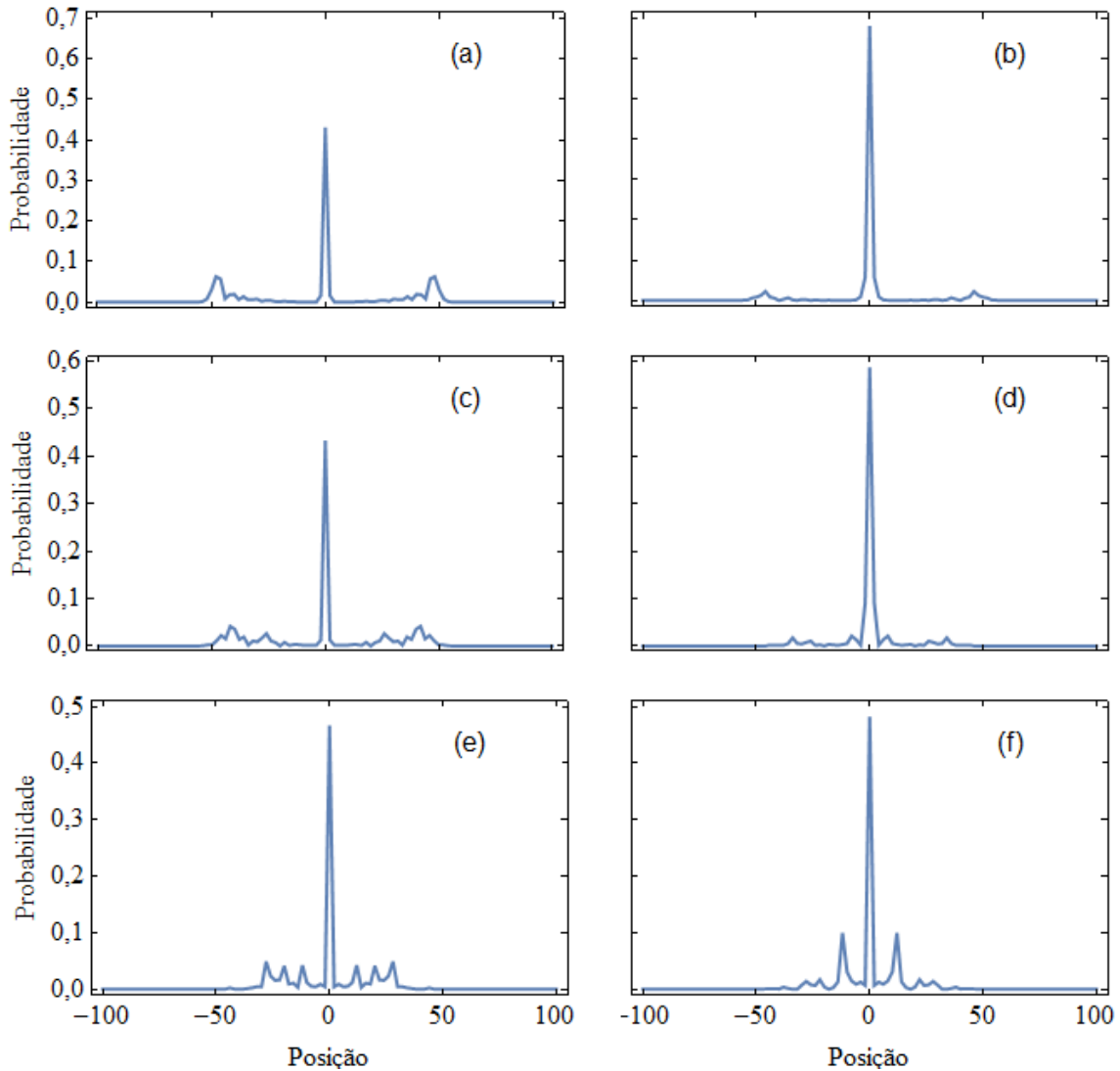
de Fibonacci, chamadas de sequências aproximadas, são α , $\alpha\beta$, $\alpha\beta\alpha$, $\alpha\beta\alpha\alpha\beta$, $\alpha\beta\alpha\alpha\beta\alpha\beta\alpha$, ... , onde os operadores estão escritos em termos apenas de seus parâmetro $\alpha = C(\alpha)$ ou $\beta = C(\beta)$. Para a segunda geração, por exemplo, significa aplicar primeiramente o operador $C(\alpha)$, em seguida $C(\beta)$, e repetir essa sequência.

No trabalho de Ribeiro, os autores trabalharam com a sequência de Fibonacci aplicada no âmbito temporal, independente da posição da partícula. Isso significa que, para a segunda geração de Fibonacci ($\alpha\beta$) por exemplo, no primeiro passo ocorre uma rotação no espaço de moeda segundo $C(\alpha)$, qualquer que seja sua posição na rede, da mesma forma para o segundo passo $C(\beta)$, e repetir essa ordem para os passos seguintes. Baseada nesta ideia, propomos trabalhar com a sequência de Fibonacci aplicada espacialmente.

A ideia é construir a rede fictícia de tal forma que para cada posição um operador moeda, $C(\alpha)$ ou $C(\beta)$, já estará definido, independente se é a primeira ou n-ésima vez que a partícula passe por aquele ponto. A nossa proposta é compor a sequência de Fibonacci para as posições positivas ($j > 1$), e espelhar em relação a origem. Para obter uma rede simétrica vamos aplicar o operador identidade I na origem, de tal forma que funcione como um espelho transparente, ou seja, em $j = 0$ a partícula apenas continua a trajetória sem que ocorra mudança em seu estado. Na Figura 4.1, exemplificamos a construção da rede considerando a segunda geração da sequência de Fibonacci, $\alpha\beta$. Fica evidente a repetição da sequência considerada, quantas vezes forem necessárias, a fim de construir a rede completa. A geração assintótica, por outro lado, é obtida a partir da sequência que completa a rede sem repetições, por exemplo, para $n = 100$ passos é dada pela 10ª geração de Fibonacci.

Na Figura 4.2, mostramos a distribuição de probabilidade para as 5 primeiras gerações e a geração assintótica da sequência de Fibonacci, considerando o estado inicial simétrico $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |-\rangle + i|0\rangle \otimes |+\rangle)$ e $n = 100$ passos, para $\alpha = \pi/3$ e $\beta = \pi/6$. A primeira característica que observamos é relativa à simetria da distribuição. Isso se deve ao fato da rede e do estado inicial serem simétricos. Notamos ainda, que todas as gerações apresentam picos de alta probabilidade da partícula permanecer próximo da origem, experimentando o efeito de confinamento, de tal forma que a partícula apresenta uma localização bem definida.

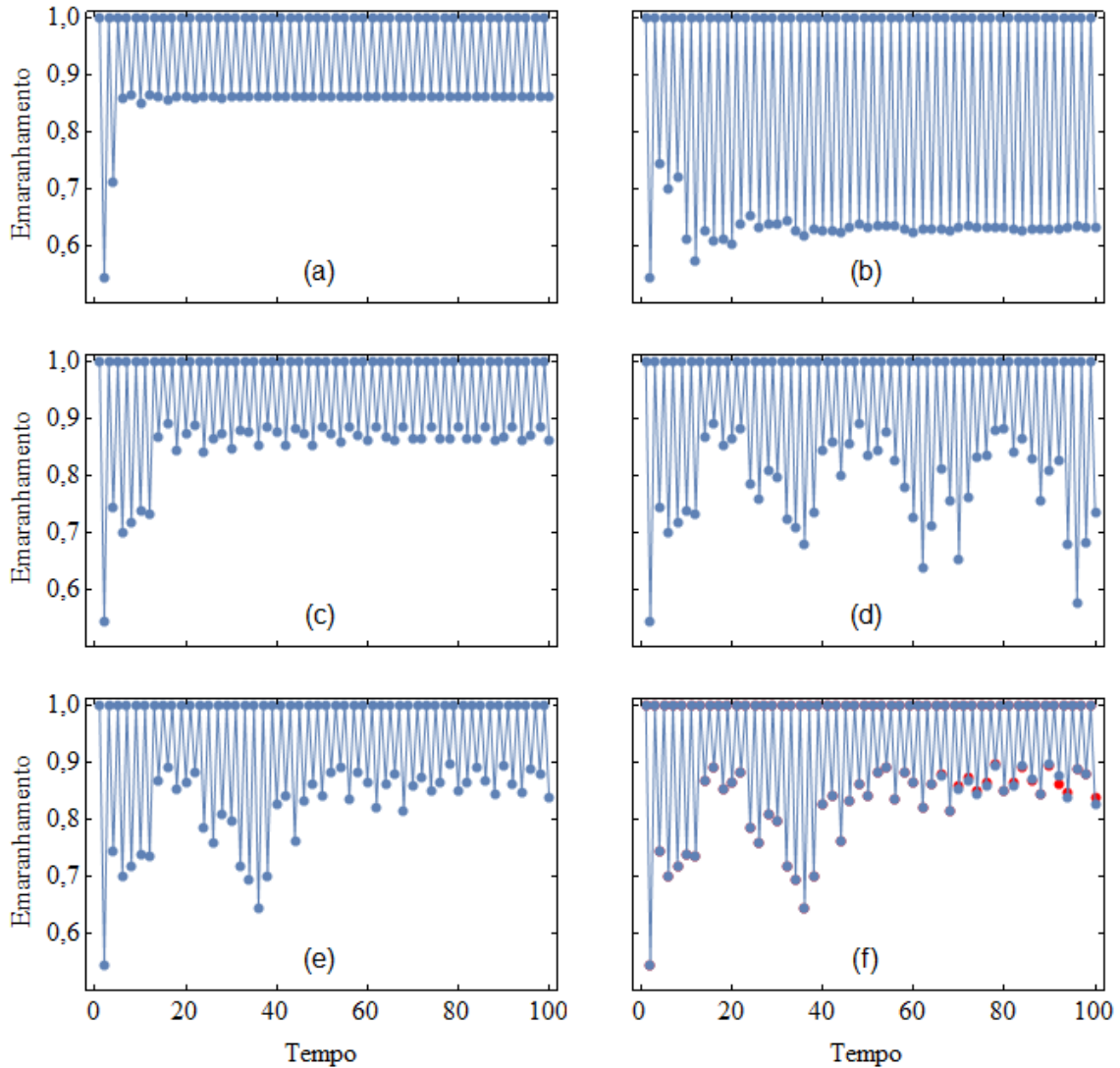
Figura 4.2 – Distribuição de probabilidade para redes variando segundo sequência de Fibonacci, considerando as gerações: (a) α ; (b) $\alpha\beta$; (c) $\alpha\beta\alpha$; (d) $\alpha\beta\alpha\alpha\beta$; (e) $\alpha\beta\alpha\alpha\beta\alpha\beta\alpha$ e (f) assintótica, para $\alpha = \pi/3$ e $\beta = \pi/6$.



Fonte: A autora.

O comportamento do emaranhamento, considerando as mesmas condições, está representado na Figura 4.3. Para a primeira geração α , por exemplo, por ser uma rede homogênea, o emaranhamento se estabiliza já no início da caminhada, de modo a assumir apenas dois valores que se intercalam, sendo eles $E_c = 1$ e $E_c \simeq 0,86$. À medida que introduzimos a não homogeneidade, aumentando a sequência de Fibonacci na rede, notamos que o comportamento do emaranhamento perde a característica de assumir valores assintóticos, como apresentava para as primeiras gerações. Até que, para a geração assintótica, o emaranhamento oscila sem apresentar tendências ou comportamentos repetidos, uma vez que, a rede não possui mais a característica periódica que tinha para as primeiras gerações de Fibonacci. Na Figura 4.3(f), sobrepomos o emaranhamento obtido da 5ª geração (pontos vermelhos) com o obtido pela geração assintótica

Figura 4.3 – Emaranhamento entre estados de posição e moeda para redes variando segundo sequência de Fibonacci, considerando as gerações: (a) 1ª; (b) 2ª; (c) 3ª; (d) 4ª; (e) 5ª; e (f) sobreposição da geração assintótica (pontos azuis) com a 5ª geração (pontos vermelhos), para $\alpha = \pi/3$ e $\beta = \pi/6$.

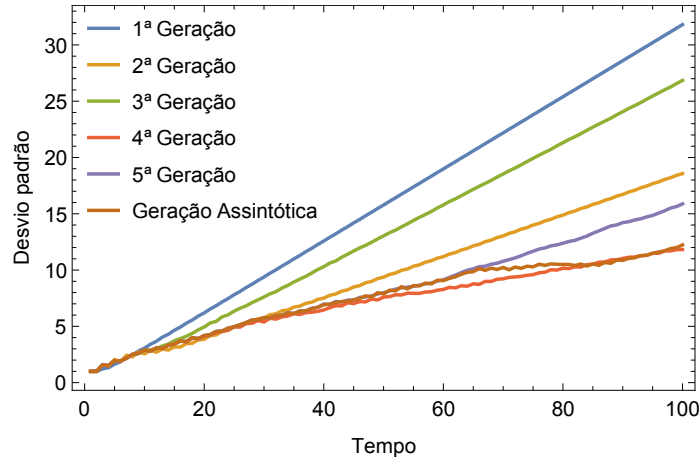


Fonte: A autora.

(pontos azuis), a fim de observar a alteração entre as duas últimas gerações consideradas. Neste caso, fica evidente uma mudança pequena apenas nos últimos passos da dinâmica, de tal forma que a 5ª geração, para o número de passos utilizados, pode ser tomada como a sequência assintótica na geração de emaranhamento. Em todos os casos, os estados de tempo ímpar, assumem emaranhamento máximo, $E_c = 1$, e para estados de tempo par, o emaranhamento é menor que 1.

Na Figura 4.4 está representado o desvio padrão para os mesmos parâmetros. Neste caso, vamos considerar que à medida que caracteriza a dispersão é $c(\alpha, \beta)$, tal que $\sigma \sim n^{c(\alpha, \beta)}$. Para as gerações utilizadas, obtemos os seguintes resultados: $c(\alpha, \beta) = 1,01$, $c(\alpha, \beta) = 0,95$, $c(\alpha, \beta) = 1,03$, $c(\alpha, \beta) = 0,63$, $c(\alpha, \beta) = 0,84$ e $c(\alpha, \beta) = 0,62$, para as respectivas gerações: 1ª,

Figura 4.4 – Desvio padrão considerando redes variando segundo sequência de Fibonacci, considerando as 5 primeiras gerações e a geração assintótica, para $\alpha = \pi/3$ e $\beta = \pi/6$.



Fonte: A autora.

2ª, 3ª, 4ª, 5ª e assintótica. Para a 1ª e 3ª geração, por exemplo, apesar de $c(\alpha, \beta) > 1$, a dispersão é caracterizada como balística, sendo o acréscimo uma questão apenas computacional. Isso acontece pois, para cada passo, a partícula se desloca apenas de um vértice pra outro e não sofre acelerações (48). Para as outras gerações, a dispersão diminui tal que o comportamento é superdifusivo ($0,5 < c(\alpha, \beta) < 1$), inclusive para o caso assintótico.

4.2 Modelo do Shikano e Katsura

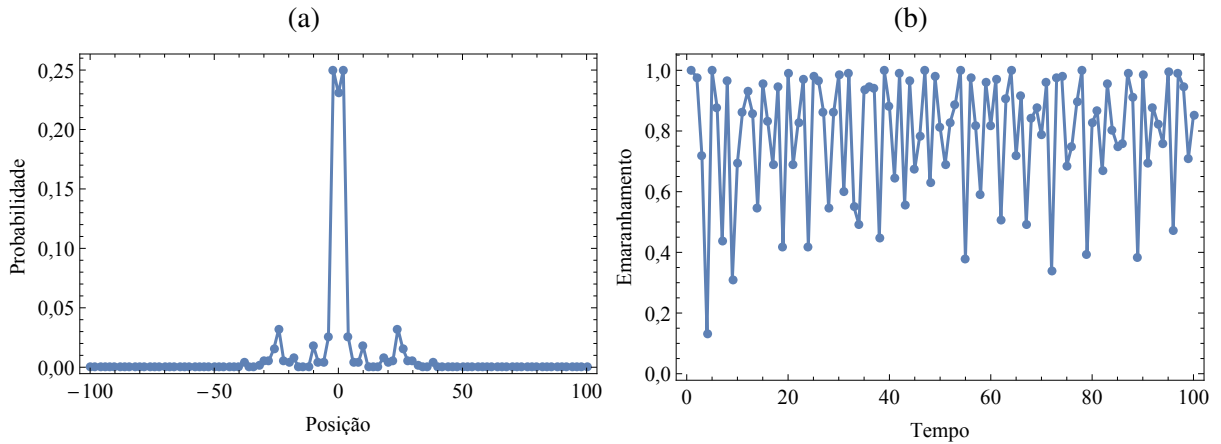
Outro trabalho bastante interessante foi proposto por Shikano e Katsura (25), no qual consideram a não homogeneidade a partir de um operador moeda com dependência explícita da posição j , dado por

$$C(j) = \begin{pmatrix} \cos(2\pi\alpha j) & -\text{sen}(2\pi\alpha j) \\ \text{sen}(2\pi\alpha j) & \cos(2\pi\alpha j) \end{pmatrix}, \quad (4.2)$$

onde α é um número real e corresponde ao inverso do período do operador moeda. É fácil notar que este é um operador moeda não homogêneo, uma vez que, a rotação no espaço moeda em cada vértice da rede é diferente das rotações de outras posições.

Na Figura 4.5a, representamos a distribuição de probabilidade da caminhada quântica, aplicando o operador moeda da Eq. (4.2) e considerando o estado inicial $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |-\rangle + i|0\rangle \otimes |+\rangle)$ para $n = 100$ passos com $\alpha = \pi/2$. Notamos uma maior concentração de probabilidade em torno da origem. De fato, o desvio padrão da posição neste caso é 0,42, indicando um comportamento subdifusivo para a partícula, significando um baixo espalhamento, menor até que o obtido para a caminhada clássica.

Figura 4.5 – (a) Distribuição de probabilidade e (b) emaranhamento entre os estados moeda e posição, utilizando o operador moeda não homogêneo da Eq. (4.2), para $\alpha = \pi/2$ e $n = 100$ passos.



Fonte: A autora.

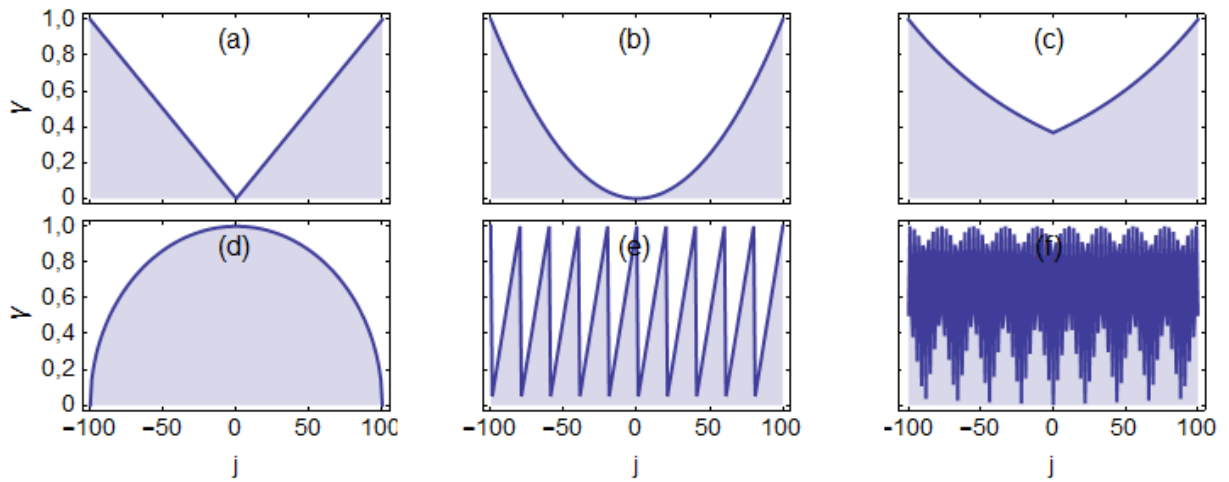
No trabalho do Shikano e Katsura, os autores não investigam o comportamento do emaranhamento no sistema. Portanto, estendendo a análise, estudamos agora o emaranhamento entre os estados de posição e moeda da partícula para os mesmos parâmetros, obtendo a Figura 4.5b. O emaranhamento oscila entre 0 e 1 de forma aleatória e não apresenta um comportamento assintótico, como acontece com a caminhada utilizando o operador Hadamard (homogêneo), por exemplo.

Uma observação importante é que, devido ao comportamento subdifusivo, era de se esperar uma classicalização da caminhada quântica à medida que o sistema evolui. Porém, notamos a partir do comportamento do emaranhamento uma oscilação sem sugerir um decréscimo. E, sendo o emaranhamento uma característica completamente quântica, o sistema permanece apresentando coerência quântica, de tal forma a não se encaminhar para uma versão clássica. Também concluímos que o emaranhamento não apresenta conexão direta com o espalhamento, podendo exibir crescimento ou decréscimo independente do regime da dispersão.

4.3 Redes com variações nas interações pontuais

Nas seções anteriores discutimos modelos de caminhadas quânticas não homogêneas no contexto espacial, conforme os modelos da literatura (25, 26), a partir de operadores moedas com e sem dependência explícita da posição da partícula. Agora, mantendo a análise da caminhada quântica com moeda, utilizamos a ideia do espalhamento - a partir do mapeamento da matriz de espalhamento em um operador moeda - considerando interações pontuais sendo modificadas com a posição. O operador moeda de espalhamento é dado pela Eq. (2.29), o qual reescrevemos

Figura 4.6 – Intensidade γ variando com funções: (a) linear; (b) quadrática ; (c) exponencial; (d) transferência perfeita de estado; (e) modular; e (f) seno, em termos da posição j .



Fonte: A autora.

aqui

$$\mathbf{C}_{\text{esp}}(k) = \begin{pmatrix} t_j^{(-)}(k) & r_j^{(+)}(k) \\ r_j^{(-)}(k) & t_j^{(+)}(k) \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

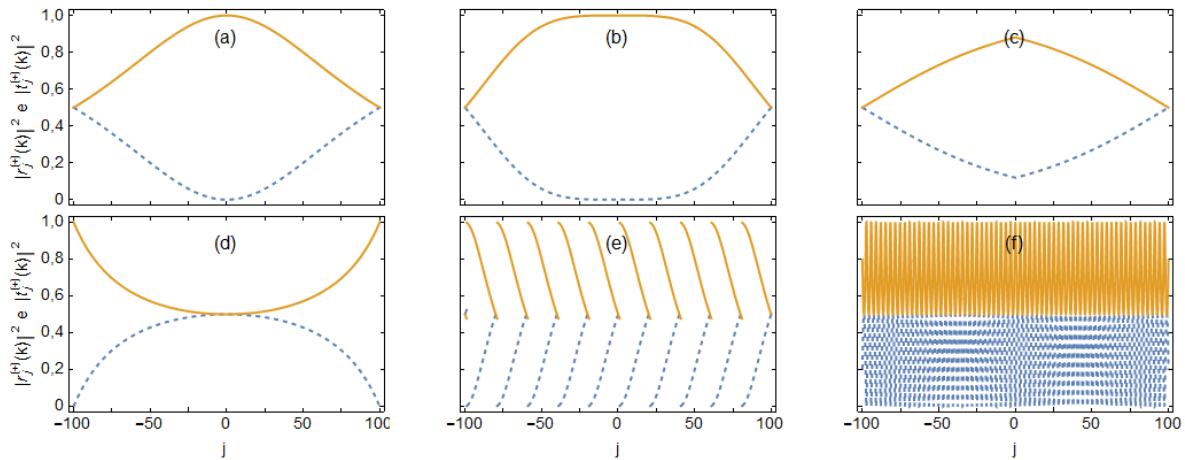
Os coeficientes de reflexão e transmissão, $r_j^{(\pm)}(k)$ e $t_j^{(\pm)}(k)$, das interações pontuais possuem intensidade γ . É possível γ ser constante ao longo da rede, conforme apresentado na seção 2.6, ou depender da posição em que a partícula se encontra. Nesta seção, vamos considerar γ variando com a posição j segundo as seguintes funções

1. Linear: $\gamma(j) = |j/n|$;
2. Quadrática: $\gamma(j) = j^2/n^2$;
3. Exponencial: $\gamma(j) = e^{|j/n|}/e$;
4. Transferência perfeita de estado (TPE) (49): $\gamma(j) = \frac{1}{n} \sqrt{(j+n)(n-j)}$, a qual é obtida a partir de uma das distribuições de intensidade de acoplamentos usada em cadeias de spins para realização da transferência de excitação numa cadeia de spin (50);
5. Modular: a intensidade cresce linearmente até atingir o máximo, $\gamma(j) = 1$, e retorna ao valor inicial na posição seguinte, $\gamma(j+1) = 0$. O processo se repete a cada $n = 20$ passos;
6. Senoidal: $\gamma(j) = |\text{sen}(j)|$;

onde n é o número de passos. A intensidade $\gamma(j)$ está normalizada em todos os casos, ou seja, varia no intervalo $[0,1]$, conforme observado na Figura 4.6.

Conforme vimos na seção 2.6, as interações pontuais podem ser do tipo δ , δ' , cruzado e assimétrico. Para a análise das variações na rede, vamos considerar apenas os casos δ e δ' , partindo do estado inicial simétrico $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |-\rangle + |0\rangle \otimes |+\rangle)$, para $k = 1$ após

Figura 4.7 – Amplitudes de reflexão (linha tracejada) e transmissão (linha cheia) para interações pontuais δ e δ' com $k = 1$. Intensidade $\gamma(j)$ variando segundo funções: (a) linear; (b) quadrática ; (c) exponencial; (d) TPE; (e) modular; e (f) seno.



Fonte: A autora.

$n = 100$ passos, analisando as 6 funções listadas acima.

Uma observação importante é relativa às amplitudes de reflexão e transmissão para as situações consideradas. Para ambas as interações pontuais, δ e δ' , com $k = 1$, elas são idênticas, conforme Figura 4.7. Apesar disso, a distribuição de probabilidade, emaranhamento e desvio padrão apresentam comportamentos diferentes, uma vez que, antes de realizar as medições, o estado leva em conta apenas os coeficientes de reflexão e transmissão, influenciando assim nas interferências (construtivas e destrutivas).

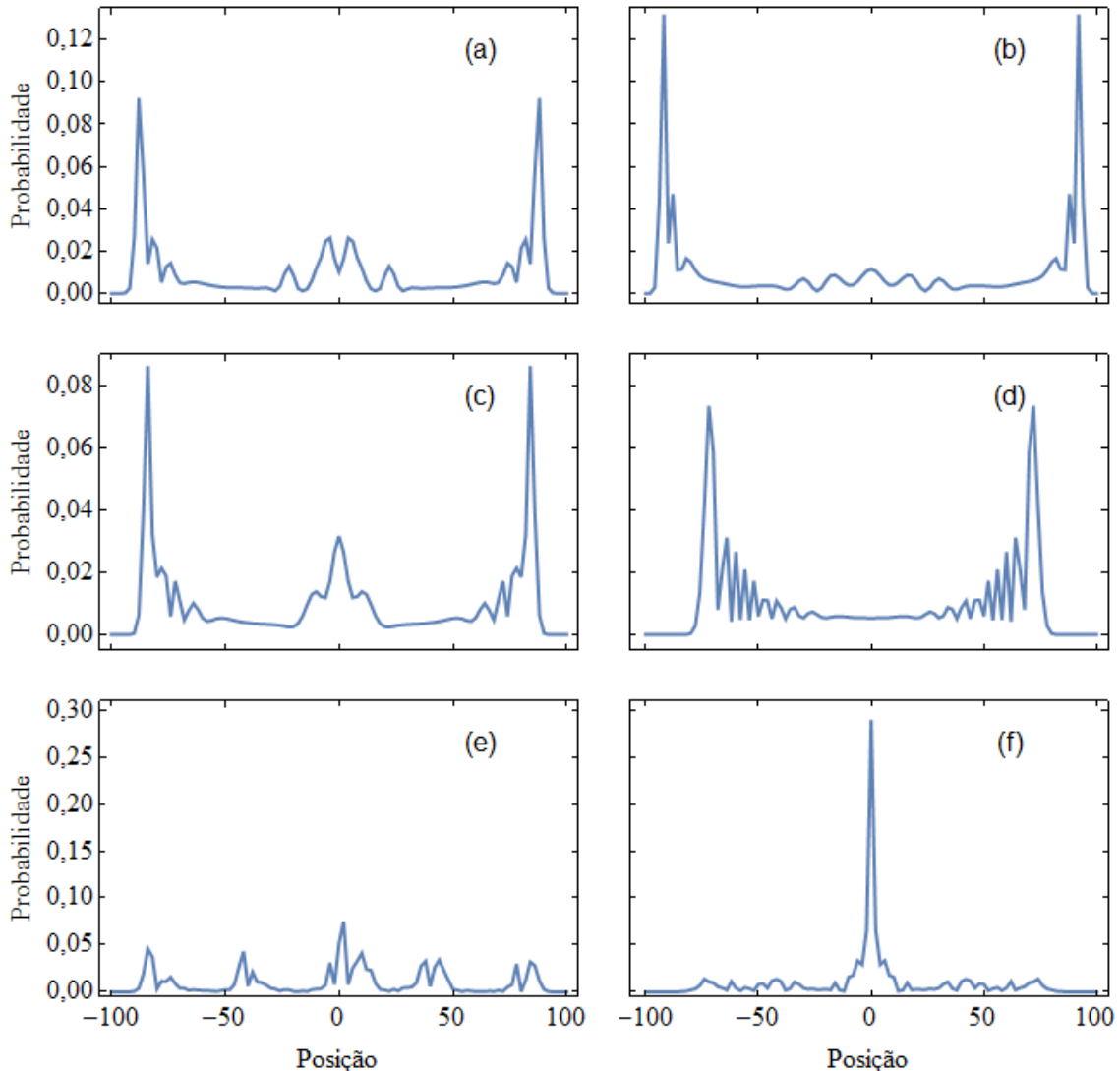
4.3.1 Interação pontual delta de Dirac

Iniciamos a análise para a interação pontual do tipo delta de Dirac, δ . Neste caso, a função de onda da partícula é contínua e sua derivada descontínua (39), tal que os coeficientes de reflexão e transmissão são dados por

$$r^{(\pm)}(k) = \frac{\gamma}{ik - \gamma}, \quad t^{(\pm)}(k) = \frac{ik}{ik - \gamma}. \quad (4.4)$$

Na Figura 4.8, mostramos o perfil da distribuição de probabilidade considerando a intensidade γ modificando ao longo da rede. Para as variações linear, quadrática e exponencial, por exemplo, os comportamentos são bastante parecidos, com picos de maior probabilidade nas extremidades e próximo da origem uma probabilidade pequena. No caso da variação γ segundo TPE, o comportamento lembra a caminhada Hadamard, com baixa e quase constante probabilidade em torno da origem e uma oscilação crescente de probabilidade até seu pico máximo nos extremos. Portanto, percebemos um comportamento semelhante para as variações

Figura 4.8 – Distribuição de probabilidade com interações pontuais do tipo δ de Dirac. Intensidade γ variando com funções: (a) linear; (b) quadrática ; (c) exponencial; (d) TPE; (e) modular; e (f) seno.

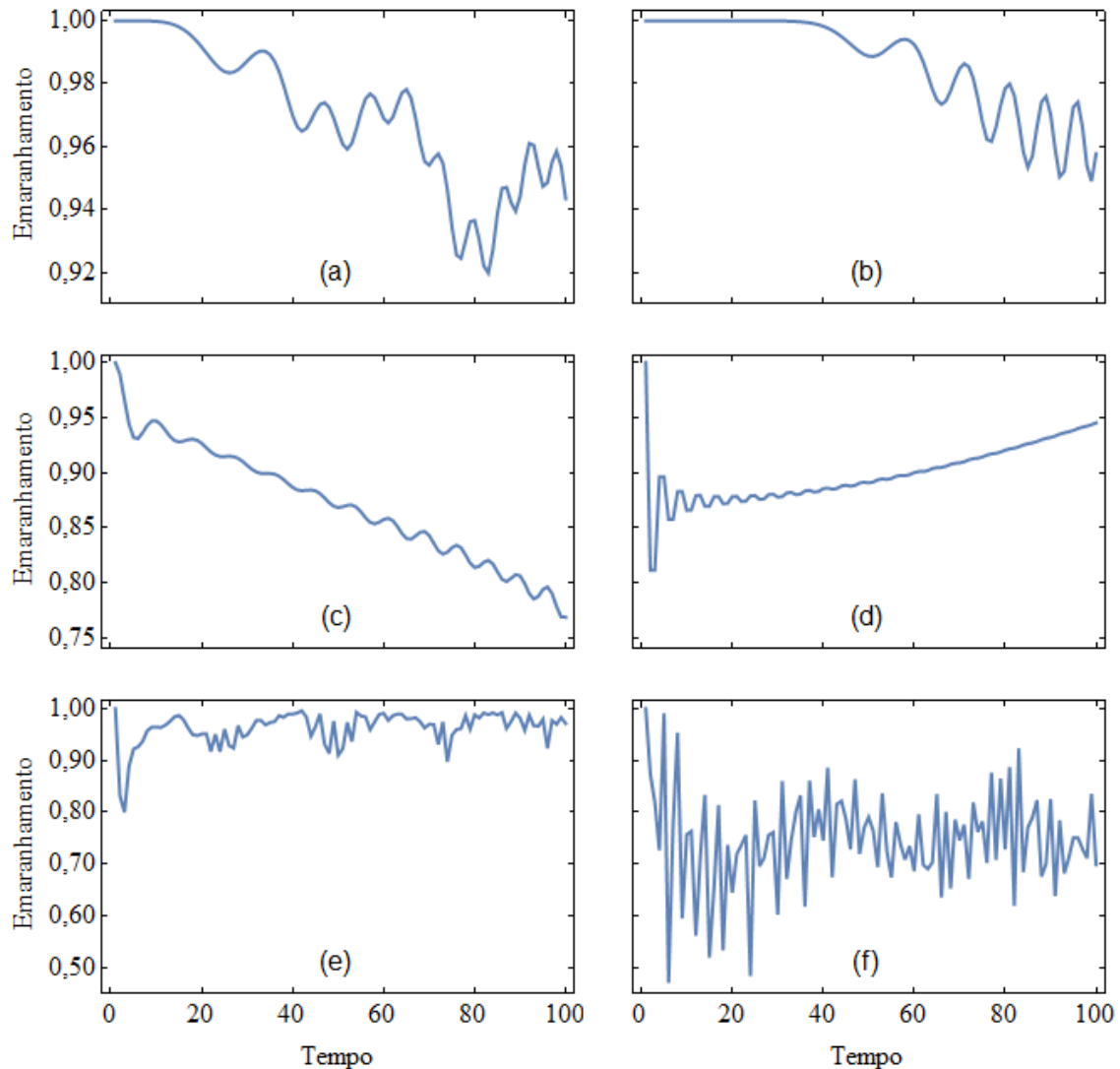


Fonte: A autora.

linear, quadrática, exponencial e segundo transferência perfeita de estado. O mesmo não acontece com as variações modular e senoidal. Para o caso modular, percebemos primeiramente uma distribuição assimétrica, isso porque a intensidade γ não é simétrica, conforme podemos observar na Figura 4.6. A segunda característica é relativa às cinco regiões com picos de maior probabilidade intercalados com intervalos de baixa probabilidade. Para a variação senoidal, observamos um pico de alta probabilidade na origem, e no restante da rede, uma probabilidade bem menor.

O emaranhamento para as mesmas modificações na rede, está representado na Figura 4.9. Para todos os cenários, o estado após um passo é maximamente emaranhado. Porém, uma análise após $n = 1$ nos mostra um comportamento diferente. Para as variações linear e quadrática, por exemplo, percebemos que o sistema permanece maximamente emaranhado, ou seja $E_c = 1$, em

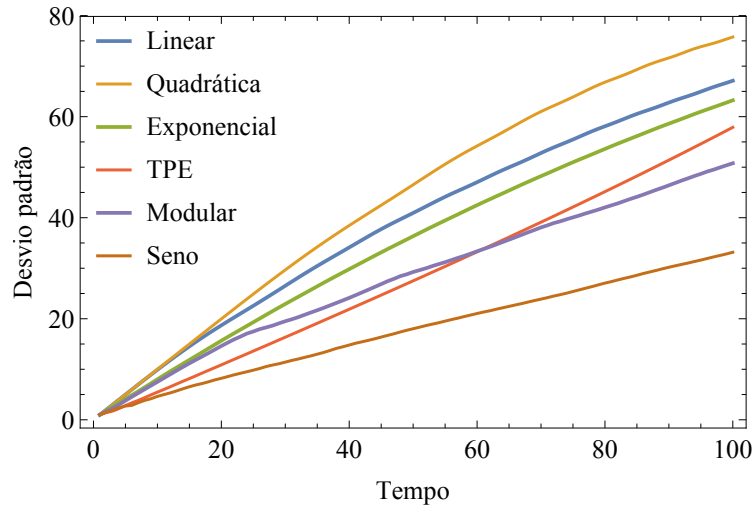
Figura 4.9 – Emaranhamento entre os estados de moeda e posição da partícula com interações pontuais do tipo delta de Dirac. Intensidade γ variando com funções: (a) linear; (b) quadrática ; (c) exponencial; (d) TPE; (e) modular; e (f) seno.



Fonte: A autora.

aproximadamente 10 e 35 primeiros passos, respectivamente. Podemos entender esse fenômeno observando as amplitudes de reflexão e transmissão representadas na Figura (4.7). Enquanto a reflexão permanece igual a zero, o emaranhamento é máximo e, à medida que a reflexão aumenta, o emaranhamento decresce oscilando. Já para o caso exponencial, o emaranhamento possui um comportamento decrescente e oscilatório logo após o primeiro passo. Para a variação segundo a transferência perfeita de estado, o emaranhamento começa com oscilações que vão diminuindo ao mesmo tempo em que o emaranhamento cresce. Por fim, para os casos modular e senoidal, percebemos emaranhamento com oscilações aleatórias à medida que a partícula se espalha na rede. Portanto, nossos resultados sugerem que o emaranhamento entre os estados de posição e moeda não se aproxima de um valor limite para $n \rightarrow \infty$, como acontece utilizando o operador Hadamard.

Figura 4.10 – Desvio padrão para interações pontuais do tipo δ variando ao longo da rede.



Fonte: A autora.

Para o desvio padrão, obtemos a Figura 4.10. O parâmetro α que classifica a dispersão é, em interação pontual variando segundo a função linear, dado por $\alpha_l^\delta = 0,79$. Já para a variação quadrática $\alpha_q^\delta = 0,81$. Para a variação exponencial $\alpha_e^\delta = 0,86$. Para a variação de transferência perfeita de estado $\alpha_{TPE}^\delta = 1,04$. Para a variação modular $\alpha_m^\delta = 0,80$. E, por fim, a variação senoidal $\alpha_s^\delta = 0,87$. Portanto, salvo o caso segundo transferência perfeita de estado, o desvio padrão para as outras 5 situações está no regime superdifusivo ($0,5 < \alpha < 1$). O fato da variação segundo TPE ter α um pouco maior que 1, é devido à incerteza numérica ao gerar a dinâmica, de modo que podemos assumir $\alpha = 1$, apresentando uma dinâmica balística. Isso ocorre devido ao sistema não sofrer acelerações e, portanto, não deve apresentar $\alpha > 1$.

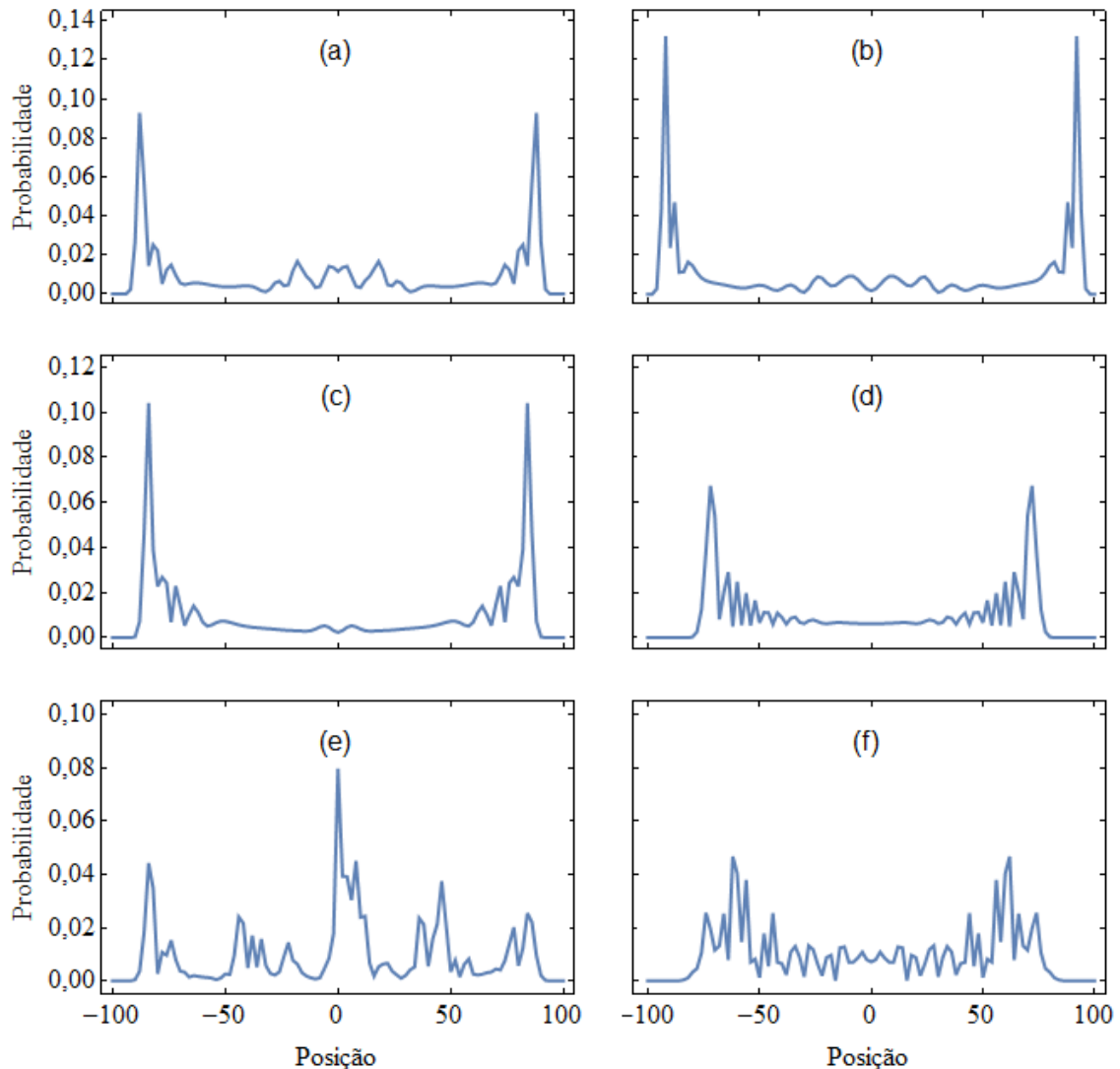
4.3.2 Interação pontual δ'

A segunda condição que analisamos é a interação pontual segundo a δ' , na qual a função de onda da partícula é descontínua e a sua derivada contínua (39). Neste caso, os coeficientes de reflexão e transmissão são dados por

$$r^{(\pm)}(k) = \frac{\gamma k}{i + \gamma k}, \quad t^{(\pm)}(k) = \frac{i}{i + \gamma k}. \quad (4.5)$$

Na Figura 4.11, mostramos a distribuição de probabilidade considerando interações pontuais do tipo δ' na qual a intensidade γ varia ao longo da rede. Da mesma forma que para a interação δ , aqui temos um comportamento semelhante para as variações segundo funções linear, quadrática, exponencial e transferência perfeita de estado, nas quais os picos de maior probabilidade estão deslocados nos extremos e próximo da origem as probabilidades são baixas. Para a variação modular, temos novamente 5 regiões onde existe maior probabilidade intercaladas

Figura 4.11 – Distribuição de probabilidade com interações pontuais do tipo δ' . Intensidade γ variando com funções: (a) linear; (b) quadrática ; (c) exponencial; (d) segundo TPE; (e) modular; e (f) seno.

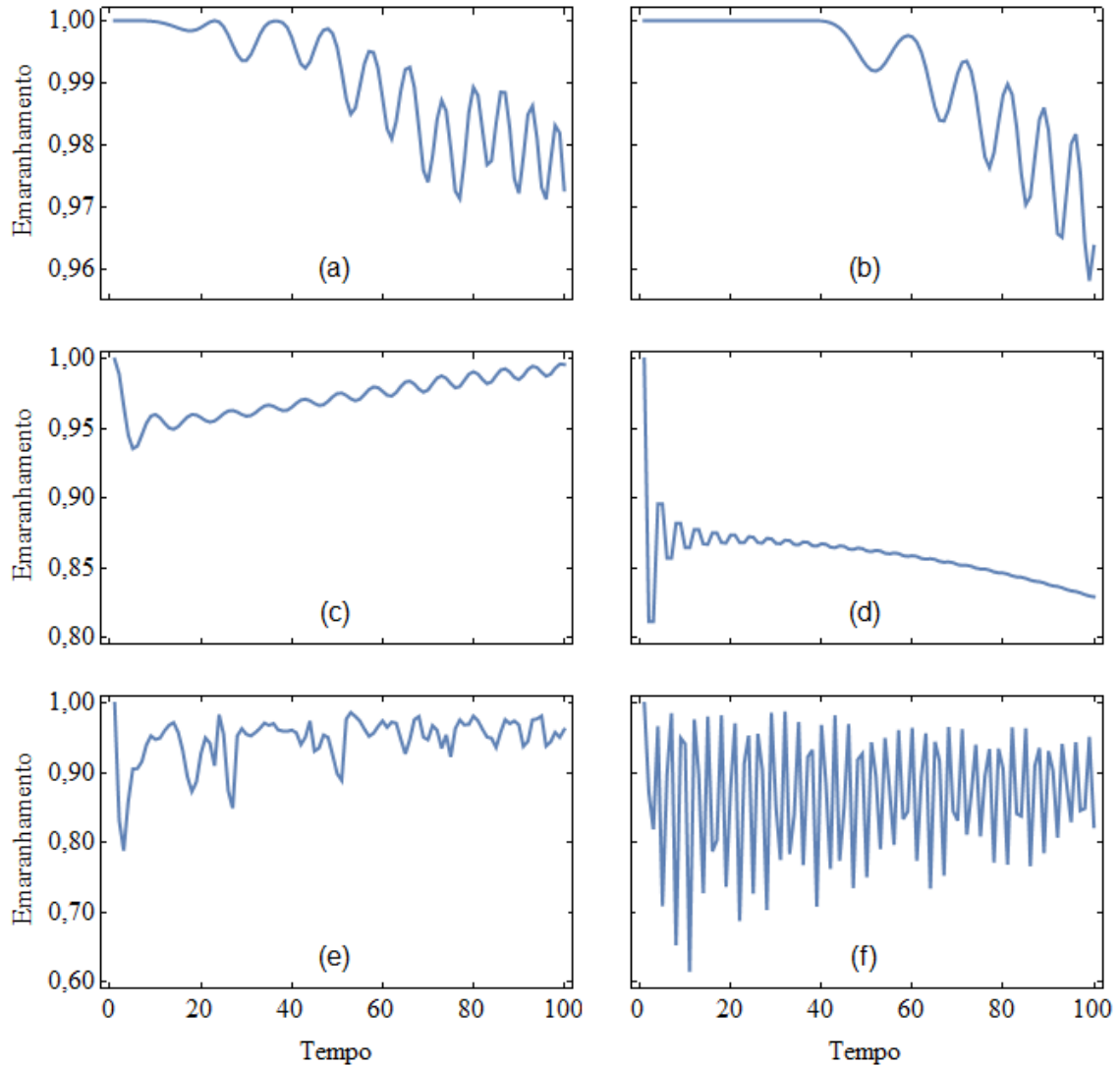


Fonte: A autora.

com regiões de probabilidade baixa. Por fim, para a variação senoidal, diferente do obtido no caso δ , temos uma distribuição bem espalhada ao longo de toda a rede.

O emaranhamento para os mesmos casos, está representado na Figura 4.12. Para as variações linear e quadrática, os comportamentos seguem parecidos com as interações δ , com estados maximamente emaranhados nos primeiros passos e, em seguida, com decrescimento oscilatório. Já para a variação exponencial, o comportamento muda quando comparado à variação δ , assumindo um crescimento à medida que o sistema evolui. Para a variação segundo transferência perfeita de estado, o emaranhamento decresce para n grande. Para as variações modular e senoidal, o emaranhamento oscila sem apresentar crescimento ou decrescimento. Novamente, o emaranhamento não apresenta comportamento assintótico a um valor limite para

Figura 4.12 – Emaranhamento entre os estados de moeda e posição da partícula com interações pontuais δ' . Intensidade γ variando com funções: (a) linear; (b) quadrática ; (c) exponencial; (d) segundo TPE; (e) modular; e (f) seno.

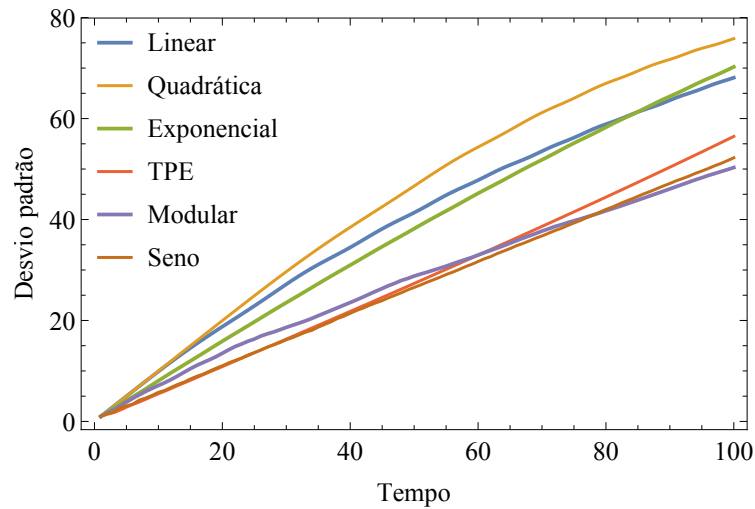


Fonte: A autora.

os casos considerados.

O desvio padrão está representada na Figura 4.13. O parâmetro α que caracteriza a dispersão da partícula são: $\alpha_l^{\delta'} = 0,78$, $\alpha_q^{\delta'} = 0,81$, $\alpha_e^{\delta'} = 0,91$, $\alpha_{TPE}^{\delta'} = 1,03$, $\alpha_m^{\delta'} = 0,82$ e $\alpha_s^{\delta'} = 0,97$, para as respectivas variações consideradas: linear, quadrática, exponencial, TPE, modular e senoidal. Portanto, todas as variações geram um comportamento superdifusivo ($0,5 < \alpha < 1$) para a dinâmica da partícula, exceto para a TPE. Para o caso segundo transferência perfeita de estado, a partícula apresenta dinâmica balística ($\alpha = 1$), onde assumimos a quantidade 0,03 como um erro numérico. Isso porque a partícula não sofre nenhum tipo de aceleração e portanto não pode apresentar deslocamento maior que de um passo por vez. Dessa forma, concluímos que o comportamento pode ser, no máximo, balístico.

Figura 4.13 – Desvio padrão para interações pontuais do tipo δ' variando ao longo da rede.



Fonte: A autora.

De modo geral, o comportamento obtido para as interações δ e δ' foi semelhante. Na análise do espalhamento da partícula, os cenários produziram, no mínimo, dispersões superdifusivas ($0,5 < \alpha < 1$). Dessa forma, a partícula mantém a vantagem do espalhamento mais rápido comparado com a versão clássica. Para o emaranhamento, notamos comportamentos oscilatórios sem valores assintóticos para ambas interações. Em uma comparação particular, considerando as dinâmicas geradas pela δ e δ' para a variação TPE, o regime de dispersão obtido foi balístico ($\alpha = 1$) para ambas. Porém, na análise do emaranhamento, a interação δ gerou um crescimento, enquanto a δ' gerou um decréscimo de coerência quântica no sistema. Logo, fica evidente, mais uma vez, o fato do comportamento do emaranhamento não ter conexão direta com o regime de dispersão.

5 CONCLUSÃO

Neste trabalho apresentamos um estudo sobre caminhadas quânticas devido às suas inúmeras aplicações em sistemas físicos. A principal delas consiste na sua aplicação em algoritmos quânticos para a construção do computador quântico, o qual apresenta perspectivas promissoras (51). Os modelos de caminhada quântica considerados neste trabalho, com moeda e de espalhamento, são equivalentes, ou seja, existe o mapeamento de um modelo no outro. O mapeamento da caminhada quântica de espalhamento no modelo com moeda nos trouxe dois principais resultados: (i) foi possível obter a caminhada quântica dependente da energia para o modelo mais conhecido na literatura, a partir do operador moeda de espalhamento, sem a necessidade de trabalhar com a equação diferencial de Schrödinger; (ii) foi possível investigar o emaranhamento, propriedade que carrega as informações das correlações quânticas do sistema, considerando as posições na rede como centros espalhadores que podem, ou não, variar com a posição da partícula.

A fim de avaliar a influência da não homogeneidade no sistema, no contexto espacial, introduzimos variações na rede de acordo com a posição da partícula. A formação das redes não homogêneas ocorreu por meio da geração de operadores moedas que se alteram de acordo com a posição da partícula, com ou sem dependência explícita de j . Neste contexto, analisamos a distribuição de probabilidade, desvio padrão e emaranhamento para cada situação considerada.

A análise do desvio padrão da posição mostrou que a caminhada quântica com a moeda Hadamard e a caminhada quântica de espalhamento para $r = t = 1/\sqrt{2}$ apresentam um comportamento balístico, enquanto que na caminhada aleatória clássica o comportamento é difusivo. Dessa forma, uma partícula realizando uma caminhada quântica se dispersa quadraticamente mais rápido do que no caso clássico. Este fato fica bastante evidente ao analisar as distribuições de probabilidade: para os casos quânticos, notamos picos de probabilidade afastadas da origem significando maior espalhamento, enquanto que no caso clássico a partícula apresenta maior probabilidade de ser encontrada próxima da origem, devido à sua distribuição binomial. Porém, ao introduzir não homogeneidade no sistema, notamos mudança no comportamento da dispersão para a partícula. O que é bastante razoável, uma vez que, em redes não homogêneas a partícula experimenta diferentes efeitos para cada posição que passa, influenciando então no espalhamento do sistema. Na maior parte dos casos considerados, a não homogeneidade gerou uma dispersão superdifusiva, sendo esse regime entre o difusivo (caminhada clássica) e o balístico (caminhada quântica com a moeda Hadamard). Portanto, mesmo as caminhadas quânticas não homogêneas apresentam vantagem na dispersão quando comparada com a versão clássica.

O emaranhamento, por apresentar correlações quânticas entre subsistemas ou graus de liberdade, foi possível ser avaliado somente no modelo com moeda. Porém, através do ma-

peamento, também investigamos emaranhamento considerando algumas variações nos centros espalhadores da caminhada quântica de espalhamento. Para o caso homogêneo considerando a moeda Hadamard, notamos um comportamento oscilatório assintótico, cujo valor tem tendência a $E_c(n \rightarrow \infty) \simeq 0,872$, mas com taxa de convergência dependente do estado inicial, sendo os estados iniciais simétricos com maior taxa de convergência. A introdução de não homogeneidade no sistema, gerou mudanças no comportamento do emaranhamento. Nas redes para as quais consideramos as sequências de Fibonacci, por exemplo, notamos que conforme introduzimos a não homogeneidade, aumentando as sequências, o emaranhamento perde a estabilidade de obter valores assintóticos. O mesmo comportamento sem valores assintóticos pode ser visto nas situações de redes não homogêneas variando com a dependência explícita de j . Portanto, mesmo considerando estados iniciais simétricos, notamos que quanto menor a homogeneidade, maiores as oscilações sem comportamentos periódicos ou assintóticos. A partir do emaranhamento, também concluímos que, mesmo a partícula realizando uma caminhada quântica não homogênea cuja dispersão é baixa (menor até que o caso clássico), o sistema ainda pode apresentar emaranhamento alto, de tal forma que não é possível assumir uma "classicalização" do sistema apenas a partir da dispersão. Consequentemente, constatamos a ausência de uma conexão direta entre o comportamento do emaranhamento com o regime da dispersão da partícula.

5.1 Perspectivas futuras

Tendo em vista a grande aplicabilidade das caminhadas quânticas e a partir das análises deste trabalho, podemos listar alguns problemas que podem ser abordados em estudos futuros, tais como:

- Analisar correlações quânticas além do emaranhamento considerando os modelos apresentados, tal que seja possível ampliar a noção fundamental a respeito de sistemas quânticos, em especial nas caminhadas quânticas;
- Investigar propriedades introduzidas na literatura, como por exemplo, localização de Anderson, espectro de energia, propriedade de transporte e entropia, mas levando em conta os modelos de caminhadas quânticas apresentadas, a fim de expandir as aplicações do sistema;
- Desenvolver as caminhadas quânticas de espalhamento para dimensões maiores, tal que a partícula pode se dispersar em um plano ou em um volume, por exemplo. Tal desenvolvimento poderia facilitar a implementação experimental.

REFERÊNCIAS

- 1 EISBERG, R.; RESNICK, R. *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles*. USA: John Wiley and Sons, 1985.
- 2 KEMPE, J. Quantum random walks: An introductory overview. *Contemp. Phys.*, Taylor and Francis Ltd., v. 44, p. 307–327, 2003.
- 3 SALINAS, S. R. A. *Introdução à Física Estatística*. São Paulo: Edusp, 2018.
- 4 SALINAS, S. R. A. Einstein e a teoria do movimento browniano. *Rev. Bras. Ens. Fis.*, v. 27, 2005.
- 5 BISKUP, M.; DING, J.; GOSWAMI, S. Return probability and recurrence for the random walk driven by two-dimensional gaussian free field. *Commun. Math. Phys.*, Springer Berlin Heidelberg, Berlin/Heidelberg, v. 373, n. 1, p. 45–106, 2019.
- 6 CVETKOVIC, V.; FIORI, A.; DAGAN, G. Solute transport in aquifers of arbitrary variability: A time-domain random walk formulation. *Water Resour. Res.*, Blackwell Publishing Ltd, v. 50, n. 7, p. 5759–5773, 2014.
- 7 KARAMAN, M. M. et al. Differentiating low- and high-grade pediatric brain tumors using a continuous-time random-walk diffusion model at high b-values. *Magn. Reson. Med.*, Blackwell Publishing Ltd, United States, v. 76, n. 4, p. 1149–1157, 2016.
- 8 HUA, K.-L. et al. A novel multi-focus image fusion algorithm based on random walks. *J. Vis. Commun. Image Represent.*, Elsevier Inc, Amsterdam, v. 25, n. 5, p. 951–962, 2014.
- 9 APERGIS, N.; GUPTA, R. Can (unusual) weather conditions in new york predict south african stock returns? *Res. Int. Bus. Finance*, Elsevier B.V, v. 41, p. 377–386, 2017.
- 10 CHILDS, A. M. Universal computation by quantum walk. *Phys. Rev. Lett.*, v. 102, n. 18, 2009.
- 11 FEYNMAN, R. P. Quantum mechanical computers. *Found. Phys.*, v. 16, p. 507–531, 1986.
- 12 AHARONOV, Y.; DAVIDOVICH, L.; ZAGURY, N. Quantum random walks. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 48, p. 1687–1690, 1993.
- 13 SU, Y.; WANG, X. A robust visual image encryption scheme based on controlled quantum walks. *Physica A*, Elsevier B.V, v. 587, p. 126529, 2022.
- 14 ASBÓTH, J. K.; OBUSE, H. Bulk-boundary correspondence for chiral symmetric quantum walks. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 88, p. 121406, Sep 2013.
- 15 WANG, K. et al. Simulating dynamic quantum phase transitions in photonic quantum walks. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 122, p. 020501, 2019.
- 16 CHANDRASHEKAR, C. M.; BUSCH, T. Localized quantum walks as secured quantum memory. *EPL*, IOP Publishing, v. 110, n. 1, p. 10005, 2015.

- 17 SOUZA, L. S. D.; CARVALHO, J. H. D.; FERREIRA, T. A. Quantum walk to train a classical artificial neural network. *Proceedings - 2019 Brazilian Conference on Intelligent Systems, BRACIS 2019*, Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc., p. 836–841, 2019.
- 18 ANNABESTANI, M. et al. Multiparameter quantum metrology with discrete-time quantum walks. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 105, p. 062411, Jun 2022.
- 19 ROBENS, C. et al. Ideal negative measurements in quantum walks disprove theories based on classical trajectories. *Phys. Rev. X*, American Physical Society, v. 5, p. 011003, 2015.
- 20 ZÄHRINGER, F. et al. Realization of a quantum walk with one and two trapped ions. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 104, p. 100503, 2010.
- 21 ALDERETE, C. H. et al. Quantum walks and dirac cellular automata on a programmable trapped-ion quantum computer. *Nat. Commun.*, v. 11, 2020.
- 22 XUE, P. et al. Experimental quantum-walk revival with a time-dependent coin. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 114, p. 140502, 2015.
- 23 QIANG, X. et al. Efficient quantum walk on a quantum processor. *Nat. Commun.*, Nature Publishing Group, England, v. 7, n. 1, 2016.
- 24 TAO, S.-J. et al. Experimental optimal generation of hybrid entangled states in photonic quantum walks. *Opt. Lett.*, The Optical Society, v. 46, p. 1868, 2021.
- 25 SHIKANO, Y.; KATSURA, H. Localization and fractality in inhomogeneous quantum walks with self-duality. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 82, p. 031122, Sep 2010.
- 26 RIBEIRO, P.; MILMAN, P.; MOSSERI, R. Aperiodic quantum random walks. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 93, p. 190503, Nov 2004.
- 27 MOLFETTA, G. D.; SOARES-PINTO, D. O.; QUEIRÓS, S. M. D. Elephant quantum walk. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 97, p. 062112, Jun 2018.
- 28 BADHANI, H.; BANERJEE, S.; CHANDRASHEKAR, C. M. Non-hermitian quantum walks and non-markovianity: the coin-position interaction. 2021. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/2109.10682>>.
- 29 BUARQUE, A. R. C.; DIAS, W. S. Aperiodic space-inhomogeneous quantum walks: Localization properties, energy spectra, and enhancement of entanglement. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 100, p. 032106, Sep 2019.
- 30 BOUGROURA, H. et al. Quantum-walk transport properties on graphene structures. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 94, p. 062331, Dec 2016.
- 31 CARNEIRO, I. et al. Entanglement in coined quantum walks on regular graphs. *New J. Phys.*, v. 7, 2005.
- 32 WILLIAMS, C. P. *Explorations in Quantum Computing*. 2. ed. USA: Springer Science and Business Media, 2011.
- 33 AMBAINIS, A. et al. One-dimensional quantum walks. In: *Proceedings of the Thirty-Third Annual ACM Symposium on Theory of Computing*. New York, USA: Association for Computing Machinery, 2001. p. 37–49.

- 34 FELDMAN, E.; HILLERY, M. Scattering theory and discrete-time quantum walks. *Phys. Lett. A*, Elsevier, v. 324, p. 277–281, 2004.
- 35 ANDRADE, F. M. de. *Métodos de função de Green na análise de grafos quânticos e caminhadas quânticas*. Tese (Doutorado) — UFPR, 2009.
- 36 SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. *Modern Quantum Mechanics*. 2. ed. USA: Cambridge University Press, 2017.
- 37 ANDRADE, F. M.; LUZ, M. G. E. da. Equivalence between discrete quantum walk models in arbitrary topologies. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 80, p. 052301, 2009.
- 38 CHADAN, K.; NEWTON, R. G.; SABATIER, P. C. *Inverse Problems in Quantum Scattering Theory*. Berlin: Springer, 1989.
- 39 ZANETTI, F. M. et al. Classifying the general family of 1d point interactions: A scattering approach. *J. Phys. A Math. Theor.*, v. 39, p. 2493–2508, 3 2006.
- 40 GROVER, L. K. A fast quantum mechanical algorithm for database search. In: *Proceedings of the Twenty-Eighth Annual ACM Symposium on Theory of Computing*. New York, NY, USA: Association for Computing Machinery, 1996. p. 212–219.
- 41 BUCHLEITNER, A.; VIVIESCAS, C.; TIERSCH, M. *Entanglement and Decoherence: Foundations and Modern Trends*. Berlin, Heidelberg: Springer, 2009.
- 42 PLENIO, M. B.; VIRMANI, S. An introduction to entanglement measures. *Quantum Info. Comput.*, Rinton Press, Incorporated, Paramus, NJ, v. 7, n. 1, p. 1–51, 2007.
- 43 GUO, Z.; CAO, H.; CHEN, Z. Distinguishing classical correlations from quantum correlations. *J. Phys. A Math. Theor.*, IOP Publishing, v. 45, n. 14, p. 145301, 2012.
- 44 VIDAL, G. Entanglement monotones. *J. Mod. Opt.*, Taylor and Francis, v. 47, n. 2-3, p. 355–376, 2000.
- 45 PIRES, M. A.; QUEIRÓS, S. M. D. Quantum walks with sequential aperiodic jumps. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 102, p. 012104, Jul 2020.
- 46 NGUYEN, D. T.; NOLAN, D. A.; BORRELLI, N. F. Localized quantum walks in quasi-periodic fibonacci arrays of waveguides. *Opt. Express*, The Optical Society, v. 27, p. 886, 2019.
- 47 NGUYEN, D. T.; NOLAN, D. A.; BORRELLI, N. F. Quantum walks in quasi-periodic photonics lattices. In: *Advances in Quantum Communication and Information*. Rijeka: IntechOpen, 2020. cap. 5.
- 48 KOROSEC, C. S.; SIVAK, D. A.; FORDE, N. R. Apparent superballistic dynamics in one-dimensional random walks with biased detachment. *Phys. Rev. Research*, American Physical Society, v. 2, p. 033520, 2020.
- 49 ZHAN, X. et al. Perfect state transfer and efficient quantum routing: A discrete-time quantum-walk approach. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 90, p. 012331, 2014.
- 50 CHRISTANDL, M. et al. Perfect state transfer in quantum spin networks. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 92, p. 187902, 2004.
- 51 ARUTE, F. et al. Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. *Nature*, v. 574, p. 505–510, 2019.

APÊNDICE A – CÁLCULO ANALÍTICO DO EMARANHAMENTO EM CAMINHADAS QUÂNTICAS

Para exemplificar o cálculo analítico do emaranhamento, vamos considerar o operador moeda Hadamard. Partindo do estado inicial $|\psi(0)\rangle = |0\rangle \otimes |-\rangle$, o qual já sabemos ser um estado separável e, portanto, não emaranhado, vamos analisar o emaranhamento para o estado após um passo. Conforme Eq. (2.17), o estado $|\psi(1)\rangle$ é dado por

$$|\psi(1)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|-1\rangle \otimes |-\rangle + |1\rangle \otimes |+\rangle \right),$$

de modo que o operador densidade do estado é escrito como

$$\begin{aligned} \rho &= |\psi(1)\rangle \langle \psi(1)| \\ &= \frac{1}{\sqrt{4}} \left[|-1\rangle |-\rangle \langle -| \langle -1| + |-1\rangle |-\rangle \langle +| \langle 1| + |1\rangle |+\rangle \langle -| \langle -1| + |1\rangle |+\rangle \langle +| \langle 1| \right] \end{aligned}$$

onde omitimos o símbolo de produto direto \otimes e utilizamos a propriedade cíclica do estado $|\psi\rangle = |j\rangle \otimes |\sigma\rangle = |\sigma\rangle \otimes |j\rangle$.

Agora, para obter o operador de densidade reduzido de moeda ρ_c , determinamos o traço parcial no espaço das posições. Para isso, é necessário considerar os autoestados possíveis de posição em $|\psi(1)\rangle$, sendo eles $j = -1$ e 1 . Assim, seguindo Eq. (3.11)

$$\rho_c = \langle -1|\rho| -1\rangle + \langle 1|\rho|1\rangle,$$

substituindo ρ , temos

$$\begin{aligned} \rho_c &= \frac{1}{\sqrt{4}} \left[\langle -1| -1\rangle |-\rangle \langle -| \langle -1| -1\rangle + \langle -1| -1\rangle |-\rangle \langle +| \langle 1| -1\rangle + \langle -1| 1\rangle |+\rangle \langle -| \langle -1| -1\rangle \right. \\ &\quad \left. + \langle -1| 1\rangle |+\rangle \langle +| \langle 1| -1\rangle + \langle 1| -1\rangle |-\rangle \langle -| \langle -1| 1\rangle + \langle 1| -1\rangle |-\rangle \langle +| \langle 1| 1\rangle \right. \\ &\quad \left. + \langle 1| 1\rangle |+\rangle \langle -| \langle -1| 1\rangle + \langle 1| 1\rangle |+\rangle \langle +| \langle 1| 1\rangle \right]. \end{aligned}$$

Os autoestados de posição são ortonormais, de modo que $\langle j|j'\rangle = \delta_{j,j'}$, onde $\delta_{j,j'}$ representa a delta de Kronecker dada por

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

Portanto, o operador densidade reduzido de moeda é

$$\rho_c = \frac{1}{\sqrt{4}} \left[|-\rangle \langle -| + |+\rangle \langle +| \right] = \frac{1}{\sqrt{4}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

A partir do determinante de ρ_c , encontramos os autovalores $\lambda_1 = \lambda_2 = 1/2$. Portanto, o emaranhamento entre os estados de posição e moeda da partícula para o estado após um passo é $E_c = 1$. Desta forma, concluímos que o estado $|\psi(1)\rangle$ é maximamente emaranhado.

Para obter o emaranhamento $E_c(t)$, basta realizar o mesmo procedimento considerando o estado $|\psi(t)\rangle$.