

Universidade Federal do Paraná  
Programa de Pós-graduação em  
Física  
Tese de Doutorado

Bruno Felipe Venancio

Caminhadas Quânticas na Rede Hexagonal

Curitiba - PR

2016

Universidade Federal do Paraná  
Programa de Pós-graduação em  
Física  
Tese de Doutorado

Bruno Felipe Venancio

Caminhadas Quânticas na Rede Hexagonal

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Paraná como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Doutor em Física.

**Orientador:** *Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz*

Curitiba - PR

2016



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ  
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO  
Setor CIÊNCIAS EXATAS  
Programa de Pós Graduação em FÍSICA  
Código CAPES: 40001016020P4

### TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em FÍSICA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da Tese de Doutorado de **BRUNO FELIPE VENANCIO**, intitulada: "**Caminhadas Quânticas na Rede Hexagonal**", após terem inquirido o aluno e realizado a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua

APROVADO

Curitiba, 29 de Novembro de 2016.

MARCOS GOMES ELEUTÉRIO DA LUZ  
Presidente da Banca Examinadora (UFPR)

MARCIO HENRIQUE FRANCO BETTEGA  
Avaliador Interno (UFPR)

SERGIO D'ALMEIDA SANCHEZ  
Avaliador Interno (UFPR)

EDUARDO INACIO DUZZIONI  
Avaliador Externo (UFSC)

MARCELO DE OLIVEIRA TERRA CUNHA  
Avaliador Externo (UNICAMP)



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ  
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO  
Setor CIÊNCIAS EXATAS  
Programa de Pós Graduação em FÍSICA  
Código CAPES: 40001016020P4

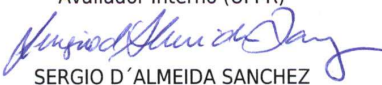
## ATA DE SESSÃO PÚBLICA DE DEFESA DE TESE PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM FÍSICA


No dia vinte e nove de Novembro de dois mil e dezesseis às 14:00 horas, na sala Sala PE03, Centro Politécnico - Departamento de Física - Bloco II, do Setor de CIÊNCIAS EXATAS da Universidade Federal do Paraná, foram instalados os trabalhos de arguição do doutorando **BRUNO FELIPE VENANCIO** para a Defesa Pública de sua Tese intitulada: "**Caminhadas Quânticas na Rede Hexagonal**". A Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em FÍSICA da Universidade Federal do Paraná, foi constituída pelos seguintes Membros: MARCOS GOMES ELEUTÉRIO DA LUZ (UFPR), EDUARDO INACIO DUZZIONI (UFSC), MARCELO DE OLIVEIRA TERRA CUNHA (UNICAMP), MARCIO HENRIQUE FRANCO BETTEGA (UFPR), SERGIO D'ALMEIDA SANCHEZ (UFPR). Dando início à sessão, a presidência passou a palavra ao discente, para que o mesmo expusesse seu trabalho aos presentes. Em seguida, a presidência passou a palavra a cada um dos Examinadores, para suas respectivas arguições. O aluno respondeu a cada um dos arguidores. A presidência retomou a palavra para suas considerações finais e, depois, solicitou que os presentes e o doutorando deixassem a sala. A Banca Examinadora, então, reuniu-se sigilosamente e, após a discussão de suas avaliações, decidiu-se pela APROVAÇÃO do aluno. O doutorando foi convidado a ingressar novamente na sala, bem como os demais assistentes, após o que a presidência fez a leitura do Parecer da Banca Examinadora. Nada mais havendo a tratar a presidência deu por encerrada a sessão, da qual eu, MARCOS GOMES ELEUTÉRIO DA LUZ, lavrei a presente ata, que vai assinada por mim e pelos membros da Comissão Examinadora.

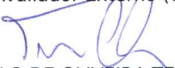
Curitiba, 29 de Novembro de 2016.

  
MARCOS GOMES ELEUTÉRIO DA LUZ  
Presidente da Banca Examinadora (UFPR)

  
MARCIO HENRIQUE FRANCO BETTEGA  
Avaliador Interno (UFPR)

  
SERGIO D'ALMEIDA SANCHEZ  
Avaliador Interno (UFPR)

  
EDUARDO INACIO DUZZIONI  
Avaliador Externo (UFSC)

  
MARCELO DE OLIVEIRA TERRA CUNHA  
Avaliador Externo (UNICAMP)

*Dedicado a minha esposa Tatiane e aos meus filhos Maria Clara e Artur José.*

# Agradecimentos

- A minha família.
- Ao meu orientador.
- Aos membros da banca.
- Aos meus colegas de pós-graduação.
- A CAPES pelo suporte financeiro.

# Resumo

Nesta tese abordamos as caminhadas quânticas em tempo discreto no modelo de espalhamento (CQEs) na rede hexagonal. Primeiro faremos uma revisão das CQEs em uma dimensão, dando um enfoque mais de propagação em rede do que em computação e informação quântica, que é o usual na área. Em seguida apresentaremos um formalismo geral para a implementação das CQEs em redes regulares e daremos o simples exemplo concreto da rede quadrada. Na sequência do trabalho, implementaremos as CQEs para a rede hexagonal e analisaremos suas propriedades no espaço de *momentum*. Além disso, realizamos uma breve discussão comparando as estruturas de bandas de energia obtidas para uma CQEs, caracterizada pela matriz de Grover, com as do grafeno. De maneira qualitativa, observa-se que esses dois sistemas possuem características comuns. Finalmente, através destes formalismos exploramos a estrutura topológica da rede hexagonal para obter dez diferentes formulações, com características espaciais distintas. Além disso, exemplificamos a evolução temporal dessas diferentes formulações das CQEs considerando, por exemplo, as matrizes de espalhamento de Grover e da transformada discreta de Fourier. Nosso estudo ilustra que, combinações específicas dessas dez formulações com matrizes de espalhamento adequadas resultam em sistemas com as características fenomenológicas distintas, que podem ser uma possível forma de controle de processos quântico nas CQEs na rede hexagonal.

# Abstract

In this work we discuss the discrete time quantum walks in the scattering formulation (SQWs) for the honeycomb lattice. First we review the quantum walks in one dimension, giving a focus in lattice propagation than in quantum computation and quantum information, which is usual in the area. Then we present a general formalism for the implementation of SQWs in regular lattices and give a simple concrete example of the square lattice. Next, we implement the SQWs for the honeycomb lattice and analyze its properties in *momentum* space. In addition, we present a brief discussion comparing the energy bands obtained for a SQWs (characterized by Grover matrix) with those of the graphene. Qualitatively, we observe that the two energy structures have common features. Finally, from the proposed formalism we show that it is possible to explore the topological structure of the honeycomb lattice. We obtain ten different formulations, each one with spatial different features. Furthermore, we exemplify the time evolution of these different SQWs versions considering as scattering matrices, the Grover and discrete Fourier transform operators. Our study illustrate that specific combinations of the ten formulations with adequate scattering matrices result in distinct phenomenological behavior, which therefore may be a possible way to control quantum processes in SQWs along the honeycomb lattice.



# Sumário

<b>Agradecimentos</b>	<b>vi</b>
<b>Resumo</b>	<b>vii</b>
<b>Abstract</b>	<b>viii</b>
<b>Sumário</b>	<b>ix</b>
<b>Lista de Acrônimos</b>	<b>xii</b>
<b>Lista de Símbolos Matemáticos</b>	<b>xiii</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 As Caminhadas Quânticas</b>	<b>10</b>
2.1 Caminhadas Aleatórias Clássicas . . . . .	10
2.2 Valor Médio e Variância . . . . .	15
2.3 Caminhadas Quânticas - o Modelo “ADZ” . . . . .	16
2.4 Caminhadas Quânticas - o Modelo de Espalhamento . . . . .	19
2.5 Matriz de Espalhamento . . . . .	28
2.6 Exemplificando as Caminhadas Quânticas em 1D . . . . .	31
2.6.1 O Caminho de Hadamard . . . . .	31
2.6.2 O Estado de Bloch . . . . .	38

2.6.3	Influência da Matriz de Espalhamento . . . . .	44
<b>3</b>	<b>Caminhadas Quânticas no Espaço de <i>Momentum</i></b>	<b>49</b>
3.1	Operador de Translação e o Teorema de Bloch . . . . .	49
3.2	Autovalores e Autovetores do Operador Evolução Temporal . . . . .	52
3.3	O Método da Fase Estacionária . . . . .	60
3.4	Bandas de Energia, Velocidade de Grupo e Densidade de Estados . . . . .	67
<b>4</b>	<b>Caminhadas Quânticas em Redes Bidimensionais Regulares</b>	<b>74</b>
4.1	O Formalismo . . . . .	74
4.1.1	Estados de Base do Sistema . . . . .	74
4.1.2	Operador de Evolução Temporal . . . . .	76
4.1.3	Probabilidades . . . . .	78
4.1.4	Resumindo os Passos para a Implementação das CQs . . . . .	78
4.2	Caminhadas Aleatórias Clássicas . . . . .	79
4.3	Redes Formadas por Polígonos Regulares . . . . .	80
4.4	Caminhadas Quânticas nas Redes Quadrada e Triangular . . . . .	81
<b>5</b>	<b>Caminhadas Quânticas na Rede Hexagonal</b>	<b>86</b>
5.1	Estrutura Topológica da Rede Hexagonal . . . . .	86
5.2	Estados de Base do Sistema . . . . .	87
5.3	Operador Evolução Temporal . . . . .	88
5.4	Probabilidades . . . . .	90
5.5	Analisando as Matrizes de Espalhamento . . . . .	91
5.6	Exemplos de CQs na Rede Hexagonal . . . . .	95
5.6.1	Caminhadas Quânticas $\times$ Caminhadas Clássicas . . . . .	95
5.6.2	Influência das Matrizes de Espalhamento nas CQs . . . . .	99
5.6.3	Família AB . . . . .	106

<b>6</b>	<b>Caminhadas Quânticas na Rede Hexagonal no Espaço de <i>Momenta</i></b>	<b>110</b>
6.1	Rede de Bravais do Sistema . . . . .	110
6.2	Bandas de Energia . . . . .	113
6.3	Exemplos de Bandas de Energia . . . . .	117
6.4	Caminhadas Quânticas e o Grafeno . . . . .	122
<b>7</b>	<b>Caracterizando as CQEs na Rede Hexagonal Através do Grau de Liberdade Direcional</b>	<b>126</b>
7.1	Definindo as Funções Topológicas Direcionais . . . . .	126
7.2	Propriedades das Funções Topológicas Direcionais . . . . .	128
7.3	Estruturas Topológicas . . . . .	131
7.4	As Dez Formulações . . . . .	136
7.5	Resultados . . . . .	142
	7.5.1 Matrizes Imparciais . . . . .	144
	7.5.2 Matrizes da Família AB . . . . .	148
<b>8</b>	<b>Conclusão</b>	<b>154</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>158</b>

# Lista de Acrônimos

CAC: Caminhada Aleatória Clássica

CQ: Caminhada Quântica

CQM: Caminhada Quântica no Modelo de Moeda

CQE: Caminhada Quântica no Modelo de Espalhamento

DMQ: Deslocamento Médio Quadrático

matriz *GRO*: Matriz de Grover

matriz *IMP*: Matriz imparcial

matriz *TDF*: Matriz da Transformada Discreta de Fourier

matriz *TDH*: Matriz da Transformada Discreta de Hartley

# Lista de Símbolos Matemáticos

$n - n \in \mathbb{N}$  e representa passos de tempo.

$(j, k) - (j, k) \in \mathbb{Z}$  e descrevem as coordenadas dos sítios de uma rede no plano cartesiano.

$P_v(j, k, n)$  – probabilidade de encontrar uma partícula convergido para o sítio  $(j, k)$  no passo de tempo  $n$ .

$\langle f(x) \rangle$  – valor médio da função  $f(x)$ .

$\langle (\Delta f(x))^2 \rangle$  – variância da função  $f(x)$ .

$\langle (\Delta x)^2 \rangle$  – deslocamento médio quadrático se  $x$  representa posição.

$\text{Re}[z]$  – denota a parte real do número complexo  $z$ .

$\text{Im}[z]$  – denota a parte imaginária do número complexo  $z$ .

$i$  – unidade imaginária.

$\hat{U}$  – operador evolução temporal.

$t_{\sigma\sigma'}$  – coeficiente de transmissão.

$r_{\sigma\sigma'}$  – coeficiente de reflexão.

$\hat{\Gamma}$  – matriz de espalhamento.

$\Gamma_{\sigma\sigma'}$  – amplitude de espalhamento.

$d_x[f(x)]$  – representa a derivada de  $f(x)$  em relação a  $x$ .

$[X]_Y \equiv \text{resto de } \frac{X}{Y}$ .

# Introdução

Certamente, as Caminhadas Aleatórias Clássicas (CACs) [1] em geral, e o Movimento Browniano [2–4] em particular, são assuntos importantes e estabelecidos há muito tempo no domínio da física clássica, que apresentam uma fenomenologia muito rica e abrangem uma ampla gama de aplicações em diversas áreas das ciências [5–7]. Na biologia as CACs são utilizadas no estudo das propriedades estatísticas de deriva genética [8]; na química elas são aplicadas na simulação de reações químicas [9]; na ciência da computação existem diversos algoritmos baseados em CACs, por exemplo, para processos de busca em banco de dados [10, 11]; os economistas aplicam as CACs na compreensão de certos comportamentos similares a aleatórios da bolsa de valores [7]; entre outras. Na física, além do movimento browniano, as CACs encontram aplicações no estudo de processos estocásticos em geral [12, 13], sendo que alguns desses casos são os estudos de polímeros, para a descrição das possíveis configurações espaciais que eles podem assumir [14, 15] e de processos de difusão [16]. Na seção (2.1) abordamos de maneira introdutória o formalismo matemático para as CACs.

A noção explícita das Caminhadas Quânticas<sup>1</sup> (CQs) foi proposta em 1993, por Y. Aharonov, L. Davidovich e N. Zagury, como sendo um possível (e interessante) análogo quântico das CACs [17] (na seção (2.3) iremos discutir matematicamente o modelo proposto por Aharonov *et al*). Entretanto, a ideia das CQ remonta a R. P. Feynman, quando considerou a discretização do propagador da equação de Dirac [18, 19]. Além disso, em um artigo de Feynman sobre computadores quanto-mecânicos [20], podemos encontrar uma proposta que pode ser interpretada como uma CQ em tempo contínuo [21]. De maneira independente, D. A. Meyer abordou o mesmo tema em um artigo sobre autômatos

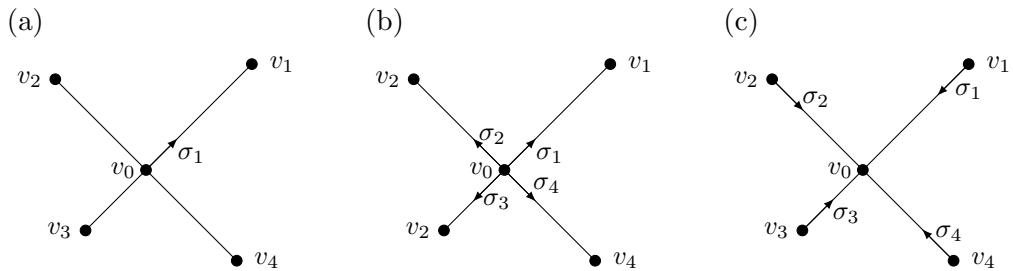
---

<sup>1</sup>O termo original proposto por Y. Aharonov *et al* é “caminhadas aleatórias quânticas”, mas atualmente diversos autores usam somente “caminhadas quânticas”.

celulares quânticos [22], mas sem utilizar o termo “caminhada quântica” e tão pouco fazer analogia com CACs. De fato, encontram-se na literatura alguns trabalhos associando a discretização da equação de Dirac, autômato celulares e caminhadas quânticas [23–26]. Nos anos 80, S. P. Gudder também já havia considerado brevemente o assunto, ao tratar a mecânica quântica discreta em um capítulo de seu livro “*Quantum Probability*” [27]. Nas duas últimas décadas foram publicados diversos artigos a respeito das CQs. Para uma introdução ou revisão do tema, recomendamos as referências [28–44].

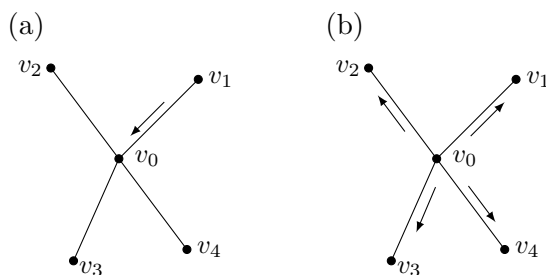
As CQs podem ser divididas em dois grupos. No primeiro, sua dinâmica ocorre em intervalos de tempo discreto [17, 28, 36] e no segundo evolui em tempo contínuo [33]. Entretanto, ambas formulações são definidas em um espaço de posições discreto (redes ou grafos) [28]. Nesta tese focamos apenas em CQs em tempo discreto, as quais podem ser formuladas em dois modelos completamente equivalentes: o modelo de moeda (CQM) [17, 28] e o modelo de espalhamento (CQE) [36–38].

As CQMs consistem de evoluções quânticas unitárias para um sistema cujo espaço de Hilbert ( $\mathcal{H}$ ) é dado pelo produto tensorial de dois subespaços vetoriais, um associado aos graus de liberdade que descrevem as “posições” dos vértices de um grafo,  $\mathcal{H}_x$ , e o outro associado a graus de liberdades “internos” (similares a spins),  $\mathcal{H}_c$ . A função de onda, associada ao estado  $|\Psi_n\rangle$ , que descreve o sistema em  $\mathcal{H}$  e no passo de tempo discreto  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ , propaga-se sobre os vértices do grafo, resultando em  $|\Psi_{n+1}\rangle$ , sendo direcionada através da ação adequada de um operador chamado moeda, que atua sobre os estados do subespaço  $\mathcal{H}_c$ , e sendo deslocada através da ação de um operador translação condicional que atua no espaço  $\mathcal{H}$ . A fig. (1.1) mostra a representação gráfica de uma possível evolução em um passo de tempo de uma CQ em um grafo.



**Figura 1.1:** Representação esquemática da evolução de um passo de uma CQM em um grafo. (a) representa o estado do sistema no passo de tempo  $n$  e dado por  $|\Psi_n\rangle = |\sigma_1\rangle_c \otimes |v_0\rangle_x$ , onde o conjunto de estados  $\{|\sigma_i\rangle_c\}$  descrevem os graus de liberdade interno do sistema e constituem uma base para  $\mathcal{H}_c$ , e  $\{|v_j\rangle_x\}$  descrevem as posições dos vértices e formam uma base para  $\mathcal{H}_x$ . (b) representa a ação do operador moeda, ( $\hat{C}$ ), sobre os estados associados ao subespaço vetorial  $\mathcal{H}_c$ , cujo resultado é  $\hat{C}|\sigma_1\rangle_c = \sum_{i=1}^4 c_i |\sigma_i\rangle_c$ , tal que  $\sum_{i=1}^4 |c_i|^2 = 1$ . (c) representa o estado do sistema no passo de tempo  $n + 1$ , após a ação do operador translação condicional ( $\hat{S}$ ), isto é,  $|\Psi_{n+1}\rangle = \hat{S} \left( (\hat{C}|\sigma_1\rangle_c) \otimes |v_0\rangle_x \right) = \sum_{i=1}^4 c_i |\sigma_i\rangle_c \otimes |v_i\rangle_x$ .

A versão que adotamos nesta tese são as CQEs, pois sob certos aspectos é um modelo fisicamente mais intuitivo, uma vez que podemos encarar esse modelo como um “simples” problema de espalhamento. Neste caso, a dinâmica também ocorre em intervalo de tempo discretos  $n$ , mas sua dinâmica é definida nas arestas do grafo (ligações da rede) e a cada passo de tempo a partícula sofre processos de espalhamento devido aos vértices do grafo (sítios da rede). De fato, em qualquer passo de tempo  $n$ , o estado do sistema  $|\Psi_n\rangle$  é descrito por uma superposição de estados de base – definidos individualmente sobre cada ligação da rede – ponderados por amplitudes de reflexão e transmissão (associadas em cada sítio a matrizes de espalhamento locais [36], ver capítulo 2), fig. (1.2). Esta construção tem uma analogia com um feixe de luz em uma rede interferométrica, onde cada sítio atua como um divisor de feixe, e as arestas funcionam como eixos ópticos que permitem a propagação da luz. Ademais, cada divisor de feixe pode ser ligado a um número diferente de eixos ópticos (assim, a rede não necessita ser regular). Uma descrição matemática detalhada das CQEs em uma rede unidimensional é apresentada na seção (2.4).



**Figura 1.2:** Representação esquemática da evolução de um passo de tempo de uma CQE em um grafo. (a) representa o estado no passo de tempo  $n$ , tal que  $|\Psi_n\rangle = |v_1, v_0\rangle$ , onde o estado  $|v_i, v_j\rangle$  representa o deslocamento da partícula do vértice  $v_i$  para o vértice  $v_j$ . Em (b) temos a representação do estado do sistema no passo de tempo  $n + 1$ , isto é,  $|\Psi_{n+1}\rangle = \sum_{i=1}^4 \Gamma_i |v_0, v_i\rangle$ , onde  $\Gamma_i$  representam amplitudes de espalhamento e  $\sum_{i=1}^4 |\Gamma_i|^2 = 1$ .

Dada sua relativa simplicidade – quando comparada com sistemas quânticos mais tradicionais – mas ainda exibindo a maior parte das fenomenologias básicas da mecânica quântica [28, 36, 40, 45, 46], as CQs encontram inúmeras aplicações [42, 47], especialmente na computação quântica no desenvolvimento de algoritmos quânticos [34, 48]. Além disso, uma maneira de investigar um computador quântico complexo, é decompô-lo em diversos circuitos quânticos mais simples denominados de “portas”, que são representadas matematicamente por operações unitárias que podem ser identificadas como CQs [21]. Assim, nesta perspectiva, um computador quântico pode ser inteiramente baseado em CQs [49–51]. Como outras aplicações para as CQs podemos citar: os estudos das propriedades de transporte eletrônico de sistemas quânticos [52] e de transporte de energia em sistemas fotossintéticos [53, 54], a análise de distribuição de cargas elétricas em polímeros [55],



o estudo da desordem em sistema de bósons e férmions não interagentes [56], transição de fase quântica em armadilhas ópticas [57], transferência de estados quânticos em um sistema de spin interagentes [58], condensado de Bose–Einstein [59], percolação em grafos [60, 61], estudos de emaranhamento e decoerência [62–67], apenas para mencionar alguns exemplos.

No que tange a implementações físicas das CQs existem diversas propostas e realizações experimentais concretas. Entre elas destacamos a utilização de sistemas ópticos lineares, tais como interferometria de fótons [68] e cavidades ópticas ressonantes [69, 70]; armadilhas ópticas de átomos [71, 72], redes ópticas [73], o controle de spin de elétrons [74], pontos quânticos [75], armadilhas de íons [76–78], redes de guias de onda [79–81], ressonância magnética nuclear [82] e eletrodinâmica quântica de cavidades (*cavity quantum electrodynamics - cavity QED*) [83, 84]. A referência [85] apresenta uma coletânea das principais implementações físicas das CQs. Analisando os trabalhos citados neste parágrafo, verificamos que existem algumas poucas proposta de implementações das CQs em duas dimensões, como destaca a referência [86], que investiga um sistema físico capaz de implementar uma CQ em redes bidimensionais.

Outro aspecto importante é a investigação dos processos de decoerência nas CQs, pois uma maneira de identificar se uma dinâmica quântica particular pode ser caracterizada como uma CQ, é verificar se ela se transforma em uma CAC quando sofre esse tipo de processo. Isto pode ser feito introduzindo algum elemento estocástico durante a evolução de uma CQ, por exemplo efetuando-se processos de medidas de algum observável do sistema [44, 47, 66].

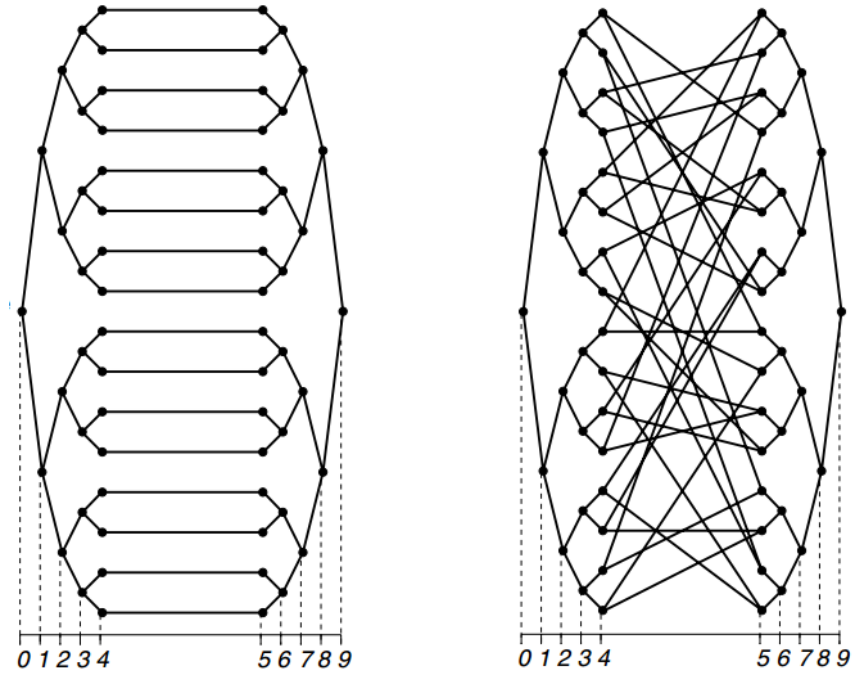
A maioria das aplicações para as CQs são pensadas em termos de construções em uma dimensão, onde só existem dois possíveis sentidos de propagação da partícula (portanto, o número de coordenação é  $k = 2$ ). No entanto, características como fases topológicas e transições de fase dinâmica observadas em uma dimensão [87–90] possivelmente se mostrariam mais ricas e interessantes em estruturas com  $k > 2$ , especialmente para  $k$  ímpar [91]. Além disso, diversos trabalhos demonstraram uma fenomenologia muito mais diversa para as CQs em duas ou mais dimensões, como na rede quadrada ( $k = 4$ ) e no hipercubo  $N$ -dimensional ( $k = 2N$ ) [92–97]. Por exemplo, como apontado em [98] as CQs com  $k > 2$  são modelos naturais para descrever excitações eletrônicas do números de onda<sup>2</sup> em redes cristalinas [99].

Na literatura encontramos algumas aplicações das CQs em redes ou grafos com número

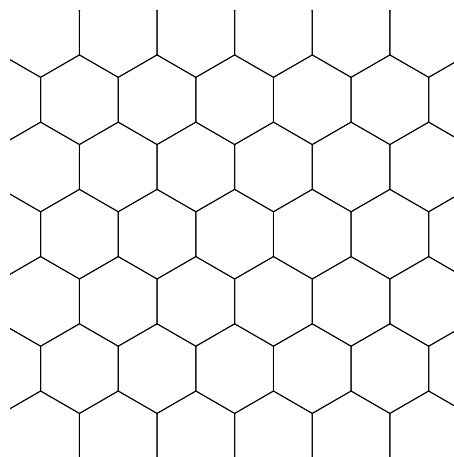
---

<sup>2</sup>Basicamente, os comprimentos de onda devem ser suficientemente pequenos de modo que a topologia local (isto é, as vizinhanças em torno de cada sítio) se torne relevante para as propriedades de transporte.

de coordenação  $k = 3$ , como a estrutura “*glued tree*” [33, 35, 91], fig. (1.3), e a rede “*honeycomb*” (hexagonal) [92, 100, 101], fig. (1.4). De fato, modelos de CQs para a rede hexagonal se mostram muito útil no estudo de processos como percolação [102], localização [103] e procedimentos de busca [101]. Além disso, modelos de CQs nestes sistemas têm sido considerados para derivar hamiltonianas efetivas para o grafeno [104] e investigar nanofitas de grafeno em possíveis implementações de portas lógicas quânticas [105].



**Figura 1.3:** Exemplo de grafos *glued tree*. Figura adaptada da referência [91].

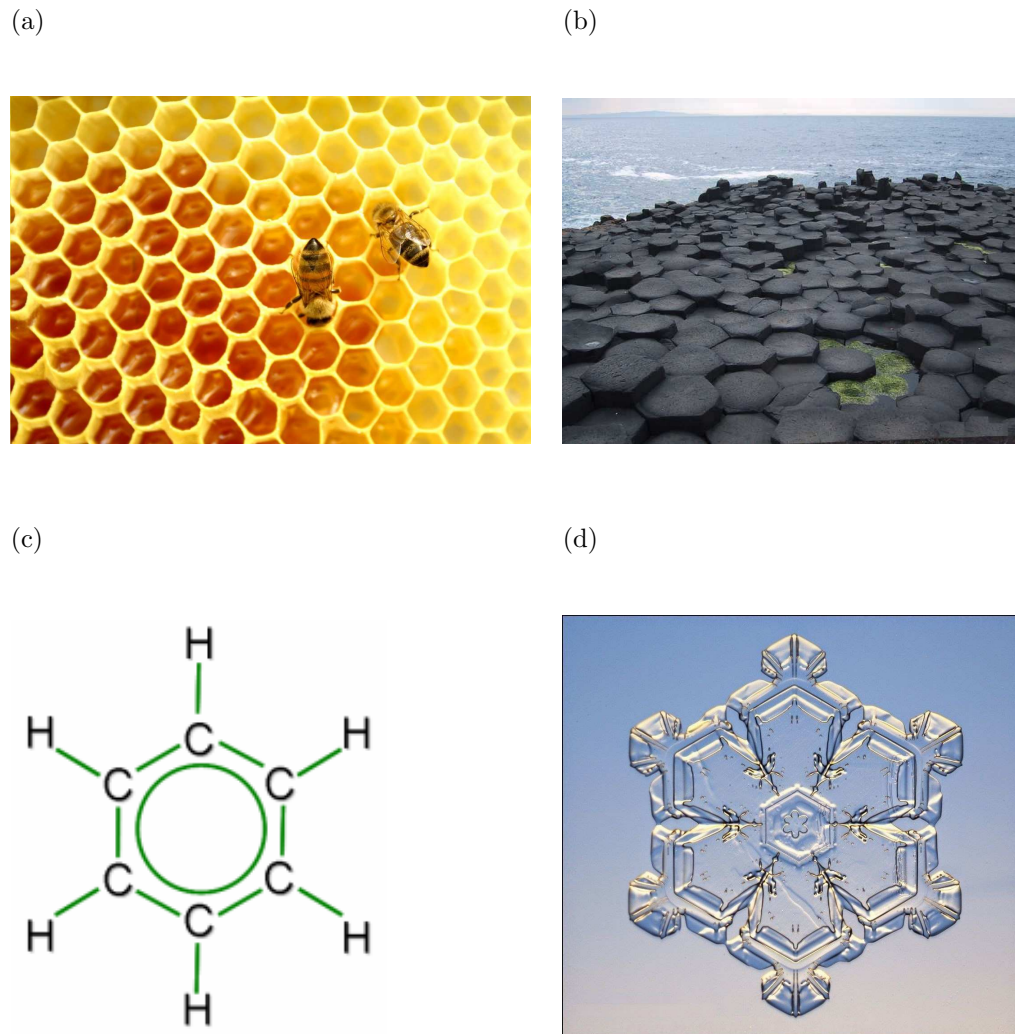


**Figura 1.4:** Rede hexagonal.

O padrão hexagonal, além de ser uma das três formas possíveis de se recobrir o plano<sup>3</sup> usando um mesmo conjunto de polígonos regulares de maneira a não superpô-los e nem

<sup>3</sup>As outras duas são triângulos equiláteros e quadrados.

deixar espaços entre os mesmos [106–108], ele aparece em diversos sistemas da natureza, por exemplo: os favos de mel em colmeias de abelhas; nas colunas de basalto na Calçada dos Gigantes (formação rochosa natural e atração turística da Irlanda do Norte); em estruturas moleculares (anel de benzeno); e flocos de neve; ver a fig. (1.5).

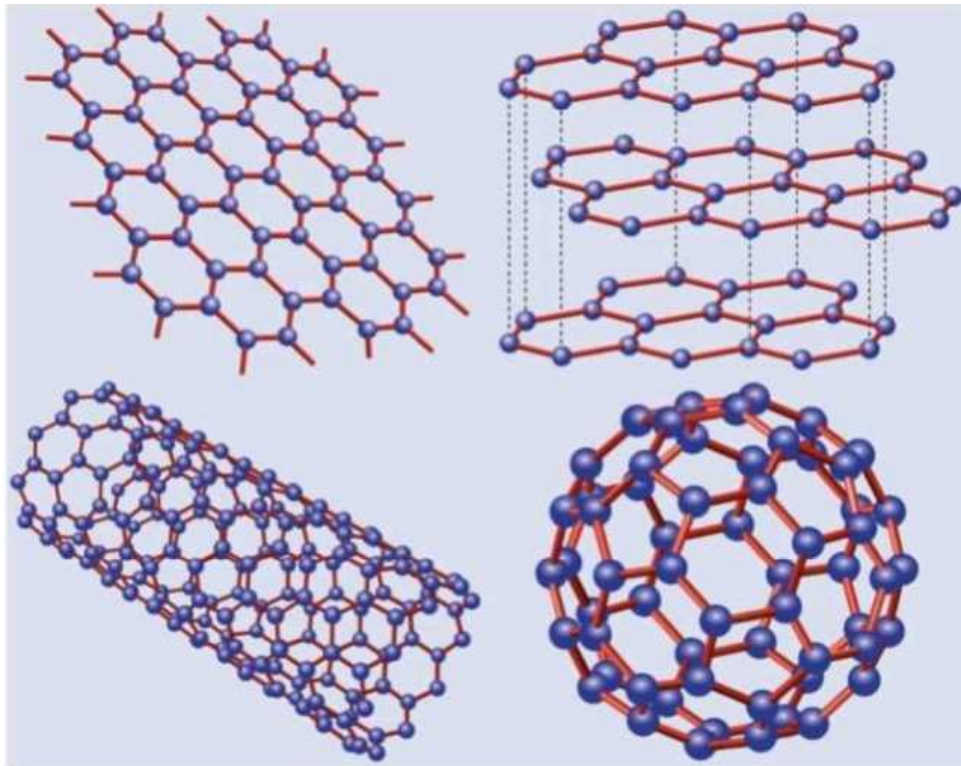


**Figura 1.5:** Exemplos de padrões hexagonais: (a) favos de mel, (b) formações rochosas na Irlanda do Norte, (c) anel de benzeno; e (d) flocos de neve. Imagens retiradas da internet.

Nos últimos anos, o grafeno se tornou o exemplo mais notável de um padrão hexagonal. Ele é um cristal bidimensional estável, constituído por uma monocamada de átomos de carbono dispostos em uma rede hexagonal e possui uma variedade de diferentes propriedades [109, 110], muitas das quais possuem um grande potencial em aplicações tecnológicas [111]. Além disso, o comportamento dos elétrons desse material próximo ao ponto de Dirac (no espaço de *momentum*) pode ser descrito por uma teoria que imita a descrição de férmions relativísticos sem massa [112, 113]. Esse comportamento, por exemplo, propicia a abertura de um campo de pesquisa para investigar física de altas energias

em matéria condensada [114].

O grafeno foi observado experimentalmente no ano de 2004 por A. Geim e K. Novoselov [115], rendendo-lhes o Prêmio Nobel de Física de 2010 [116, 117]. Para maiores detalhes sobre as propriedades eletrônica do grafeno, recomendamos a referência [118]. Outros materiais que exibem o padrão hexagonal são os nanotubos de carbono e o fulereno, fig. (1.6). Devido à subjacente importância da topologia hexagonal, algumas propostas particulares para a implementação das CQs em tempo discreto nessa classe de redes têm sido desenvolvidas [92]. Assim, motivado pelas peculiaridades e grande interesse em topologia hexagonal, um primeiro objetivo desta tese é apresentar um formalismo totalmente geral para a construção das caminhadas quânticas em tempo discreto no modelo de espalhamento na rede hexagonal infinita.



**Figura 1.6:** Estruturas a base de carbono: grafeno, grafite, nanotubo de carbono e fulereno. Imagem retirada da referência [118].

Apesar da ampla gama de aplicações mencionadas, um aspecto ainda pouco explorado é que, dada uma topologia específica, há uma grande versatilidade na construção de diferentes modelos de CQs [119, 120]. De fato, existem alguns poucos trabalhos que mostram como distintos operadores que implementam a evolução temporal das CQs (portanto resultando em diferentes  $\hat{U}$ 's<sup>4</sup>) geram evoluções que são unitariamente equivalentes [121, 122]. Além disso, é praticamente inexistente na literatura discussões que mostram

<sup>4</sup>Aqui  $\hat{U}$  é o operador de evolução temporal para um passo na dinâmica:  $\hat{U}|\Psi_n\rangle = |\Psi_{n+1}\rangle$ .

que exigindo-se apenas regras quânticas básicas para a evolução ser coerente com as simetrias intrínsecas do sistema (por exemplo, estrutura da célula unitária em um sistema cristalino), pode-se obter diversas prescrições para  $\hat{U}$ , o que gera CQs com diferentes características. Assim, concebivelmente estas diferentes prescrições deveriam conduzir a diferentes comportamentos qualitativos, por exemplo, associados à propriedades de transporte e difusividade [46].

Como salientamos nos parágrafos anteriores, as caminhadas quânticas tem uma grande aplicabilidade em diversas áreas da ciência. Assim, torna-se indispensável compreender suas características sob os mais diversos aspectos, inclusive (nosso interesse principal aqui), com relação a sua versatilidade matemática na construção concreta desses modelos. Durante o desenvolvimento de nossa dissertação de mestrados [123], observamos que a rede hexagonal permite diversas formulações para as CQs. Entretanto não exploramos tal situação. Assim, um segundo objetivo desse trabalho é provar concretamente este fato derivando diferentes formulações das CQEs para a topologia hexagonal. Para isto, iremos definir o que chamamos de funções topológicas direcionais ( $\Phi$ ) e mostraremos que pode-se gerar um certo número específico de dinâmicas distintas especificando-se adequadamente essas funções  $\Phi$ 's. Mostraremos que o número dessas diferentes dinâmicas está relacionado com o comportamento de “trajetórias fundamentais” (definidas ao longo da tese) associadas ao operador que implementa a evolução temporal do sistema, o qual é fortemente dependente dessas funções  $\Phi$ 's. Especificamente, fazendo  $\Phi$  compatível com a topologia hexagonal, obtemos exatamente dez formulações para as CQEs. Também discutimos CQE em rede hexagonal no espaço de *momentum* e determinamos suas bandas de energia.

Finalmente, apesar desta tese tratar das caminhadas quânticas na rede hexagonal, é importante revisar e salientar as principais características de CQs gerais. E isto fica mais fácil no caso unidimensional onde diversos resultados podem ser obtidos analiticamente. E também para redes regulares com  $k$  par! Mas tudo isto dando um aspecto mais de propagação em rede do que em computação e informação quântica [44], que é o usual na área de CQs.

Esta tese está organizada da seguinte forma: no capítulo 2 revisamos o conceito de CQs em tempo discreto em uma dimensão, analisando seus principais aspectos. No capítulo 3, investigamos as CQEs em 1D no espaço de *momentum*. Esta abordagem nos permite derivar analiticamente algumas propriedade fundamentais do sistema, como as estruturas de bandas e a densidade de estados. No capítulo 4 apresentamos uma metodologia para a implementação das CQEs em redes bidimensionais regulares e apresentamos o exemplo da

rede quadrada. Em seguida, no capítulo 5, aplicamos essa metodologia para a construção das CQEs na rede hexagonal. Já, no capítulo 6, investigamos as CQEs na rede hexagonal, onde determinamos suas bandas de energia para uma classe de matriz de espalhamento genérica e comparamos as CQEs para a matriz de Grover com o grafeno. No capítulo 7 definimos as funções topológicas direcionais  $\Phi$ 's e desenvolvemos as dez formulações para as CQEs na rede hexagonal. Além disso, ao longo do texto apresentamos diversos exemplos numéricos. Finalmente, no capítulo 8, apresentamos nossas conclusões, perspectivas de trabalhos futuros e considerações finais.

## As Caminhadas Quânticas

Neste capítulo introduzimos e analisamos as propriedades das CQEs unidimensionais fazendo um paralelo com as CACs. Em geral as características das CQEs em uma dimensão são válidas para duas ou três dimensões. Assim, realizamos inicialmente uma breve revisão sobre as CACs unidimensionais, em seguida expomos o modelo de moeda proposto por Y. Aharonov, L. Davidovich e N. Zagury no artigo seminal sobre o tema [17]. Finalmente, apresentamos o modelo de espalhamento proposto por M. Hillery, J. Bergou e E. Feldman [36], onde abordamos em mais detalhes os principais aspectos das CQEs, uma vez que é esta formulação adotada neste trabalho.

### 2.1 Caminhadas Aleatórias Clássicas

Nesta seção discutimos as principais propriedades das CACs em uma dimensão. Para maiores detalhes e generalizações, sugerimos as referências introdutórias [124–129]. O problema das CACs foi proposto por K. Pearson em julho de 1905 [1]. Nas palavras<sup>1</sup> de Pearson o problema consistia de:

*“Um homem parte de um ponto O e anda  $\ell$  jardas em linha reta; então ele se vira em um ângulo qualquer e anda novamente  $\ell$  jardas em uma segunda linha reta. Ele repete este processo  $n$  vezes. Eu quero descobrir a probabilidade após essas  $n$  etapas dele estar a uma distância entre  $r$  e  $r + \delta r$  do ponto de partida O.”*

<sup>1</sup>Tradução livre de: “A man starts front a point O and walks  $\ell$  yards in straight line; he then turns through any angle whatever and walks another  $\ell$  yards in a second straight line. He repeats this process  $n$  times. I require the probability that after these  $n$  stretches he is at distance between  $r$  and  $r + \delta r$  from his starting point O” [1].

Em agosto de 1905, Lord Rayleigh respondeu Pearson [130]. Segundo Rayleigh para um valor grande de  $n$  a probabilidade é dada por

$$dP(r) = \frac{2}{n} e^{-r^2/n} r dr. \quad (2.1)$$

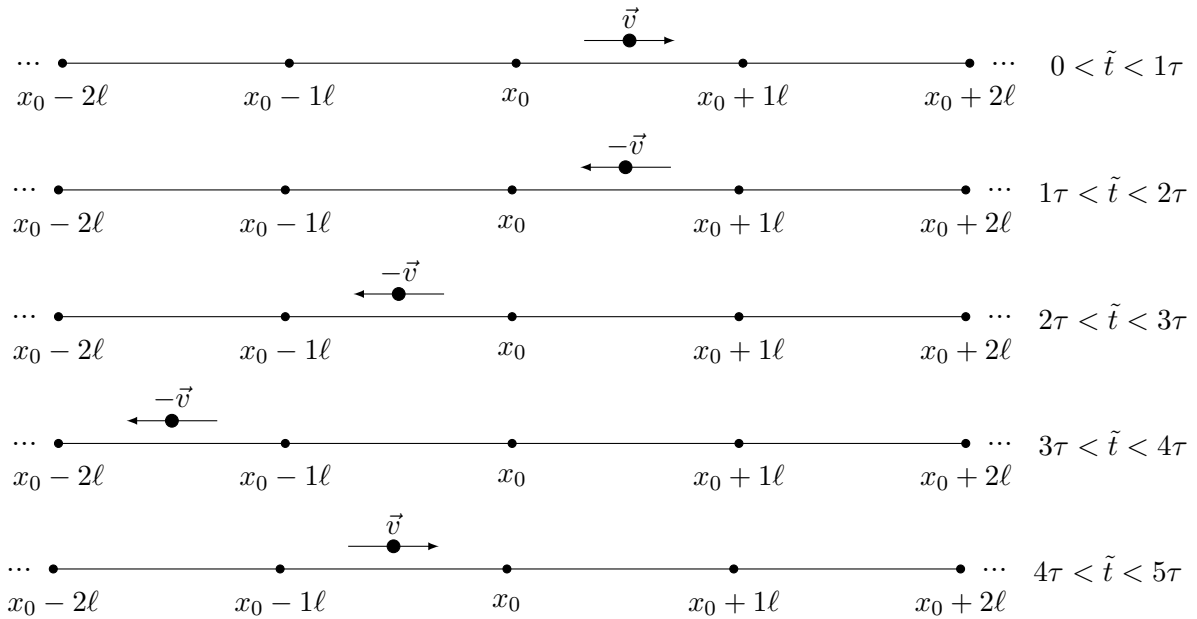
Em uma dimensão uma CAC pode ser encarada como uma partícula movendo-se com velocidade  $\vec{v}$  que tem módulo constante,  $|\vec{v}| = v$ . A cada intervalo de tempo  $\tau = \ell/v$  uma variável aleatória e independente (que assume apenas dois valores) é sorteada, por exemplo, através de um jogo de moeda. Assim, se o resultado é cara a partícula se desloca para a direita e se for coroa, ela vai para a esquerda, fig. (2.1).

Associando a cada resultado do sorteio da moeda no intervalo de tempo  $\tau$ , uma variável  $\sigma_n$ , onde  $n \in \mathbb{N}$ , tal que

$$\sigma_n = \begin{cases} +1, & \text{se o resultado for cara} \\ -1, & \text{se o resultado for coroa} \end{cases}, \quad (2.2)$$

então, após o  $n$ -ésimo passo de tempo  $\tau$ , a posição da partícula, é dada por

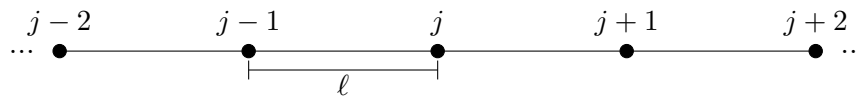
$$x(n) = x_0 + \sum_{i=1}^n \sigma_i \ell = x_0 + \sum_{i=1}^n \sigma_i v \tau. \quad (2.3)$$



**Figura 2.1:** Exemplo de uma possível realização dos cinco primeiros passos de uma CAC em uma dimensão, onde  $\tilde{t}$  é um instante de tempo arbitrário entre os intervalos dados na figura. Ao atingir a posição  $x_j = x_0 + j\ell$ , com  $j \in \mathbb{Z}$ , a partícula muda de sentido (ou não) dependendo do valor do sorteio da moeda.

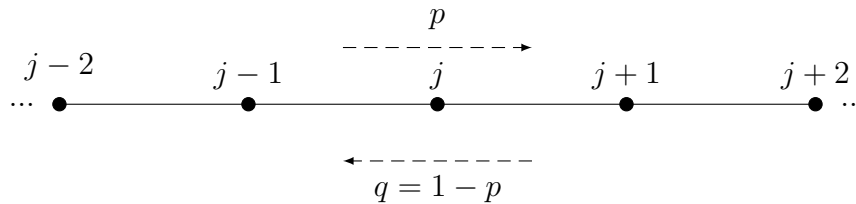


Observando a fig. (2.1), constatamos que o sistema pode ser descrito em uma rede linear cujos sítios estão separados por uma distância  $\ell$ . Assim, sem perda de generalidade, podemos identificar a posição de cada sítio por apenas um número inteiro  $j$ , isto é,  $x_j = j\ell$  fig. (2.2). Além disso, se reiniciarmos o sistema com as mesmas condições iniciais e deixá-lo evoluir novamente de acordo com o processo descrito acima, provavelmente não vamos obter a mesma configuração dada na fig. (2.1). Isto ocorre devido aos processos aleatórios que determinam o sentido de propagação da partícula a cada intervalo de tempo  $\tau$ , introduzidos com os sorteios da moeda.



**Figura 2.2:** O espaço de posições para os processos descritos na fig. (2.1) pode ser identificado como uma rede unidimensional cujo parâmetro de rede é  $\ell$  e  $j \in \mathbb{Z}$ .

A cada intervalo de tempo  $\tau$  existe uma probabilidade  $p$  associada ao resultado do sorteio da moeda ser cara ( $\sigma_n = +1$ ) e  $q = 1 - p$  de ser coroa ( $\sigma_n = -1$ ), em outras palavras,  $p$  é a probabilidade da partícula se deslocar para a direita e  $q$  a probabilidade dela ir para a esquerda ao incidir em um dado sítio da rede, fig. (2.3). Neste modelo de CAC não existem restrições no número de vezes que a partícula pode passar por um sítio. Além disso, a escolha do próximo vértice a ser visitado é independente das escolhas realizadas nos passos anteriores.



**Figura 2.3:** Probabilidades da partícula ir para a direita ( $p$ ) ou esquerda ( $q = 1 - p$ ) ao incidir em um sítio da rede a cada passo de tempo.

Uma quantidade relevante é a probabilidade de encontrar a partícula convergindo para a posição  $j$  após  $n$  passos de tempo  $\tau$ . Essa quantidade pode ser obtida através da relação de recorrência

$$P_v(j, n) = pP_v(j + 1, n - 1) + qP_v(j - 1, n - 1), \quad (2.4)$$

com condições iniciais apropriadas, por exemplo,  $P_v(0, 0) = 1$  e  $P_v(j \neq 0, 0) = 0$ , que representa uma partícula partindo da origem.

A eq. (2.4) não é a única via para se obter  $P_v(j, n)$ . Assim, vamos considerar uma CAC onde a partícula parte da origem. Neste caso, após  $n$  etapas de tempo  $\tau$ , o número de passos que a partícula dá para a direita e esquerda são dados, respectivamente por  $n_d$  e  $n_e$ , tal que,

$$n = n_d + n_e. \quad (2.5)$$

Além disso, assumindo que o parâmetro de rede  $\ell = 1$ , a posição da partícula após o  $n$ -ésimo passo é dada por

$$j = n_d - n_e. \quad (2.6)$$

Na tab. (2.1) mostramos os todas possíveis sequências de passos após três etapas de evolução. Logo, constatamos que após  $n$  passos, a probabilidade  $P_s$  de uma sequência de passos ocorrer é dada por

$$P_s = p^{n_d} q^{n_e}. \quad (2.7)$$

$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	sequências
$j = 0 \therefore P_s = 1$	$j = +1 \therefore P_s = p$	$j = +2 \therefore P_s = pp$	$j = +3 \therefore P_s = ppp$	$\rightarrow \rightarrow \rightarrow$
			$j = +1 \therefore P_s = ppq$	$\rightarrow \rightarrow \leftarrow$
		$j = 0 \therefore P_s = pq$	$j = +1 \therefore P_s = pqp$	$\rightarrow \leftarrow \rightarrow$
			$j = -1 \therefore P_s = pqq$	$\rightarrow \leftarrow \leftarrow$
	$j = -1 \therefore P_s = q$	$j = 0 \therefore P_s = qp$	$j = +1 \therefore P_s = qpp$	$\leftarrow \rightarrow \rightarrow$
			$j = -1 \therefore P_s = qpq$	$\leftarrow \rightarrow \leftarrow$
		$j = -2 \therefore P_s = qq$	$j = -1 \therefore P_s = qqp$	$\leftarrow \leftarrow \rightarrow$
			$j = -3 \therefore P_s = qqq$	$\leftarrow \leftarrow \leftarrow$

**Tabela 2.1:** Nas quatro primeiras colunas temos os três primeiros passos de tempo para uma CAC, onde  $P_s$  é a probabilidade de uma sequência de passos ocorrer após a  $n$ -ésima etapa da evolução. Na quinta coluna temos a representação gráfica dos passos para  $n = 3$ , onde  $(\rightarrow)$  representa um passo para a direita e  $(\leftarrow)$  um passo para a esquerda.

A probabilidade de encontrar a partícula em uma posição  $j$  da rede após  $n$  passos de tempo,  $P_v(j, n)$ , é dada pelo produto entre o número de todas as possíveis sequência de passos que resultem em tal posição e a probabilidade da ocorrência de uma única sequência que leve ao sítio escolhido. Assim, vamos considerar uma posição  $j = 1$  dada na tab. (2.1). Neste caso observamos que existem três possíveis sequência que resultam nessa posição, e a probabilidade de uma dessas sequências ocorrer é  $P_s = p^2q$ . Portanto,  $P_v(1, 3) = 3p^2q$ . Ademais, observe que para  $n = 1$  existem duas sequências possíveis, para  $n = 2$ , quatro, e para  $n = 3$ , oito. Desta forma, é fácil verificar por indução que o número de sequências possíveis após  $n$  passos é dado por  $2^n$ .

Uma vez que o número de sequência cresce de maneira exponencial, torna-se uma missão extremamente árdua contá-las a medida que o valor de  $n$  cresce. Entretanto, esse problema pode ser contornado, uma vez que cada passo é independente do anterior e que devemos contar cada sequência apenas uma vez. Então, o número total de sequências é dada pela combinação simples entre o número de passos  $n$  e a posição  $j$  escolhida. Assim, escolhendo uma posição  $j > 0$ , por exemplo,  $j = n_d$ , o número de combinações é o coeficiente binomial

$$C_{n_d}^n = \binom{n}{n_d} = \frac{n!}{n_d!(n - n_d)!}. \quad (2.8)$$

Além disso, uma vez que a probabilidade de uma sequência que leve a posição  $j = n_d$  é dado pela eq. (2.7),  $P_v(n_d, n)$  é dada por

$$P_v(n_d, n) = \frac{n!}{n_d!(n - n_d)!} p^{n_d} q^{n_e}. \quad (2.9)$$

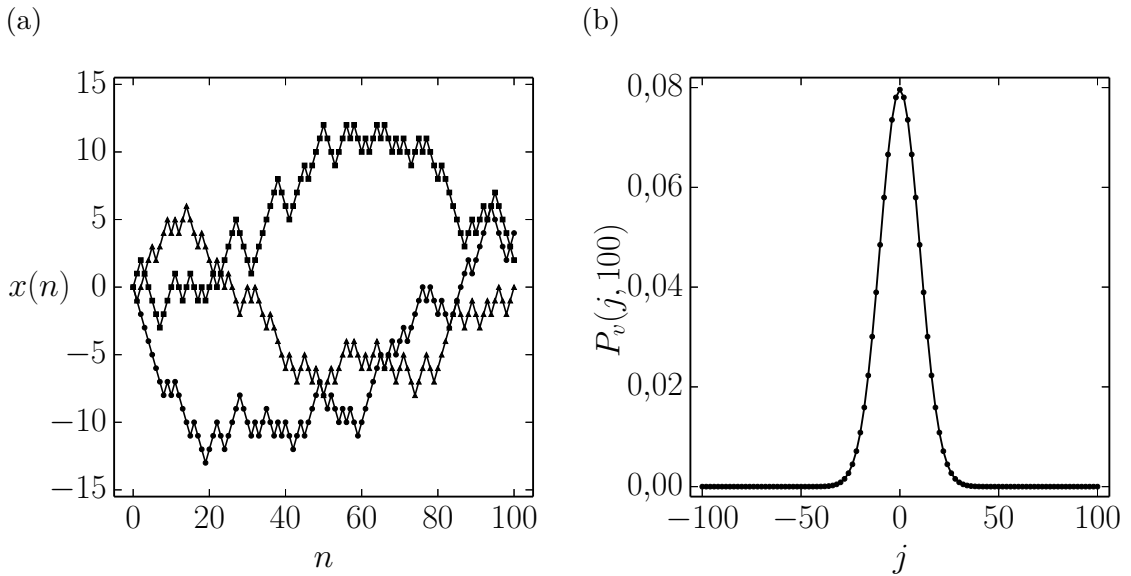
Mas das eqs. (2.5) e (2.6)

$$n_d = \frac{n + j}{2} \text{ e } n_e = \frac{n - j}{2}. \quad (2.10)$$

Substituindo essas duas equações acima na eq. (2.9), obtemos

$$P_v(j, n) = \frac{n!}{\left(\frac{n+j}{2}\right)! \left(\frac{n-j}{2}\right)!} p^{(n+j)/2} q^{(n-j)/2}, \quad (2.11)$$

onde  $j = -n, -n + 2, \dots, n - 2, n$ . E eq. (2.11) é válida para qualquer posição da rede.



**Figura 2.4:** (a) Trajetórias em função do número de passos, eq. (2.3), de três evoluções de uma CAC imparcial ( $p = q = 1/2$ ) partindo da origem, onde assumimos que  $\ell = \tau = 1$ . (b) Distribuição de probabilidades, eq. (2.11), para uma CAC imparcial após 100 passos.

Para exemplificar a construção desta seção, evoluímos uma CAC imparcial (com probabilidades iguais de ir para esquerda ou direita,  $p = q = 1/2$ ) três vezes, onde assumimos que  $\ell = \tau = 1$ , fig. (2.4a). Como discutido nos parágrafos anteriores, obtivemos três trajetórias diferentes. A fig. (2.4b) apresenta a distribuição de probabilidades dada pela eq. (2.11) após 100 passos, como esperado ela é uma distribuição gaussiana.

## 2.2 Valor Médio e Variância

Considere uma função arbitrária  $\mathcal{F}(x)$  e seja  $P(x)$  a distribuição de probabilidade associada a  $x$ . Então, se  $x$  é uma variável discreta, a média  $\langle \mathcal{F}(x) \rangle$  é definida por

$$\langle \mathcal{F}(x) \rangle = \sum_x P(x) \mathcal{F}(x). \quad (2.12)$$

Se  $x$  representar uma variável contínua, substituímos o somatório na eq. (2.12) por uma integral, tal que

$$\langle \mathcal{F}(x) \rangle = \int P(x) \mathcal{F}(x) dx. \quad (2.13)$$

Neste caso,  $P(x)$  é a densidade de probabilidade associada a variável  $x$ .

A variância da função  $\mathcal{F}(x)$  é definida por

$$\langle (\Delta \mathcal{F}(x))^2 \rangle = \langle (\mathcal{F}(x) - \langle \mathcal{F}(x) \rangle)^2 \rangle = \langle [\mathcal{F}(x)]^2 \rangle - \langle \mathcal{F}(x) \rangle^2. \quad (2.14)$$

Em especial, se  $\mathcal{F}(x) = x$ , onde  $x$  representa a posição, defini-se a variância de  $\mathcal{F}(x)$  como sendo o Deslocamento Quadrático Médio (DQM), isto é,

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \sum_x P(x) x^2 - \left( \sum_x P(x) x \right)^2, \quad (2.15)$$

se  $x$  é uma variável discreta. Para uma variável contínua, troca-se os somatórios por integrais em todos os valores possíveis da variável  $x$ .

Para as CACs definidas na seção anterior, no regime onde  $n \gg 1$ , usando o teorema central do limite, no regime onde  $n \gg 1$ ,  $P_v(j, n)$  é dada por

$$P_v(x, n) = \frac{1}{\sqrt{8\pi npq}} \exp\left(-\frac{(x - (p - q)n)^2}{8pqn}\right). \quad (2.16)$$

que representa uma função gaussiana [126]. Assim, podemos considerar que as posições

$x_j = j\ell$  são contínuas, então

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} P_v(x, n) x dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x}{\sqrt{8\pi npq}} \exp\left(-\frac{(x - (p - q)n)^2}{8npq}\right) dx = (p - q)n \quad (2.17)$$

e

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} P_v(x, n) x^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2}{\sqrt{8\pi npq}} \exp\left(-\frac{(x - (p - q)n)^2}{8npq}\right) dx = ((p - q)n)^2 + 4pqn. \quad (2.18)$$

Logo, o DQM se reduz a

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = 4pqn. \quad (2.19)$$

Além disso, considerando que a probabilidade de obtermos, em um sorteio da variável aleatória, o resultado  $\sigma_n = +1$  ( $\sigma_n = -1$ ) é  $p$  ( $q$ ), então verifica-se que a média e a variância da variável aleatória  $\sigma_n$  são dadas por

$$\langle \sigma \rangle = p - q \quad (2.20)$$

e

$$\langle (\Delta \sigma)^2 \rangle = \langle \sigma^2 \rangle - \langle \sigma \rangle^2 = 4pq. \quad (2.21)$$

## 2.3 Caminhadas Quânticas - o Modelo “ADZ”

Em 1993 Y. Aharonov, L. Davidovich e N. Zagury publicaram um trabalho na revista *Physical Review A*, que é considerado o artigo seminal das CQs [17]. Neste trabalho, os autores apresentaram um modelo para uma possível versão quântica das CACs. Portanto, devido à importância desse trabalho, nesta seção apresentamos, de maneira ligeiramente modificada, o modelo proposto por estes autores. Além disso, em homenagem a esses autores, nomeamos tal CQ de “modelo ADZ”.

Na visão de Aharonov *et al.*, uma CQ é um sistema constituído de uma partícula com spin  $1/2$  deslocando-se em uma dimensão. Sua evolução ocorre em intervalos discretos de tempo  $\tau$ , a qual é regida pelo operador unitário de evolução temporal definido por

$$\hat{U} = \hat{S}\hat{C}, \quad (2.22)$$

onde

$$\hat{S} = \exp\left[-i\hat{\sigma}_z \otimes \hat{P}\ell/\hbar\right] \quad (2.23)$$

é o operador de translação condicional e

$$\hat{C} = \exp [i\pi\hat{\sigma}_y/4] \otimes \hat{\mathbf{1}}_x \quad (2.24)$$

é o operador “moeda”, responsável em direcionar a partícula a cada passo de tempo. Nas expressões acima,  $\hat{\sigma}_z$  e  $\hat{\sigma}_y$  são as matrizes de Pauli,  $\hat{\mathbf{1}}_x$  é a relação de completeza no espaço de posições,  $\hat{P}$  é o operador *momentum* canonicamente conjugado ao operador posição  $\hat{X}$  e  $\ell$  é um parâmetro com dimensão de comprimento.

Observe que  $\hat{S}$  é um operador de translação condicional, pois sua ação depende do autovalor de  $\hat{\sigma}_z$ . Assim, uma vez que

$$\hat{\sigma}_z|\pm\rangle = \pm|\pm\rangle, \quad (2.25)$$

então,  $\hat{S}$  translada um estado do sistema associado a posição  $x$  para  $x \pm \ell$ . O operador  $\hat{C}$  é chamado de operador moeda porque ele desempenha um papel análogo ao sorteio da moeda nas CACs. Por este motivo, esse modelo é frequentemente nomeado de “*modelo de moeda*” (Caminhada Quântica de Moeda (CQM)). Na base dos autovetores do operador  $\hat{\sigma}_z$ ,

$$\hat{C} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle\langle+| + |+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|) \otimes \hat{\mathbf{1}}_x. \quad (2.26)$$

Ademais, o operador moeda dado na eq. (2.24) que atua somente no espaço vetorial ligado aos graus de liberdade interno (spin) pode ser substituído por qualquer operador unitário que atue nesse espaço.

Nas CACs ao sortear uma moeda, dependendo do resultado (cara ou coroa), a partícula desloca-se do sítio que ela se encontra para um sítio adjacente a direita **ou** esquerda. Diferentemente, nas CQMs ao “lançar” a moeda quântica (ação do operador moeda) a partícula move-se da posição que ela se encontra para as posições adjacente à direita **e** à esquerda (estado de superposição). Em outras palavras, os resultados dos sorteios da moeda clássica são análogos aos termos  $|+\rangle\langle+|$  e  $|-\rangle\langle-|$  do operador moeda, enquanto que os termos  $|+\rangle\langle-|$  e  $|-\rangle\langle+|$  são responsáveis pelos estado de superposição e não possuem análogo clássico.

Após  $n$  passos de tempo  $\tau$ , com  $n \in \mathbb{N}$ , o estado do sistema é dado por

$$|\Psi_n\rangle = \hat{U}^n |\Psi_0\rangle. \quad (2.27)$$

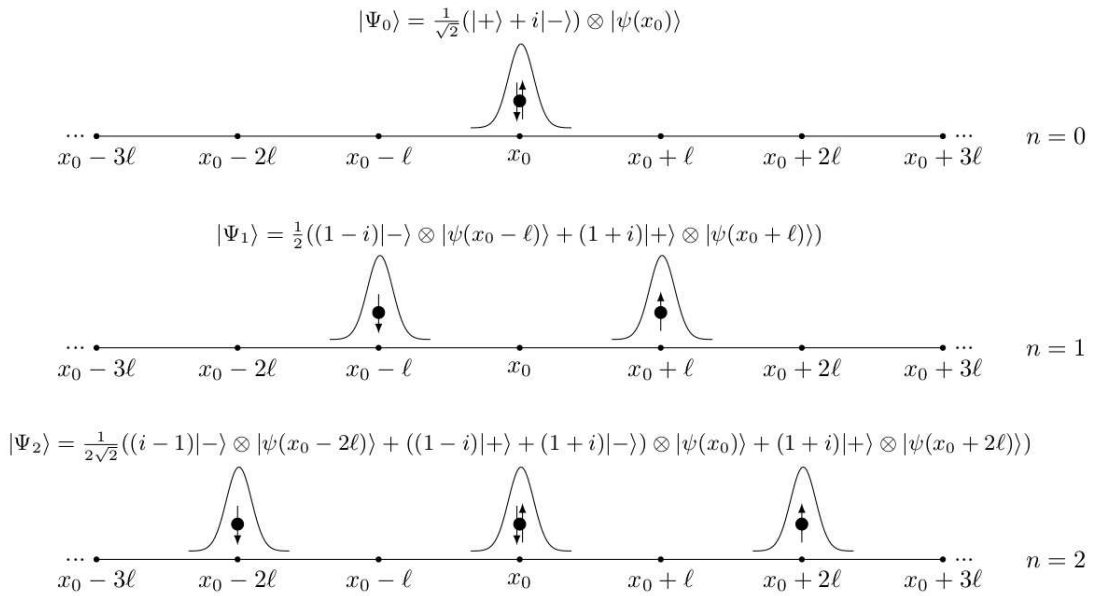
Como exemplo, vamos considerar que

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, \psi(x_0)\rangle + i|-, \psi(x_0)\rangle) \quad (2.28)$$

é o estado inicial, onde  $|\pm, \psi(x_0)\rangle \equiv |\pm\rangle \otimes |\psi(x_0)\rangle$  e  $\langle x|\psi(x_0)\rangle = \psi(x, x_0)$  é uma função de onda centrada em  $x_0$ . Logo, após um passo de tempo  $\tau$  da definição de  $\hat{U}$ , eq. (2.22), têm-se diretamente que

$$|\Psi_1\rangle = \hat{U}|\Psi_0\rangle = \frac{1}{2} [(1+i)|+, \psi(x_0 + \ell)\rangle + (-1+i)|-, \psi(x_0 - \ell)\rangle]. \quad (2.29)$$

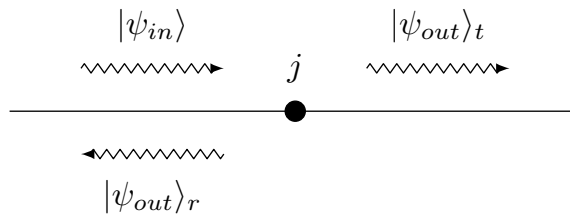
Observe que para CAC se a partícula se encontra na posição  $x_0$  no passo de tempo  $n = 0$ , no passo de tempo  $n = 1$  sua posição pode ser  $x_0 + \ell$  (com probabilidade  $p$ ) ou  $x_0 - \ell$  (com probabilidade  $q = 1 - p$ ), dependendo do sorteio da variável aleatória que rege a evolução desse sistema. Entretanto, a eq. (2.29) mostra que para uma CQM, após o primeiro passo de tempo, o estado do sistema é dado por uma superposição dos estados associados às posições  $x_0 - \ell$  e  $x_0 + \ell$ . Isso ocorre porque para as CQM a evolução temporal é unitária e definida em termos de amplitudes de probabilidades. Esta diferença na evolução das CACs e das CQMs é a principal distinção entre estes dois modelos. A caráter de ilustração, na fig. (2.5) apresentamos uma representação esquemática da função de onda para os passos de tempo iniciais da evolução do sistema acima.



**Figura 2.5:** Representação pictórica dos estados para os passos de tempo iniciais de uma CQM, onde as setas verticais no sentido de baixo para cima e de cima para baixo denotam, respectivamente, os estados  $|+\rangle$  e  $|-\rangle$  e os estados  $|\Psi_n\rangle$  foram obtido via eq. (2.27). As setas duplas no sítio  $x_0$  estão associadas a superposição dos estados  $|+\rangle$  e  $|-\rangle$ .

## 2.4 Caminhadas Quânticas - o Modelo de Espalhamento

Uma visão alternativa à de Aharonov *et al.* [17] para as CQs foi introduzida na literatura por M. Hillery *et al.* [36]. Nesta situação, o sistema consiste de uma partícula movendo-se pelas arestas de uma rede linear e sofrendo processos de espalhamento nos sítios a cada passo de tempo. Este processo pode ser visto como um feixe de luz em uma rede interferométrica, onde cada sítio atua como um divisor de feixes e as arestas como eixos ópticos. Além disso, cada divisor de feixe possui dois modos de entrada e dois modos de saída (direita e esquerda). Finalmente, após a partícula incidir em um sítio o estado do sistema é dado pela superposição de estados associados com os processos de transmissão e de reflexão ponderados por amplitudes de espalhamento, veja a fig. (2.6). Ademais, as propostas de Aharonov *et al.* e M. Hillery *et al* são completamente equivalentes [36, 92, 121], portanto a partir deste ponto trabalharemos apenas com o modelo de M. Hillery *et al*, pois sob certos aspectos é um modelo fisicamente mais intuitivo uma vez que podemos encarar esse modelo como um “simples” problema de espalhamento.



**Figura 2.6:** Representação de um elemento (um divisor de feixe) de uma rede interferométrica, onde  $|\psi_{in}\rangle$  descreve uma onda incidente no vértice  $j$ . Os estados  $|\psi_{out}\rangle_r$  e  $|\psi_{out}\rangle_t$  descrevem, respectivamente a reflexão e a transmissão após a onda ser espalhada por uma interação pontual em  $j$ .

Ao incidir sobre um sítio da rede, a partícula é espalhada e seu estado após esse processo é dado por

$$|\psi_{in}\rangle \longrightarrow |\psi_{out}\rangle = \Gamma_r |\psi_{out}\rangle_r + \Gamma_t |\psi_{out}\rangle_t, \quad (2.30)$$

onde os coeficientes  $\Gamma_r$  e  $\Gamma_t$  são denominados amplitudes de espalhamento de reflexão e transmissão, tal que

$$|\Gamma_r|^2 + |\Gamma_t|^2 = 1.$$

De maneira geral, uma CQE em uma dimensão consiste de uma partícula movendo-se em uma rede linear e, a cada intervalo de tempo característico  $\tau$ , ela sofre processos de espalhamento nos sítios, de tal forma que se no  $n$ -ésimo passo de tempo  $\tau$  o estado do



sistema é dado por  $|\Psi_n\rangle$ , então no passo de tempo  $n + 1$

$$|\Psi_{n+1}\rangle = \hat{U}|\Psi_n\rangle, \quad (2.31)$$

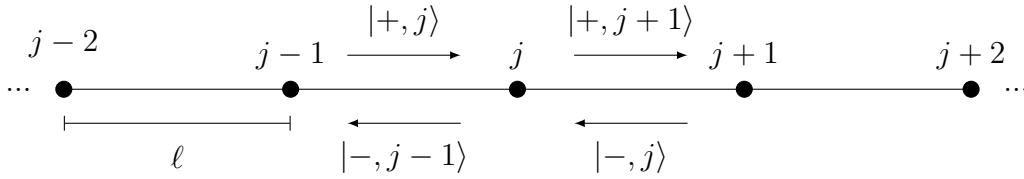
onde  $n \in \mathbb{N}$  e  $\hat{U}$  é operador unitário que descreve os processos de espalhamento.

Para descrever o sistema necessitamos de uma base para seu espaço de Hilbert. Assim, definimos tal base como sendo o conjunto de estados  $\{|\sigma, j\rangle\}$ , com  $j \in \mathbb{Z}$ , que representam o deslocamento da partícula do vértice rotulado por  $(j - \sigma)$  para o vértice  $(j)$ , que estão separados por uma distância  $\ell$  e  $\sigma = \pm 1$ , fig. (2.7). Além disso, como os estados  $\{|\sigma, j\rangle\}$  constituem uma base, então são válidas as seguintes relações de ortonormalidade e completeza:

$$\langle \sigma, j | \sigma', j' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (2.32)$$

e

$$\hat{\mathbf{1}} = \sum_j \sum_{\sigma=\pm 1} |\sigma, j\rangle \langle \sigma, j|. \quad (2.33)$$



**Figura 2.7:** Regras para rotular os estados que descrevem as CQEs em uma dimensão, onde  $\sigma$  está associado com o sentido de propagação da partícula nas arestas e  $j$  com as posições de cada sítio da rede.

Observe que o número quântico  $j$  descreve o sítio da rede para onde a função de onda associada ao estado  $|\sigma, j\rangle$  está evoluindo. Os valores do número quântico  $\sigma$  estão correlacionados com o sentido de propagação da partícula ao longo de uma aresta. Entretanto, apesar de utilizarmos o número quântico  $j$  como auto estado de posição ao longo da tese, ele não representa, necessariamente, um autovalor do operador posição. Já o número quântico  $\sigma$ , que é o responsável pelo direcionamento da partícula a cada passo de tempo, não representa um autovalor do operador *momentum*, ele corresponde a um grau de liberdade auxiliar, que pode ser identificado como um grau de liberdade intrínseco da partícula, por exemplo, o spin de um elétron ou o estado de polarização de um fóton. Em algumas implementações físicas que usam óptica linear,  $j$  representa os modos normais de vibração de uma cavidade óptica ressonante e  $\sigma$  os estados de polarização ortogonais da luz [69, 70, 85]. Outra proposta utilizando eletrodinâmica quântica de cavidade, onde um átomo de dois níveis inserido em uma cavidade contendo um campo eletromagnético

intenso [83, 85],  $j$  representa os estados coerentes de Glauber [131], que é um autoestado do operador de aniquilação de fótons, e  $\sigma$  os dois níveis atômicos.

Como mencionado no parágrafo anterior, o deslocamento da partícula de um vértice para outro está associado condicionalmente ao grau de liberdade interno  $\sigma$ . De fato, é impossível construir uma CQE considerando apenas o espaço de posição, além de uma condição trivial (sistema invariante sob translações – partícula livre), pois isso leva a um processo não-unitário [22]. Para demonstrar esse ponto, considere uma CQE utilizando apenas o espaço de posição. Neste caso, definimos a ação do operador evolução temporal em um estado de base com sendo

$$\hat{U}|j\rangle = a|j-1\rangle + b|j+1\rangle. \quad (2.34)$$

Logo, na forma matricial  $\hat{U}$  é representado por

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \dots & 0 & a & 0 & 0 & \dots \\ \dots & b & 0 & a & 0 & \dots \\ \dots & 0 & b & 0 & a & \dots \\ \dots & 0 & 0 & b & 0 & \dots \\ \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (2.35)$$

Uma vez que  $\hat{U}$  deve ser unitário, as colunas de sua matriz constituem um conjunto de vetores ortonormais. Assim, denotando a  $i$ -ésima coluna por  $|U_i\rangle$ , temos

$$\langle U_i|U_j\rangle = \delta_{ij}, \quad (2.36)$$

o que resulta no seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} a^*b = 0 \\ |a|^2 + |b|^2 = 1, \end{cases} \quad (2.37)$$

cujas soluções são

$$\{|a| = 1, |b| = 0\} \text{ e } \{|a| = 0, |b| = 1\}, \quad (2.38)$$

que correspondem a uma partícula livre se propagando, respectivamente, nos sentidos decrescente e crescente de  $j$ .

Uma vez demonstrada a necessidade do grau de liberdade auxiliar para direcionar a partícula a cada passo de tempo, para evoluir o sistema, ou seja, resolver a eq. (2.31),

expandimos o vetor de estado  $|\Psi_n\rangle$  na base  $\{|\sigma, j\rangle\}$ , isto é,

$$|\Psi_n\rangle = \sum_j \sum_{\sigma=\pm 1} \psi_\sigma(j, n) |\sigma, j\rangle, \quad (2.39)$$

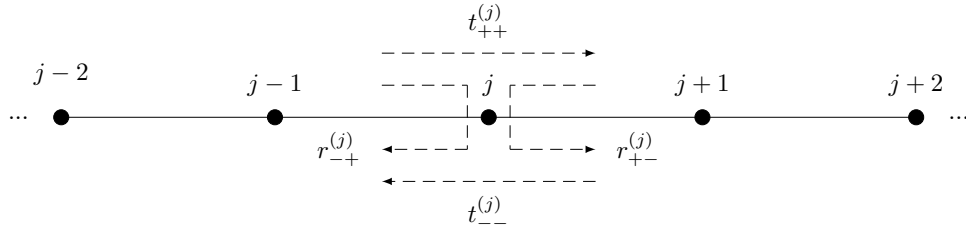
onde  $\psi_\sigma(j, n)$  é a componente  $\sigma$  da função de onda do sistema associada ao sítio  $j$  no passo de tempo  $n$ . Assim, torna-se necessário definir a ação de  $\hat{U}$  sobre um estado de base, ou seja:

$$\hat{U}|\sigma, j\rangle = t_{\sigma\sigma}^{(j)} |\sigma, j + \sigma\rangle + r_{-\sigma\sigma}^{(j)} |-\sigma, j - \sigma\rangle \quad (2.40)$$

e

$$\hat{U}^\dagger|\sigma, j\rangle = t_{\sigma\sigma}^{(j-\sigma)*} |\sigma, j - \sigma\rangle + r_{\sigma-\sigma}^{(j-\sigma)*} |-\sigma, j - \sigma\rangle, \quad (2.41)$$

onde  $t_{\sigma\sigma}^{(j)}$  e  $r_{-\sigma\sigma}^{(j)}$  representam, respectivamente, as amplitudes de probabilidades da partícula ser transmitida e refletida através do sítio  $j$ , fig. (2.8).



**Figura 2.8:** Coeficientes de reflexão e transmissão em um dado vértice  $j$ .

Como consequência da unitariedade de  $\hat{U}$ ,  $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$ , temos

$$|t_{\sigma\sigma}^{(j)}|^2 + |r_{\sigma-\sigma}^{(j)}|^2 = 1, \quad t_{\sigma\sigma}^{(j)*} r_{-\sigma\sigma}^{(j)} + r_{\sigma-\sigma}^{(j)*} t_{-\sigma-\sigma}^{(j)} = 0. \quad (2.42)$$

Ademais, usando a relação de completeza, eq. (2.33), podemos escrever o operador evolução da seguinte forma

$$\hat{U} = \sum_j \sum_{\sigma=\pm} \sum_{\sigma'=\pm} \Gamma_{\sigma\sigma'}^{(j)} |\sigma, j + \sigma\rangle \langle \sigma', j| \quad (2.43)$$

e

$$\hat{U}^\dagger = \sum_j \sum_{\sigma=\pm} \sum_{\sigma'=\pm} \Gamma_{\sigma\sigma'}^{(j-\sigma)*} |\sigma', j - \sigma\rangle \langle \sigma, j|, \quad (2.44)$$

onde

$$\Gamma_{\sigma\sigma}^{(j)} = t_{\sigma\sigma}^{(j)}, \quad \Gamma_{-\sigma\sigma}^{(j)} = r_{-\sigma\sigma}^{(j)}. \quad (2.45)$$

Assim, as relações da eq. (2.42) podem ser resumidas em

$$\sum_{\sigma=\pm 1} \Gamma_{\sigma\sigma'}^{(j)} \Gamma_{\sigma\sigma''}^{(j)*} = \sum_{\sigma=\pm 1} \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j)} \Gamma_{\sigma''\sigma}^{(j)*} = \delta_{\sigma'\sigma''}. \quad (2.46)$$

Considerando a ação de  $\hat{U}$  no estados de base do sistema, eq. (2.40), e a relação de completude, eq. (2.33), podemos expressar a eq. (2.31) por

$$|\Psi_{n+1}\rangle = \sum_j \sum_{\sigma=\pm} \psi_\sigma(j, n) \left( t_{\sigma\sigma}^{(j)} |\sigma, j + \sigma\rangle + r_{-\sigma\sigma}^{(j)} |-\sigma, j - \sigma\rangle \right). \quad (2.47)$$

Portanto, se o estado inicial do sistema é dado por  $|\Psi_0\rangle$ , usando a eq. (2.31), após  $n$  passos de tempo o estado do sistema é dado por

$$|\Psi_n\rangle = \hat{U}^n |\Psi_0\rangle. \quad (2.48)$$

Além disso, pode-se mostrar que as componentes da função de onda obedecem a seguinte relação de recorrência:

$$\psi_\sigma(j, n) = t_{\sigma\sigma}^{(j-\sigma)} \psi_\sigma(j - \sigma, n - 1) + r_{-\sigma-\sigma}^{(j-\sigma)} \psi_{-\sigma}(j - \sigma, n - 1), \quad (2.49)$$

onde

$$\psi_\sigma(j, n) = \langle \sigma, j | \Psi_n \rangle. \quad (2.50)$$

A eq. (2.49) pode ser representada matricialmente por

$$\begin{pmatrix} \psi_+(j, n) \\ \psi_-(j, n) \end{pmatrix} = \hat{\Gamma}_+^{(j-1)} \begin{pmatrix} \psi_+(j-1, n-1) \\ \psi_-(j-1, n-1) \end{pmatrix} + \hat{\Gamma}_-^{(j+1)} \begin{pmatrix} \psi_+(j+1, n-1) \\ \psi_-(j+1, n-1) \end{pmatrix}, \quad (2.51)$$

onde,  $\hat{\Gamma}_+^{(j-1)}$  e  $\hat{\Gamma}_-^{(j-1)}$  são matrizes definidas por

$$\hat{\Gamma}_+^{(j-1)} \equiv \begin{pmatrix} t_{++}^{(j-1)} & r_{-+}^{(j-1)} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \hat{\Gamma}_-^{(j+1)} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ r_{-+}^{(j+1)} & t_{--}^{(j+1)} \end{pmatrix}. \quad (2.52)$$

As amplitudes de espalhamento em cada sítio  $j$  podem ser organizadas em uma matriz denominada de matriz de espalhamento, tal que

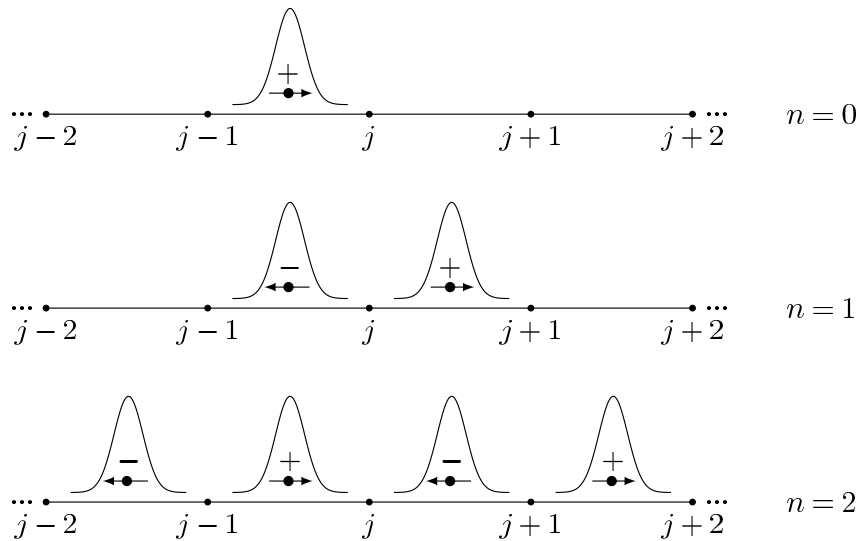
$$\hat{\Gamma}^{(j)} = \hat{\Gamma}_+^{(j)} + \hat{\Gamma}_-^{(j)} = \begin{pmatrix} t_{++}^{(j)} & r_{+-}^{(j)} \\ r_{-+}^{(j)} & t_{--}^{(j)} \end{pmatrix}. \quad (2.53)$$

Considerando as relações da eq. (2.42), a matriz de espalhamento deve ser unitária, isto é,

$$\hat{\Gamma}^{(j)\dagger}\hat{\Gamma}^{(j)} = \hat{\Gamma}^{(j)}\hat{\Gamma}^{(j)\dagger} = \hat{\mathbf{1}}.$$

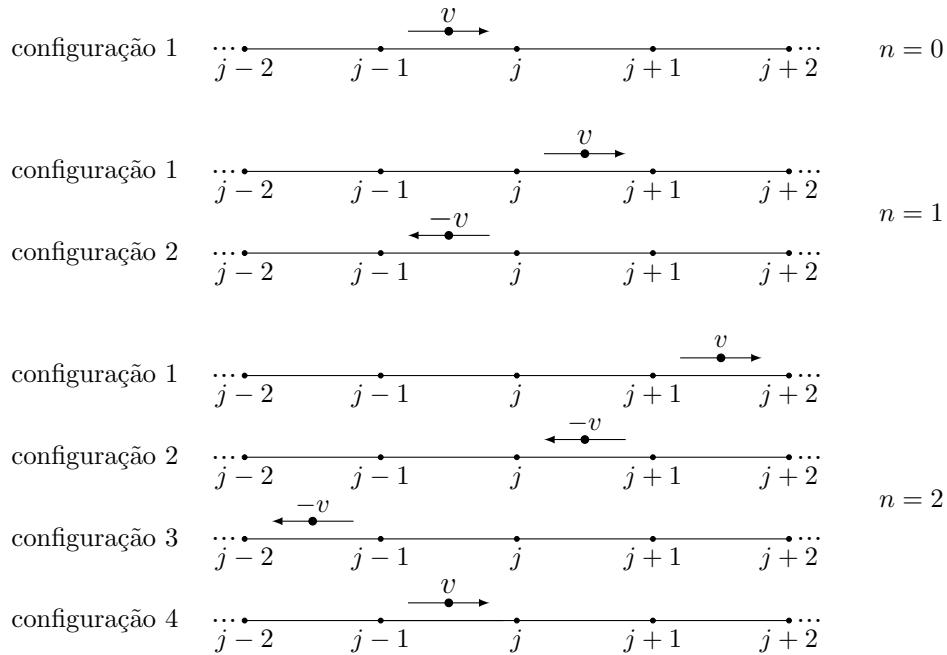
Desta forma, se garante a conservação do fluxo de probabilidades. Portanto, é possível definir uma grande variedade de CQEs com diferentes  $\hat{\Gamma}^{(j)}$ . Além disso, as matrizes de espalhamento são equivalentes aos operadores moedas do modelo ADZ, ver eq. (2.22).

Para traçar um paralelo entre os casos clássico e quântico, suponha a CAC descrita na seção (2.1), com  $x_0 = j_0\ell$  (onde  $j_0$  é um número inteiro arbitrário) e velocidade inicial com  $+v$ , veja a fig. (2.1). Neste caso, a decisão sobre o sentido de propagação da partícula é realizada nos instantes de tempo  $n\tau$ , com  $n = 0, 1, 2, \dots$ , nas posições de  $x_j = j\ell$  ( $j \in \mathbb{Z}$ ). Além disso,  $j$  corresponde ao número quântico que descreve as posições onde ocorrem os processos de espalhamento no sistema quântico. Assim, para o problema quântico considere o estado inicial  $|\Psi_0\rangle = |+, j\rangle$ , logo o estado do sistema no passo de tempo  $n$  é  $|\Psi_n\rangle = \hat{U}^n|\Psi_0\rangle$ . A fig. (2.9) indica os estados da base  $\{|\sigma, j\rangle\}$  em que  $|\Psi_n\rangle$  é expandido. Para o caso clássico, com  $j_0 = j - 1$ , imediatamente após chegar no sítio  $j$  ( $j \pm 1$ ) em  $n = 1$ , “primeiro passo” ( $n = 2$ , “segundo passo”), as duas (quatro) configurações possíveis que o sistema clássico pode assumir estão indicadas na fig. (2.10). É óbvio que as possíveis configurações (trajetórias) clássicas se proliferam com o incremento em  $n$ . No final, sabemos que a configuração específica que realmente é observada depende da sua probabilidade relativa de ocorrer, isto tipifica o caráter estocástico das CACs. Por outro lado, o princípio da superposição em mecânica quântica garante que todos “caminhos” possíveis no passo de tempo  $n$  estão coerentemente incluídos no estado  $|\Psi_n\rangle$ .



**Figura 2.9:** Representação pictórica da função de onda do sistema nos passos de tempo iniciais para uma CQEs.

A discussão do parágrafo anterior destaca a principal diferença nas evoluções desses dois modelos, ou seja, enquanto as CACs são definidas em termos de probabilidades da escolha de uma variável estocástica (por exemplo sorteio de uma moeda ser cara ou coroa), as CQEs são definidas em termos de amplitudes de probabilidades cujas evoluções são unitárias. As diferenças entre os casos clássico e quântico determinam fortemente o comportamento do DMQ (como mostrado na referência [46] e discutido nos próximos capítulos), tal que para as CACs  $\langle(\Delta x)^2\rangle_{CAC} \sim n$  e para as CQEs  $\langle(\Delta x)^2\rangle_{CQE} \sim n^2$  [28].



**Figura 2.10:** Representação das possíveis configurações para os primeiros passos de tempo para uma CAC.

As distribuições de probabilidades são ingredientes fundamentais na definição das CQEs, pois elas diferem das caminhadas clássicas devido aos efeitos de interferência que o estado do sistema sofre durante a evolução temporal [46, 132]. Elas são determinadas a partir de projeções do estado global  $|\Psi_n\rangle$  sob os estados de base do espaço de Hilbert do problema. Assim, a probabilidade de encontrar a partícula convergindo para um dado sítio  $j$  no passo de tempo  $n$  é dada por

$$P_v(j, n) = \sum_{\sigma=\pm} |\langle\sigma, j|\Psi_n\rangle|^2 = \sum_{\sigma=\pm} |\psi_\sigma(j, n)|^2. \quad (2.54)$$

Além disso, a probabilidade de encontrar a partícula se propagando no sentido  $\sigma$  é definida por

$$P_c(\sigma, n) = \sum_j |\langle\sigma, j|\Psi_n\rangle|^2 = \sum_j |\psi_\sigma(j, n)|^2. \quad (2.55)$$

Considerando a eq. (2.49), pode-se mostrar que

$$|\psi_\sigma(j, n)|^2 = |t_{\sigma, \sigma}^{(j-\sigma)}|^2 |\psi_\sigma(j-\sigma, n-1)|^2 + |r_{\sigma, -\sigma}^{(j-\sigma)}|^2 |\psi_{-\sigma}(j-\sigma, n-1)|^2 + \Lambda_\sigma(j-\sigma, n-1), \quad (2.56)$$

onde

$$\Lambda_\sigma(j, n) = 2\text{Re} \left[ t_{\sigma, \sigma}^{(j)} r_{\sigma, -\sigma}^{(j)*} \psi_\sigma(j, n) \psi_{-\sigma}^*(j, n) \right]. \quad (2.57)$$

Comparando a relação de recorrência para a probabilidade  $|\psi_\sigma(j, n)|^2$  de encontrar a partícula propagando-se para o sítio  $j$  pelo sentido associado a  $\sigma$ , eq. (2.56), com a relação de recorrência para a distribuição de probabilidades de uma caminhada aleatória clássica unidimensional, eq. (2.4), constatamos que os dois primeiros termos na expressão de  $|\psi_\sigma(j, n)|^2$  na eq. (2.56) são equivalentes a eq. (2.4) com  $|t_{\sigma, \sigma}^{(j-\sigma)}|^2$  e  $|r_{\sigma, -\sigma}^{(j-\sigma)}|^2$  desempenhando o papel da probabilidade da partícula saltar entre dois vértices; o terceiro termo na eq. (2.56) corresponde a processos de interferência que a função de onda sofre durante a evolução temporal do sistema, e não possui análogo clássico [132].

Assumindo que os estados de base  $\{|\sigma, j\rangle\}$  são autovetores do operador posição  $\hat{X}$  e do operador  $\hat{\sigma}_z$  (componente  $z$  das matrizes de Pauli), tal que

$$\hat{X}|\sigma, j\rangle = j|\sigma, j\rangle \text{ e } \hat{\sigma}_z|\sigma, j\rangle = \sigma|\sigma, j\rangle \quad (2.58)$$

e que o parâmetro de rede  $\ell = 1$ , então os valores esperados de funções dos operadores  $\hat{X}$  e  $\hat{\sigma}_z$  são dados, respectivamente, por

$$\langle f(\hat{X}) \rangle = \langle \Psi_n | \mathcal{F}(\hat{X}) | \Psi_n \rangle = \sum_j P_v(j, n) \mathcal{F}(j) \quad (2.59)$$

e

$$\langle g(\hat{\sigma}_z) \rangle = \langle \Psi_n | \mathcal{G}(\hat{\sigma}_z) | \Psi_n \rangle = \sum_{\sigma=\pm} P_c(\sigma, t) \mathcal{G}(\sigma). \quad (2.60)$$

Um aspecto interessante na evolução das caminhadas quânticas consiste na maneira que a função de onda sofre os processos de interferência. Considere que na etapa de tempo  $n$  o estado do sistema seja dado por

$$|\psi_n\rangle = \underbrace{\sum_{\sigma, j} \mathcal{A}_{(\sigma, 2j)} |\sigma, 2j\rangle}_{\text{componente par}} + \underbrace{\sum_{\sigma', j'} \mathcal{A}_{(\sigma', 2j'+1)} |\sigma', 2j'+1\rangle}_{\text{componente ímpar}} \quad (2.61)$$

onde as superposições de estados do primeiro termo representam vértices com coordenada  $j$  par e a do segundo representam vértices com coordenada  $j$  ímpar. Após um passo de

tempo, temos

$$|\Psi_{n+1}\rangle = |\Psi_{n+1}^{par}\rangle + |\Psi_{n+1}^{impar}\rangle, \quad (2.62)$$

com

$$|\Psi_{n+1}^{par}\rangle = \sum_{\sigma,j} \sum_{\sigma''} \mathcal{A}_{(\sigma,2j)} \Gamma_{\sigma''\sigma}^{(2j)} |\sigma'', 2j + \sigma''\rangle \quad (2.63)$$

e

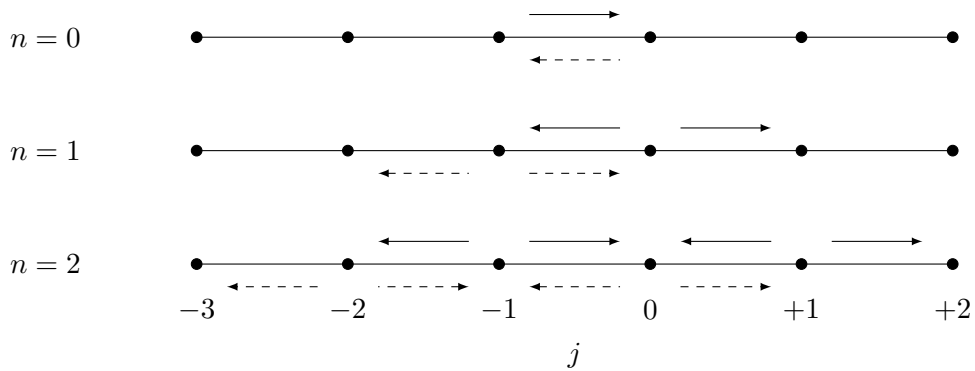
$$|\Psi_{n+1}^{impar}\rangle = \sum_{\sigma',j'} \sum_{\sigma'''} \mathcal{A}_{(\sigma',2j'+1)} \Gamma_{\sigma'''\sigma'}^{(2j'+1)} |\sigma''', 2j' + 1 + \sigma'''\rangle, \quad (2.64)$$

onde as eqs. (2.63) e (2.64) foram obtidas a partir da eq. (2.40).

Analisando as equações acima, se o estado do sistema é dado pela eq. (2.61), durante sua evolução temporal a componente par não interfere com a componente ímpar, pois os estados associados a sítios com  $j$  par (ímpar), na etapa de tempo  $n$ , evoluem para estado associados a vértices com  $j$  ímpar (par), no passo de tempo  $n + 1$ . Isto ocorre devido a topologia da rede 1D, uma vez que para um dado vértice com  $j$  par seus vizinho adjacentes possuem, necessariamente, coordenada  $j$  ímpar, e vice-versa, veja a fig. (2.11).

Finalmente, quando o estado inicial do sistema for uma superposição de estados de base com  $j$  par (ímpar), a superposição de estados resultantes da evolução do sistema no passo de tempo  $n$  vai ter apenas componentes com  $j$  par (ímpar) para os passos de tempo  $n$  par (ímpar) e componentes com  $j$  ímpar (par) para  $n$  ímpar (par). Além disso, quando o estado inicial é uma superposição de estados com  $j$ 's de paridade diferentes, podemos encarar a evolução temporal dessa caminhada como dois processos independentes, pois estados resultantes de saltos de sítios com paridades distintas não interferem entre si, ou seja,

$$\langle \Psi_n^{par} | \Psi_n^{impar} \rangle = 0. \quad (2.65)$$



**Figura 2.11:** Representação geométrica dos primeiros passos da evolução de uma CQE com o estado inicial dado pela eq. (2.61). Observe que os estados “tracejados” não interferem com os estados “contínuos”, pois não existem setas tracejadas e contínuas saindo (ou entrando) de um mesmo vértice.



## 2.5 Matriz de Espalhamento

As matrizes de espalhamento que definem o operador evolução temporal devem ser unitárias. Assim, para parametrizar tais matrizes em termos de parâmetros reais, vamos considerar as matrizes que constituem o grupo  $SU(2)$ , cujo o determinante é igual a um e sua representação genérica é dada por

$$\hat{\Gamma}_{SU(2)} = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}, \quad (2.66)$$

onde  $a$  e  $b$  são números complexos denominados de *parâmetros de Cayley-Klein*, que foram introduzidos por Felix Klein no final do Século XIX para realizar integrações no estudo da rotação de um giroscópio [133]. Assim temos

$$\text{Det } \hat{\Gamma}_{SU(2)} = \begin{vmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{vmatrix} = |a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (2.67)$$

Logo, da eq. (2.67) é fácil verificar a unitariedade de  $\hat{\Gamma}_{SU(2)}$  uma vez que

$$\hat{\Gamma}_{SU(2)} \hat{\Gamma}_{SU(2)}^\dagger = \hat{\Gamma}_{SU(2)}^\dagger \hat{\Gamma}_{SU(2)} = \begin{pmatrix} |a|^2 + |b|^2 & 0 \\ 0 & |a|^2 + |b|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.68)$$

Os parâmetros de Cayley-Klein podem ser escritos na forma

$$a = x + iy, \quad b = u + iv \quad (2.69)$$

onde  $x$ ,  $y$ ,  $u$  e  $v$  são reais. Portanto, da eq. (2.67) pode-se mostrar que são necessários apenas três parâmetros reais para descrever as matrizes do grupo  $SU(2)$  [41, 134], uma vez que a eq. (2.67) resulta em

$$x^2 + y^2 + u^2 + v^2 = 1. \quad (2.70)$$

Da equação de vínculo acima sempre podemos escrever um desses quatro parâmetros reais em termos dos outros três, por exemplo  $x^2 = 1 - y^2 - u^2 - v^2$ . Retornando ao parâmetros  $a$  e  $b$ , vamos assumir que

$$a = e^{i(\varphi-\phi)} \sin \theta \quad (2.71)$$

e

$$b = e^{i(\phi+\varphi)} \cos \theta, \quad (2.72)$$

onde  $\theta, \phi, \varphi \in [-\pi, \pi]$ . Desta maneira, a matriz genérica do grupo  $SU(2)$  pode ser expressa por

$$\hat{\Gamma}_{SU(2)} = \begin{pmatrix} e^{i(\varphi-\phi)} \sin \theta & e^{i(\phi+\varphi)} \cos \theta \\ -e^{-i(\phi+\varphi)} \cos \theta & e^{-i(\varphi-\phi)} \sin \theta \end{pmatrix}. \quad (2.73)$$

Para contemplar certas classes de matrizes que utilizaremos na sequência, sem prejuízo para o desenvolvimento das CQEs, vamos trocar as colunas na matriz da eq. (2.73), pois cada troca de linhas ou colunas em uma matriz implica na troca de sinal de seu determinante, de maneira que a matriz resultante continua sendo unitária. Além disso, para simplificar a notação, suprimimos o índice  $j$ , entretanto não devemos perder a noção os elementos da matriz de espalhamento podem variar com tal índice, pois a matriz de espalhamento é definida localmente em cada sítio da rede de maneira independente. Logo,

$$\hat{\Gamma}_{(\theta,\phi,\varphi)} = \begin{pmatrix} e^{i(\phi+\varphi)} \cos \theta & e^{i(\varphi-\phi)} \sin \theta \\ e^{-i(\varphi-\phi)} \sin \theta & -e^{-i(\phi+\varphi)} \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (2.74)$$

Assim, considerando a eq. (2.40), a ação do operador evolução, caracterizado pela matriz  $\hat{\Gamma}_{(\theta,\phi,\varphi)}$ , nos estados de base é dada por

$$\hat{U}_{(\theta,\phi,\varphi)}|\pm, j\rangle = e^{\mp i(\varphi-\phi)} \sin \theta |\mp, j \mp 1\rangle \pm e^{\pm i(\phi+\varphi)} \cos \theta |\pm, j + \pm 1\rangle. \quad (2.75)$$

Na matriz da eq. (2.74), o parâmetro  $\theta$  é responsável pelo controle da probabilidade da partícula ser transmitida ou refletida. Por exemplo, para  $\theta = 0$  temos 100% de probabilidade da partícula ser transmitida pelos vértices. Neste caso a partícula se propaga livremente pela rede. O caso antagônico é obtido para  $\theta = \pi/2$ , que fornece 100% de probabilidade de ocorrer uma reflexão. Assim, a partícula fica confinada nas arestas associadas ao estado inicial do sistema. Um caso intermediário ocorre para  $\theta = \pi/4$ , que resulta em iguais probabilidades da partícula ser refletida ou transmitida. Os parâmetros  $\phi$  e  $\varphi$  são responsáveis, dependendo do estado inicial do sistema, pela simetria ou assimetria nas distribuições de probabilidades [41].

Consideremos ainda que as CQEs possuam simetria de reversão temporal [38, 135], ou mais apropriadamente reversão de movimento [136], na caracterização da matriz de espalhamento. Segundo E. Wigner e J. Griffin [135], a simetria de reversão temporal em um sistema é caracterizada por quatro operações que, se realizadas sucessivamente em um estado arbitrário do sistema levam ao próprio estado original. Tais operações, em ordem, são uma inversão temporal, a evolução em um intervalo de tempo  $n$ , uma nova inversão temporal e por último uma nova evolução por um intervalo de tempo  $n$ . Assim,

matematicamente temos, no caso das CQs,

$$\hat{U}^n \hat{\Theta} \hat{U}^n \hat{\Theta} = \hat{\mathbf{1}}, \quad (2.76)$$

ou de maneira equivalente

$$\hat{U}^n \hat{\Theta} = \hat{\Theta} \hat{U}^{-n} = \hat{\Theta} (\hat{U}^\dagger)^n, \quad (2.77)$$

onde  $\hat{\Theta}$  é o operador de reversão temporal que é anti-unitário, isto é,

$$\Theta(c_1|\alpha\rangle) = c_1^* \Theta|\alpha\rangle, \quad (2.78)$$

onde  $\Theta|\alpha\rangle$  é o estado reverso no tempo. Por exemplo, se  $|\alpha\rangle = |p\rangle$  é um autovetor do operador *momentum*, deveremos esperar que  $\Theta|p\rangle = |-p\rangle$  a menos de um fator de fase [136]. Além disso, devemos ter

$$\hat{\Theta} \hat{\Theta} = \hat{\Theta}^2 = \hat{\mathbf{1}}. \quad (2.79)$$

Logo, para  $n = 1$ , multiplicando  $\hat{U}^\dagger$  pela direita na eq. (2.76), temos que

$$\underbrace{\hat{U}^\dagger \hat{U}}_{\hat{\mathbf{1}}} \hat{\Theta} \hat{U} \hat{\Theta} = \hat{U}^\dagger \therefore \hat{\Theta} \hat{U} \hat{\Theta} = \hat{U}^\dagger. \quad (2.80)$$

Considerando uma CQEs em uma dimensão, a ação do operador de reversão temporal em um estado é definida como sendo a inversão do sentido de propagação da partícula na aresta considerada [38] (reversão de movimento). Assim,

$$\hat{\Theta}|\sigma, j\rangle = |-\sigma, j - \sigma\rangle. \quad (2.81)$$

Portanto, levando em conta as ações de  $\hat{U}$  e  $\hat{\Theta}$  em um estado de base, eqs. (2.40) e (2.81), e considerando a eq. (2.78), temos que

$$\hat{\Theta} \hat{U} \hat{\Theta} |\sigma, j\rangle = \hat{U}^\dagger |\sigma, j\rangle = t_{-\sigma, -\sigma}^{(j-\sigma)*} |\sigma, j - \sigma\rangle + r_{\sigma, -\sigma}^{(j-\sigma)*} |-\sigma, j - \sigma\rangle. \quad (2.82)$$

Da eqs. (2.41),

$$\hat{U}^\dagger |\sigma, j\rangle = t_{\sigma, \sigma}^{(j-\sigma)*} |\sigma, j - \sigma\rangle + r_{\sigma, -\sigma}^{(j-\sigma)*} |-\sigma, j - \sigma\rangle, \quad (2.83)$$

logo, comparando as eqs. (2.82) e (2.83), se as CQEs possuem invariância de reversão temporal, então suas amplitudes de espalhamento associadas aos processos de transmissão devem satisfazer a

$$t_{++}^{(j)} = t_{--}^{(j)}. \quad (2.84)$$

## 2.6 Exemplificando as Caminhadas Quânticas em 1D

Nesta seção apresentamos alguns exemplos das CQEs. Iniciamos com o exemplo tradicionalmente conhecido como o caminho de Hadamard, onde realizamos uma comparação com as CAC. Em seguida, realizamos considerações a respeito da relação entre a evolução do sistema e o estado inicial e finalizamos a seção com uma discussão a respeito da influência das matrizes de espalhamento no comportamento das CQEs.

### 2.6.1 O Caminho de Hadamard

As CQs em tempo discreto possuem grande aplicabilidade na área de informação e computação quântica. Assim, é usual definir os elementos de matriz de espalhamento de maneira a associá-los aos operadores de portas lógicas quânticas [137]. Isto explica, por exemplo, a frequente escolha na literatura da matriz de Hadamard, cuja versão  $2 \times 2$  é frequentemente aplicada para a manipulação de  $q$ -bits [137] e amplamente utilizada para a exemplificação das CQs em tempo discreto em uma dimensão [28, 36]. Outras aplicações das matrizes de Hadamard são no campo de teoria de informação [138], teoria de designe algébrico [138–140], processamento de sinais, codificações e criptografia [141, 142]. A matriz de Hadamard é uma matriz unitária quadrada de ordem  $D$  (que deve ser 1, 2 ou um múltiplo de 4), que além de um fator de normalização dado por  $\sqrt{D}$ , suas entradas são  $+1$  ou  $-1$  [140, 141]. Sua versão de ordem dois pode ser obtida fazendo  $\theta = \pi/4$  e  $\phi = \varphi = 0$  na eq. (2.74), ou seja,

$$\hat{\Gamma}_{HAD} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.85)$$

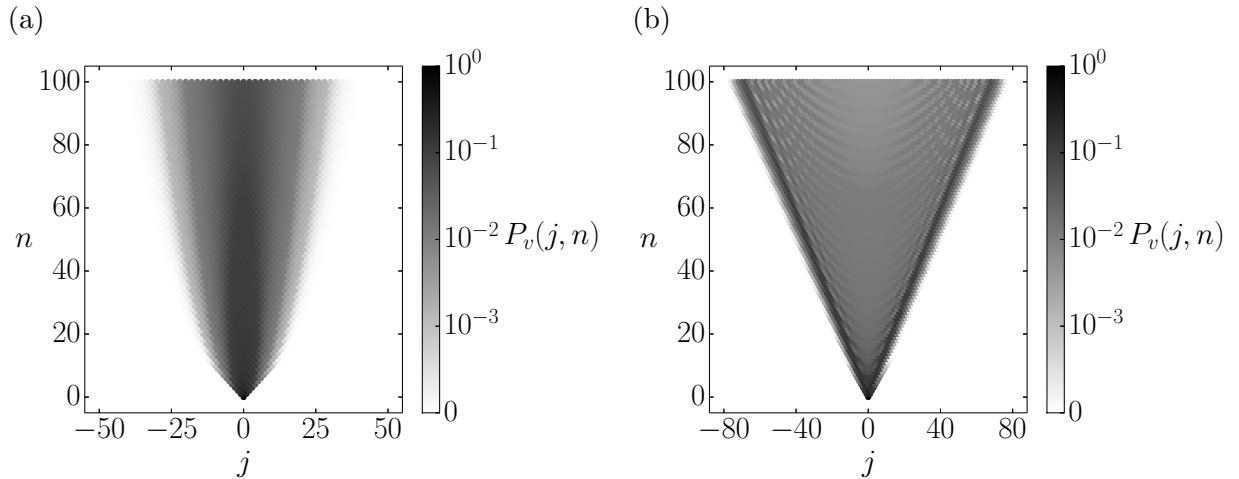
Portanto, da eq. (2.75), temos

$$\hat{U}_{HAD}|\pm, j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\mp, j \mp 1\rangle \pm |\pm, j \pm 1\rangle). \quad (2.86)$$

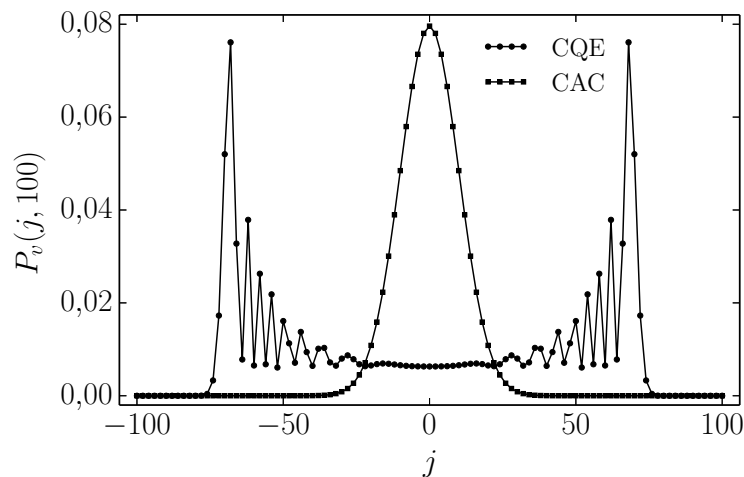
Na fig. (2.12) apresentamos as distribuições de probabilidades  $P_v(j, n)$  de encontrar a partícula propagando-se para um dado sítio  $j$ . Na fig. (2.13) temos a mesma quantidade, mas para  $n = 100$  passos. Tais gráficos são dados para uma CQEs no caminho de Hadamard cujo estado inicial é dado por

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, 0\rangle + i|-, 0\rangle), \quad (2.87)$$

e para uma CAC com iguais probabilidades de a cada sorteio da moeda ser encontrado cara ou coroa, isto é,  $p = q = 1/2$ , partindo da origem. A eq. (2.87) corresponde a uma superposição de estados que descrevem a partícula convergindo para origem pela direita e esquerda com iguais probabilidades de serem observados. Para a CQE  $P_v(j, n)|_{CQE}$  é dada pela eq. (2.54), com  $|\Psi_n\rangle$  obtido através da simulação numérica da eq. (2.27). Para a CAC,  $P_v(j, n)|_{CAC}$  é dada analiticamente pela eq. (2.11).



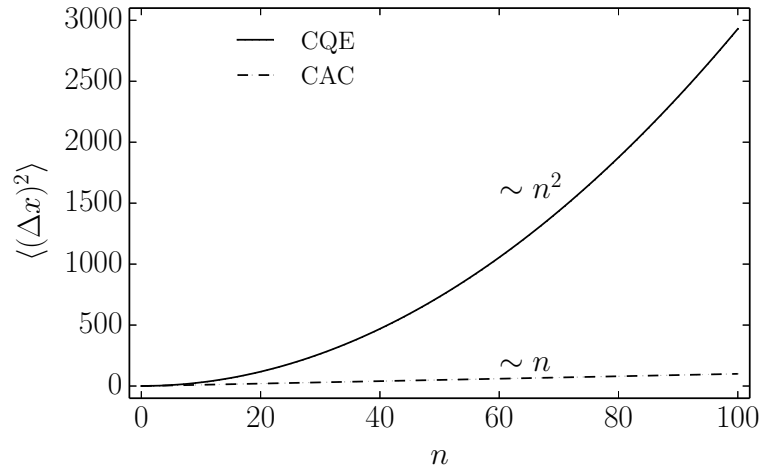
**Figura 2.12:** Distribuições de probabilidades, em (a) para uma CAC e em (b) para uma CQE em função dos passos de tempo  $n$  e das posições  $j$ . Observe que enquanto para a CAC as probabilidades tende a se concentrar próximo a origem (distribuição gaussiana), para a CQE ela tende a se afastar da origem (distribuição bimodal).



**Figura 2.13:** Distribuições de probabilidades para uma CQE e para uma CAC após 100 passos de tempo. Somente as probabilidades para  $j$  par estão representadas, uma vez que para  $j$  ímpar  $P_v(j, 100)$  são nulas.

Analisando os gráficos das figs. (2.12) e (2.13), observamos que o comportamento das distribuições de probabilidades para a CAC e a CQE são radicalmente distintos. Enquanto que para a CAC ela é uma distribuição gaussiana centrada na posição  $j = 0$ ,

para a CQE ela é uma distribuição bimodal cujo valor máximo tende a se afastar da origem e se distribui no intervalo de posições  $[-n/\sqrt{2}, n/\sqrt{2}]$  [30]. Isso ocorre devido aos processos de interferência, que são recorrentes nas CQEs, o que constitui uma assinatura de um fenômeno quântico [28]. Tais comportamento podem ser melhor visualizados na fig. (2.13), onde apresentamos  $P_v(j, n)$  após 100 passos de tempo.



**Figura 2.14:** Comportamento do DQM para uma CQE, obtidos a partir dos resultados da simulação numérica da eq. (2.27), e uma CAC, obtidos a partir da eq. (2.19), onde estamos assumindo que o parâmetro de rede  $\ell = 1$ .

Na fig. (2.14), mostramos o comportamento do DQM, eq. (2.15) para esses dois sistemas. Observa-se que essa quantidade varia mais rapidamente para a CQE em relação a CAC, uma vez que  $\langle(\Delta x)^2\rangle_{CAC} \sim n$  e para a CQE  $\langle(\Delta x)^2\rangle_{CQE} \sim n^2$ . O aumento quadrático no DQM para a CQE é uma consequência direta dos processos de interferência que a função de onda sofre devido à coerência da evolução quântica do sistema [132].

Na base dos autovetores do operador posição a função de onda, para o caso quântico, no passo de tempo  $n$  é dada por

$$|\Psi_n\rangle = \sum_j \sum_{\sigma=\pm} \psi_\sigma(j, n) |\sigma, j\rangle, \quad (2.88)$$

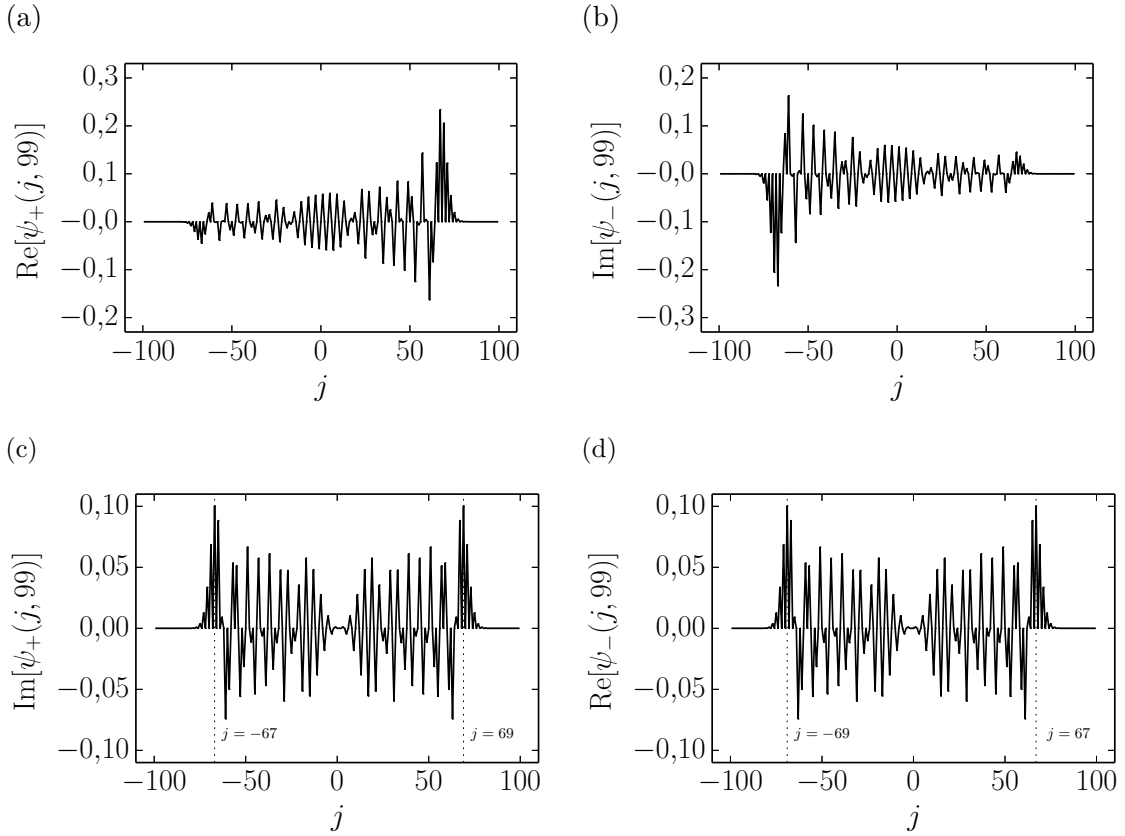
onde  $\psi_\sigma(j, n) = \langle\sigma, j|\Psi_n\rangle$ . Assim, devido a simetria que a distribuição de probabilidades exhibe, verificamos numericamente que neste caso

$$\text{Re}[\psi_\sigma(j, n)] = (-1)^n \text{Im}[\psi_{-\sigma}(-j, n)] \quad (2.89)$$

e

$$\text{Im}[\psi_\sigma(j, n)] = (-1)^{n+1} \text{Re}[\psi_{-\sigma}(-j, n)], \quad (2.90)$$

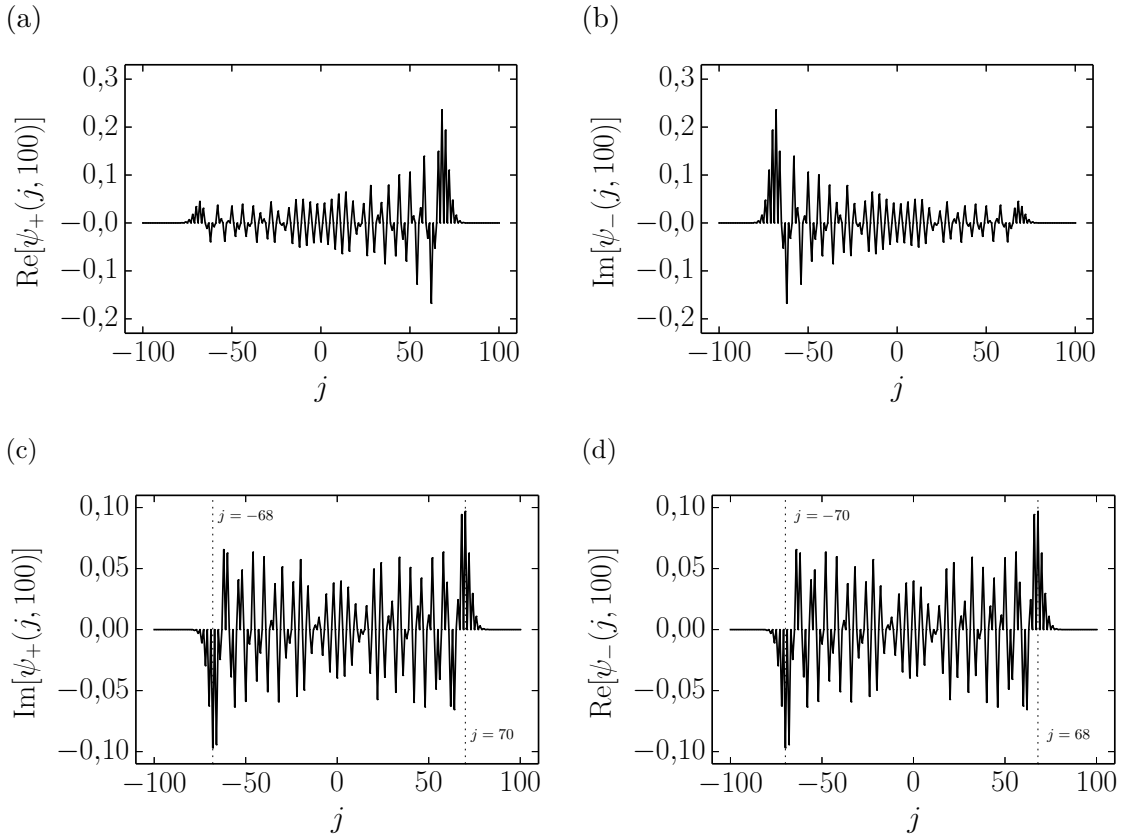
onde  $\text{Re}[z]$  e  $\text{Im}[z]$  denotam, respectivamente, as partes real e imaginária do número complexo  $z$ , veja as figs. (2.15) e (2.16). Demonstraremos essas relações analiticamente no capítulo (3) na página 57.



**Figura 2.15:** Gráficos das partes real e imaginária das componentes da função de onda após 99 passos de tempo, ilustrando as eqs. (2.89) e (2.90).

As relações entre as partes real e imaginária das componente da função de onda dada pelas eqs. (2.89) e (2.90) é um reflexo da combinação do estado inicial, eq. (2.87), com o operador evolução que é caracterizado pela matriz de Hadamard, eq. (2.85). Nas figs. (2.15) e (2.16), os gráficos dessas quantidades, respectivamente, para os passos tempo  $n = 99$  e  $n = 100$ .

Outra característica interessante que esse exemplo de CQE exhibe é o comportamento da função de onda em função das posições  $j$  de cada sítio. Observe que para  $n = 99$  a parte real de  $\psi_+$ , fig. (2.15a), e a parte imaginária de  $\psi_-$ , fig. (2.15b), são assimétricas, enquanto que a parte imaginária de  $\psi_+$ , fig. (2.15c) e a parte real de  $\psi_-$ , fig. (2.15d), são simétricas. Já para  $n = 100$  a parte real de  $\psi_+$ , fig. (2.16a), e a parte imaginária de  $\psi_-$ , fig. (2.16b), são assimétricas, enquanto que a parte imaginária de  $\psi_+$ , fig. (2.16c) e a parte real de  $\psi_-$ , fig. (2.16d), são antissimétricas.



**Figura 2.16:** Gráficos das partes real e imaginária das componentes da função de onda após 100 passos de tempo, ilustrando as eqs. (2.89) e (2.90).

Tomando-se o módulo quadrado das componentes da função de onda e considerando as eqs. (2.89) e (2.90), verifica-se que

$$|\psi_{\sigma}(j, n)|^2 = |\psi_{-\sigma}(-j, n)|^2. \quad (2.91)$$

Logo, considerando que a probabilidade de encontrar a partícula em um estado com  $\sigma = \pm 1$ , é dada por

$$P_c(\sigma, n) = \sum_j |\langle \sigma, j | \Psi_n \rangle|^2 = \sum_j |\psi_{\sigma}(j, n)|^2, \quad (2.92)$$

então a eq. (2.91) implica em

$$P_c(+, n) = P_c(-, n). \quad (2.93)$$

Usando o fato que a soma total das probabilidades deve ser igual a um, chegamos no seguinte sistema de equações:



$$\begin{cases} P_c(+, n) + P_c(-, n) = 1, \\ P_c(+, n) - P_c(-, n) = 0, \end{cases} \quad (2.94)$$

cuja solução é dada por

$$P_c(+, n) = P_c(-, n) = 1/2. \quad (2.95)$$

Este resultado é análogo a 50% de probabilidade de sortear uma moeda e encontrar cara ou coroa como no caso da CAC. Isso ocorre porque a distribuição de probabilidades é simétrica. Veremos mais tarde que, ao considerar um estado inicial cuja evolução temporal resulte em uma distribuição de probabilidades não-simétrica, a quantidade  $P_c(\sigma, n)$  varia com os passos de tempo.

Considerando que a ação do operador  $\hat{\sigma}_z$  em um estado de base resulta em

$$\hat{\sigma}_z|\sigma, j\rangle = \sigma|\sigma, j\rangle, \quad (2.96)$$

é fácil verificar que o valor médio e a variância de  $\hat{\sigma}_z$  são dadas, respectivamente, por

$$\langle\sigma\rangle = P_c(+, n) - P_c(-, n) \quad (2.97)$$

e

$$\langle(\Delta\sigma)^2\rangle = \langle\hat{\sigma}_z^2\rangle - \langle\hat{\sigma}_z\rangle^2 = 4P_c(+, n)P_c(-, n). \quad (2.98)$$

Observe que para este exemplo de CQE o valor médio e a variância de  $\hat{\sigma}_z$  são idênticos ao valor médio e a variância da variável aleatória  $\sigma_n$  para uma CAC imparcial, uma vez que nesses casos  $P_c(+, n) = P_c(-, n) = p = q = 1/2$ ,

$$\langle\sigma\rangle_{CQE} = \langle\sigma\rangle_{CAC} = 0 \quad (2.99)$$

e

$$\langle(\Delta\sigma)^2\rangle_{CQE} = \langle(\Delta\sigma)^2\rangle_{CAC} = 1, \quad (2.100)$$

compare as eqs. (2.97) e (2.98) com as eqs. (2.20) e (2.21).

Finalmente, podemos perguntar como o estado do sistema em um passo de tempo qualquer está correlacionado com o estado inicial? Podemos responder esta pergunta construindo o produto interno entre o estado inicial e o estado no passo de tempo  $n$ , isto é

$$C(n) = \langle\Psi_0|\Psi_n\rangle = \langle\Psi_0|U^n|\Psi_0\rangle, \quad (2.101)$$

que é chamado de amplitude de correlação. O módulo de  $C(n)$  fornece uma medida

quantitativa da semelhança entre os estados em passos de tempo distintos [136]. Assim, quanto mais próximo de um é o módulo de  $C(n)$ , mais semelhantes são os estados  $|\Psi_0\rangle$  e  $|\Psi_n\rangle$ . Logo, considerando o estado inicial dado pela eq. (2.87), isto é,

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, 0\rangle + i|-, 0\rangle), \quad (2.102)$$

então

$$C(n) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_+(0, n) - i\psi_-(0, n)), \quad (2.103)$$

Assumindo que

$$\psi_+(0, n) = a + ib \quad (2.104)$$

e

$$\psi_-(0, n) = c + id, \quad (2.105)$$

onde  $a, b, c$  e  $d$  são reais, mostra-se que o módulo quadrado da eq. (2.103) é dado por

$$|C(n)|^2 = \frac{1}{2} (a^2 + b^2 + c^2 + d^2 + 2ad - 2bc). \quad (2.106)$$

Além disso, usando as relações das eqs. (2.89) e (2.90) obtemos

$$|C(n)|^2 = a^2 (1 + (-1)^n) + b^2 (1 - (-1)^{n+1}) = \begin{cases} 2(a^2 + b^2) & \text{se } n \text{ é par,} \\ 0 & \text{se } n \text{ é ímpar.} \end{cases} \quad (2.107)$$

Finalmente, considerando que a probabilidade de encontrar a partícula na posição 0 é dada por

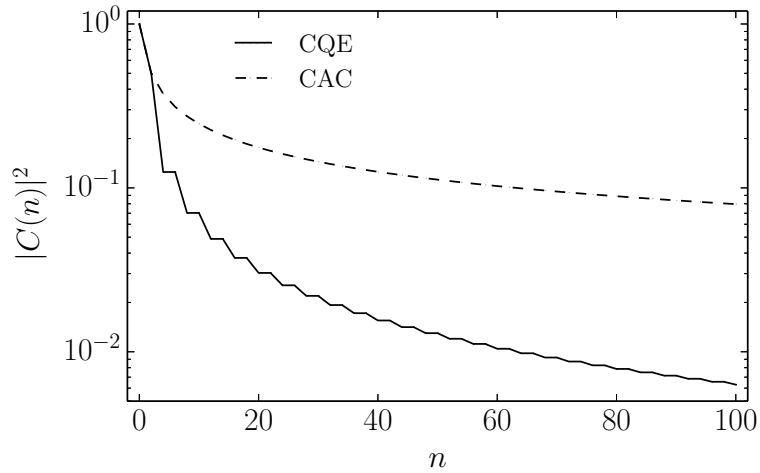
$$P_v(0, n) = |\psi_+(0, n)|^2 + |\psi_-(0, n)|^2 = a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = 2(a^2 + b^2), \quad (2.108)$$

onde obtemos a última igualdade na expressão acima usando as eqs. (2.89) e (2.90), resulta que para os passos de tempo par

$$|C(n_{par})|^2 = P_v(0, n_{par}). \quad (2.109)$$

Na fig. (2.17) mostramos o gráfico de  $|C(n)|^2$  em função dos passos de tempo para a CAC e a CQE exemplificadas acima. Assim, seguindo a eq. (2.109), admitimos que para a CAC,  $|C(n)|^2$  é dado pela probabilidade de encontrar a partícula na origem da rede. Desta forma, observa-se que  $|C(n)|^2$  decai mais rapidamente para a CQE em relação a CAC. Este fato é um reflexo direto do comportamento da distribuição de probabilidades para essas caminhadas, uma vez que, diferentemente do caso clássico, no quântico os picos

em  $P_v(j, n)$  tendem a se afastar da origem, veja a fig. (2.13).



**Figura 2.17:** Comportamento do módulo quadrado da função de correlação entre o estado inicial e um estado no passo de tempo  $n$  para uma CAC e uma CQE. Somente os valores  $|C(n)|^2$  para  $n$  par estão apresentadas no gráfico, uma vez que para  $n$  ímpar essa quantidade é nula. Neste caso  $|C(n)|^2$  para a CQE é igual a probabilidade da partícula ser encontrada na origem, por isso que para a CAC definimos  $|C(n)|^2 = P_v(0, n)|_{CAC}$ . Além disso, para os quatro primeiros passos  $|C(n)|^2$  possui o mesmo valor para os dois sistemas, clássico e quântico. Outra aspecto interessante no caso da CQE reside no fato que para  $n > 2$   $|C(n)|^2 = |C(n+2)|^2$ , o que dá uma aparência de uma “escada” para a curva de  $|C(n)|^2$ .

## 2.6.2 O Estado de Bloch

O comportamento da evolução das CQEs são dependentes da escolha do estado inicial do sistema e da matriz de espalhamento adotada. Assim, por exemplo, podemos obter uma grande variedade de evoluções considerando uma mesma matriz de espalhamento e variando o estado inicial.

Uma vez que o espaço de Hilbert associado ao grau de liberdade auxiliar,  $\mathcal{H}_c$ , possui somente dois estados de base,  $\{|+\rangle_c, |-\rangle_c\}$ , então um estado genérico nesse espaço vetorial é dado pela combinação linear

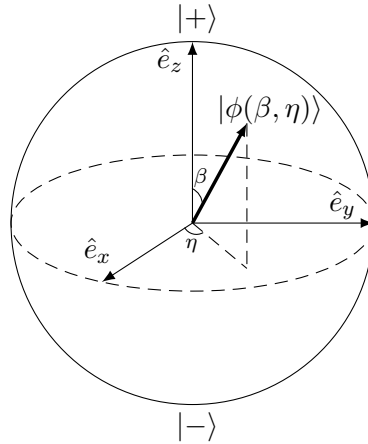
$$|\phi\rangle_c = \alpha_+|+\rangle_c + \alpha_-|-\rangle_c, \quad (2.110)$$

onde  $\alpha_{\pm}$  são números complexos e  $|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1$ . Uma maneira útil de representar a superposição de estados da eq. (2.110) é

$$|\phi(\beta, \eta)\rangle = \cos(\beta/2)|+\rangle_c + e^{i\eta} \sin(\beta/2)|-\rangle_c, \quad (2.111)$$

onde  $0 \leq \beta \leq \pi$  e  $0 \leq \eta \leq 2\pi$  [136, 137]. Os números  $\beta$  e  $\eta$  definem um ponto em uma

esfera unitária, como mostrado na fig. (2.18). Esta esfera é frequentemente chamada de esfera de Bloch.



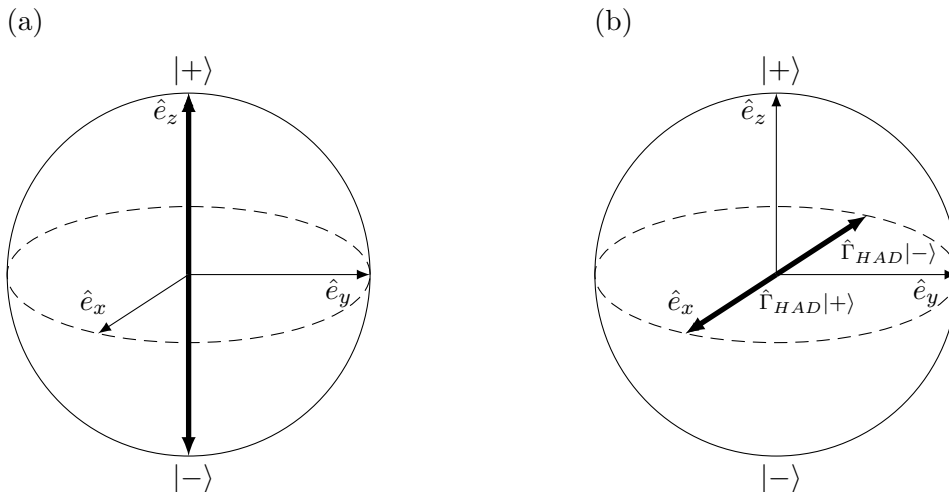
**Figura 2.18:** Esfera de Bloch que representa geometricamente o estado da eq. (2.111).

A representação da esfera de Bloch fornece um meio útil de representar um estado do espaço vetorial  $\mathcal{H}_c$ , e é uma excelente maneira de testar ideias a respeito do sistema físico, sobretudo em informação e computação quântica [137]. Por exemplo, assumindo que

$$|+\rangle_c = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ e } |-\rangle_c = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.112)$$

então a ação da matriz de Hadamard, eq. (2.85), nos estados de base de  $\mathcal{H}_c$  resulta em

$$\hat{\Gamma}_{HAD}|\pm\rangle_c = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_c \pm |-\rangle_c). \quad (2.113)$$



**Figura 2.19:** Representações em (a) dos estado de base base de  $\mathcal{H}_c$  e em (b) da ação da matriz de Hadamard em  $|\pm\rangle$  na esfera de Bloch.

Na fig. (2.19) temos a representação dessa operação na esfera de Bloch. Observe que a ação de  $\hat{\Gamma}_{HAD}$  nos estados de base representa uma “rotação” do estado  $|\pm\rangle$  de  $\pm\pi/2$  em torno do eixo  $\hat{e}_y$ .

Portanto, considerando o estado inicial de uma CQE dado por

$$|\Phi(\beta, \eta, j_0)\rangle = |\phi(\beta, \eta)\rangle_c \otimes |j_0\rangle_p = \cos(\beta/2) |+, j_0\rangle + e^{i\eta} \sin(\beta/2) |-, j_0\rangle, \quad (2.114)$$

onde  $j_0$  representa a posição de um dado sítio da rede, a ação do operador evolução temporal, eq. (2.40), no estado  $|\Phi(\beta, \eta)\rangle$ , considerando a matriz de Hadamard, resulta em

$$\hat{U}_{HAD}|\Phi(\beta, \eta, j_0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\sigma=\pm} (\cos(\beta/2) + \sigma e^{i\eta} \sin(\beta/2)) |\sigma, j_0 + \sigma\rangle. \quad (2.115)$$

Observe que os parâmetros de  $\beta$  e  $\eta$  controlam a simetria da distribuição da função de onda. Assim, considerando que para  $\beta = \pi/2$  o vetor está no equador da esfera de Bloch, a eq. (2.115) se reduz a

$$\hat{U}_{HAD}|\Phi(\pi/2, \eta, j_0)\rangle = \frac{1}{2} ((1 + e^{i\eta}) |+, j_0 + 1\rangle + (1 - e^{i\eta}) |-, j_0 - 1\rangle). \quad (2.116)$$

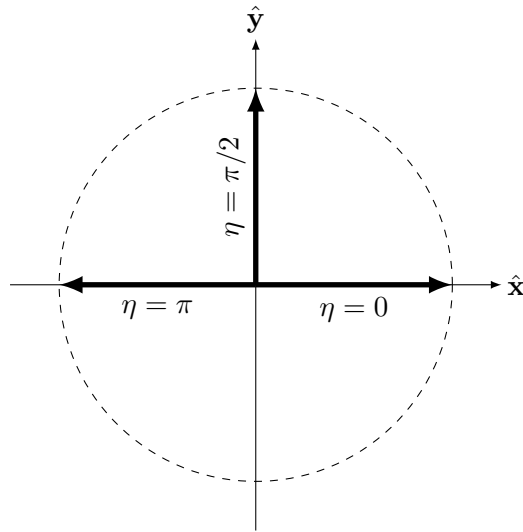
Se  $\eta = 0$ , os processos de interferência associados aos estados com  $\sigma = +1$  são mais recorrentes do que os associados aos estados com  $\sigma = -1$ , uma vez que  $1 + e^{i\eta} = 2$  e  $1 - e^{i\eta} = 0$ , logo a partícula tende a se deslocar para o sentido crescente do  $j$ . O oposto ocorre quando  $\eta = \pi$ , pois  $1 + e^{i\eta} = 0$  e  $1 - e^{i\eta} = 2$ . Para  $\eta = \pi/2$  os processos de interferência associados aos estados com  $\sigma = +1$  e  $\sigma = -1$  são igualmente prováveis, uma vez que  $|1 + i| = |1 - i|$ , o que resulta em uma distribuição de probabilidades simétrica. Esses casos particulares de estados no equador da esfera de Bloch estão representados na fig. (2.20) e matematicamente são dados por

$$|\Psi_0^+\rangle = |\Phi(\pi/2, 0, j_0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, j_0\rangle + |-, j_0\rangle), \quad (2.117)$$

$$|\Psi_0^i\rangle = |\Phi(\pi/2, \pi/2, j_0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, j_0\rangle + i|-, j_0\rangle) \quad (2.118)$$

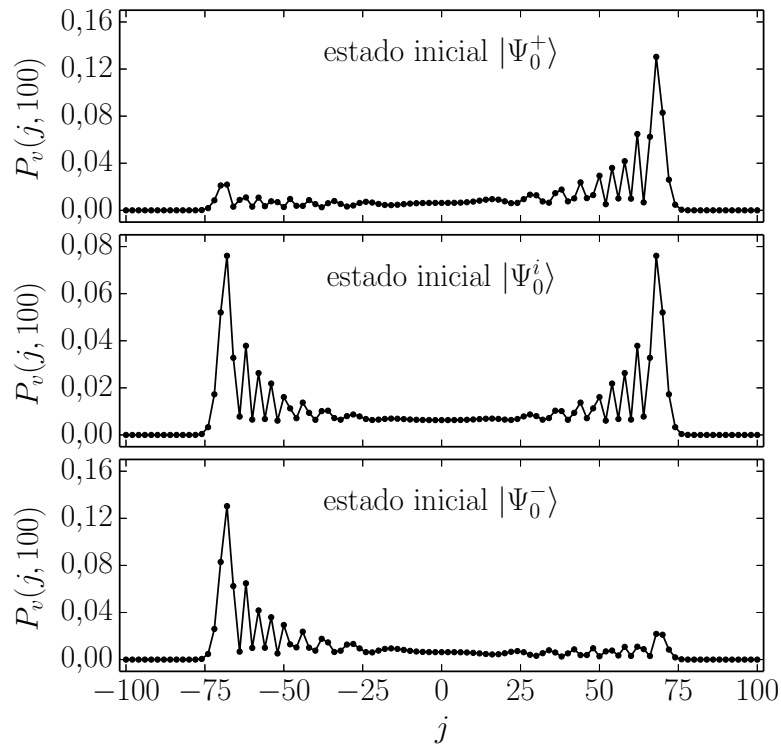
e

$$|\Psi_0^-\rangle = |\Phi(\pi/2, \pi, j_0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, j_0\rangle - |-, j_0\rangle). \quad (2.119)$$



**Figura 2.20:** O círculo tracejado possui raio unitário e representa o equador da esfera de Bloch, isto é,  $\beta = \pi/2$ .

No gráfico da fig. (2.21) temos as distribuições de probabilidades  $P_v(j, n)$  após 100 passos de tempo para evoluções de CQEs cujos estados iniciais são dados pelas eqs. (2.117), (2.118) e (2.119), com o operador evolução temporal caracterizado pela matriz de Hadamard, eq. (2.85).

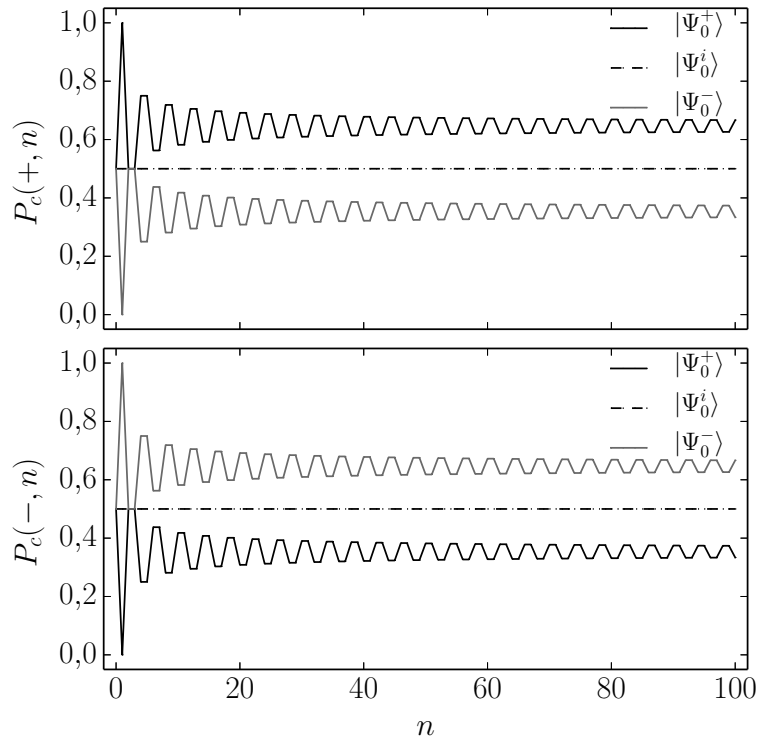


**Figura 2.21:** Distribuições de probabilidades após  $n = 100$  passos de tempo,  $P_v(j, 100)$ , para três CQEs cujos estados iniciais são dados por  $|\Psi_0^+\rangle$ , eq. (2.117),  $|\Psi_0^i\rangle$ , eq. (2.118),  $|\Psi_0^-\rangle$ , eq. (2.119), e com o operador evolução temporal caracterizado pela matriz de Hadamard, eq. (2.85), e  $j_0 = 0$ .

Nas simulações cujas distribuições de probabilidades são dadas na fig. (2.21), o exemplo com o estado inicial dado  $|\Psi_0^i\rangle$  é equivalente a CQEs exemplificada e analisada na seção (2.6.1). Além disso, observamos que para o estado inicial  $|\Psi_0^i\rangle$  a distribuição de probabilidades é simétrica, enquanto que para os estados iniciais  $|\Psi_0^\pm\rangle$  elas são assimétricas, tal que,  $P_v(j, n)$  se desloca para direita, quando o estado inicial é dado por  $|\Psi_0^+\rangle$ , e para a esquerda, quando o estado inicial dado por  $|\Psi_0^-\rangle$ . Ademais, verificamos numericamente que as distribuições de probabilidades para esses dois casos assimétricos estão relacionadas por

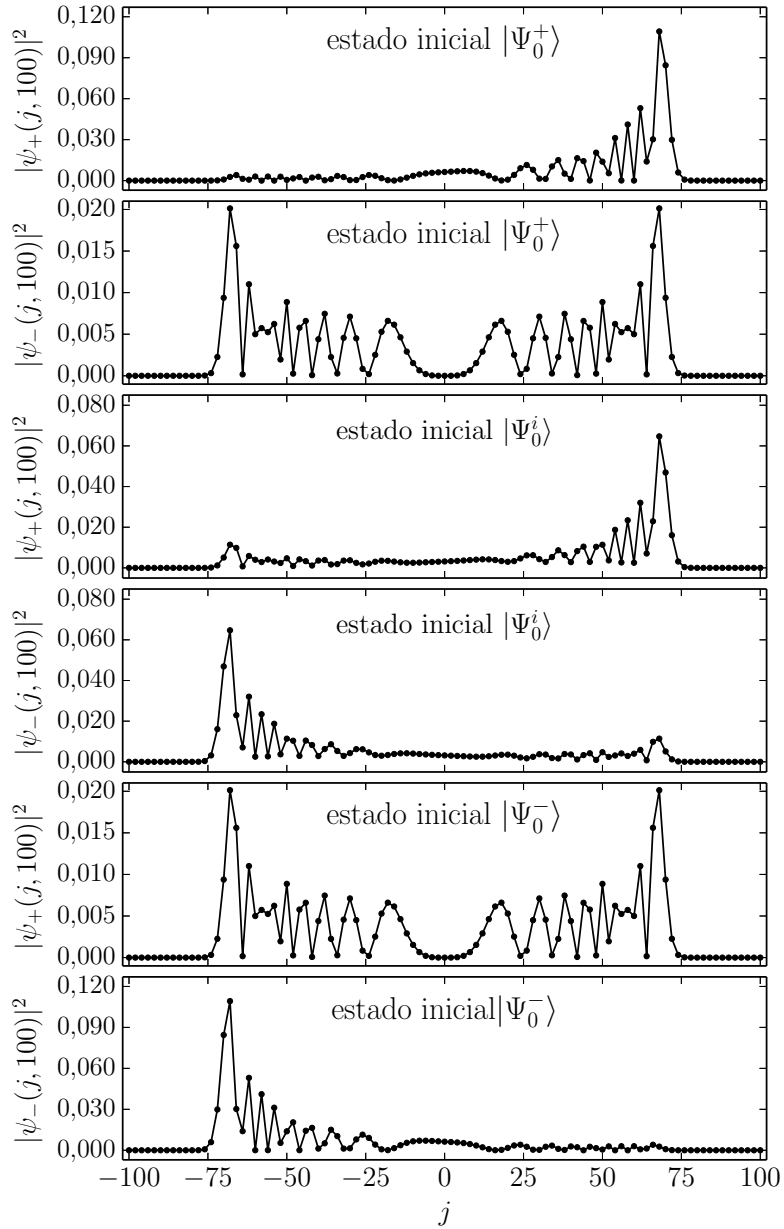
$$P_v^{\Psi_0^+}(j, n) = P_v^{\Psi_0^-}(-j, n). \quad (2.120)$$

A fig. (2.22) apresentamos distribuições de probabilidades  $P_c(\sigma, n)$ , eq. (2.55), de encontrar a partícula em um estado com um determinado valor do número quântico  $\sigma$ , eq. (2.92).



**Figura 2.22:** Distribuições de probabilidades  $P_c(\sigma, n)$  de encontrar a partícula em um estado com  $\sigma = \pm 1$  em função dos passos de tempo, para CQEs cujos estados iniciais são dados por  $|\Psi_0^+\rangle$ , eq. (2.117),  $|\Psi_0^i\rangle$ , eq. (2.118),  $|\Psi_0^-\rangle$ , eq. (2.119), e com o operador evolução temporal caracterizado pela matriz de Hadamard, eq. (2.85).

A análise dos gráficos da fig. (2.22) mostra que  $P_c(\sigma, n)$  possui comportamentos oscilatórios para as evoluções das CQEs cujos estados iniciais são  $|\Psi_0^\pm\rangle$ , eqs. (2.117) e (2.119), e é constante para a CQE cujo estado inicial  $|\Psi_0^i\rangle$ , eq. (2.118). Isso é um reflexo direto do comportamento da evolução da função de onda do sistema, veja a fig. (2.23).



**Figura 2.23:** Comportamento do módulo quadrado das componentes da função de onda após 100 passos de tempo, para CQEs cujos estados iniciais são dados por  $|\Psi_0^+\rangle$ , eq. (2.117),  $|\Psi_0^i\rangle$ , eq. (2.118),  $|\Psi_0^-\rangle$ , eq. (2.119), e com o operador evolução temporal caracterizado pela matriz de Hadamard, eq. (2.85).

Para as evoluções com os estado iniciais  $|\Psi_0^\pm\rangle$ , uma das componentes da função de onda está simetricamente, enquanto que a outra esta assimetricamente distribuída ao longo da rede. Para a evolução com o estado inicial  $|\Psi_0^i\rangle$ , as componentes da função de onda exibem a propriedade de simetria entre si dada pela eq. (2.91), isto é,

$$|\psi_\sigma(j, n)|^2 = |\psi_{-\sigma}(-j, n)|^2.$$

Além disso, da mesma forma que as distribuições de probabilidades espaciais são simetri-



amente opostas para as CQEs cujos estado iniciais são dados pelas eqs. (2.117) e (2.119), verificamos que  $P_c(\sigma, n)$  neste casos estão relacionados por

$$P_c^{\Psi_0^+}(\sigma, t) = P_c^{\Psi_0^-}(-\sigma, t). \quad (2.121)$$

### 2.6.3 Influência da Matriz de Espalhamento

Discutimos na seção (2.5) que para a matriz  $\hat{\Gamma}_{(\theta, \phi, \varphi)}$ , eq. (2.74), o parâmetro  $\theta$  é responsável pelo controle da probabilidade da partícula ser transmitida ou refletida e os parâmetros  $\phi$  e  $\varphi$  são responsáveis pela simetria ou assimetria nas distribuições de probabilidades [41]. Assim, para exemplificar a influência desses parâmetros no comportamento das CQEs, assumimos que o estado inicial do sistema é dado por

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, 0\rangle + i|-, 0\rangle). \quad (2.122)$$

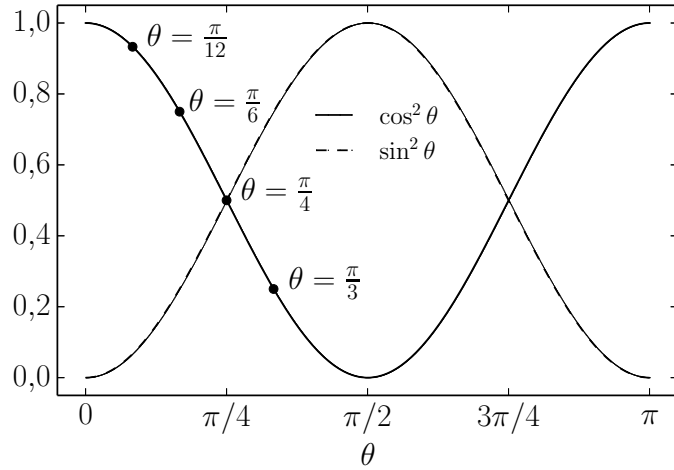
Iniciamos investigando a influência do parâmetro  $\theta$ , para isso, assumimos que  $\phi = 0$  e  $\varphi = 0$  na eq. (2.74). Neste caso a matriz de espalhamento é dada por

$$\hat{\Gamma}_\theta = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (2.123)$$

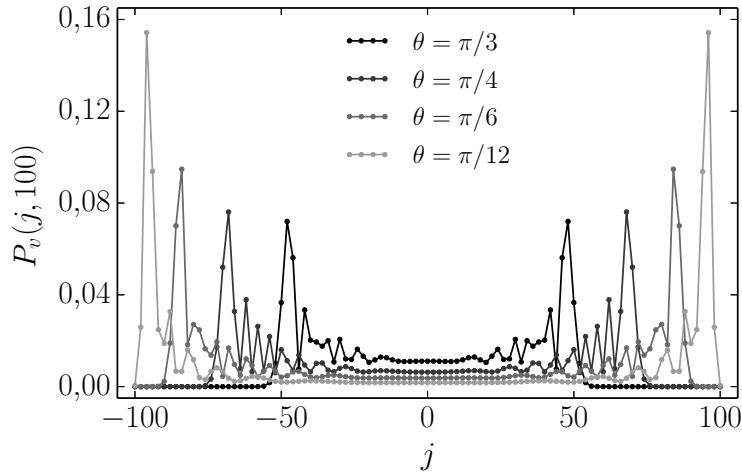
Observe que, para  $\theta = 0$  obtemos a matriz de Hadamard, eq. (2.85). Na fig. (2.24) apresentamos o gráfico dos módulos das amplitudes de transmissão e reflexão da matriz  $\hat{\Gamma}_\theta$  em função do parâmetro  $\theta$ .

Na fig. (2.25) mostramos as distribuições de probabilidades  $P_v(j, n)$  após 100 passos de tempo para diversos valores de  $\theta$ . A combinação das fases  $\phi = \varphi = 0$  com o estado inicial dado na eq. (2.122) gera distribuições de probabilidades  $P_v(j, n)$  simétricas independentemente do valor de  $\theta$ . Ademais, a medida que variamos o valor de  $\theta$ , resultando em um aumento na probabilidade da partícula ser transmitida, a distribuição de probabilidades tende a se espalhar em uma região maior da rede, como discutido na seção anterior. Podemos mostrar que após  $n$  passos de tempo, a distribuição de probabilidades se espalha no intervalo de posições dado por  $[-n \cos \theta, n \cos \theta]$  [30, 41], compare as figs. (2.24) e (2.25).

O comportamento da distribuição de probabilidades influencia diretamente o DQM da partícula, que é dado na fig. (2.26). Assim, quanto mais deslocalizada está a distribuição de probabilidades, maior é o valor de  $\langle \Delta x \rangle^2$ , em outros termos, o DQM varia diretamente



**Figura 2.24:** Gráfico do módulo quadrado das amplitudes de espalhamento dadas pela matriz  $\hat{\Gamma}_\theta$  em função do parâmetro  $\theta$ , onde  $|t_{\sigma\sigma}|^2 = \cos^2 \theta$  e  $|r_{\sigma\sigma'}|^2 = \sin^2 \theta$ . No gráfico destacamos quatro pontos e seus respectivos valores de  $\theta$  que serão usados para exemplificar as CQEs caracterizada pela matriz de espalhamento  $\Gamma_\theta$ .

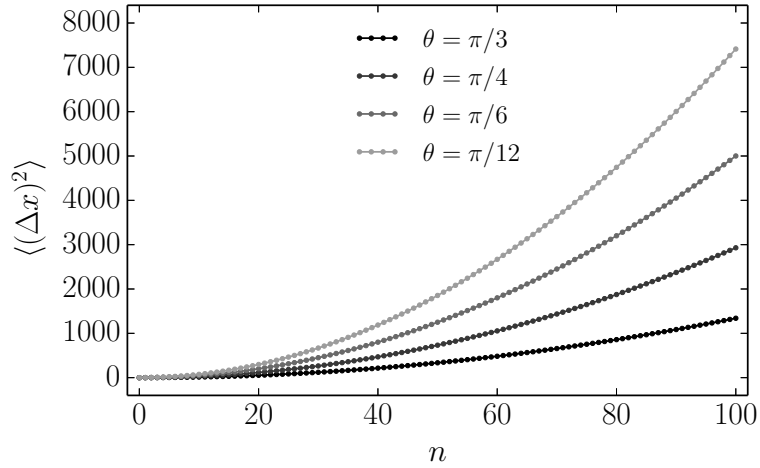


**Figura 2.25:** Distribuições de probabilidades de encontrar a partícula convergindo para um vértice  $j$  após  $n = 100$  passos de tempo para CQEs utilizando a matriz de espalhamento  $\hat{\Gamma}_\theta$ , eq. (2.123), para diversos valores de  $\theta$  e o estados inicial dado pela eq. (2.122).

com a probabilidade da partícula ser transmitida, compare as figs. (2.24) e (2.26). No capítulo 3 derivamos uma expressão analítica para o comportamento do DQM em função do parâmetro  $\theta$ , dada pela eq. (3.96).

O próximo passo foi fixar o valor de  $\theta = \pi/4$  e  $\phi = \varphi$ . Substituindo esses valores na eq. (2.74), a matriz de espalhamento é dada por

$$\hat{\Gamma}_\phi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{2i\phi} & 1 \\ 1 & -e^{-2i\phi} \end{pmatrix}. \quad (2.124)$$



**Figura 2.26:** Comportamento do DQM, em função dos passos de tempo para CQEs utilizando a matriz de espalhamento  $\Gamma_\theta$ , eq. (2.123), para diversos valores de  $\theta$  e o estado inicial dado pela eq. (2.122).

Observe que, para  $\phi = 0$  obtemos a matriz de Hadamard, eq. (2.85), e para  $\phi = \pi/4$  obtemos a matriz simétrica dada por

$$\hat{\Gamma}_{SIM} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i & 1 \\ 1 & i \end{pmatrix}. \quad (2.125)$$

A matriz  $\hat{\Gamma}_\phi$ , eq. (2.124), independentemente do parâmetro  $\phi$ , fornece iguais probabilidades da partícula ser refletida ou transmitida, uma vez que

$$|r_{+-}|^2 = |r_{-+}|^2 = |t_{++}|^2 = |t_{--}|^2 = \frac{1}{2},$$

entretanto, sua ação em um estado de base resulta em uma superposição com uma diferença de fase proporcional a  $\phi$ , ou seja,

$$\hat{U}_\phi |\pm, j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\mp, j \mp 1\rangle \pm e^{\pm 2i\phi} |\pm, j \pm 1\rangle). \quad (2.126)$$

Assim, o parâmetro  $\phi$  impõem diferentes processos de interferência na função de onda, e que dependendo do estado inicial, influencia diretamente a direção preferencial de propagação da função de onda do sistema. A caráter de ilustração, compare as evoluções para os três primeiros passos de duas CQEs caracterizadas pela matriz de Hadamard,  $\phi = 0$  e pela matriz simétrica,  $\phi = \pi/4$ , considerando o mesmo estado inicial, descritas nas tabs. (2.2) e (2.3).

$$\begin{aligned}
|\Psi_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|-, 0\rangle + |+, 0\rangle) \\
|\Psi_1\rangle &= |+, +1\rangle \\
|\Psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, +2\rangle + |-, 0\rangle) \\
|\Psi_3\rangle &= \frac{1}{2} (|+, +3\rangle + |+, +1\rangle + |-, +1\rangle - |-, -1\rangle)
\end{aligned}$$

**Tabela 2.2:** Evolução da função de onda para os três primeiros passos para uma CQEs cujo operador evolução é caracterizado pela matriz de Hadamard, eq. (2.85) e  $\phi = 0$

$$\begin{aligned}
|\Psi_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|-, 0\rangle + |+, 0\rangle) \\
|\Psi_1\rangle &= \frac{1+i}{2} (|-, -1\rangle + |+, +1\rangle) \\
|\Psi_2\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{2}} ((i-1)|-, -2\rangle + (i+1)(|-, 0\rangle + |+, 0\rangle) + (i-1)|+, +2\rangle) \\
|\Psi_3\rangle &= \frac{1}{4} (-(i+1)|-, -3\rangle + 2i|-, -1\rangle + (i-1)(|+, -1\rangle + |-, +1\rangle) + 2i|+, +1\rangle - (i-1)|+, +3\rangle)
\end{aligned}$$

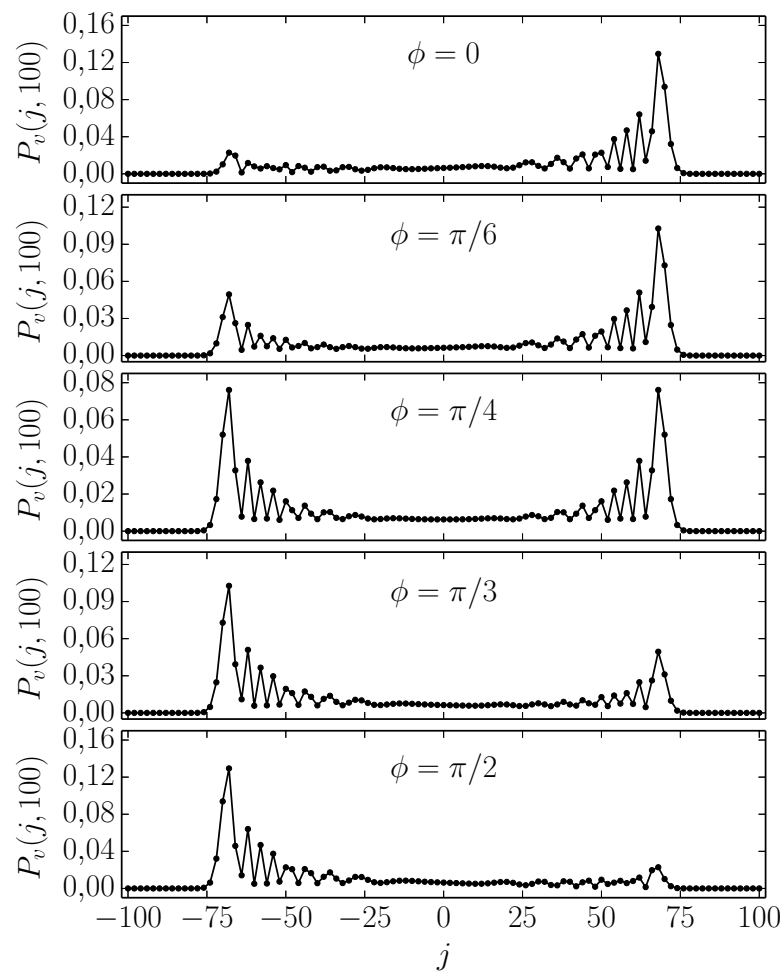
**Tabela 2.3:** Evolução da função de onda para os três primeiros passos para uma CQEs cujo operador evolução é caracterizado pela matriz simétrica, eq. (2.125) e  $\phi = \pi/4$ .

Observe que a matriz de Hadamard induz superposições destrutivas à esquerda e construtivas à direita do sítio  $j = 0$ , gerando uma função de onda assimétrica, tab. (2.2). Para a matriz simétrica os processos de interferência levam a uma função de onda simétrica, tab. (2.3). Esses dois exemplos demonstram a riqueza no comportamentos das evoluções das CQEs devido aos processos de interferência, o que é uma marca registrada do mundo quântico.

Na fig. (2.27) apresentamos as distribuições de probabilidades  $P_v(j, n)$ , eq. (2.54) para diversos valores de  $\phi$  na faixa  $0 \leq \phi \leq \pi/2$ , e considerado o estado inicial dado por

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, j_0\rangle + |-, j_0\rangle). \quad (2.127)$$

Perceba que o estado dado na eq. (2.127) difere do estado dado na eq. (2.87) por um fator de fase igual a  $\pi/2$  na componente  $|-, j_0\rangle$ . Assim, para  $\phi = \pi/4$  temos uma distribuição de probabilidade simétrica. Para  $\phi \neq \pi/4$  a distribuição de probabilidades se torna assimétrica, tal que, para  $0 \leq \phi < \pi/4$  a distribuição de probabilidade se desloca para direita, e para  $\pi/4 < \phi \leq \pi/2$  ela vai para a esquerda. A medida que o valor de  $\phi$  se afasta de  $\pi/4$  a assimetria na distribuição de probabilidades aumenta. Além disso, observe que a posição dos máximos na distribuição de probabilidades não se alteram, pois a probabilidade de transmissão e reflexão não são alteradas, uma vez que, para todos esses casos  $|t_{\sigma\sigma}|^2 = |r_{\sigma\sigma'}|^2 = 1/2$ .



**Figura 2.27:** Distribuições de probabilidades de encontrar a partícula convergindo para um vértice  $j$  após  $n = 100$  passos para CQEs utilizando a matriz de espalhamento  $\Gamma_\phi$ , eq. (2.124), para diversos valores de  $\phi$  e o estado inicial dado pela eq. (2.127).

# Caminhadas Quânticas no Espaço de *Momentum*

Uma maneira de investigar a dinâmica gerada pelas CQEs é encontrar os autovalores e autovetores do operador evolução temporal. Assim, neste capítulo abordamos as CQEs no espaço de *momentum* a fim de encontrar solução para

$$\hat{U}|\Phi\rangle = e^{-i\omega}|\Phi\rangle. \quad (3.1)$$

Através da solução da eq. (3.1) é possível obter uma expressão analítica para o comportamento do deslocamento quadrático médio em função do tempo. Além disso, a partir das bandas de energia (autovalores de  $\hat{U}$ ) pode-se determinar a velocidade de grupo das autofunções de  $\hat{U}$  e a densidade de estados. A velocidade de grupo está associada com a transmissão de energia pela rede, enquanto que, propriedades como o calor específico e demais fenômenos de transporte de sólidos condutores são dependentes da densidade de estados [143–145].

## 3.1 Operador de Translação e o Teorema de Bloch

Nesta seção, onde fazemos uma revisão de conceitos necessários para o presente capítulo, nos basearemos em [30] e no teorema de Bloch [143]. Assim, para determinar os autovalores e autovetores do operador evolução temporal para um CQE em uma rede unidimensional, cujo parâmetro de rede é dado por  $\ell$ , consideramos o operador de translação

definido por

$$\hat{T}_m \equiv e^{-im\ell\hat{K}}, \quad (3.2)$$

onde,  $m \in \mathbb{Z}$ ,  $\hat{K} \equiv \hat{P}/\hbar$  e  $\hat{P}$  é o operador *momentum* canonicamente conjugado ao operador posição  $\hat{X}$ , ou seja,

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar. \quad (3.3)$$

Além disso, assumimos que o tempo característico  $\tau$  que define os passos de tempo, o parâmetro de rede  $\ell$  e  $\hbar$  são dados por

$$\tau = \ell = \hbar = 1. \quad (3.4)$$

No caso usual, a ação de  $\hat{T}_m$  em um estado associado à posição  $x$  resulta na translação da função de onda para a posição  $x + m\ell$ . Logo, por definição, a ação do operador translação em um estado de base no espaço das posições resulta em

$$\hat{T}_m|\sigma, j\rangle = |\sigma, j + m\rangle, \quad (3.5)$$

e

$$\hat{T}_m^\dagger|\sigma, j\rangle = |\sigma, j - m\rangle. \quad (3.6)$$

Para determinar os autovetores do operador de translação  $\hat{T}_m$  vamos considerar a seguinte combinação linear dos estados de base,

$$|\sigma, \theta\rangle = \sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{ij\theta}|\sigma, j\rangle, \quad (3.7)$$

onde  $\theta$  é um parâmetro real contido no intervalo  $[-\pi, \pi]$ . Assim, considerando a eq. (3.5), a ação do operador de translação neste estado resulta em

$$\hat{T}_m|\sigma, \theta\rangle = \sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{ij\theta}|\sigma, j + m\rangle = \sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{i(j-m)\theta}|\sigma, j\rangle = e^{-im\theta}|\sigma, \theta\rangle. \quad (3.8)$$

Portanto,  $|\sigma, \theta\rangle$  é autovetor do operador translação com o autovalor dado por  $e^{-im\theta}$ .

Para determinar o significado físico do parâmetro  $\theta$ , devemos estudar a função de onda  $\langle\sigma, j|\sigma', \theta\rangle$ . Assim, considerando as eqs. (3.6) e (3.8), pode-se verificar que

$$\langle\sigma, j|\sigma', \theta\rangle = \frac{e^{i\kappa j}}{\sqrt{2\pi}}u(j)\delta_{\sigma\sigma'}, \quad (3.9)$$

onde  $\theta = \kappa$ ,  $\kappa$  é um número adimensional denominado de número de onda e definido por  $\kappa \equiv p\ell/\hbar$ , tal que  $p$  é o autovalor do operador *momentum*. Ademais, o intervalo  $[-\pi, \pi]$  no qual  $\kappa$  está contido, define a primeira zona de Brillouin, que desempenha um papel central no estudo de vibrações cristalinas e teoria de bandas [143]. Por último,  $u(j)$  é uma função qualquer que deve satisfazer a

$$u(j+m) = u(j). \quad (3.10)$$

Este resultado é conhecido como teorema de Bloch, onde as autofunções de  $\hat{T}_m$  são ondas planas combinadas com uma função periódica de periodicidade dada por um vetor  $\vec{R}_m = m\hat{e}_x$  que define os pontos da rede de Bravais do sistema e  $m$  é inteiro [143]. Portanto, na base  $\{|\sigma, j\rangle\}$  os autovetores do operador translação são dados por

$$|\sigma, \theta\rangle \equiv |\sigma, \kappa\rangle = \sum_j |\sigma, j\rangle \langle \sigma, j | \sigma, \kappa\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_j e^{i\kappa j} |\sigma, j\rangle, \quad (3.11)$$

onde escolhemos, por simplicidade,  $u(j) = 1$ .

Lembrando que  $\sigma$  assume dois valores distintos,  $\sigma = \pm 1$ , os autoestados do operador translação são duplamente degenerados. Além disso,  $\{|\sigma, \kappa\rangle\}$  constituem uma base ortonormal, tal que, são válidas as relações de completeza e ortonormalidade

$$\hat{\mathbf{1}} = \sum_{\sigma} \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa |\sigma, \kappa\rangle \langle \sigma, \kappa|, \quad (3.12)$$

$$\langle \sigma', \kappa' | \sigma, \kappa\rangle = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\kappa - \kappa'). \quad (3.13)$$

Portanto, se

$$\psi_{\sigma}(j, n) = \langle \sigma, j | \Psi_n\rangle, \quad \tilde{\psi}_{\sigma}(\kappa, n) = \langle \sigma, \kappa | \Psi_n\rangle, \quad (3.14)$$

então  $\tilde{\psi}_{\sigma}(\kappa, n)$  é a transformada de Fourier discreta de  $\psi_{\sigma}(j, n)$ , que é definida por

$$\tilde{\psi}_{\sigma}(\kappa, n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_j \psi_{\sigma}(j, n) e^{-i\kappa j}, \quad (3.15)$$

cujas transformadas inversa é dada por

$$\psi_{\sigma}(j, n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa \tilde{\psi}_{\sigma}(\kappa, n) e^{i\kappa j}, \quad (3.16)$$

desde que a função  $\psi_{\sigma}(j, n)$  seja não nula em um conjunto finito de pontos  $j$ , neste caso a transformada inversa é uma função bem comportada [146].



## 3.2 Autovalores e Autovetores do Operador Evolução Temporal

Utilizando as eqs. (2.43), (3.5) e (3.6), calculamos o comutador entre os operadores de evolução temporal e de translação, obtendo o seguinte resultado:

$$\left[ \hat{T}_m, \hat{U} \right] = \sum_j \sum_{\sigma=\pm} \sum_{\sigma'=\pm} \left( \Gamma_{\sigma\sigma'}^{(j)} - \Gamma_{\sigma\sigma'}^{(j+m)} \right) |\sigma, j + \sigma + m\rangle \langle \sigma', j|. \quad (3.17)$$

Assim, se

$$\Gamma_{\sigma\sigma'}^{(j)} = \Gamma_{\sigma\sigma'}^{(j+m)} = \Gamma_{\sigma\sigma'}, \quad (3.18)$$

ou seja, se as amplitudes de espalhamento são independentes de  $j$ , então  $\hat{T}_m$  e  $\hat{U}$  comutam. Neste caso, podemos diagonalizar simultaneamente esses dois operadores. Entretanto, devido à degenerescência nos autovalores de  $\hat{T}_m$ , verifica-se que  $|\sigma, \kappa\rangle$  não é autoestado de  $\hat{U}$ , pois da eq. (2.40), a ação de  $\hat{U}$  no estado da eq. (3.11) resulta em

$$\hat{U}|\sigma, \kappa\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_j e^{i\kappa j} (t_{\sigma\sigma}|\sigma, j + \sigma\rangle + r_{-\sigma\sigma}|-\sigma, j - \sigma\rangle). \quad (3.19)$$

Considerando a eq. (3.11), podemos reescrever a eq. (3.19) como

$$\hat{U}|\sigma, \kappa\rangle = e^{-i\kappa\sigma} t_{\sigma\sigma} |\sigma, \kappa\rangle + e^{i\kappa\sigma} r_{-\sigma\sigma} |-\sigma, \kappa\rangle. \quad (3.20)$$

Contudo, esse problema pode ser facilmente contornado considerando uma combinação linear dos autoestados de  $\hat{T}_m$ ,

$$|\Phi_\kappa\rangle = C_+ |+, \kappa\rangle + C_- |-, \kappa\rangle, \quad (3.21)$$

com  $|C_+|^2 + |C_-|^2 = 1$ . Assim, temos

$$\hat{U}|\Phi_\kappa\rangle = e^{-i\omega(\kappa)} |\Phi_\kappa\rangle, \quad (3.22)$$

onde  $\omega(\kappa)$  é a energia associada ao autoestado  $|\Phi_\kappa\rangle$ . Considerando a eq. (3.20), a equação de autovalores para  $\hat{U}$  se reduz ao sistema de equações dado por

$$\begin{pmatrix} t_{++}e^{-i\kappa} & r_{+-}e^{-i\kappa} \\ r_{-+}e^{+i\kappa} & t_{--}e^{+i\kappa} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix} = e^{-i\omega(\kappa)} \begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

que não leva ao caso trivial se

$$\begin{vmatrix} t_{++}e^{-i\kappa} - e^{-i\omega(\kappa)} & r_{+-}e^{-i\kappa} \\ r_{-+}e^{+i\kappa} & t_{--}e^{+i\kappa} - e^{-i\omega(\kappa)} \end{vmatrix} = 0. \quad (3.24)$$

A eq. (3.24) possui duas soluções,  $\omega_1(\kappa)$  e  $\omega_2(\kappa)$ , e para cada uma delas temos os autoestados correspondentes,  $|\Phi_{1\kappa}\rangle$  e  $|\Phi_{2\kappa}\rangle$ . Portanto, na base dos autovetores de  $\hat{U}$ , a relação de completudeza é dada por

$$\hat{\mathbf{1}} = \sum_{\mu=1}^2 \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa |\Phi_{\mu\kappa}\rangle \langle \Phi_{\mu\kappa}|. \quad (3.25)$$

Assumindo que o estado inicial do sistema é dado por  $|\Psi_0\rangle$ , e considerando a relação de completudeza na base dos autovetores de  $\hat{U}$ , eq. (3.25), o estado do sistema no passo de tempo  $n$  é dado por

$$|\Psi_n\rangle = \hat{U}^n |\Psi_0\rangle = \sum_{\mu=1}^2 \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa e^{-i\omega_{\mu}(\kappa)n} |\Phi_{\mu\kappa}\rangle \langle \Phi_{\mu\kappa} | \Psi_0\rangle. \quad (3.26)$$

Substituindo os coeficientes da matriz de espalhamento genérica do grupo  $SU(2)$ , eq. (2.74), na eq. (3.24) obtemos a seguinte equação característica,

$$\sin(\omega) - \cos \theta \sin(\kappa - \phi - \varphi) = 0 \quad (3.27)$$

cujas duas soluções são dadas por

$$\omega_1(\kappa) = \arcsin(\cos \theta \sin(\kappa - \phi - \varphi)) \quad \text{e} \quad \omega_2(\kappa) = \pi - \arcsin(\cos \theta \sin(\kappa - \phi - \varphi)), \quad (3.28)$$

onde definimos

$$\omega(\kappa) = \arcsin(\cos \theta \sin(\kappa - \phi - \varphi)). \quad (3.29)$$

Os autovetores correspondentes aos dois autovalores da eq. (3.28) são dados por

$$|\Phi_{\mu\kappa}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_{\mu}(\kappa)}} (|+, \kappa\rangle + C_{\mu}(\kappa)|-, \kappa\rangle), \quad (3.30)$$

tal que

$$C_{\mu}(\kappa) = -\frac{1}{\sin \theta} (e^{2i\phi} - (-1)^n e^{i(\kappa + \phi - \varphi - (-1)^{\mu}\omega(\kappa))}), \quad (3.31)$$

e

$$\mathcal{N}_\mu(\kappa) = \frac{2}{\sin^2 \theta} (1 - (-1)^\mu \cos(\kappa - \phi - \varphi - (-1)^\mu \omega(\kappa)) \cos \theta), \quad (3.32)$$

com  $\mu = 1, 2$ .

Consequentemente, considerando os autovalores e autovetores do operador evolução temporal, o estado do sistema no passo de tempo  $n$ , eq. (3.26), é dado por

$$|\Psi_n\rangle = \hat{U}^n |\Psi_0\rangle = \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa \left( \tilde{\psi}_+(\kappa, n) |+, \kappa\rangle + \tilde{\psi}_-(\kappa, n) |-, \kappa\rangle \right), \quad (3.33)$$

onde

$$\tilde{\psi}_\sigma(\kappa, n) = f_1^{(\sigma)}(\kappa) e^{-i\omega(\kappa)n} + e^{-i\pi n} f_2^{(\sigma)} e^{i\omega(\kappa)n}, \quad (3.34)$$

$$f_\mu^{(+)}(\kappa) = \frac{\tilde{\psi}_+(\kappa, 0)}{\mathcal{N}_\mu(\kappa)} + \frac{C_\mu^*(\kappa) \tilde{\psi}_-(\kappa, 0)}{\mathcal{N}_\mu(\kappa)} \quad (3.35)$$

$$f_\mu^{(-)}(\kappa) = \frac{C_\mu(\kappa) \tilde{\psi}_+(\kappa, 0)}{\mathcal{N}_\mu(\kappa)} + \frac{|C_\mu(\kappa)|^2 \tilde{\psi}_-(\kappa, 0)}{\mathcal{N}_\mu(\kappa)} \quad (3.36)$$

e

$$\tilde{\psi}_\sigma(\kappa, 0) = \langle \sigma, \kappa | \Psi_0 \rangle. \quad (3.37)$$

Assumindo que o estado inicial é dado pelo estado de Bloch,

$$|\Psi_0\rangle = \cos(\beta/2) |+, j_0\rangle + e^{i\eta} \sin(\beta/2) |-, j_0\rangle, \quad (3.38)$$

onde, os estados  $|\pm, j_0\rangle$  são autovetores do operador posição associados ao vértice de coordenada  $j = 0$ , da eq. (3.11) temos

$$\tilde{\psi}_\sigma(\kappa, 0) = \langle \sigma, \kappa | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (\cos(\beta/2) \delta_{\sigma+} + e^{i\eta} \sin(\beta/2) \delta_{\sigma-}). \quad (3.39)$$

Portanto, as funções  $f_\mu^{(\pm)}$  se reduzem a

$$f_\mu^{(+)}(\kappa) = \frac{(\cos(\frac{\beta}{2}) \sin \theta - e^{i(\eta-2\phi)} \sin(\frac{\beta}{2}) (\cos \theta - (-1)^\mu e^{-i(\kappa - (-1)^\mu \omega(\kappa) - \phi - \varphi)})) \sin \theta}{2\sqrt{2\pi} (1 - (-1)^\mu \cos \theta \cos(\kappa - (-1)^\mu \omega(\kappa) - \phi - \varphi))} \quad (3.40)$$

e

$$f_\mu^{(-)}(\kappa) = \frac{(\cos(\frac{\beta}{2}) \sin \theta - e^{i(\eta-2\phi)} \sin(\frac{\beta}{2}) (\cos \theta - (-1)^\mu e^{-i(\kappa - (-1)^\mu \omega(\kappa) - \phi - \varphi)})) \mathcal{F}_\mu(\kappa)}{2\sqrt{2\pi} (1 - (-1)^\mu \cos(\theta) \cos(\kappa - (-1)^\mu \omega(\kappa) - \phi - \varphi))}, \quad (3.41)$$

onde

$$\mathcal{F}_\mu(\kappa) = e^{2i(\phi - \pi/2)} (\cos \theta - (-1)^\mu e^{i(\kappa - (-1)^\mu \omega(\kappa) - \phi - \varphi)}). \quad (3.42)$$

A eq. (3.34) é a componente  $\sigma$  da função de onda do sistema no espaço dos *momenta* no passo de tempo  $n$ . Assim, para obter a função de onda no espaço das posições basta tomar a transformada de Fourier inversa das funções  $\tilde{\psi}_\sigma(\kappa, n)$ , veja a eq. (3.16). Portanto,

$$\psi_\sigma(j, n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( \int_{-\pi}^{\pi} f_1^{(\sigma)}(\kappa) e^{-i\omega(\kappa)n + i\kappa j} d\kappa + e^{-i\pi n} \int_{-\pi}^{\pi} f_2^{(\sigma)}(\kappa) e^{i\omega(\kappa)n + i\kappa j} d\kappa \right). \quad (3.43)$$

Considerando as eqs. (3.40) e (3.41) verifica-se que elas possuem a seguinte propriedade

$$f_2^{(\sigma)}(\kappa - \pi) = f_1^{(\sigma)}(\kappa). \quad (3.44)$$

Além disso, a função  $\omega(\kappa)$ , eq. (3.29), exibe uma propriedade semelhante, tal que

$$\omega(\kappa - \pi) = -\omega(\kappa). \quad (3.45)$$

Portanto, considerando o estado inicial dado pelo estado de Bloch, eq. (3.38), realizando a mudança de variável  $k = k' - \pi$  no segundo termo da eq. (3.43), considerando as relações dadas nas eqs. (3.44) e (3.45), e uma vez que as funções  $f_\mu^{(\sigma)}$  são periódicas, a eq. (3.43) se reduz a

$$\psi_\sigma(j, n) = \frac{1 + e^{-i\pi(j+n)}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} f_1^{(\sigma)}(\kappa) e^{-i\omega(\kappa)n + i\kappa j} d\kappa. \quad (3.46)$$

Observe que a eq. (3.46) reflete o fato das componentes da função de onda com  $j$  par não interferirem com as componentes com  $j$  ímpar, como discutido na seção (2.3), uma vez que  $j$  e  $n$  são números inteiros, então o fator  $1 + e^{-i\pi(j+n)}$  nessa equação resulta em

$$1 + e^{-i\pi(j+n)} = 1 + (-1)^{j+n} = \begin{cases} 0, & \text{se } j \text{ é par (ímpar) e } n \text{ é ímpar (par)} \\ 2, & \text{se } j \text{ é par (ímpar) e } n \text{ é par (ímpar)} \end{cases}. \quad (3.47)$$

Assim, durante a evolução do sistema nos passos de tempo com  $n$  par (ímpar) só teremos componentes da função de onda com  $j$  par (ímpar), como discutido na seção (2.4).

Para exemplificar o desenvolvimento dessa seção, vamos considerar que a matriz de espalhamento é dada pela matriz de Hadamard, eq. (2.85), que é obtida com  $\theta = \pi/4$ ,  $\phi = \varphi = 0$ , e que o estado inicial do sistema é dado pelo estado de Bloch, eq. (3.38), com  $\beta = \eta = \pi/2$  e partindo da origem,  $j_0 = 0$ . Este exemplo de CQE corresponde ao caminho de Hadamard que foi desenvolvido na subseção (2.6.1). Assim, verificamos que as funções  $f_n^{(\sigma)}(\kappa)$  se reduzem a

$$f_n^{(\sigma)}(\kappa) = \frac{\sqrt{\sigma}}{4\sqrt{\pi}} \left( 1 - (-1)^n \frac{e^{-\sigma i(\kappa - \pi/2)} + \sigma \cos(\kappa)}{\sqrt{1 + \cos^2(\kappa)}} \right). \quad (3.48)$$

Finalmente, substituindo a expressão acima na eq. (3.34), as componentes da função de onda no espaço dos *momenta* são dadas por

$$\tilde{\psi}_\sigma(\kappa, n) = \frac{\sqrt{\sigma}}{4\sqrt{\pi}} \left( \left( 1 + \frac{e^{-\sigma i(\kappa - \pi/2)} + \sigma \cos(\kappa)}{\sqrt{1 + \cos^2(\kappa)}} \right) e^{-in\omega(\kappa)} + \left( 1 - \frac{e^{-\sigma i(\kappa - \pi/2)} + \sigma \cos(\kappa)}{\sqrt{1 + \cos^2(\kappa)}} \right) e^{in(\omega(\kappa) - \pi)} \right). \quad (3.49)$$

Manipulando a eq. (3.49), obtemos

$$\tilde{\psi}_+(\kappa, n) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \begin{cases} \left( \cos(n\omega(\kappa)) + \frac{\cos \kappa \sin(n\omega(\kappa))}{\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} \right) - i \left( \frac{(\sin \kappa + \cos \kappa) \sin(n\omega(\kappa))}{\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} \right), & \text{para } \kappa \text{ par;} \\ \left( \frac{(\sin \kappa + \cos \kappa) \cos(n\omega(\kappa))}{\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} \right) + i \left( \sin(n\omega(\kappa)) - \frac{\cos \kappa \cos(n\omega(\kappa))}{\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} \right), & \text{para } \kappa \text{ ímpar;} \end{cases} \quad (3.50)$$

e

$$\tilde{\psi}_-(\kappa, n) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \begin{cases} \left( \frac{(\sin \kappa - \cos \kappa) \sin(n\omega(\kappa))}{\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} \right) + i \left( \cos(n\omega(\kappa)) - \frac{\cos \kappa \sin(n\omega(\kappa))}{\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} \right), & \text{para } \kappa \text{ par;} \\ \left( \sin(n\omega(\kappa)) + \frac{\cos \kappa \cos(n\omega(\kappa))}{\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} \right) + i \left( \frac{(\sin \kappa - \cos \kappa) \cos(n\omega(\kappa))}{\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} \right), & \text{para } \kappa \text{ ímpar.} \end{cases} \quad (3.51)$$

Assim, considerando que

$$\omega(-\kappa) = -\omega(\kappa), \quad \cos(-\kappa) = \cos(\kappa) \quad \text{e} \quad \sin(-\kappa) = -\sin(\kappa), \quad (3.52)$$

então, das eqs. (3.50) e (3.51), constatamos que

$$\text{Re}[\tilde{\psi}_\sigma(\kappa, n)] = (-1)^n \text{Im}[\tilde{\psi}_{-\sigma}(-\kappa, n)] \quad (3.53)$$

e

$$\text{Im}[\tilde{\psi}_\sigma(\kappa, n)] = (-1)^{n+1} \text{Re}[\tilde{\psi}_{-\sigma}(-\kappa, n)]. \quad (3.54)$$

Além disso, tomando-se o módulo quadrado das componentes da função de onda no espaço de *momentum* e considerando as eqs. (3.53) e (3.54), de imediato verifica-se que

$$|\tilde{\psi}_\sigma(\kappa, n)|^2 = |\tilde{\psi}_{-\sigma}(-\kappa, n)|^2. \quad (3.55)$$

Na subseção (2.6.1), obtivemos relações semelhantes as eqs. (3.53) e (3.54), via simulação numérica, isto é,

$$\text{Re}[\psi_\sigma(j, n)] = (-1)^n \text{Im}[\psi_{-\sigma}(-j, n)] \quad (3.56)$$

e

$$\text{Im}[\psi_\sigma(j, n)] = (-1)^{n+1} \text{Re}[\psi_{-\sigma}(-j, n)], \quad (3.57)$$

as quais implicam em

$$|\psi_\sigma(j, n)|^2 = |\psi_{-\sigma}(-j, n)|^2. \quad (3.58)$$

Para demonstrar as eqs. (3.56) e (3.57), vamos considerar que a função de onda no espaço de *momentum* é dada por

$$\tilde{\psi}_\sigma(\kappa, n) = \text{Re}[\tilde{\psi}_\sigma(\kappa, n)] + i \text{Im}[\tilde{\psi}_\sigma(\kappa, n)]. \quad (3.59)$$

Portanto, considerando a forma polar de um número complexo, é fácil verificar que a função de onda no espaço de posições, é dada por

$$\begin{aligned} \psi_\sigma(j, n) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{\psi}_\sigma(\kappa, n) e^{ij\kappa} d\kappa \\ \psi_\sigma(j, n) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \left( \text{Re}[\tilde{\psi}_\sigma(\kappa, n)] \cos(j\kappa) - \text{Im}[\tilde{\psi}_\sigma(\kappa, n)] \sin(j\kappa) + \right. \\ &\quad \left. + i \left( \text{Im}[\tilde{\psi}_\sigma(\kappa, n)] \cos(j\kappa) + \text{Re}[\tilde{\psi}_\sigma(\kappa, n)] \sin(j\kappa) \right) \right) d\kappa. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Logo,

$$\text{Re}[\psi_\sigma(j, n)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \left( \text{Re}[\tilde{\psi}_\sigma(\kappa, n)] \cos(j\kappa) - \text{Im}[\tilde{\psi}_\sigma(\kappa, n)] \sin(j\kappa) \right) d\kappa \quad (3.61)$$

e

$$\text{Im}[\psi_\sigma(j, n)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \left( \text{Im}[\tilde{\psi}_\sigma(\kappa, n)] \cos(j\kappa) + \text{Re}[\tilde{\psi}_\sigma(\kappa, n)] \sin(j\kappa) \right) d\kappa. \quad (3.62)$$

Assim, por exemplo para  $n$  par, considerando as eqs. (3.50) e (3.51), temos

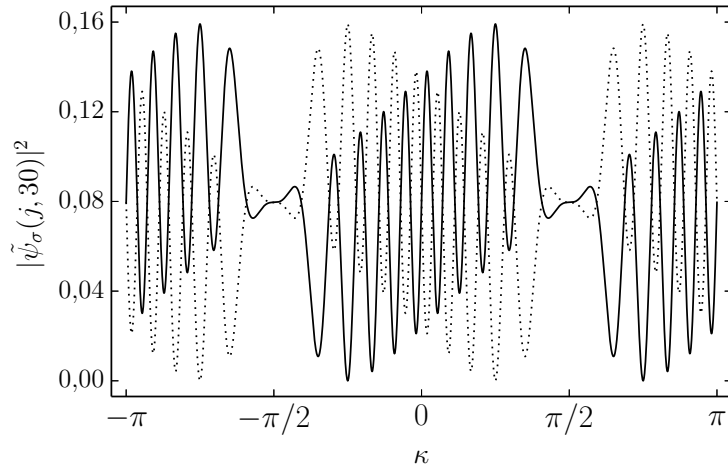
$$\begin{aligned} \text{Re}[\psi_+(j, n)] &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( \int_{-\pi}^{\pi} \cos(n\omega(\kappa)) \cos(jk) d\kappa + \underbrace{\int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos \kappa \sin(n\omega(\kappa)) \cos(jk)}{\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} d\kappa}_{=0, \text{ o integrando é uma função ímpar}} + \right. \\ &\quad \left. + \underbrace{\int_{-\pi}^{\pi} \frac{\sin \kappa \sin(n\omega(\kappa)) \sin(jk)}{\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} d\kappa}_{=0, \text{ o integrando é uma função ímpar}} + \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos \kappa \sin(n\omega(\kappa)) \sin(jk)}{\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} d\kappa \right) d\kappa \\ \text{Re}[\psi_+(j, n)] &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \left( \cos(n\omega(\kappa)) \cos(jk) + \frac{\cos \kappa \sin(n\omega(\kappa)) \sin(jk)}{\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} \right) d\kappa \end{aligned} \quad (3.63)$$

e

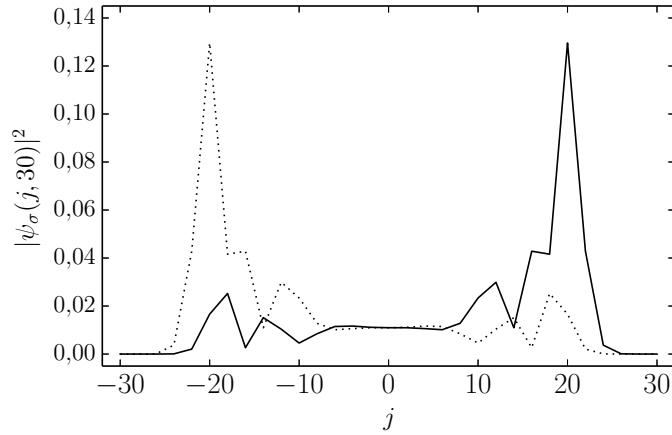
$$\begin{aligned}
\text{Im}[\psi_-(-j, n)] &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( \int_{-\pi}^{\pi} \cos(n\omega(\kappa)) \cos(-jk) d\kappa - \underbrace{\int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos \kappa \sin(n\omega(\kappa)) \cos(-jk)}{\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} d\kappa}_{=0, \text{ o integrando é uma função ímpar}} + \right. \\
&\quad \left. + \underbrace{\int_{-\pi}^{\pi} \frac{\sin \kappa \sin(n\omega(\kappa)) \sin(-jk)}{\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} d\kappa}_{=0, \text{ o integrando é uma função ímpar}} - \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos \kappa \sin(n\omega(\kappa)) \sin(-jk)}{\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} d\kappa \right) d\kappa \\
\text{Im}[\psi_-(-j, n)] &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \left( \cos(n\omega(\kappa)) \cos(jk) + \frac{\cos \kappa \sin(n\omega(\kappa)) \sin(jk)}{\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} \right) d\kappa. \quad (3.64)
\end{aligned}$$

Portanto,  $\text{Re}[\psi_+(j, n)] = \text{Im}[\psi_-(-j, n)]$  para  $n$  par. As outras relações decorrentes das eqs. (3.56) e (3.57) podem ser demonstradas da mesma forma.

Nas figs. (3.1) e (3.2), temos o comportamento do módulo quadrado das componentes  $\sigma$  da função de onda, respectivamente, nos espaços dos *momenta* e das posições após 30 passos de tempo. Como esperado, enquanto que as componentes da função de onda no espaço das posições estão “localizadas” em torno das posições  $j = \pm 20$ , as componentes da função de onda no espaço dos *momenta* são deslocalizadas. As funções de onda nesses dois espaços possuem esses comportamentos antagônicos uma vez que os operadores de posição e *momentum* não comutam [136]. Além disso, verifica-se as simetrias dadas pelas eqs. (3.55) e (3.58).



**Figura 3.1:** Comportamento do módulo quadrado das componentes da função de onda do sistema no espaço dos *momenta* após 30 passos de tempo, onde  $\tilde{\psi}_{\pm}(\kappa, 30)$  são dadas pela eq. (3.49). Linha contínua para  $\sigma = +1$ , e linha pontilhada para  $\sigma = -1$ . Observe que  $|\tilde{\psi}_+(\kappa, 30)|^2$  e  $|\tilde{\psi}_-(\kappa, 30)|^2$  são simetricamente opostas.



**Figura 3.2:** Comportamento do módulo quadrado das componentes da função de onda do sistema no espaço das posições após 30 passos de tempo, onde  $\psi_{\pm}(j, 30)$  foram obtidas via integração numérica da transformada de Fourier inversa da eq. (3.49). Linha contínua para  $\sigma = +1$ , e linha pontilhada para  $\sigma = -1$ . Observe que  $|\psi_{+}(j, 30)|^2$  e  $|\psi_{-}(j, 30)|^2$  são simetricamente opostas.

Na subseção (2.6.1) obtivemos que as probabilidades de encontrar a partícula em um estado com  $\sigma = +1$  ou  $\sigma = -1$  é uma constante e dada por  $P_c(\sigma, n) = 1/2$ . Isso é verificado, considerando que para a função de onda dada na eq. (3.49),

$$P_c(\sigma, n) = \sum_j |\psi_{\sigma}(j, n)|^2 = \int_{-\pi}^{\pi} |\tilde{\psi}_{\sigma}(\kappa, n)|^2 d\kappa = \frac{1}{2}. \quad (3.65)$$

Para demonstrar a equação acima, considerando  $n$  par, de acordo com a eq. (3.50),

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}_{+}(\kappa, n)|^2 &= \tilde{\psi}_{+}(\kappa, n) \tilde{\psi}_{+}(\kappa, n)^* \\ |\tilde{\psi}_{+}(\kappa, n)|^2 &= \frac{1}{4\pi} \left( \left( \cos(n\omega(\kappa)) + \frac{\cos \kappa \sin(n\omega(\kappa))}{\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} \right) - i \left( \frac{(\sin \kappa + \cos \kappa) \sin(n\omega(\kappa))}{\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} \right) \right) \\ &\quad \left( \left( \cos(n\omega(\kappa)) + \frac{\cos \kappa \sin(n\omega(\kappa))}{\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} \right) + i \left( \frac{(\sin \kappa + \cos \kappa) \sin(n\omega(\kappa))}{\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} \right) \right) \\ |\tilde{\psi}_{+}(\kappa, n)|^2 &= \frac{1}{4\pi} + \frac{\sin \kappa \cos \kappa \sin^2(n\omega(\kappa))}{2\pi(1 + \cos^2 \kappa)} + \frac{\cos \kappa \sin(n\omega(\kappa)) \cos(n\omega(\kappa))}{2\pi\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}}. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Logo, integrando a eq. (3.66),

$$\begin{aligned} P_c(+, n) &= \int_{-\pi}^{\pi} |\tilde{\psi}_{+}(\kappa, n)|^2 d\kappa \\ P_c(+, n) &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{1}{4\pi} d\kappa + \underbrace{\int_{-\pi}^{\pi} \left( \frac{\sin \kappa \cos \kappa \sin^2(n\omega(\kappa))}{2\pi(1 + \cos^2 \kappa)} + \frac{\cos \kappa \sin(n\omega(\kappa)) \cos(n\omega(\kappa))}{2\pi\sqrt{1 + \cos^2 \kappa}} \right) d\kappa}_{=0, \text{ o integrando é uma função ímpar}} \\ P_c(+, n) &= \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (3.67)$$



O mesmo resultado é obtido para  $n$  ímpar e para  $\sigma = -1$ .

### 3.3 O Método da Fase Estacionária

A integral na eq. (3.46) é do tipo

$$I(\alpha, n) = \int_{-\pi}^{\pi} f(\kappa) e^{ig(\alpha, \kappa)n} d\kappa, \quad (3.68)$$

onde

$$g(\alpha, \kappa) = -\omega(\kappa) + \alpha\kappa \quad (3.69)$$

é uma função real, pois  $\omega(\kappa)$  está associado aos autovalores do hamiltoniano do sistema,  $\alpha = j/n \rightarrow$  (posição/números de passos) e  $\alpha \in [-1, 1]$ . Assim, elas podem ser avaliadas assintoticamente através do método da fase estacionária [147]. No limite em que  $n \gg 1$ ,  $e^{ig(\alpha, \kappa)n}$  oscila rapidamente com a variação de  $\kappa$ , produzindo contribuições na integral da eq. (3.68) que tendem a se cancelar, exceto nos pontos de máximo ou mínimo da função  $g(\alpha, \kappa)$ . Logo, a maior contribuição na integral da eq. (3.68) provém dos pontos nas vizinhança dos pontos de máximo ou mínimo, pois  $g(\alpha, \kappa)$  é praticamente constante nessas regiões. Assim, segundo o método da fase estacionária, no limite que  $n \gg 1$

$$I(\alpha, n) \sim \sum_i \frac{\sqrt{2\pi} f(\kappa_i)}{\sqrt{n |d_\kappa^2 [g(\alpha, \kappa)]|_{\kappa=\kappa_i}}} e^{i(g(\alpha, \kappa_i)n + \mu(\kappa_i)\pi/4)}, \quad (3.70)$$

onde  $\kappa_i$  são os pontos no intervalo  $[-\pi, \pi]$  que resultam em  $d_\kappa [g(\alpha, \kappa)]|_{\kappa=\kappa_i} = 0$ , e  $\mu(\kappa_i)$  é o sinal da função  $d_\kappa^2 [g(\alpha, \kappa_i)]$ . No limite em que  $n \gg 1$ , as componentes da função de onda no espaço de posições são dadas por

$$\psi_\sigma(j, n) \sim (1 + e^{-i\pi(\alpha+1)n}) \sum_i \frac{\sqrt{2\pi} f(\kappa_i)}{\sqrt{n |d_\kappa^2 [g(\alpha, \kappa)]|_{\kappa=\kappa_i}}} e^{i(g(\alpha, \kappa_i)n + \mu(\kappa_i)\pi/4)}. \quad (3.71)$$

Derivando a eq. (3.69) em relação a variável  $\kappa$  encontramos os seguintes resultados,

$$d_\kappa [g(\alpha, \kappa)] = \alpha - \frac{\cos \theta \cos(\kappa - \phi - \varphi)}{\sqrt{1 - \cos^2 \theta \sin^2(\kappa - \phi - \varphi)}} \quad (3.72)$$

e

$$d_\kappa^2 [g(\alpha, \kappa)] = \frac{\cos \theta \sin^2 \theta \sin(\kappa - \phi - \varphi)}{(1 - \cos^2 \theta \sin^2(\kappa - \phi - \varphi))^{3/2}}. \quad (3.73)$$

O próximo passo é impor que  $d_\kappa [g(\alpha, \kappa)]|_{\kappa=\kappa_i} = 0$ , o que resulta em duas soluções dadas

por

$$\kappa_{\pm} = \pm \arccos \left( \frac{\alpha \tan \theta}{\sqrt{1 - \alpha^2}} \right) + \phi + \varphi. \quad (3.74)$$

Assim, uma vez que o argumento da função  $\arccos(x)$  deve variar entre  $|x| \leq 1$ , isto leva a um limite para  $\alpha$ . Impondo que

$$\frac{\alpha_{lim} \tan \theta}{\sqrt{1 - \alpha_{lim}^2}} = 1, \quad (3.75)$$

os limites para  $\alpha$  são dados por

$$\alpha_{lim} = \pm \cos \theta. \quad (3.76)$$

Portanto, considerando que  $\alpha = j/n$ , pode-se mostrar facilmente que os limites para os valores de  $j$  são dados por  $j_{lim} = \pm n \cos \theta$ , como discutido na seção (2.6).

Para exemplificar o método da fase estacionária, admitimos que  $\beta = \eta = \pi/2$ ,  $\theta = \pi/4$  e  $\phi = \varphi = 0$ . Esta evolução com esses valores de parâmetros corresponde ao desenvolvimento da seção (2.3). Assim, temos

$$\kappa_{\pm} = \pm \kappa_0 = \pm \arccos \left( \frac{\alpha}{\sqrt{1 - \alpha^2}} \right). \quad (3.77)$$

Avaliando as funções  $g(\alpha, \kappa)$ ,  $d_{\kappa}^2[g(\alpha, \kappa)]$  e  $f_1^{(\sigma)}(\kappa)$  em  $\kappa = \pm \kappa_0$ , obtivemos

$$g(\alpha, \pm \kappa_0) = \pm g(\alpha, \kappa_0) = \mp \omega(\kappa_0) \pm \alpha \kappa_0 = \mp \arcsin \left( \frac{\sin(\kappa_0)}{\sqrt{2}} \right) \pm \alpha \kappa_0, \quad (3.78)$$

$$d_{\kappa}^2[g(\alpha, \kappa)]|_{\kappa=\pm \kappa_0} = \pm (1 - \alpha^2) \sqrt{1 - 2\alpha^2}, \quad (3.79)$$

$$f_1^{(+)}(\pm \kappa_0) = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \left( (1 + \alpha) + i \left( \alpha \mp i \sqrt{1 - 2\alpha^2} \right) \right) \quad (3.80)$$

e

$$f_1^{(-)}(\pm \kappa_0) = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \left( i(1 - \alpha) + \left( \alpha \pm i \sqrt{1 - 2\alpha^2} \right) \right). \quad (3.81)$$

Substituindo as expressões acima na eq. (3.71), as componentes  $\sigma$  da função de onda no espaço de posições, no limite que  $\alpha \rightarrow 0$  ( $n \gg 0$ ), são dadas por

$$\psi_+(\alpha, n) \sim \frac{(1 + (-1)^{(\alpha-1)n}) \left( (1 + (1 + i)\alpha) \cos(g(\alpha, \kappa_0)n + \pi/4) + i \sqrt{1 - 2\alpha^2} \sin(g(\alpha, \kappa_0)n + \pi/4) \right)}{2\sqrt{\pi n} \left| \sqrt{1 - 2\alpha^2} (1 - \alpha^2) \right|} \quad (3.82)$$

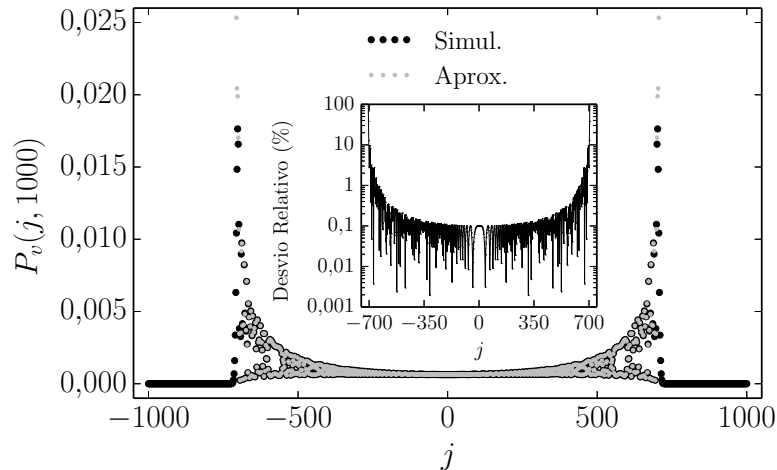
e

$$\psi_-(\alpha, n) \sim \frac{(1+(-1)^{(\alpha-1)n}) \left( (i + (1-i)\alpha) \cos(g(\alpha, \kappa_0)n + \pi/4) - \sqrt{1-2\alpha^2} \sin(g(\alpha, \kappa_0)n + \pi/4) \right)}{2\sqrt{\pi n} \left| \sqrt{1-2\alpha^2}(1-\alpha^2) \right|}, \quad (3.83)$$

onde  $\alpha \in \left[ -\frac{1}{\sqrt{2}} + \epsilon, \frac{1}{\sqrt{2}} - \epsilon \right]$  com  $\epsilon$  arbitrariamente pequeno. Assim, verificamos que a distribuição de probabilidades aproximada de encontrar a partícula em um dado vértice  $j$  é dada por

$$P_v(j, n) = |\psi_+(j, n)|^2 + |\psi_-(j, n)|^2 \sim \frac{(1 + (-1)^{(\alpha-1)n})^2 (1 - 2\alpha^2 \sin(2g(\alpha, \kappa_0)n))}{2\pi n \left| \sqrt{1-2\alpha^2}(1-\alpha^2) \right|}. \quad (3.84)$$

No gráfico da fig. (3.3) comparamos a distribuição de probabilidades espacial exata obtida a partir da simulação numérica da equação  $|\Psi_n\rangle = \hat{U}^n |\Psi_0\rangle$ , com os resultados obtidos a partir da solução aproximada, eq. (3.84), após  $n = 1000$  passos. A solução aproximada possui uma concordância significativa com a simulação numérica, sobretudo na região onde  $j/n \ll 1$ , pois, neste caso o desvio relativo percentual entre os resultados simulado e aproximado não passa de 1%, como pode ser visto no gráfico interno da fig. (3.3). Entretanto, a medida que  $j \rightarrow n/\sqrt{2}$ , observa-se um aumento no desvio relativo percentual, isto é, as soluções simulada e aproximada não possuem uma boa concordância. Isso ocorre, porque a eq. (3.84), diverge no ponto  $\alpha = j/n = 1/\sqrt{2}$ .



**Figura 3.3:** Comparação entre as distribuições de probabilidades após 1000 passos de tempo obtidas através de simulação numérica e da solução aproximada, para uma CQ definida pelos  $\theta = \pi/4$ ,  $\phi = \varphi = 0$  e  $\beta = \eta = \pi/2$ . O gráfico interno apresenta o desvio relativo entre as soluções simulada e numérica.

A distribuição de probabilidades dada na eq. (3.84) pode ser dividida em dois termos,

ou seja,

$$P_v(\alpha, n) = |\psi_+(\alpha, n)|^2 + |\psi_-(\alpha, n)|^2 \sim (1 + (-1)^{-(1+\alpha)n})^2 (P_v^{(ass)}(\alpha, n) + P_v^{(osc)}(\alpha, n)), \quad (3.85)$$

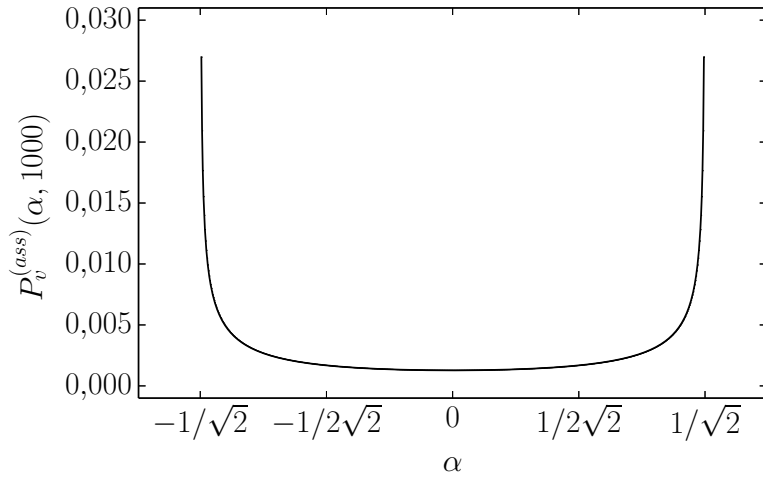
onde

$$P_v^{(ass)}(\alpha, n) = \frac{1}{2\pi n |(1 - \alpha^2)\sqrt{1 - 2\alpha^2}|} \quad (3.86)$$

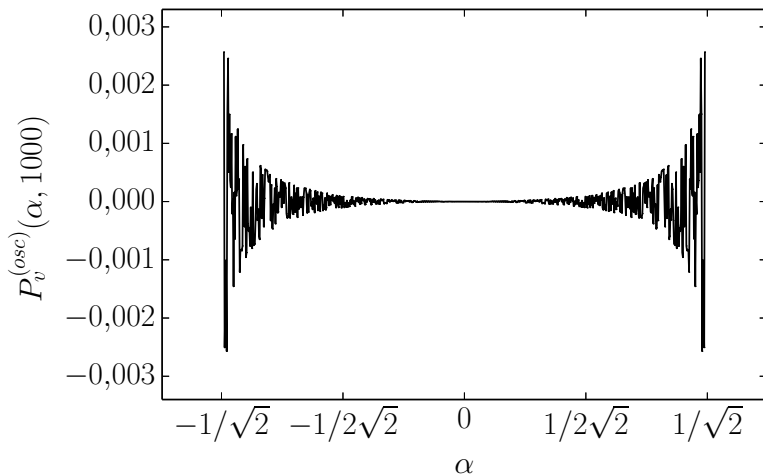
e

$$P_v^{(osc)}(\alpha, n) = \frac{-\alpha^2 \sin(g(\alpha, \kappa_\alpha)n)}{\pi n |(1 - \alpha^2)\sqrt{1 - 2\alpha^2}|}, \quad (3.87)$$

tal que,  $P_v^{(ass)}(\alpha, n)$  é responsável pelo comportamento assintótico e  $P_v^{(osc)}(\alpha, n)$  pelas oscilações na distribuição de probabilidades, veja os gráficos das figs. (3.4) e (3.5).



**Figura 3.4:** Comportamento assintótico da distribuição de probabilidades.



**Figura 3.5:** Comportamento oscilatório da distribuição de probabilidades.

Considerando o limite da soma de Riemann, pode-se mostrar que o cálculo dos momentos pode ser aproximado por

$$\langle x^\nu \rangle = \sum_j P_v(j, n) j^\nu \approx n^{\nu+1} \int_{-\frac{1}{\sqrt{2}}+\epsilon}^{\frac{1}{\sqrt{2}}-\epsilon} P_v(\alpha, n) \alpha^\nu d\alpha \approx n^{\nu+1} \int_{-\frac{1}{\sqrt{2}}+\epsilon}^{\frac{1}{\sqrt{2}}-\epsilon} 2P_v^{(slw)}(\alpha, n) \alpha^\nu d\alpha, \quad (3.88)$$

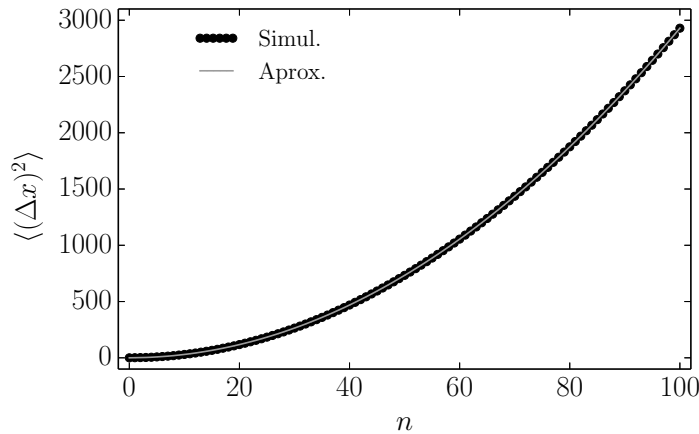
onde  $\epsilon$  é uma constante arbitrariamente pequena. Na equação acima o fator 2 é resultado do coeficiente  $1 - (-1)^{(1-\alpha)n}$ , veja as eqs. (3.47) e (3.85). Além disso, a componente  $P_v^{(osc)}(\alpha, n)$  foi desconsiderada porque ela oscila rapidamente no limite em que  $n \gg 1$  e pouco contribui para integral. Assim, o valor médio da posição e DQM são dados por

$$\langle x \rangle = \sum_j P_v(j, n) j \approx n \int_{-\frac{1}{\sqrt{2}}}^{\frac{1}{\sqrt{2}}} 2P_v^{(slw)}(\alpha, n) \alpha d\alpha = n \int_{-\frac{1}{\sqrt{2}}}^{\frac{1}{\sqrt{2}}} \frac{\alpha}{\pi |(1-\alpha^2)\sqrt{1-2\alpha^2}|} d\alpha = 0 \quad (3.89)$$

e

$$\begin{aligned} \langle (\Delta x)^2 \rangle &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \sum_j P_v(j, n) j^2 \approx n^2 \int_{-\frac{1}{\sqrt{2}}}^{\frac{1}{\sqrt{2}}} P_v^{(slw)}(\alpha, n) \alpha^2 d\alpha \\ \langle (\Delta x)^2 \rangle &\approx n^2 \int_{-\frac{1}{\sqrt{2}}}^{\frac{1}{\sqrt{2}}} \frac{\alpha^2}{\pi |(1-\alpha^2)\sqrt{1-2\alpha^2}|} d\alpha = \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\right) n^2. \end{aligned} \quad (3.90)$$

O resultado para o valor médio da posição é zero porque o integrando na eq. (3.89) é uma função ímpar integrada em um intervalo simétrico. Na fig. (3.6) temos a comparação entre os comportamentos exato e aproximado do deslocamento quadrático médio. Portanto, como no caso das distribuições de probabilidades, temos uma ótima concordância entre os resultados.



**Figura 3.6:** Comparação entre o comportamento do DMQ obtido através de simulação numérica e através do resultado aproximado dado pela eq. (3.90).

Considerando a matriz de espalhamento genérica dada na eq. (2.74), o parâmetro  $\theta$  é responsável pelo controle da probabilidade de transmissão e reflexão da partícula em cada vértice da rede. Para  $\phi = \varphi = 0$  e  $\beta = \eta = \pi/2$ , e usando o método da fase estacionária, pode-se mostrar que a distribuição de probabilidades de encontrar a partícula propagando-se para um dado sítio da rede é aproximadamente dada por

$$\begin{aligned}
P_v(\alpha, n) &= |\psi_+(\alpha, n)|^2 + |\psi_-(\alpha, n)|^2 \\
P_v(\alpha, n) &\sim \frac{(1 + (-1)^{-(1+\alpha)n})^2 \tan \theta}{2\pi n (1 - \alpha^2) \sqrt{1 - (1 + \tan^2 \theta) \alpha^2}} + \\
&\quad - \frac{(1 + (-1)^{-(1+\alpha)n})^2 \tan \theta (\cos \theta + \cos(\omega(\kappa_0) + \kappa_0))^2 \sin(2n(\omega(\kappa_0) - \alpha\kappa_0))}{4\pi n (\alpha^2 - 1) \sqrt{1 - \alpha^2 \sec^2 \theta} (\cos \theta \cos(\omega(\kappa_0) + \kappa_0) + 1)^2},
\end{aligned} \tag{3.91}$$

onde

$$\kappa_0 = \arccos \left( \frac{\alpha \tan \theta}{\sqrt{1 - \alpha^2}} \right) \tag{3.92}$$

e

$$\omega(\kappa_0) = \arcsin \left( \cos \theta \sqrt{1 - \frac{\alpha^2 \tan^2 \theta}{1 - \alpha^2}} \right). \tag{3.93}$$

Além disso, de acordo com a eq. (3.76),  $\alpha$  está contido no intervalo  $[-\cos \theta, \cos \theta]$ .

Observe que, como no exemplo anterior, podemos separar a distribuição de probabilidades em duas partes, uma assintótica e uma que oscila rapidamente no limite em que  $n \gg 1$ , tal que

$$P_v^{ass}(\alpha, n) = \frac{\tan \theta}{2\pi n (1 - \alpha^2) \sqrt{1 - (1 + \tan^2 \theta) \alpha^2}} \tag{3.94}$$

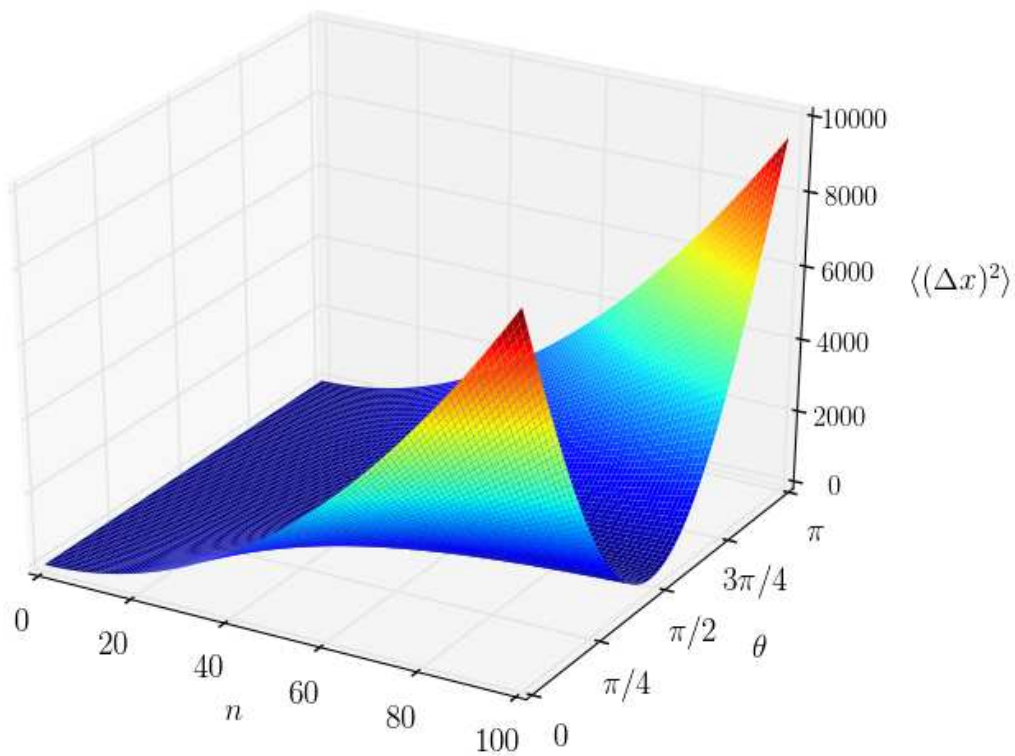
e

$$P_v^{osc}(\alpha, n) = - \frac{(1 + (-1)^{-(1+\alpha)n})^2 \tan \theta (\cos \theta + \cos(\omega(\kappa_0) + \kappa_0))^2 \sin(2n(\omega(\kappa_0) - \alpha\kappa_0))}{4\pi n (\alpha^2 - 1) \sqrt{1 - \alpha^2 \sec^2 \theta} (\cos \theta \cos(\omega(\kappa_0) + \kappa_0) + 1)^2}. \tag{3.95}$$

Logo, podemos mostrar que o deslocamento quadrático médio nesta situação é dado por

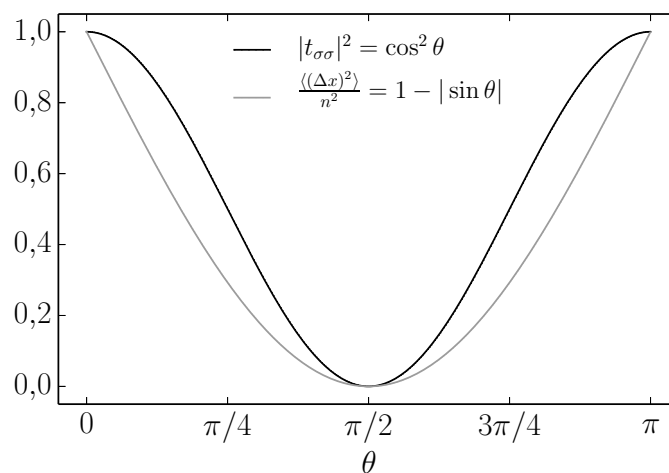
$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \approx n^2 \int_{-\cos \theta}^{\cos \theta} \frac{\alpha^2 \tan \theta}{\pi (1 - \alpha^2) \sqrt{1 - (1 + \tan^2 \theta) \alpha^2}} d\alpha = (1 - |\sin \theta|) n^2. \tag{3.96}$$

Este resultado também foi obtido em [41]. Na fig. (3.7) apresentamos o comportamento do DQM ( $\langle (\Delta x)^2 \rangle$ ) em função dos passos de tempo e do parâmetro  $\theta$ . Observa-se que para  $\theta = \pi/2$ ,  $\langle (\Delta x)^2 \rangle = 0$  pois nesse caso a partícula tende a ficar confinada, uma vez que a probabilidade de reflexão é igual a 100%. Para  $\theta = 0$  ou a  $\pi$ , obtemos o valor máximo para  $\langle (\Delta x)^2 \rangle$ , pois nesses casos a partícula tem 100% de probabilidade de ser transmitida.



**Figura 3.7:** Comportamento do DQM, eq. (3.96), em função dos passos de tempo  $n$  e do parâmetro  $\theta$ .

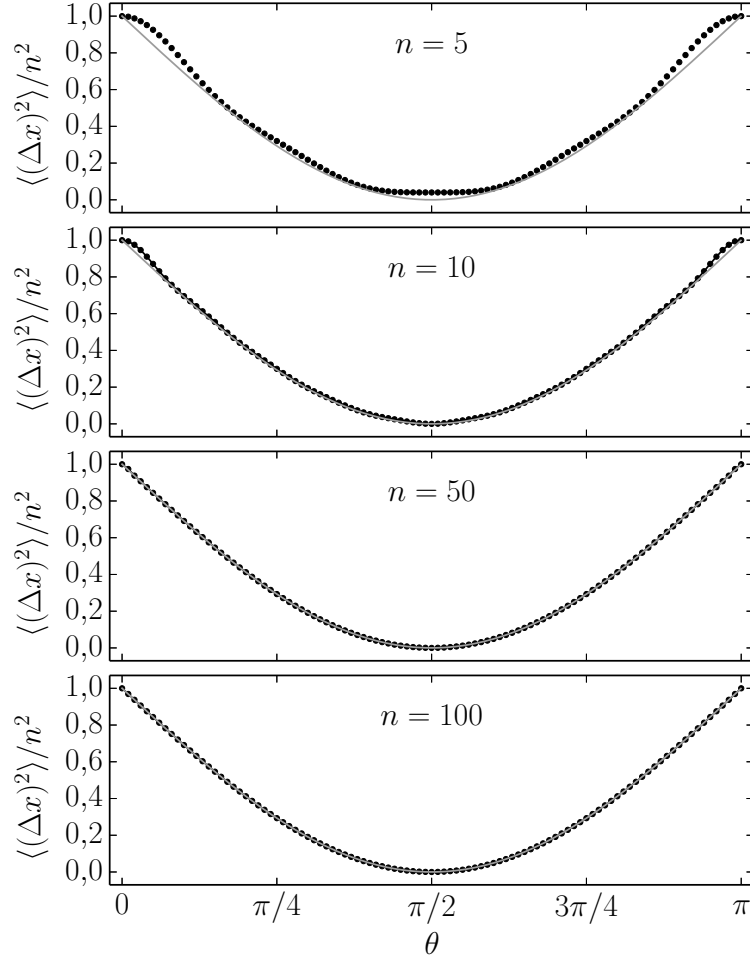
Considerando um passo de tempo fixo  $n > 0$ , verifica-se que o comportamento do DQM dado pela eq. (3.96) possui um comportamento similar à probabilidade de transmissão,  $|t_{\sigma\sigma}|^2 = \cos^2 \theta$ , como pode ser visto no gráfico da fig. (3.8).



**Figura 3.8:** Comportamento da probabilidade de transmissão e do DQM (normalizado pelos passos de tempo) em função do parâmetro  $\theta$ .

Na fig. (3.9) temos a comparação dos valores do deslocamento quadrático médio em função do parâmetro  $\theta$ , para diversos valores de passos de tempo, obtidos de forma exata a

partir da simulação numérica da equação  $|\Psi_n\rangle = \hat{U}^n|\Psi_0\rangle$ , com a previsão aproximada dada na eq. (3.96). Analisando os gráficos da fig. (3.9), constatamos que a previsão aproximada e a solução exata tem uma ótima concordância no limite que  $n \gg 1$ . Entretanto, mesmo para os valores onde  $n \sim 1$ , a eq. (3.96) fornece resultados razoáveis.



**Figura 3.9:** Comparação dos valores obtidos para o deslocamento quadrático médio em função do parâmetro  $\theta$  obtidos via simulação numérica com os resultados aproximados obtidos através da eq. (3.96), para diversos valores de passos de tempo. Ponto em preto simulação numérica; linha contínua em cinza valor aproximado.

### 3.4 Bandas de Energia, Velocidade de Grupo e Densidade de Estados

Considere uma partícula livre cujo operador hamiltoniano é dado por

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m}, \quad (3.97)$$



onde

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad (3.98)$$

é a equação de Schrödinger independente do tempo para esse hamiltoniano. A solução da eq. (3.98) é formada pela combinação linear de ondas planas e a auto-energia (o que nos interessa nesse momento) é dada por

$$E = \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}. \quad (3.99)$$

Observe que a auto-energia pode assumir qualquer valor, uma vez que  $\kappa$  é uma variável contínua.

Para o caso onde a partícula está sujeita a um potencial, o hamiltoniano do sistema é dado por

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + U(\hat{X}). \quad (3.100)$$

Então, se  $U(\hat{X})$  é um potencial confinante, por exemplo um poço de potencial com altura infinita (partícula confinada em uma caixa), devido a continuidade da função de onda nas paredes da caixa, a auto-energia passa assumir apenas certos valores discretos. Neste caso,

$$E_\mu = \frac{\hbar^2\kappa_\mu^2}{2m}, \quad (3.101)$$

onde

$$\kappa_\mu = \frac{\mu\pi}{a}, \quad (3.102)$$

$\mu \in \mathbb{Z}$  e  $a$  é a largura do poço.

Certos materiais sólidos (metais em geral) têm seus átomos organizados de forma geométrica (rede) gerando uma estrutura cristalina, o que resulta em uma periodicidade no potencial. Assim, as auto-energias para uma partícula submetida a esse potencial periódico deverão ser um misto dos dois casos discutidos anteriormente. Nesta nova situação, a partícula pode ocupar faixas de energias permitidas separadas por lacunas de energias proibidas. As faixas de energias permitidas são denominadas de “bandas” e as lacunas de “*gap*”. Tais quantidades desempenham um papel importante na classificação de um material como sendo um condutor, isolante ou semi-condutor [143].

Uma vez posta a discussão nos parágrafos anteriores, podemos encarar uma CQE, cujo operador evolução temporal é caracterizado em cada sítio da rede pela matriz genérica dada pela eq. (2.74), com sendo uma partícula movendo-se em um potencial periódico. Neste

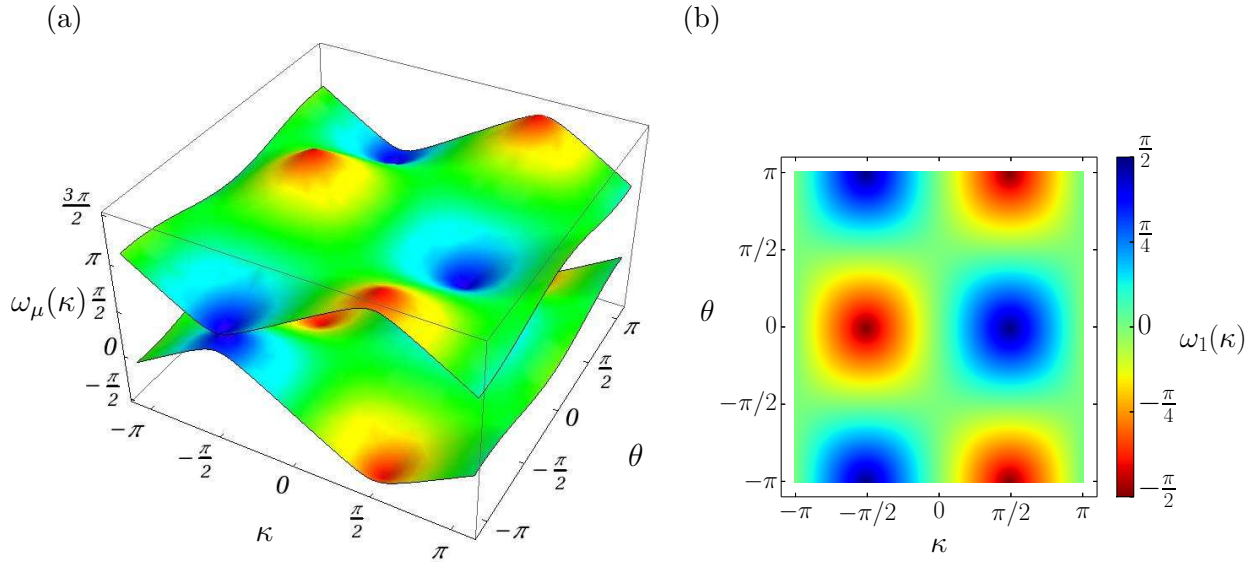
caso, suas bandas de energia são dadas pela eq. (3.28), isto é,

$$\omega_\mu(\kappa) = \frac{\pi(1 + (-1)^\mu)}{2} - (-1)^\mu \arcsin(\cos \theta \sin(\kappa - \phi - \varphi)), \quad (3.103)$$

onde  $\mu = 1; 2$ . Observe que os parâmetros  $\phi$  e  $\varphi$  representam apenas uma fase e não influenciam nos valores máximo ou mínimo da banda de energia. Assim, sem perda de generalidade, vamos assumir que  $\phi = \varphi = 0$ . Neste caso as bandas de energias, eq. (3.103), se reduzem a

$$\omega_\mu(\kappa) = \frac{\pi(1 + (-1)^\mu)}{2} - (-1)^\mu \arcsin(\cos \theta \sin \kappa). \quad (3.104)$$

Na fig. (3.10) apresentamos o gráfico de  $\omega_\mu$  em função de  $\kappa$  e  $\theta$ .



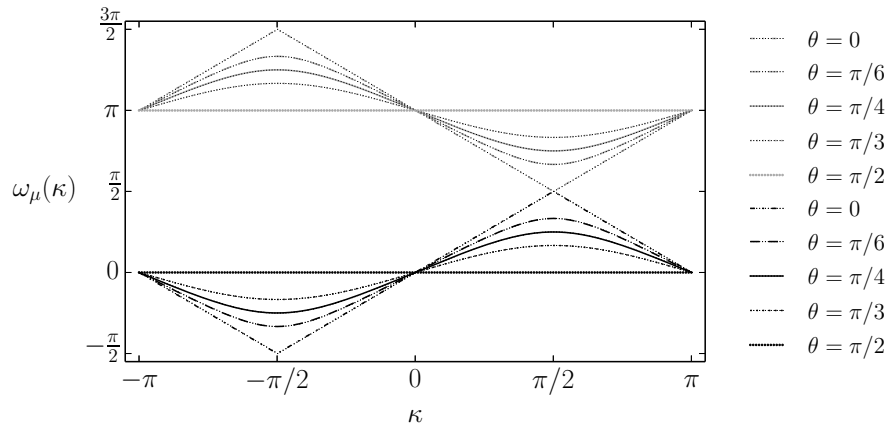
**Figura 3.10:** Em (a) temos o gráfico em três dimensões de  $\omega_\mu(\kappa)$  em função do número de onda  $\kappa$  e do parâmetro  $\theta$ , onde as banda inferiores correspondem a  $\omega_1(\kappa)$  e as superiores a  $\omega_2(\kappa)$ . Observe que uma banda é o reflexo da outra. Em (b) mostramos  $\omega_1(\kappa)$  em um gráfico bidimensional.

Para exemplificar algumas dessas bandas de energia admitimos os seguintes valores para  $\theta$ :  $\{0, \pi/6, \pi/4, \pi/3, \pi/2\}$ , na fig. (3.11). Observa-se que  $\omega_+$  é o reflexo de  $\omega_-$ . Lembrando que, para  $\phi = \varphi = 0$ , a matriz de espalhamento é dada por

$$\hat{\Gamma}_\theta = \begin{pmatrix} t & r \\ r & -t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}, \quad (3.105)$$

onde  $t$  e  $r$  correspondem, respectivamente, aos coeficientes de transmissão e reflexão. Então, para  $\theta = 0$  a partícula encontra 100% de probabilidade de ser transmitida. Nesta

situação, ela se comporta como uma partícula relativística sem massa, pois a relação de dispersão entre a energia e o *momentum* é linear ( $\omega_\mu(\kappa) \propto |\kappa|$ ), diferentemente do que ocorre para uma partícula livre não-relativística, onde  $\omega(\kappa) \propto \kappa^2$ , ver eq. (3.99). Além disso, as bandas se tocam no ponto  $\kappa = \pi/2$ , isto é, o *gap* mínimo de energia entre elas é nulo. À medida que o valor de  $\theta$  se aproxima de  $\pi/2$  a probabilidade da partícula ser transmitida é reduzida, e o *gap* mínimo entre as bandas de energia aumenta. Para  $\theta = \pi/2$  temos 100% de probabilidade da partícula ser refletida, levando ao confinamento da partícula nas arestas associadas ao estado inicial do sistema. Neste caso o *gap* entre as bandas de energia é máximo.



**Figura 3.11:** Gráficos de  $\omega_\mu(\kappa)$  em função do número de onda  $\kappa$  para diferentes valores de  $\theta$ . As curvas em preto correspondem a  $\omega_1(\kappa)$  e as curvas em cinza a  $\omega_2(\kappa)$ .

Analisando as figs. (3.10) e (3.11), observamos que  $\omega_\mu(\kappa)$  os pontos de mínimo e máximo na banda de energia são dados por  $\kappa = \pm\pi/2$ , tal que,  $\omega_1(\kappa)$  ( $\omega_2(\kappa)$ ) possui, respectivamente, um ponto de mínimo (máximo) para  $\kappa = -\pi/2$  e de máximo (mínimo) em  $\kappa = +\pi/2$ . Assim, as bandas de energia estão limitadas em

$$[\omega_\mu(-\pi/2), \omega_\mu(\pi/2)],$$

que em termos do parâmetro  $\theta$  é dado por

$$-\arcsin(\cos \theta) \leq \omega_1(\kappa) \leq \arcsin(\cos \theta) \quad (3.106)$$

e

$$\pi - \arcsin(\cos \theta) \leq \omega_2(\kappa) \leq \pi + \arcsin(\cos \theta). \quad (3.107)$$

Além disso, as duas bandas são caracterizada por um *gap* de energia, cujo valor mínimo é dado por

$$\omega_{gap} = \omega_2(\pi/2) - \omega_1(\pi/2) = 2 \arccos(\cos \theta) = 2|\theta|. \quad (3.108)$$

A existência de bandas de energia implica em importantes consequências no movimento da partícula pela rede. Assim, uma quantidade relevante para a investigação do sistema é a velocidade de grupo das autofunções de  $\hat{U}$  (“velocidade de média da partícula”). Portanto, se o estado do sistema é dado pelo autoestado  $|\Phi_{\mu\kappa}\rangle$  de  $\hat{U}$  e cujo autovalor é  $\omega_\mu(\kappa)$ , então a velocidade de grupo é dada

$$v_\mu(k) = d_\kappa [\omega_\mu(\kappa)]. \quad (3.109)$$

A eq. (3.109) expõe um fato relevante. Se o estado do sistema é dado por um autoestado do operador evolução (isto é, independente do tempo), então a partícula, mesmo interagindo com os sítios da rede (que podem ser descritos através de um potencial periódico), move-se com uma velocidade constante. Este fato está em flagrante contraste, por exemplo, com o modelo de Drude para a condução eletrônica, onde as partículas sofrem colisões nos sítios da rede (caroços iônicos) alterando sua velocidade [143].

As velocidades de grupo, associadas às bandas de energias dadas na eq. (3.104), são dadas por

$$v_\mu(\kappa) = d_\kappa [\omega_\mu(\kappa)] = -\frac{(-1)^\mu \cos \theta \cos \kappa}{\sqrt{1 - \cos^2 \theta \sin^2 \kappa}}. \quad (3.110)$$

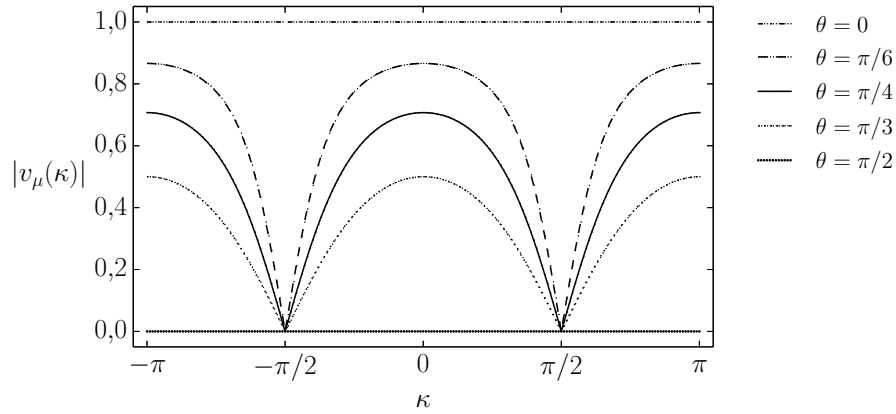
Observe que  $v_1(\kappa)$  e  $v_2(\kappa)$  possuem a mesma magnitude mas com sinais opostos, isto é,  $v_1(\kappa) = -v_2(\kappa)$ . Verifica-se que  $v_\mu(\kappa)$  está limitada entre  $[-\cos \theta, +\cos \theta]$ , e que para  $\kappa = \pm\pi/2$ , tem-se  $v_\mu = 0$ . Na fig. (3.12) temos os gráficos de  $|v_\mu(\kappa)|$  para os valores de  $\theta$ . Observa-se que para  $\theta = \pi/2$ ,  $|v_\mu(\kappa)| = 0$ , pois a partícula está confinada, e para  $\theta = 0$  a  $|v_\mu(\kappa)| = 1$ , o que caracteriza o deslocamento de uma partícula livre. Ademais, observa-se que, para um dado valor de  $\kappa \neq \pm\pi/2$ , o módulo de  $v_\mu(\kappa)$  cresce a medida que  $\theta$  se afasta de  $\pi/2$ . Isso ocorre porque a probabilidade de transmissão,  $|t_{\sigma\sigma}|^2 = \cos^2 \theta$ , aumenta a medida que  $\theta$  se afasta de  $\pi/2$ , o que confere uma maior mobilidade da partícula pela rede.

A densidade de estados por unidade de volume (que por simplicidade vamos chamar apenas de “densidade de estados”) é essencialmente o número de estados por unidade de volume por unidade de energia que a partícula pode ocupar [145]. Tal quantidade é definida por

$$g(\omega) = \sum_\mu g_\mu(\omega), \quad (3.111)$$

onde  $g_\mu(\omega)$  é a densidade de estados da  $\mu$ -ésima banda de energia e

$$g_\mu(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa \delta(\omega - \omega_\mu(\kappa)). \quad (3.112)$$



**Figura 3.12:** Gráficos de  $v_\mu(\kappa)$  em função do número de onda  $\kappa$  para diferentes valores de  $\theta$ , onde as curvas contínuas correspondem a  $v_1(\kappa)$  e as tracejadas a  $v_2(\kappa)$ .

Além disso, note que

$$g_\mu(\omega)d\omega = \text{o número de estados quânticos com energia entre } \omega \text{ e } \omega + d\omega. \quad (3.113)$$

O número de estado na faixa de energia  $d\omega$  com energia entre  $\omega$  e  $\omega + d\omega$  é dado por  $d\kappa/V_{ZB}$ , onde  $V_{ZB}$  é o volume da primeira zona de Brillouin. Logo, considerando que para a rede linear  $V_{ZB} = 2\pi$ , a eq. (3.113) temos

$$g_\mu(\omega)d\omega = \frac{1}{2\pi}d\kappa. \quad (3.114)$$

Conseqüentemente,

$$g_\mu(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{d\kappa}{d\omega}. \quad (3.115)$$

Da eq. (3.112), observamos que a única faixa de energia que contribuem para a densidade de estados é dada por  $\omega = \omega_\mu(\kappa)$ . Logo, invertendo as expressões da eq. (3.104), obtemos

$$\kappa(\omega) = \arcsin\left(\frac{\sin(\omega)}{\cos\theta}\right). \quad (3.116)$$

Segue que a derivada  $\kappa(\omega)$  em relação a  $\omega$ , é da por

$$\frac{d\kappa}{d\omega} = \left| \frac{\cos(\omega)}{\sqrt{\cos^2\theta - \sin^2(\omega)}} \right|, \quad (3.117)$$

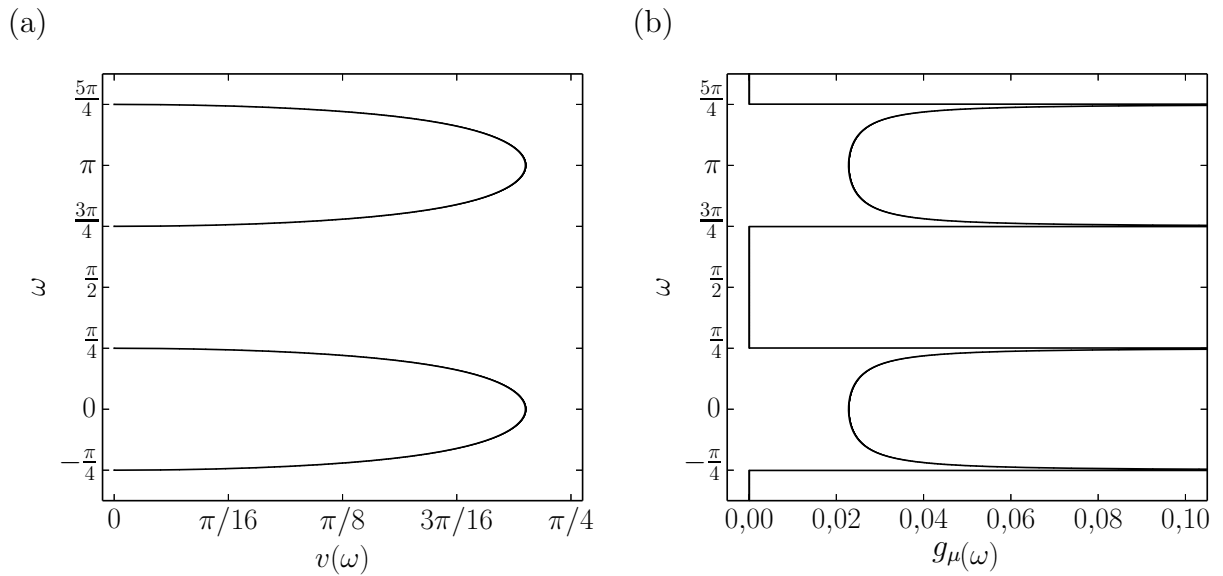
cuja inversa é a velocidade média em função de  $\omega$ , veja a eq. (3.109), isto é

$$v(\omega) = \begin{cases} \left| \frac{\sqrt{\cos^2 \theta - \sin^2(\omega)}}{\cos(\omega)} \right| & \text{se } \omega \in [\min\{\omega_\mu(\kappa)\}, \max\{\omega_\mu(\kappa)\}], \\ 0 & \text{para outros valores de } \omega. \end{cases} \quad (3.118)$$

Assim, a densidade de estados da  $\mu$ -ésima banda é dada por

$$g_\mu(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{d\kappa}{d\omega} = \begin{cases} \frac{1}{2\pi} \left| \frac{\cos(\omega)}{\sqrt{\cos^2 \theta - \sin^2(\omega)}} \right| & \text{se } \omega \in [\min\{\omega_\mu(\kappa)\}, \max\{\omega_\mu(\kappa)\}], \\ 0 & \text{para outros valores de } \omega. \end{cases} \quad (3.119)$$

Nos gráficos da fig. (3.13) mostramos o módulo das velocidades de grupo, eq. (3.118), e da densidade de estados, eq. (3.119), em função de  $\omega$  para  $\theta = \pi/4$ . Observa-se que a densidade de estados diverge nos pontos onde a velocidade de grupo se anula, isto é, os pontos de mínimo ou máximo das bandas de energia. Esses pontos são denominados de singularidades de van Hove [148], que são importantes, por exemplo, na caracterização espectroscópica, pois elas definem propriedades ópticas do material [149, 150].



**Figura 3.13:** (a) Módulo das velocidades de grupo, as curvas superior e inferior estão associadas, respectivamente, às bandas  $\omega_1(\kappa)$  e  $\omega_2(\kappa)$ ; (b) densidade de estados.

# Caminhadas Quânticas em Redes Bidimensionais Regulares

Neste capítulo, tendo o caso unidimensional como modelo, estendemos o formalismo para construir as CQEs para redes bidimensionais cujos vértices possuem o mesmo número de ligações, cada par de vértice é ligado por apenas uma aresta e os vértices não possuem laços, ou seja, elas são grafos regulares [151–153]. Além disso, abordamos brevemente as CACs em tais redes. Encerramos o capítulo exemplificando esse formalismo para redes constituídas por polígonos regulares (quadrada e triangular).

## 4.1 O Formalismo

Considere uma rede regular bidimensional cujos vértices possuem  $l$  ligações com seus vizinhos. Assim, como no caso unidimensional, a evolução do sistema ocorre em intervalos de tempos discretos, e a cada passo de tempo a partícula sofre processos de espalhamento nos vértices da rede. Estes processos são governados pelo operador unitário de evolução temporal,  $\hat{U}$ , que é caracterizado, em cada vértice, por  $l^2$  coeficientes  $\Gamma$ 's denominados de amplitudes de espalhamento.

### 4.1.1 Estados de Base do Sistema

O sistema é descrito pelos estados de base  $\{|\sigma, j, k\rangle\}$ , onde o número quântico  $\sigma$  está associado à direção e ao sentido de propagação da partícula nas arestas e o par ordenado  $(j, k)$ , de números inteiros, é o rótulo do vértice para o qual ela está evoluindo. Além

disso,  $j$  e  $k$  estão, respectivamente, relacionados com as direções ortogonais  $\hat{e}_x$  e  $\hat{e}_y$  no plano cartesiano.

Em uma rede regular, cada vértice faz  $l$  ligações com seus vizinhos, portanto,  $\sigma$  deve assumir  $l$  valores distintos, cada um deles associados a um possível sentido de propagação da partícula pelas arestas ligadas ao vértice. Tais estados formam uma base para o espaço de Hilbert do sistema,  $\mathcal{H}$ , tal que, são válidas as relações de ortonormalidade e completiza:

$$\langle \sigma, j, k | \sigma', j', k' \rangle = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{jj'} \delta_{kk'} \quad (4.1)$$

e

$$\hat{\mathbf{1}} = \sum_{j,k} \sum_{\sigma} |\sigma, j, k\rangle \langle \sigma, j, k|. \quad (4.2)$$

Observe que a dimensão do espaço de Hilbert é dada pelo dobro do número de arestas da rede, uma vez que cada uma delas abriga dois estados possíveis do sistema. Obviamente, para redes ilimitadas a dimensão de  $\mathcal{H}$  é infinita. Ademais, admitimos que o estado  $|\sigma, j, k\rangle$  é autovetor do operador posição, tal que

$$\hat{X}|\sigma, j, k\rangle = x_j|\sigma, j, k\rangle \quad (4.3)$$

e

$$\hat{Y}|\sigma, j, k\rangle = y_k|\sigma, j, k\rangle, \quad (4.4)$$

onde  $x_j$  e  $y_j$  são as coordenadas do sítio  $(j, k)$  no plano cartesiano.

Além disso, associamos ao grau de liberdade auxiliar  $\sigma$ , o operador “ $\hat{S}_z$ ”, tal que

$$\hat{S}_z|\sigma, j, k\rangle = \sigma|\sigma, j, k\rangle. \quad (4.5)$$

O espaço de Hilbert do sistema,  $\mathcal{H}$ , pode ser decomposto em termos do produto tensorial

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_c \otimes \mathcal{H}_{x \times y}, \quad (4.6)$$

onde  $\mathcal{H}_c$  contém os estados que descrevem o grau de liberdade auxiliar que está associado ao número quântico  $\sigma$ , e  $\mathcal{H}_{p_x \times p_y}$  descreve os graus de liberdade associados a posição na rede a qual é dada pelos números quânticos  $j$  e  $k$ . Portanto, o estado  $|\sigma, j, k\rangle$  pode ser decomposto em termos do produto tensorial

$$|\sigma, j, k\rangle = |\sigma\rangle_c \otimes |j, k\rangle_{x \times y}, \quad (4.7)$$



tal que o estado  $|\sigma\rangle_c \in \mathcal{H}_c$  e  $|j, k\rangle_x \in \mathcal{H}_{x \times p_y}$ .

Uma vez que a dimensão do subespaço  $\mathcal{H}_c$  é  $l$ , podemos representar os seus estados de base  $\{|\sigma\rangle_c\}$  matricialmente por

$$|\sigma_1\rangle_c = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |\sigma_2\rangle_c = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, |\sigma_{l-1}\rangle_c = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |\sigma_l\rangle_c = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4.8)$$

de tal maneira que o operador  $\hat{S}_z$  nesta base é uma matriz de ordem  $l$  dada por

$$\hat{S}_z = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_{l-1} & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \sigma_l \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

### 4.1.2 Operador de Evolução Temporal

O sistema evolui sob a ação do operador de evolução temporal  $\hat{U}$ . Se o estado do sistema no passo de tempo  $n$  é  $|\Psi_n\rangle$  então no passo de tempo seguinte temos

$$|\Psi_{n+1}\rangle = \hat{U}|\Psi_n\rangle. \quad (4.10)$$

Assim, se em  $n = 0$ , o sistema é descrito por  $|\Psi_0\rangle$ , então em  $n$  tem-se que

$$|\Psi_n\rangle = \hat{U}^n|\Psi_0\rangle. \quad (4.11)$$

A ação do operador evolução temporal em um estado de base é definida por

$$\hat{U}|\sigma, j, k\rangle = \sum_{\sigma'} \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j,k)} |\sigma', f(\sigma', j, k), g(\sigma', j, k)\rangle \quad (4.12)$$

e

$$\hat{U}^\dagger|\sigma, j, k\rangle = \sum_{\sigma'} \Gamma_{\sigma\sigma'}^{[\tilde{f}(\sigma, j, k), \tilde{g}(\sigma, j, k)]^*} |\sigma', \tilde{f}(\sigma, j, k), \tilde{g}(\sigma, j, k)\rangle, \quad (4.13)$$

onde, os coeficientes  $\Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j,k)}$  são denominados de amplitudes de espalhamento e os pares de funções  $(f(\sigma, j, k), g(\sigma, j, k))$  e  $(\tilde{f}(\sigma, j, k), \tilde{g}(\sigma, j, k))$  representam as coordenadas dos vértices adjacentes ao sítio  $(j, k)$ .

Usando a relação de completeza, Eq. (4.2) e considerando a ação do operador evolução temporal nos estados de base, Eq. (4.12), a Eq. (4.10) é dada por

$$|\Psi_{n+1}\rangle = \sum_{j,k} \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \psi_{\sigma}(j, k, n) \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j,k)} |\sigma', f_{\sigma'}(j, k), g_{\sigma'}(j, k)\rangle, \quad (4.14)$$

onde

$$\psi_{\sigma}(j, k, n) = \langle \sigma, j, k | \Psi_n \rangle \quad (4.15)$$

é a componente  $\sigma$  da função de onda no passo de tempo  $n$  e associada ao vértice  $(j, k)$ .

Naturalmente da unitariedade do operador de evolução temporal,  $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{\mathbf{1}}$ , os coeficientes,  $\Gamma_{\sigma\sigma'}^{(j,k)}$  devem satisfazer, em cada vértice, as seguintes relações

$$\sum_{\sigma} \Gamma_{\sigma\sigma'}^{(j,k)*} \Gamma_{\sigma\sigma''}^{(j,k)} = \sum_{\sigma} \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j,k)*} \Gamma_{\sigma''\sigma}^{(j,k)} = \delta_{\sigma'\sigma''}, \quad (4.16)$$

e as funções  $f(\sigma, j, k)$ ,  $g(\sigma, j, k)$ ,  $\tilde{f}(\sigma, j, k)$  e  $\tilde{g}(\sigma, j, k)$  devem exibir as seguintes propriedades

$$f[\sigma, \tilde{f}(\sigma, j, k), \tilde{g}(\sigma, j, k)] = \tilde{f}[\sigma, f(\sigma, j, k), g(\sigma, j, k)] = j \quad (4.17)$$

e

$$g[\sigma, \tilde{f}(\sigma, j, k), \tilde{g}(\sigma, j, k)] = \tilde{g}[\sigma, f(\sigma, j, k), g(\sigma, j, k)] = k. \quad (4.18)$$

Finalmente, como no caso unidimensional, organizamos os coeficientes  $\Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j,k)}$ , que descrevem os processos de espalhamento que a partícula sofre, em uma matriz quadrada e unitária de ordem  $l$ . Na base dos autovetores do operador  $\hat{S}_z$ , eq. (4.9), ela é dada por

$$\Gamma^{(j,k)} = \begin{pmatrix} \Gamma_{\sigma_1\sigma_1}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_1\sigma_2}^{(j,k)} & \cdots & \Gamma_{\sigma_1\sigma_{l-1}}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_1\sigma_l}^{(j,k)} \\ \Gamma_{\sigma_2\sigma_1}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_2\sigma_2}^{(j,k)} & \cdots & \Gamma_{\sigma_2\sigma_{l-1}}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_2\sigma_l}^{(j,k)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \Gamma_{\sigma_{l-1}\sigma_1}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_{l-1}\sigma_2}^{(j,k)} & \cdots & \Gamma_{\sigma_{l-1}\sigma_{l-1}}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_{l-1}\sigma_l}^{(j,k)} \\ \Gamma_{\sigma_l\sigma_1}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_l\sigma_2}^{(j,k)} & \cdots & \Gamma_{\sigma_{l-1}\sigma_l}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_l\sigma_l}^{(j,k)} \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

Alguns exemplos interessantes de matrizes de espalhamento são:

- a matriz de Grover, que é comumente usada no desenvolvimento de algoritmos

quânticos de busca, que podem ser baseados em CQs em tempo discreto [154–156]. Os elementos de uma matriz de Grover de ordem  $D$  são dados por

$$\Gamma_{\sigma\sigma'}^{GRO_D} = \begin{cases} -1 + \frac{2}{D} & \text{se } \sigma = \sigma', \\ \frac{2}{D} & \text{se } \sigma \neq \sigma'; \end{cases} \quad (4.20)$$

- a matriz da Transformada Discreta de Fourier (TDF) [157, 158], que é utilizada na análise, filtro e correções de sinais, análise de espectros, sistema de identificação e compressão de áudio (por exemplo MPEG-II AAC) [159]. Os coeficientes de uma matriz de TDF de ordem  $D$  são dados por

$$\Gamma_{\sigma\sigma'}^{TDF_D} = \frac{1}{\sqrt{D}} \exp\left(-\frac{2\pi i(\sigma-1)(\sigma'-1)}{D}\right); \quad (4.21)$$

- a matriz de Transformada Discreta de Hartlye (TDH) [160? ], embora não seja usualmente considerada em problemas de caminhadas quânticas, é um interessante exemplo devido às suas aplicações em processamento de sinais [161, 162]. As entradas de uma matriz TDH de ordem  $D$  são dadas por

$$\Gamma_{\sigma\sigma'}^{TDH_D} = \frac{1}{\sqrt{D}} \left( \cos\left(-\frac{2\pi(\sigma-1)(\sigma'-1)}{D}\right) + \sin\left(-\frac{2\pi(\sigma-1)(\sigma'-1)}{D}\right) \right). \quad (4.22)$$

### 4.1.3 Probabilidades

A probabilidade de encontrar a partícula propagando-se na direção e sentido associado aos valores de  $\sigma$  é dada por

$$P_c(\sigma, n) = \sum_{j,k} |\langle \sigma, j, k | \Psi_n \rangle|^2 = \sum_{j,k} |\psi_\sigma(j, k, n)|^2 \quad (4.23)$$

e a probabilidade de encontrar a partícula convergindo para o vértice  $(j, k)$  é dada por

$$P_v(j, k, n) = \sum_{\sigma} |\langle \sigma, j, k | \Psi_n \rangle|^2 = \sum_{\sigma} |\psi_\sigma(j, k, n)|^2. \quad (4.24)$$

### 4.1.4 Resumindo os Passos para a Implementação das CQs

Resumindo, para determinar o operador evolução temporal do sistema  $\hat{U}$  para implementar as caminhadas quânticas nas redes regulares bidimensionais, devemos:

- (i) – determinar a estrutura do espaço de Hilbert do sistema;
- (ii) – definir os valores de  $\sigma$  que caracterizam os estados de base do sistema,  $|\sigma, j, k\rangle$ ;
- (iii) – determinar as coordenadas dos sítios  $(j, k)$  no plano cartesiano;
- (iv) – construir as funções  $f(\sigma, j, k)$ ,  $g(\sigma, j, k)$ ,  $\tilde{f}(\sigma, j, k)$  e  $\tilde{g}(\sigma, j, k)$ ;
- (v) – definir as amplitudes de espalhamento  $\Gamma_{\sigma\sigma'}$  em cada vértice da rede.

Por exemplo, para CQE na rede linear discutida na seção 2.4 temos:

- o espaço de Hilbert é composto por um grau de liberdade de posições discretas espaçadas igualmente em uma rede linear e por um grau de liberdade auxiliar tipo spin 1/2, cujos estados de base são dados por  $\{|\sigma, j\rangle\}$ ;
- $\sigma = \pm 1$ ;
- $x_j = j\ell$ , onde  $\ell = 1$  é a distância que separa dois sítios adjacentes;
- $f(\sigma, j) = j + \sigma$  e  $\tilde{f}(\sigma, j) = j - \sigma$ ;
- $\Gamma_{++}^{(j)} = \Gamma_{+-}^{(j)} = \Gamma_{-+}^{(j)} = -\Gamma_{--}^{(j)} = 1/\sqrt{2}$  para o caso do caminho de Hadamard.

## 4.2 Caminhadas Aleatórias Clássicas

O conceito de CAC, introduzido na seção (2.1), pode ser estendido naturalmente para redes em duas e três dimensões, e em especial para redes regulares bidimensionais. Isso pode ser feito generalizando a relação de recorrência da eq. (2.4) para o caso unidimensional para

$$P_v(j, k, n) = \sum_{\sigma=1}^l p_{\sigma}^{(j,k)} P_v(f(\sigma, j, k), g(\sigma, j, k), n-1), \quad (4.25)$$

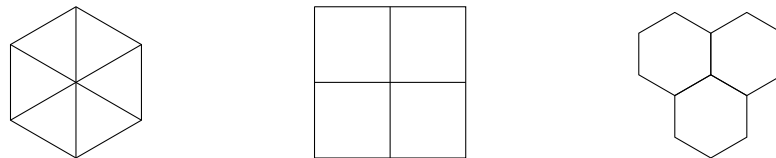
com condições iniciais apropriadas. Na eq. (4.25),  $P_v(j, k, n)$  é a probabilidade de se encontrar a partícula no sítio  $(j, k)$  no passo de tempo  $n$ ,  $(f(l, j, k), g(l, j, k))$  são as coordenadas dos vértices conectados ao vértice  $(j, k)$  e  $p_{\sigma}^{(j,k)}$  é a probabilidade da partícula saltar do sítio  $(j, k)$  para o sítio  $(f(\sigma, j, k), g(\sigma, j, k))$ , tal que

$$\sum_{\sigma=1}^l p_{\sigma}^{(j,k)} = 1, \quad (4.26)$$

onde  $l$  é o número de arestas ligadas ao vértice  $(j, k)$ .

### 4.3 Redes Formadas por Polígonos Regulares

O ladrilhamento de uma superfície consiste em recobri-la usando um conjunto de formas (azulejos ou ladrilhos) de maneira a não superpô-las e nem deixar espaços entre elas [163]. O primeiro a realizar uma classificação de ladrilhamento por polígonos regulares foi o astrônomo e matemático alemão J. Kepler em 1619 no livro “*Harmonices Mundi*”, que foi traduzido para o inglês com o título “*The Harmony of the World*” [106]. Em seu livro, Kepler mostra que existem apenas 11 formas de recobrir todo o plano Euclidiano utilizando apenas polígonos regulares mantendo a mesma disposição nos vértices, e que tais ladrilhamentos são obtidos com no máximo três polígonos regulares distintos. Entretanto, estamos interessados em recobrir o plano com apenas um tipo de polígono, o que é possível usando apenas triângulos equiláteros, quadrados ou hexágonos, fig. (4.1), [106–108].



**Figura 4.1:** Os três possíveis ladrilhamentos do plano utilizando apenas um tipo de polígono regular.

Para demonstrar que só podemos usar apenas triângulos equiláteros, quadrados ou hexágonos para recobrir o plano com polígonos regulares de apenas um tipo [163], vamos considerar que um vértice da rede deve ser formado por arestas de  $m$  polígonos regulares. Assim, como os ângulos internos de polígonos regulares são dado por

$$\theta = \frac{(n-2)\pi}{n}, \quad (4.27)$$

onde  $n$  é o número de lados do polígono. Em um dado vértice devemos ter

$$m\theta = m \frac{(n-2)\pi}{n} = 2\pi. \quad (4.28)$$

Manipulando a eq. (4.28), obtemos a seguinte expressão

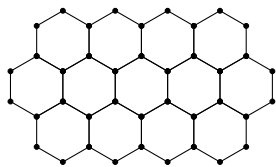
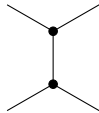
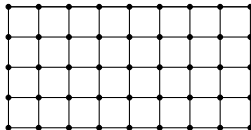
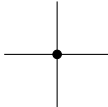
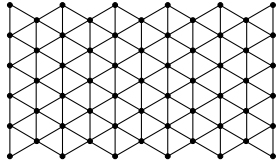
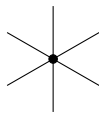
$$m - 2 = \frac{4}{n - 2}. \quad (4.29)$$

Uma vez que  $m - 2$  deve ser um número inteiro positivo, as únicas soluções que

satisfazem a eq. (4.29), são

$$(m = 6, n = 3), (m = 4, n = 4), (m = 3, n = 6). \quad (4.30)$$

A primeira solução revela que, em cada vértice, devemos ter seis triângulos equiláteros, na segunda quatro quadrados e na terceira três hexágonos, veja a fig. (4.1). Na tab. (4.1) temos as características básicas das três redes regulares constituídas por esses polígonos.

Nome da Rede	Rede	Estrutura Base	$l$
Hexagonal			3
Quadrada			4
Triangular			6

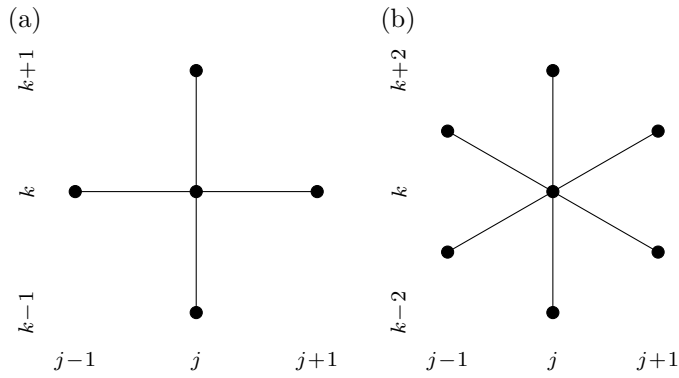
**Tabela 4.1:** Redes constituídas por polígonos regulares. Na segunda coluna, temos um segmento da rede, enquanto que na terceira temos a estrutura base que a constitui, e na quarta, temos o número de ligações,  $l$ , que cada vértice faz com seus vizinhos.

## 4.4 Caminhadas Quânticas nas Redes Quadrada e Triangular

Nesta sessão, a fim de exemplificar o desenvolvimento deste capítulo, implementamos as CQEs nas redes quadrada ( $l = 4$ ) e triangular ( $l = 6$ ). Em capítulos posteriores abordaremos a rede hexagonal, que é o foco principal desta tese.

As estruturas topológicas e a rotulação dos vértices para as redes quadrada e triangular são apresentadas na fig. (4.2). Além disso, vamos assumir que a distância entre um vértice e seus primeiro vizinhos é igual a um.

O primeiro passo para a construção das CQs é definir e associar os valores do número quântico  $\sigma$  com o sentidos de propagação da partícula pelas arestas da rede. Assim,

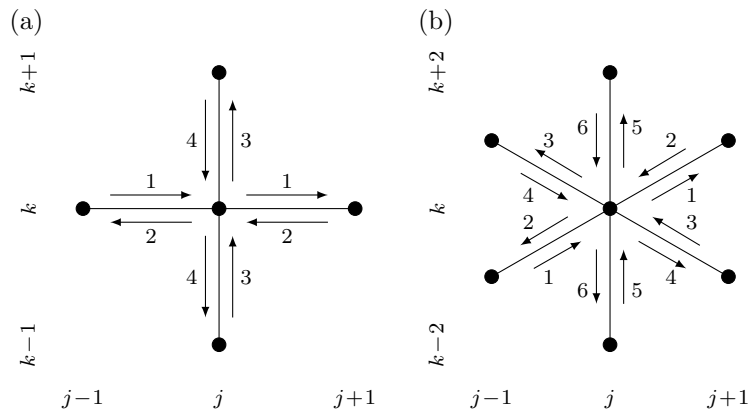


**Figura 4.2:** Estrutura topológica e rotulação dos vértices para as redes (a) quadrada e (b) triangular.

assumimos que

$$\sigma = \{1, 2, \dots, l\}. \tag{4.31}$$

Na fig. (4.3) temos a associação de cada valor de  $\sigma$  com a direção e sentido de propagação da partícula.



**Figura 4.3:** Associações dos valores de  $\sigma$  com as direções e sentido de propagação da partícula para as redes (a) quadrada e (b) triangular.

As funções  $f(\sigma, j, k)$ ,  $g(\sigma, j, k)$ ,  $\tilde{f}(\sigma, j, k)$  e  $\tilde{g}(\sigma, j, k)$  são definidas por:

- rede quadrada,  $l = 4$ ,

$$f(\sigma, j, k) = \begin{cases} j + 1 & \text{se } \sigma = 1 \\ j - 1 & \text{se } \sigma = 2 \\ j & \text{se } \sigma = 3 \\ j & \text{se } \sigma = 4 \end{cases}, \tag{4.32}$$

$$g(\sigma, j, k) = \begin{cases} k & \text{se } \sigma = 1 \\ k & \text{se } \sigma = 2 \\ k + 1 & \text{se } \sigma = 3 \\ k - 1 & \text{se } \sigma = 4 \end{cases}, \quad (4.33)$$

$$\tilde{f}(\sigma, j, k) = \begin{cases} j - 1 & \text{se } \sigma = 1 \\ j + 1 & \text{se } \sigma = 2 \\ j & \text{se } \sigma = 3 \\ j & \text{se } \sigma = 4 \end{cases} \quad (4.34)$$

e

$$\tilde{g}(\sigma, j, k) = \begin{cases} k & \text{se } \sigma = 1 \\ k & \text{se } \sigma = 2 \\ k - 1 & \text{se } \sigma = 3 \\ k + 1 & \text{se } \sigma = 4 \end{cases}; \quad (4.35)$$

- rede triangular,  $g = 6$ ,

$$f(\sigma, j, k) = \begin{cases} j + 1 & \text{se } \sigma = 1 \\ j - 1 & \text{se } \sigma = 2 \\ j - 1 & \text{se } \sigma = 3 \\ j + 1 & \text{se } \sigma = 4 \\ j & \text{se } \sigma = 5 \\ j & \text{se } \sigma = 6 \end{cases}, \quad (4.36)$$

$$g(\sigma, j, k) = \begin{cases} k + 1 & \text{se } \sigma = 1 \\ k - 1 & \text{se } \sigma = 2 \\ k + 1 & \text{se } \sigma = 3 \\ k - 1 & \text{se } \sigma = 4 \\ k + 2 & \text{se } \sigma = 5 \\ k - 2 & \text{se } \sigma = 6 \end{cases}, \quad (4.37)$$

$$\tilde{f}(\sigma, j, k) = \begin{cases} j - 1 & \text{se } \sigma = 1 \\ j + 1 & \text{se } \sigma = 2 \\ j + 1 & \text{se } \sigma = 3 \\ j - 1 & \text{se } \sigma = 4 \\ j & \text{se } \sigma = 5 \\ j & \text{se } \sigma = 6 \end{cases} \quad (4.38)$$



e

$$\tilde{g}(\sigma, j, k) = \begin{cases} k - 1 & \text{se } \sigma = 1 \\ k + 1 & \text{se } \sigma = 2 \\ k - 1 & \text{se } \sigma = 3 \\ k + 1 & \text{se } \sigma = 4 \\ k - 2 & \text{se } \sigma = 5 \\ k + 2 & \text{se } \sigma = 6 \end{cases}. \quad (4.39)$$

Como exemplo mais específico, vamos considerar a rede quadrada. Assumimos, por simplicidade, que as matrizes de espalhamento são independentes de  $(j, k)$ , e são dadas pela matriz de Grover, TDF e TDH, cujos elementos são dados, respectivamente, pelas eqs. (4.20), (4.21) e (4.22), tal que

$$\Gamma_{GRO_4} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.40)$$

$$\Gamma_{TDF_4} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -i & -1 & i \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & i & -1 & -i \end{pmatrix}, \quad (4.41)$$

e

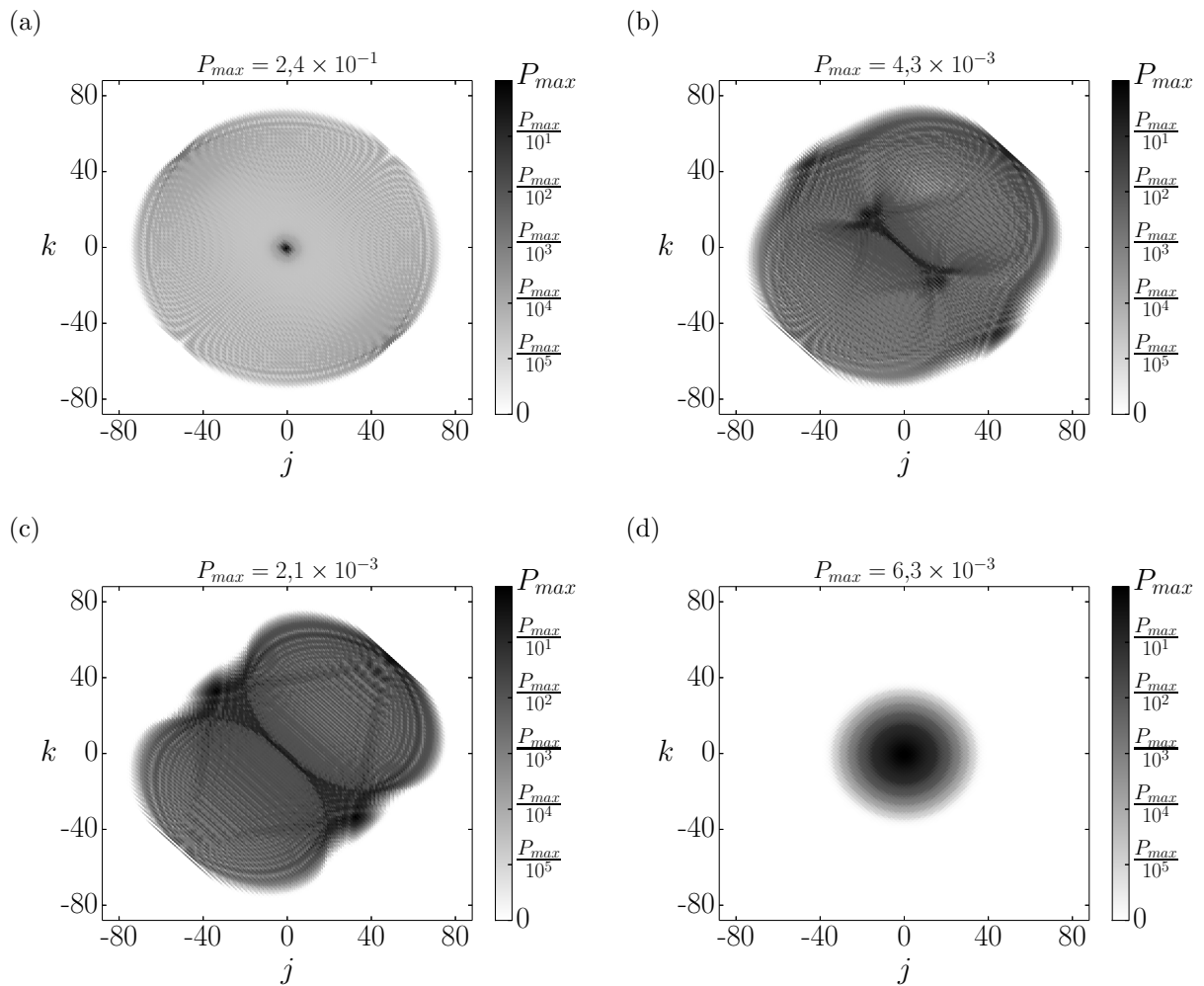
$$\Gamma_{TDH_4} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.42)$$

Nas figs. (4.4) temos as distribuições de probabilidades espaciais  $P_v(j, k)$ , eq. (4.24), respectivamente, para as CQEs na rede quadrada após 100 passos de tempo, considerando as matrizes de espalhamento DFT, DHT e GRO, e assumindo que o estado inicial do sistema é dado por

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{2} \sum_{\sigma=1}^4 |\sigma, 0, 0\rangle. \quad (4.43)$$

Além disso, também mostramos uma CAC imparcial que parte da origem da rede quadrada. Observe que, as distribuições de probabilidades para os casos quânticos são mais variadas do que para o caso clássico, que se limita a uma função gaussiana. Além disso, apesar dessa três matrizes de espalhamento fornecerem as mesma probabilidades da par-

tícula ser transmitida ou refletida, pois o módulo quadrado de seus elementos são iguais a um quarto, como esperado de um sistema quântico, onde os processos de interferência são relevantes, elas resultam em CQEs com as mais variadas características. Por exemplo, enquanto que a distribuição de probabilidades para CQE com a matriz de Grover exibe um pico em torno da origem da rede, as CQEs com as matrizes TDF e TDH observa-se uma maior dispersão dessa quantidade.



**Figura 4.4:** Distribuição probabilidades para CQEs na rede quadrada, em (a) para a matriz de Grover, em (b) para a matriz da transformada discreta de Fourier, em (c) para a matriz da transformada discreta de Hartley, e em (d) para uma CAC imparcial.

## Caminhadas Quânticas na Rede Hexagonal

Neste capítulo, aplicamos o formalismo da construção das CQEs em redes regulares bidimensionais, que foi desenvolvido no capítulo 4, para o caso particular da rede hexagonal. Além de definir os estados de base do sistema, implementar as funções que definem a ação do operador evolução temporal em um estado de base e investigar diferentes matrizes de espalhamento, nós exemplificamos as CQEs e as comparamos com uma CAC. Também estudamos diversas propriedades das CQEs, tais como o comportamento do deslocamento quadrático médio, a probabilidade da partícula ser encontrada em um sítio particular da rede e a influência de diferentes matrizes de espalhamento no comportamento da dinâmica do sistema.

### 5.1 Estrutura Topológica da Rede Hexagonal

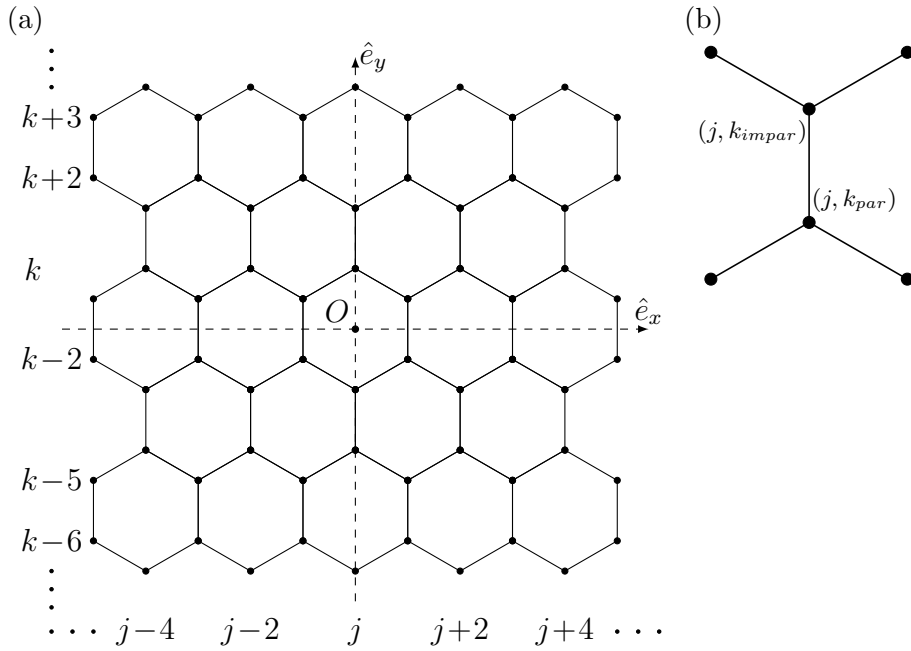
A estrutura topológica da rede hexagonal está apresentada na fig. (5.1a). Sem perda de generalidade adotamos a convenção de nomenclatura dada na fig. (5.1b) para rotular os sítios da rede. Assim, admitindo que a distância entre dois sítios adjacentes é igual a um, e considerando que a origem do sistema de coordenadas se encontra na posição do ponto  $O$  da fig. (5.1a), verificamos que as coordenadas das posições de cada sítio no plano cartesiano são dadas por

$$x_j = \frac{\sqrt{3}j}{2} \quad (5.1)$$

e

$$y_k = \frac{3k + [k]_2 + 4}{4}, \quad (5.2)$$

onde  $[X]_Y$  é o resto de  $X/Y$ .

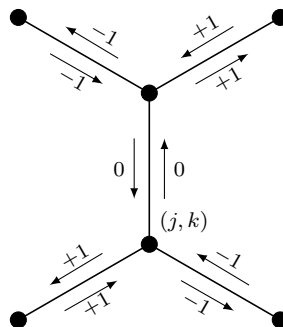


**Figura 5.1:** (a) Definições da rede hexagonal; (b) convenção de nomenclatura para rotular os sítios da rede.

## 5.2 Estados de Base do Sistema

Seguido a prescrição da subseção (4.1.1), o sistema é descrito pelos estados  $\{|\sigma, j, k\rangle\}$ , que obedecem as relações de ortonormalidade e completeza dadas nas eqs. (4.1) e (4.2), onde o número quântico  $\sigma$  está associado à direção e ao sentido de propagação da partícula nas arestas, fig. (5.2), e o par ordenado  $(j, k)$  é o rótulo do vértice para o qual ela está convergindo. Assim, como cada vértice  $(j, k)$  faz três ligações com seus vizinhos,  $\sigma$  assume três valores distintos. Portanto, de maneira conveniente, assumimos que

$$\sigma = -1, 0, +1. \quad (5.3)$$



**Figura 5.2:** Associação dos valores de  $\sigma$  com a direção e o sentido de propagação da partícula nas arestas das redes.

A dimensão do subespaço  $\mathcal{H}_c$ , associado ao grau de liberdade auxiliar  $\sigma$ , é três. Portanto, podemos representar seus estado de base  $\{|\sigma\rangle_c\}$  matricialmente por

$$|+\rangle_c = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |0\rangle_c = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |-\rangle_c = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (5.4)$$

de tal maneira que o operador  $\hat{S}_z$ , eq. (4.5), nesta base é dado por

$$\hat{S}_z = \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.5)$$

### 5.3 Operador Evolução Temporal

A ação do operador evolução temporal em um estado de base é caracterizada pelas funções  $f(\sigma, j, k)$ ,  $g(\sigma, j, k)$ ,  $\tilde{f}(\sigma, j, k)$  e  $\tilde{g}(\sigma, j, k)$ , ver as eqs. (4.12) e (4.13). Assim, considerado a escolha para os valores de  $\sigma$ , eq. (5.3), e suas associações com as direções de propagação da partícula pela rede, fig. (5.2), tais funções são dadas por

$$f(\sigma, j, k) = \tilde{f}(\sigma, j, k) = j - (-1)^k \sigma \quad (5.6)$$

e

$$g(\sigma, j, k) = \tilde{g}(\sigma, j, k) = k + (-1)^{k+\sigma}. \quad (5.7)$$

Logo, verifica-se que essas funções obedecem as condições dadas nas eqs. (4.17) e (4.18), uma vez que

$$f[\sigma, f(\sigma, j, k), g(\sigma, j, k)] = f(\sigma, j, k) - (-1)^{g(\sigma, j, k)} \sigma = j - (-1)^k \sigma - (-1)^{g(\sigma, j, k)} \sigma$$

e

$$g[\sigma, f(\sigma, j, k), g(\sigma, j, k)] = g(\sigma, j, k) + (-1)^{g(\sigma, j, k)+\sigma} = k + (-1)^{k+\sigma} + (-1)^{g(\sigma, j, k)+\sigma}.$$

Entretanto, considerando a topologia da rede, se  $k$  é par, então  $g(\sigma, j, k)$  é ímpar e vice-versa, logo, para qualquer valor de  $k$ ,  $(-1)^k = -(-1)^{g(\sigma, j, k)}$ , portanto

$$f[\sigma, f(\sigma, j, k), g(\sigma, j, k)] = j \quad \text{e} \quad g[\sigma, g(\sigma, j, k), g(\sigma, j, k)] = k. \quad (5.8)$$

Finalmente, as ações do operador evolução e de seu conjugado hermitiano em um estado de base, eqs. (4.12) e (4.13), se reduzem a

$$\hat{U}|\sigma, j, k\rangle = \sum_{\sigma'=-1}^{+1} \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j,k)} |\sigma', f(\sigma', j, k), g(\sigma', j, k)\rangle \quad (5.9)$$

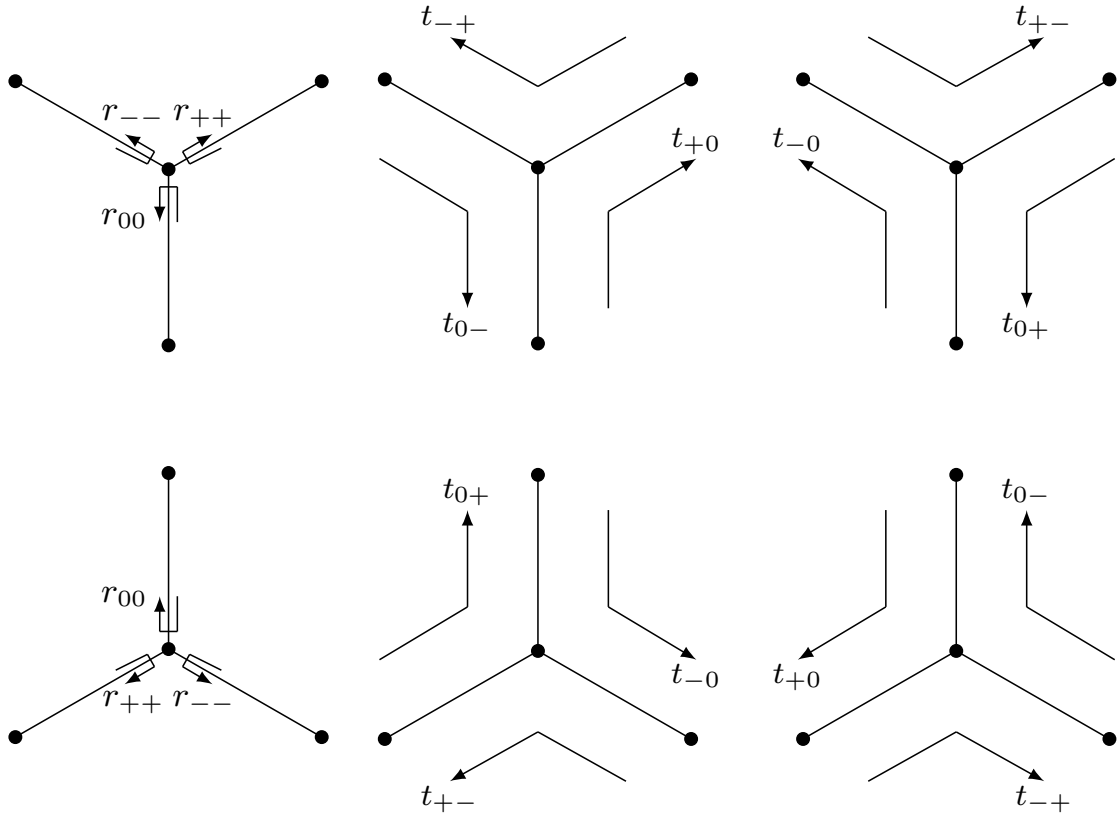
e

$$\hat{U}^\dagger|\sigma, j, k\rangle = \sum_{\sigma'=-1}^{+1} \Gamma_{\sigma\sigma'}^{[\tilde{f}(\sigma,j,k), \tilde{g}(\sigma,j,k)]^*} |\sigma', f(\sigma, j, k), g(\sigma, j, k)\rangle. \quad (5.10)$$

Na base dos autovetores do operador  $\hat{S}_z$ , eq. (5.5), as amplitudes de espalhamento  $\Gamma_{\sigma\sigma'}^{(j,k)}$  constituem uma matriz quadrada e unitária de ordem 3, para satisfazer as relações da eq. (4.16), dada por

$$\Gamma^{(j,k)} = \begin{pmatrix} \Gamma_{++}^{(j,k)} & \Gamma_{+0}^{(j,k)} & \Gamma_{+-}^{(j,k)} \\ \Gamma_{0+}^{(j,k)} & \Gamma_{00}^{(j,k)} & \Gamma_{0-}^{(j,k)} \\ \Gamma_{-+}^{(j,k)} & \Gamma_{-0}^{(j,k)} & \Gamma_{--}^{(j,k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{++}^{(j,k)} & t_{-0}^{(j,k)} & t_{+-}^{(j,k)} \\ t_{0+}^{(j,k)} & r_{00}^{(j,k)} & t_{0-}^{(j,k)} \\ t_{-+}^{(j,k)} & t_{-0}^{(j,k)} & r_{--}^{(j,k)} \end{pmatrix}, \quad (5.11)$$

tal que,  $t_{\sigma'\sigma}^{(j,k)}$  e  $r_{\sigma\sigma}^{(j,k)}$  são os coeficientes de transmissão e de reflexão, veja a fig. (5.3).



**Figura 5.3:** Distribuição dos coeficientes de reflexão e transmissão (amplitudes de espalhamento). As figuras superiores representam um vértice com coordenada  $k$  ímpar e as inferiores com coordenada  $k$  par.

O estado do sistema no passo de tempo  $n + 1$  é dado pela ação do operador evolução  $\hat{U}$ , tal que

$$|\Psi_{n+1}\rangle = \hat{U}|\Psi_n\rangle. \quad (5.12)$$

Portanto, considerando a resolução da identidade dada na eq. (4.2), e a ação do operador evolução em um estado de base, eq. (5.9), podemos expressar a eq. (5.12) como

$$|\Psi_{n+1}\rangle = \sum_j \sum_k \sum_\sigma \psi_\sigma(j, k, n + 1) |\sigma, j, k\rangle, \quad (5.13)$$

onde

$$\psi_\sigma(j, k, n + 1) = \sum_{\sigma'} \Gamma_{\sigma\sigma'}^{[f(\sigma,j,k), g(\sigma,j,k)]} \psi_{\sigma'}(f(\sigma, j, k), g(\sigma, j, k), n) \quad (5.14)$$

e

$$\psi_\sigma(j, k, n) = \langle \sigma, j, k | \Psi_n \rangle. \quad (5.15)$$

## 5.4 Probabilidades

As distribuições de probabilidade de encontrar a partícula em um estado associado a um dado valor de  $\sigma$ ,  $P_c(\sigma, t)$ , e encontra-la convergindo para o vértice  $(j, k)$ ,  $P_v(\sigma, t)$ , são dadas, respectivamente, pelas eqs. (4.23) e (4.24), ou seja,

$$P_c(\sigma, n) = \sum_{j,k} |\psi_\sigma(j, k, n)|^2. \quad (5.16)$$

e

$$P_v(j, k, n) = \sum_\sigma |\psi_\sigma(j, k, n)|^2, \quad (5.17)$$

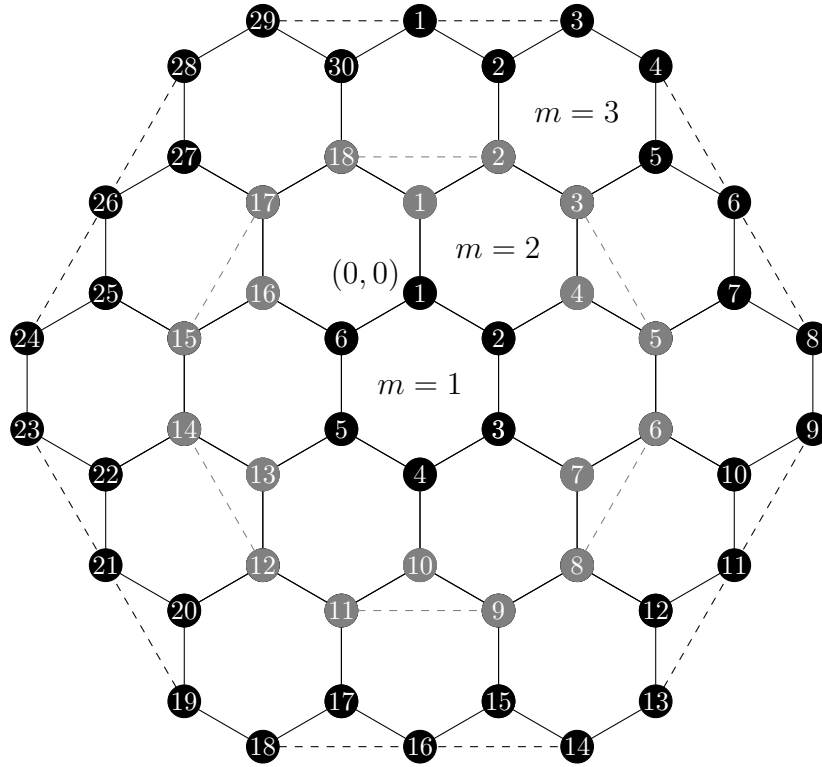
Além disso, definimos uma espécie de distribuição de probabilidades radial em termos do número natural  $m$ , que caracteriza regiões da rede denominadas de anéis de acordo com a fig. (5.4). Observe que o número de vértices em cada anel é dado por

$$N_v(m) = 6(2m - 1). \quad (5.18)$$

Assim, a probabilidade de encontrar a partícula nos sítios do anel  $m$  é dada por

$$P_{rad}(m, n) = \sum_{i=1}^{N_v(m)} \sum_\sigma |\psi_\sigma(j_i, k_i, n)|^2, \quad (5.19)$$

onde  $(j_i, k_i)$  são as coordenadas do  $i$ -ésimo sítio do anel  $m$ .



**Figura 5.4:** Os três primeiros anéis, onde é definida a distribuição de probabilidades radial,  $P_{rad}(m, n)$ .

## 5.5 Analisando as Matrizes de Espalhamento

As matrizes de espalhamento são essenciais na construção das CQEs. Para as CQEs na rede hexagonal, elas são matrizes unitárias de ordem três,  $\Gamma^{(j,k)} \in U(3)$ . Assim, como no caso unidimensional, existe uma grande variedade de família de matrizes desse tipo, veja a discussão da seção (2.5). Nesta seção consideramos alguns desses casos.

O primeiro caso que analisamos é a matriz unitária dada por

$$\hat{\Gamma} = \begin{pmatrix} \Gamma_{++} & \Gamma_{+0} & \Gamma_{+-} \\ \Gamma_{0+} & \Gamma_{00} & \Gamma_{0-} \\ \Gamma_{-+} & \Gamma_{-0} & \Gamma_{--} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ae^{i\theta} & b & b \\ b & ae^{i\theta} & b \\ b & b & ae^{i\theta} \end{pmatrix}, \quad (5.20)$$

que nomeamos de “família AB”, com  $a, b$  reais e  $0 \leq \theta < 2\pi$ .

Impondo as condições dadas na eq. (4.16) para os coeficientes da matriz da família AB, obtivemos o seguinte sistema de equações

$$\begin{cases} a^2 + 2b^2 = 1 \\ a + 2b \cos(\theta) = 0. \end{cases} \quad (5.21)$$



cuja solução é

$$\left\{ a = -\frac{1}{\sqrt{5 + 4 \cos(2\theta)}}, b = \frac{2 \cos(\theta)}{\sqrt{5 + 4 \cos(2\theta)}} \right\}. \quad (5.22)$$

Portanto, a família de matrizes AB é definida apenas pelo parâmetro real  $\theta$  tal que

$$\hat{\Gamma}_{AB}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{5 + 4 \cos(2\theta)}} \begin{pmatrix} -e^{i\theta} & 2 \cos(\theta) & 2 \cos(\theta) \\ 2 \cos(\theta) & -e^{i\theta} & 2 \cos(\theta) \\ 2 \cos(\theta) & 2 \cos(\theta) & -e^{i\theta} \end{pmatrix}, \quad (5.23)$$

onde

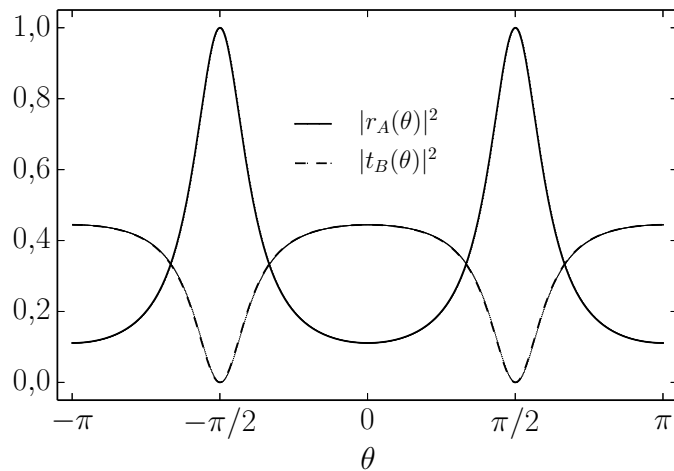
$$r_A(\theta) = -\frac{e^{i\theta}}{\sqrt{5 + 4 \cos(2\theta)}} \quad (5.24)$$

e

$$t_B(\theta) = \frac{2 \cos(\theta)}{\sqrt{5 + 4 \cos(2\theta)}} \quad (5.25)$$

são, respectivamente, os coeficientes de reflexão e transmissão. Além disso, essa matriz é análoga à matriz  $\hat{\Gamma}_\theta$  do caso unidimensional, uma vez que elas são definidas em termo de apenas um parâmetro real, veja a eq. (2.123).

Na fig. (5.5), temos os gráficos dos módulos quadrado das amplitudes de reflexão e de transmissão, em função do parâmetro  $\theta$ . A análise do comportamento desse gráfico revela que, para a matriz de espalhamento da família AB, não existe a possibilidade da partícula ter probabilidade de 100% de transmissão, pois para qualquer valor de  $\theta$ ,  $|r_A(\theta)|^2 > 0$ . Além disso, o valor máximo da probabilidade de transmissão, para uma dada direção, ocorre para  $\theta = 0$ , neste caso temos  $|t_B(\theta)|^2 = 4/9$  e  $|r_A(\theta)|^2 = 1/9$ .



**Figura 5.5:** Gráfico do comportamento do módulo quadrado dos coeficientes de reflexão, eq. (5.24), e de transmissão, eq. (5.25), para a matriz da família AB, eq. (5.23), onde  $|r_A(\theta)|^2$  é a probabilidade da partícula sofrer um processo de reflexão e  $2|t_B(\theta)|^2$  de sofrer transmissão.

Um caso particular da família AB ocorre para  $\theta = 0$ , onde obtemos a matriz de Grover (GRO)<sup>1</sup>, dada por

$$\hat{\Gamma}_{GRO} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \end{pmatrix}, \quad (5.26)$$

Outros dois casos especiais da família AB, são as matrizes imparciais, dadas por

$$\hat{\Gamma}_{IMP} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -e^{i\pi/3} & 1 & 1 \\ 1 & -e^{i\pi/3} & 1 \\ 1 & 1 & -e^{i\pi/3} \end{pmatrix}. \quad (5.27)$$

e

$$\hat{\Gamma}_{IMP2} = -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} e^{2i\pi/3} & 1 & 1 \\ 1 & e^{2i\pi/3} & 1 \\ 1 & 1 & e^{2i\pi/3} \end{pmatrix}, \quad (5.28)$$

que são obtidas para  $\theta = \pi/3$  e  $\theta = 2\pi/3$ . Essas matrizes são imparcial no sentido que elas fornecem a mesma probabilidade da partícula ser espalhada em qualquer direção, uma vez que os módulos quadrados de seus coeficientes são iguais a  $|\Gamma_{\sigma\sigma'}|^2 = 1/3$ .

Outras matrizes unitárias que podem ser empregadas na construção das CQEs são as matrizes das transformadas discretas de Fourier (TDF), e de Hartley (TDH), que de acordo com as eqs. (4.21) e (4.22), as matrizes de suas versões de ordem 3, respectivamente, são dadas por

$$\hat{\Gamma}_{TDF} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & e^{-2i\pi/3} & e^{2i\pi/3} \\ 1 & e^{2i\pi/3} & e^{-2i\pi/3} \end{pmatrix} \quad (5.29)$$

e

$$\hat{\Gamma}_{TDH} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 2 & -1 + \sqrt{3} & -1 - \sqrt{3} \\ 2 & -1 - \sqrt{3} & -1 + \sqrt{3} \end{pmatrix}. \quad (5.30)$$

A matriz TDF também é uma matriz imparcial, uma vez que  $|\Gamma_{\sigma\sigma'}|^2 = 1/3$ . Já a matriz TDH é “tendenciosa”, pois ela privilegia os processos de espalhamento associados aos coeficientes transmissão  $t_{0-}$  e  $t_{-0}$ , uma vez que

$$|t_{0-}|^2 = |t_{-0}|^2 = \left| -\frac{1}{2\sqrt{3}}(1 + \sqrt{3}) \right|^2 \simeq 0,62. \quad (5.31)$$

---

<sup>1</sup>Ver descrição na página (78).

Outras duas matrizes interessantes são dadas por

$$\hat{\Gamma}_{LGRO} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -1 & 2 & -2 \\ 2 & -1 & -2 \\ -2 & -2 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.32)$$

e

$$\hat{\Gamma}_{LTDH} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 2 & 2 & -2 \\ 2 & -1 - \sqrt{3} & 1 - \sqrt{3} \\ -2 & 1 - \sqrt{3} & -1 - \sqrt{3} \end{pmatrix}. \quad (5.33)$$

Essas duas matrizes diferem da matriz de Grover, eq. (5.26), e da matriz TDH, eq. (5.30), por alguns coeficientes que possuem uma diferença de fase igual a  $-1$ , entretanto as probabilidades da partícula ser espalhada em uma dada direção,  $|\Gamma_{\sigma,\sigma'}|^2$  permanecem inalteradas. Assim, vamos chama-las de *like* Grover (LGRO) e *like* TDH (LTDH).

Finalmente podemos considerar as matrizes unitárias do grupo  $SU(3)$ , que são caracterizadas por oito parâmetros reais  $(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_4, \phi_5)$  [134]. Assim, utilizando uma parametrização na qual os elementos de matriz são somas de funções trigonométricas [164], a matriz genérica desse grupo de matrizes é dada por

$$\hat{\Gamma}_{SU(3)} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} \end{pmatrix}, \quad (5.34)$$

onde

$$\begin{aligned} u_{11} &= \cos \theta_1 \cos \theta_2 e^{i\phi_1}, & u_{12} &= \sin \theta_1 e^{i\phi_3}, & u_{13} &= \cos \theta_1 \sin \theta_2 e^{i\phi_4}, \\ u_{21} &= \sin \theta_2 \sin \theta_3 e^{-i\phi_4 - i\phi_5} - \sin \theta_1 \cos \theta_2 \cos \theta_3 e^{i\phi_1 + i\phi_2 - i\phi_3}, & u_{22} &= \cos \theta_1 \cos \theta_3 e^{i\phi_2}, \\ u_{23} &= -\cos \theta_2 \sin \theta_3 e^{-i\phi_1 - i\phi_5} - \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos \theta_3 e^{i\phi_2 - i\phi_3 + i\phi_4}, \\ u_{31} &= -\sin \theta_1 \cos \theta_2 \sin \theta_3 e^{i\phi_1 - i\phi_3 + i\phi_5} - \sin \theta_2 \cos \theta_3 e^{-i\phi_2 - i\phi_4}, \\ u_{32} &= \cos \theta_1 \sin \theta_3 e^{i\phi_5} & u_{33} &= \cos \theta_2 \cos \theta_3 e^{-i\phi_1 - i\phi_2} - \sin \theta_1 \sin \theta_2 \sin \theta_3 e^{-i\phi + i\phi_4 + i\phi_5} \end{aligned}$$

Por exemplo, para

$$\phi_1 = \phi_2 = \phi_3 = \phi_4 = \phi_5 = 0, \quad (5.35)$$

e

$$\theta_1 = \operatorname{arcsec} \left( \frac{3}{\sqrt{5}} \right), \quad \theta_2 = \theta_3 = \arccos \left( -\frac{1}{\sqrt{5}} \right), \quad (5.36)$$

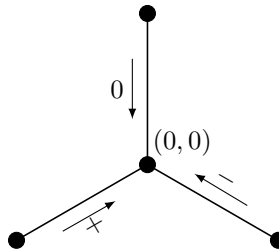
a matriz genérica do grupo  $SU(3)$  se reduz à matriz de Grover, eq. (5.26).

## 5.6 Exemplos de CQs na Rede Hexagonal

Nesta seção, exemplificamos as CQEs na rede hexagonal utilizando diferentes matrizes de espalhamento. Iniciamos comparando uma CQE com uma CAC, ambas imparciais. Neste caso a CQE é caracterizada pela matriz imparcial, eq. (5.27), tal que em ambos os sistemas (quântico e clássico) a partícula possui probabilidades iguais de ser espalhada para qualquer direção. Em seguida, discutimos como diferentes matrizes de espalhamento influenciam as CQEs. Encerramos o capítulo, analisando o comportamento das CQEs em função do parâmetro  $\theta$  que define a família de matrizes AB, eq. (5.23).

As evoluções das CQEs foram obtidas através da simulação numérica da eq. (4.11) para a rede hexagonal, com as funções  $f(\sigma, j, k)$  e  $g(\sigma, j, k)$  que definem o operador evolução temporal, dadas, respectivamente, pelas eqs. (5.6) e (5.7). Além disso, o estado inicial do sistema é dado por um estado “localizado” no sítio  $(0, 0)$  e simétrico, para não privilegiar nenhuma direção de propagação em particular, isto é,

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|-, 0, 0\rangle + |0, 0, 0\rangle + |+, 0, 0\rangle). \quad (5.37)$$



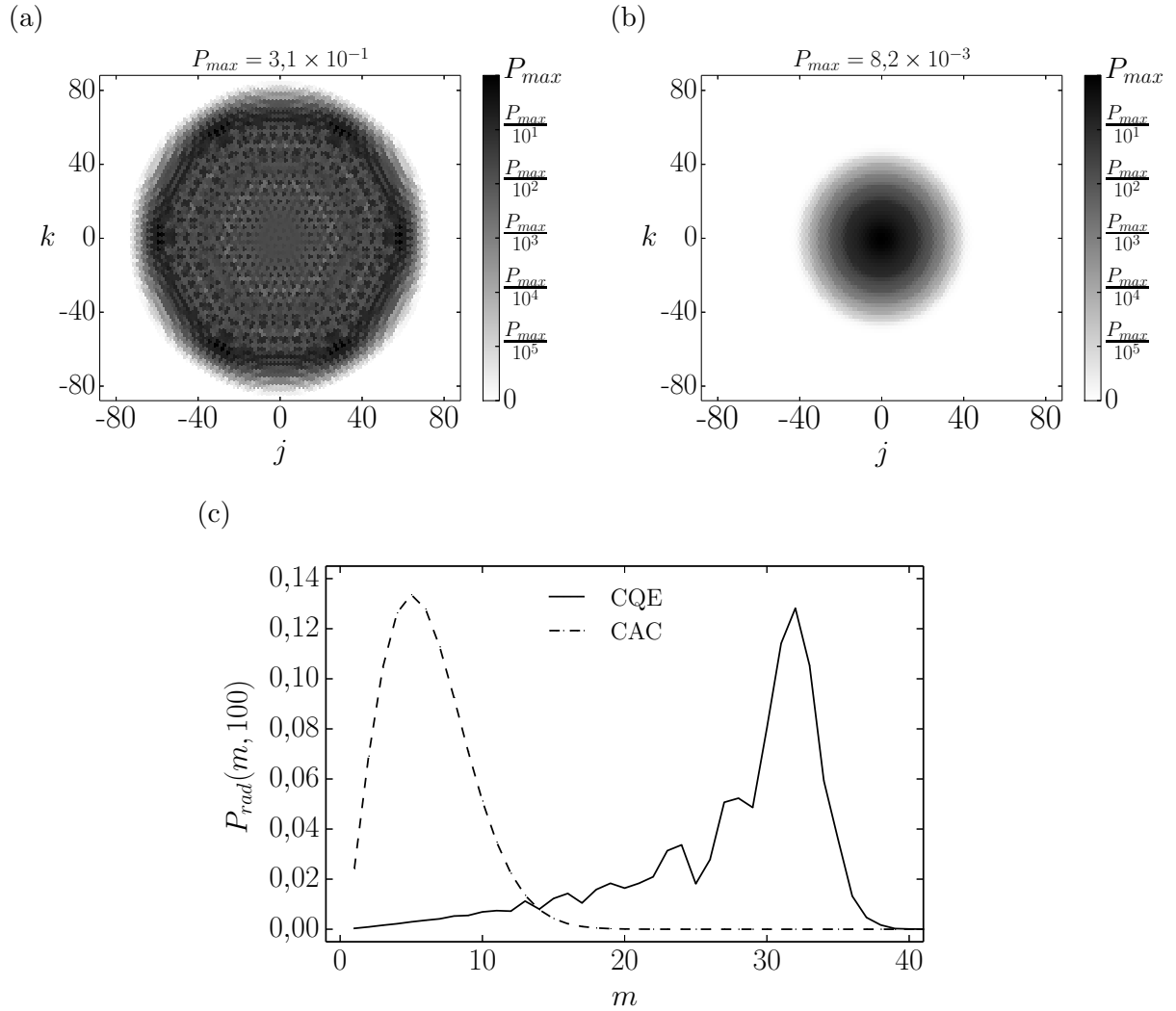
**Figura 5.6:** Representação geométrica do estado inicial dado na eq. (5.37). Observe que esse estado não privilegia nenhuma direção de propagação em particular.

### 5.6.1 Caminhadas Quânticas $\times$ Caminhadas Clássicas

A fim de expor as diferenças entre as CQEs e as CACs, comparamos as evoluções desses sistemas para a situação onde as probabilidades da partícula ser espalhada nas três direções possíveis são idênticas. Para isso, utilizamos a matriz IMP, eq. (5.27), para caracterizar a CQE. Note que ela resulta em iguais probabilidades da partícula ser espalhada em qualquer direção uma vez que  $|\Gamma_{\sigma\sigma'}|^2 = \frac{1}{3}$ . Além disso, ela trata os dois processos de transmissão da mesma forma, e impõe uma diferença de fase igual a  $\pi/3$  nos processos de reflexão.

Na fig. (5.7) temos as distribuições de probabilidades  $P_v(j, k, n)$  e  $P_{rad}(m, n)$ , após 100

passos de tempo para as CQE e CAC caracterizadas acima. A distribuição de probabilidades para a CAC foi obtida através da simulação numérica da relação de recorrência da eq. (4.25) para a rede hexagonal, com as funções  $f(\sigma, j, k)$  e  $g(\sigma, j, k)$  dadas, respectivamente pelas eqs. (5.6) e (5.7),  $p_{\sigma}^{(j,k)} = 1/3$  e partindo do sítio  $(0, 0)$ .



**Figura 5.7:** Distribuições de probabilidades  $P_v(j, k, n)$  após 100 passos de tempo, em (a) para uma CQE utilizando a matriz IMP e o estado inicial dado pela eq. (5.37); e em (b) para uma CAC iniciando no sítio  $(0, 0)$  e com iguais probabilidades da partícula saltar para seus vizinhos na rede hexagonal. Em (c) temos as distribuições de probabilidades radiais para esses dois sistemas.

Analisando a fig. (5.7), percebemos que o padrão da distribuição de probabilidades é mais rico para a CQE do que para a CAC, que se limita a uma distribuição gaussiana. Além disso,  $P_{rad}(m, n)$  se afasta mais rapidamente da origem para o caso quântico, como pode ser visto na fig. (5.7c).

O comportamento das distribuições de probabilidades é um reflexo direto da dinâmica

da CQE ser definida em termos de amplitudes de probabilidades da partícula ser transmitida ou refletida, o que gera processos de interferências na função de onda, e a dinâmica da CAC ser construída em termos de probabilidades da partícula saltar de um vértice para outro associadas a processos estocásticos. Assim, dependendo dos elementos da matriz de espalhamento, podemos ter superposições de onda construtivas ou destrutivas que resultam nos mais variados padrões para  $P_v(j, k, n)$  no caso quântico.

Admitindo que para a CAC nós associamos a cada direção de propagação da partícula uma variável aleatória que assume três valores,  $\sigma = -1, 0, +1$ , então a cada passo em um sorteio dessa variável aleatória temos uma probabilidade de  $1/3$  de encontrar um desses três valores. Para o caso quântico, ao analisar o comportamento da distribuição de probabilidade de encontrar a partícula em um estado com dado valor de  $\sigma$ ,  $P_c(\sigma, n)$ , isto é, em um autovetor o operador  $\hat{S}_z$ , constatamos que ela é dada por  $P_c(\sigma, n) = 1/3$ , reproduzindo o comportamento clássico. Este comportamento, para esse exemplo de CQE, está associado às simetrias da matriz de espalhamento e do estado inicial do sistema, que geram uma função de onda simétrica. Contudo, como discutido no caso unidimensional na seção (2.3), um estado inicial assimétrico quebra essa simetria em  $P_c(\sigma, n)$ .

Uma das principais diferenças entre as caminhadas aleatórias clássicas e as caminhadas quânticas é o comportamento do DMQ. Como discutido para o caso unidimensional, enquanto para as primeiras essa quantidade é proporcional ao número de passos de tempo, para a segunda ela é proporcional ao quadrado do número de passos de tempo. Assim, considerando a coordenada radial,

$$r_{(j,k)} = x_j^2 + y_k^2, \quad (5.38)$$

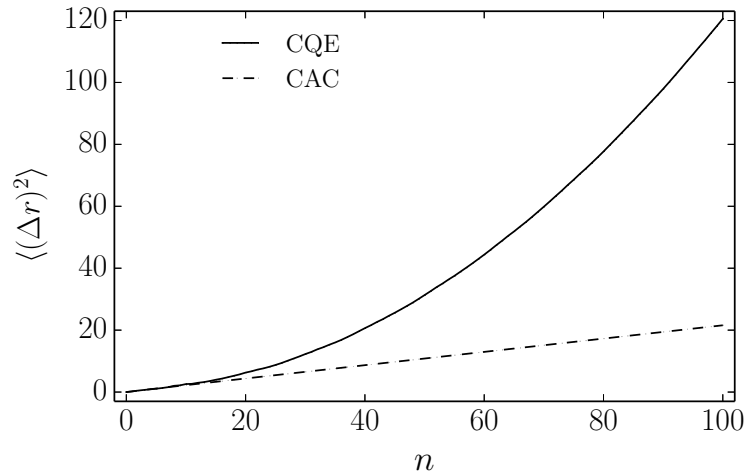
onde  $x_j$  e  $y_k$  são as coordenadas do vértice  $(j, k)$  no plano cartesiano dadas nas eqs. (5.1) e (5.2), através da eq. (2.12) determinamos o DQM,  $\langle(\Delta r)^2\rangle$ , associado a  $r_{(j,k)}$ . Na fig. (5.8) apresentamos o comportamento dessa quantidade em função dos passos de tempo. Como esperado para a CQE,  $\langle(\Delta r)^2\rangle \sim n^2$  e para a caminhada clássica  $\langle(\Delta r)^2\rangle \sim n$ .

Finalmente, determinamos a função de correlação, eq. (2.101), entre o estado inicial e o estado do sistema em um tempo  $n$  qualquer para a CQE e comparamos com o comportamento da probabilidade da partícula ser encontrada no sítio  $(0, 0)$  da caminha clássica, tal que

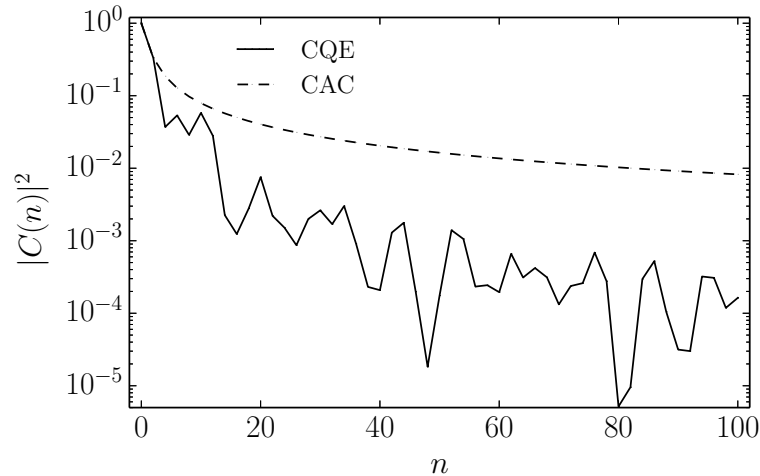
$$|C(n)|^2 = \begin{cases} |\langle\Psi_0|\Psi_n\rangle|^2 & \text{para a caminhada quântica} \\ P_v(0, n) & \text{para a caminhada clássica} \end{cases}. \quad (5.39)$$

No gráfico da fig. (5.9) mostramos o comportamento de  $|C(n)|^2$ . Tal quantidade decai

mais rapidamente para o caso quântico em relação ao clássico. Isso é um reflexo direto da maior velocidade de dispersão da partícula pela rede para o sistema quântico.



**Figura 5.8:** Comportamento do deslocamento quadrático médio radial para uma CQE utilizando a matriz IMP e o estado inicial dado pela eq. (5.37), e uma caminhada aleatória clássica iniciando no sítio  $(0,0)$  e com iguais probabilidades da partícula saltar para seus vizinhos na rede hexagonal.



**Figura 5.9:** Comportamento da função de correlação para uma CQE utilizando a matriz IMP e uma caminhada aleatória clássica iniciando no sítio  $(0,0)$  e com iguais probabilidades da partícula saltar para seus vizinhos na rede hexagonal.

De maneira geral, quando comparamos às caminhadas quântica e clássica, ambas imparciais, para as redes linear e hexagonal, obtemos resultados qualitativos semelhantes. Por exemplo, as distribuições de probabilidades estão mais espalhadas pela rede para as CQEs, a função de correlação  $C(n)$  decai mais rapidamente para o caso quântico e obtemos os mesmo comportamento para o DQM, independentemente da dimensionalidade da rede ( $\langle(\Delta x)^2\rangle_{CQE} \sim n^2$  e  $\langle(\Delta x)^2\rangle_{CAC} \sim n$ ).

### 5.6.2 Influência das Matrizes de Espalhamento nas CQs

Nesta seção investigamos a influência de diferentes matrizes de espalhamento no comportamento das CQEs. Portanto, uma vez que os coeficientes da matriz de espalhamento  $\Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j,k)}$  são números complexos, podemos expressá-los da seguinte maneira

$$\Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j,k)} = \rho_{\sigma'\sigma} e^{i\theta_{\sigma'\sigma}}, \quad (5.40)$$

onde  $0 \leq \rho_{\sigma'\sigma} \leq 1$  e  $\theta_{\sigma'\sigma}$  corresponde a uma fase. Assim, considerando a eq. (5.9), a ação do operador evolução em um estado de base é dada por

$$\hat{U}|\sigma, j, k\rangle = \sum_{\sigma'=-1}^{+1} \rho_{\sigma'\sigma} e^{i\theta_{\sigma'\sigma}} |\sigma', f(\sigma', j, k), g(\sigma', j, k)\rangle. \quad (5.41)$$

Logo, se o estado da partícula é dado por  $|\sigma, j, k\rangle$ , após um processo de espalhamento,  $\rho_{\sigma'\sigma}^2$  é a probabilidade de encontrar a partícula no estado  $|\sigma', f(\sigma', j, k), g(\sigma', j, k)\rangle$ . Ademais, os processos de interferência que a função de onda sofre são dependentes de dois fatores: (i) a probabilidade da partícula ser espalhada em uma dada direção, a qual é dada por  $\rho_{\sigma'\sigma}$ ; e (ii) as fases atribuídas às diferentes direções de espalhamento,  $\theta_{\sigma'\sigma}$ .

Para analisar a influência das matrizes de espalhamento, utilizamos seis matrizes de espalhamento distintas. Além disso, consideramos que o estado inicial do sistema é dado pela eq. (5.37). As duas primeiras matrizes que consideramos são a matriz IMP, eq. (5.27), e a matriz TDF, eq. (5.29), tal que

$$\hat{\Gamma}_{IMP} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -e^{i\pi/3} & 1 & 1 \\ 1 & -e^{i\pi/3} & 1 \\ 1 & 1 & -e^{i\pi/3} \end{pmatrix}$$

e

$$\hat{\Gamma}_{TDF} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & e^{-2i\pi/3} & e^{2i\pi/3} \\ 1 & e^{2i\pi/3} & e^{-2i\pi/3} \end{pmatrix}.$$

Como discutido na seção anterior, essas duas matrizes são imparciais no sentido que elas fornecem a mesma probabilidade da partícula ser espalhada em uma dada direção,  $|\Gamma_{\sigma\sigma'}|^2 = \rho_{\sigma\sigma'}^2 = 1/3$ . Entretanto, essas matrizes introduzem diferenças de fases distintas que dependem da direção de propagação da partícula.

A matriz IMP associa a cada processo de reflexão, elementos da diagonal principal,



uma de fase igual a  $\theta_{\sigma\sigma} = 4\pi/3$ , e para os demais elementos  $\theta_{\sigma'\sigma} = 0$ . A ação do operador evolução temporal, caracterizado com essa matriz, nos estados de base resulta em

$$\hat{U}_{IMP}|\sigma, j, k\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left( -e^{i\pi/3} |\sigma, f(\sigma, j, k), g(\sigma, j, k)\rangle + \sum_{\sigma' \neq \sigma} |\sigma', f(\sigma', j, k), g(\sigma', j, k)\rangle \right).$$

Logo, a ação do operador evolução em uma combinação de estados de base simétrica resulta em uma nova combinação também simétrica, ou seja, após a ação de  $\hat{U}_{IMP}$  as três componentes da função de onda associadas aos valores de  $\sigma$  possuem a mesma amplitude de probabilidade. Veja, por exemplo, a ação de  $U_{IMP}$  no estado inicial dado na eq. (5.37),

$$\hat{U}_{IMP}|\Psi_0\rangle = \frac{2 - e^{i\pi/3}}{\sqrt{3}} (|+, -1, -1\rangle + |0, 0, 1\rangle + |-, +1, -1\rangle).$$

A matriz TDF impõe uma fase igual a  $\theta_{00} = \theta_{--} = -2\pi/3$  nas reflexões associadas às direções de propagação com  $\sigma = 0$  e  $\sigma = -1$ , uma vez que esses processos são descritos pelos elementos  $\Gamma_{00}$  e  $\Gamma_{--}$ , e associa uma fase igual a  $\theta_{-0} = \theta_{0-} = 2\pi/3$  nas transmissões entre as direções com  $\sigma = 0$  e  $\sigma = -1$ , pois esses processos são descritos pelos elementos  $\Gamma_{0-}$  e  $\Gamma_{-0}$ . Para os demais elementos  $\theta_{\sigma+} = \theta_{+\sigma} = 0$ . A ação do operador evolução, caracterizado com essa matriz, nos estados de base resulta em

$$\hat{U}_{TDF}|+, j, k\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|+, f(+, j, k), g(+, j, k)\rangle + |0, f(0, j, k), g(0, j, k)\rangle + |-, f(-, j, k), g(-, j, k)\rangle),$$

$$\hat{U}_{TDF}|0, j, k\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|+, f(+, j, k), g(+, j, k)\rangle + e^{-2\pi/3} |0, f(0, j, k), g(0, j, k)\rangle + e^{2\pi/3} |-, f(-, j, k), g(-, j, k)\rangle)$$

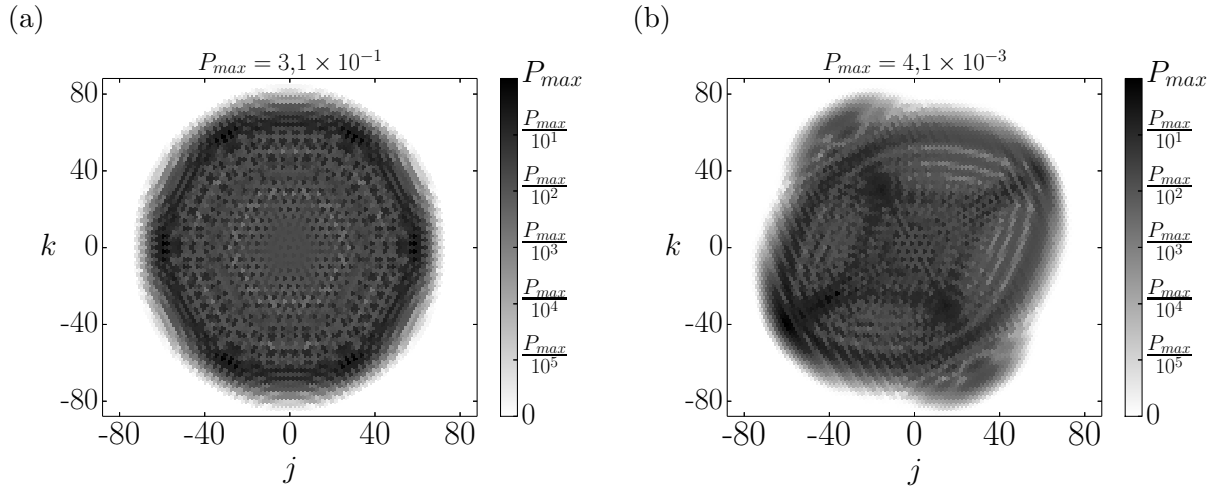
e

$$\hat{U}_{TDF}|-, j, k\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|+, f(+, j, k), g(+, j, k)\rangle + e^{2\pi/3} |0, f(0, j, k), g(0, j, k)\rangle + e^{-2\pi/3} |-, f(-, j, k), g(-, j, k)\rangle).$$

Portanto, devido às superposições destrutivas associadas às direções com  $\sigma = 0$  e  $\sigma = -1$ , a ação de  $\hat{U}_{TDF}$  em um estado simétrico privilegia os estados de base com  $\sigma = +1$ , gerando uma distribuição concentrada na direção associada a esses estados. Veja, por exemplo, a ação de  $\hat{U}_{TDF}$  no estado dado na eq. (5.37),  $\hat{U}_{TDF}|\Psi_0\rangle = |+, -1, -1\rangle$ .

Na fig. (5.10) temos as distribuições de probabilidades  $P_v(j, k, n)$  após 100 passos de tempo para duas CQEs considerando as matrizes IMP e TDF e considerando o estado

inicial dado na eq. (5.37). Como discutido nos parágrafos anteriores, para a matriz IMP temos uma distribuição simétrica e para a matriz TDF temos uma distribuição concentrada preferencialmente na direção associada a  $\sigma = +1$ .



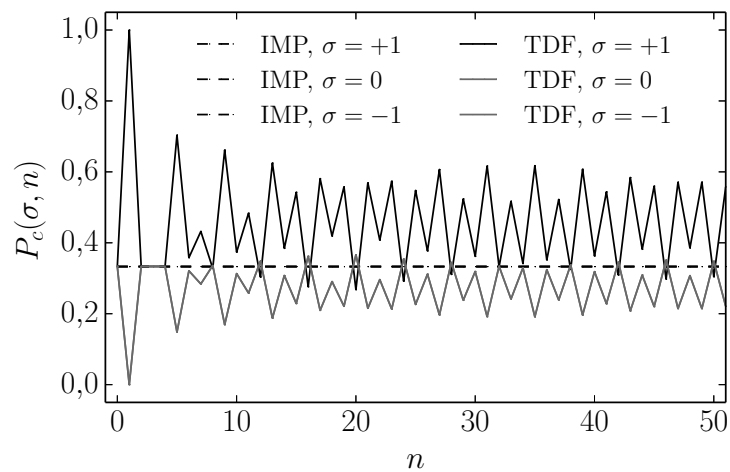
**Figura 5.10:** Distribuições de probabilidades  $P_v(j, k, n)$  após 100 passos de tempo, em (a) para uma CQ utilizando a matriz IMP, e em (b) para uma CQ utilizando a matriz TDF.

Uma vez que a matriz IMP trata da mesma maneira os estados com diferentes valores de  $\sigma$ , isso leva a uma distribuição de probabilidades  $P_c(\sigma, n)$  constante. Analisando os dados dessa evolução, obtivemos  $P_c(\sigma, n) = 1/3$ . Já para a CQE com a matriz de DFT, há um privilégio para os estados com  $\sigma = +1$ , isso se reflete em  $P_c(\sigma, n)$ . Assim, verificamos que

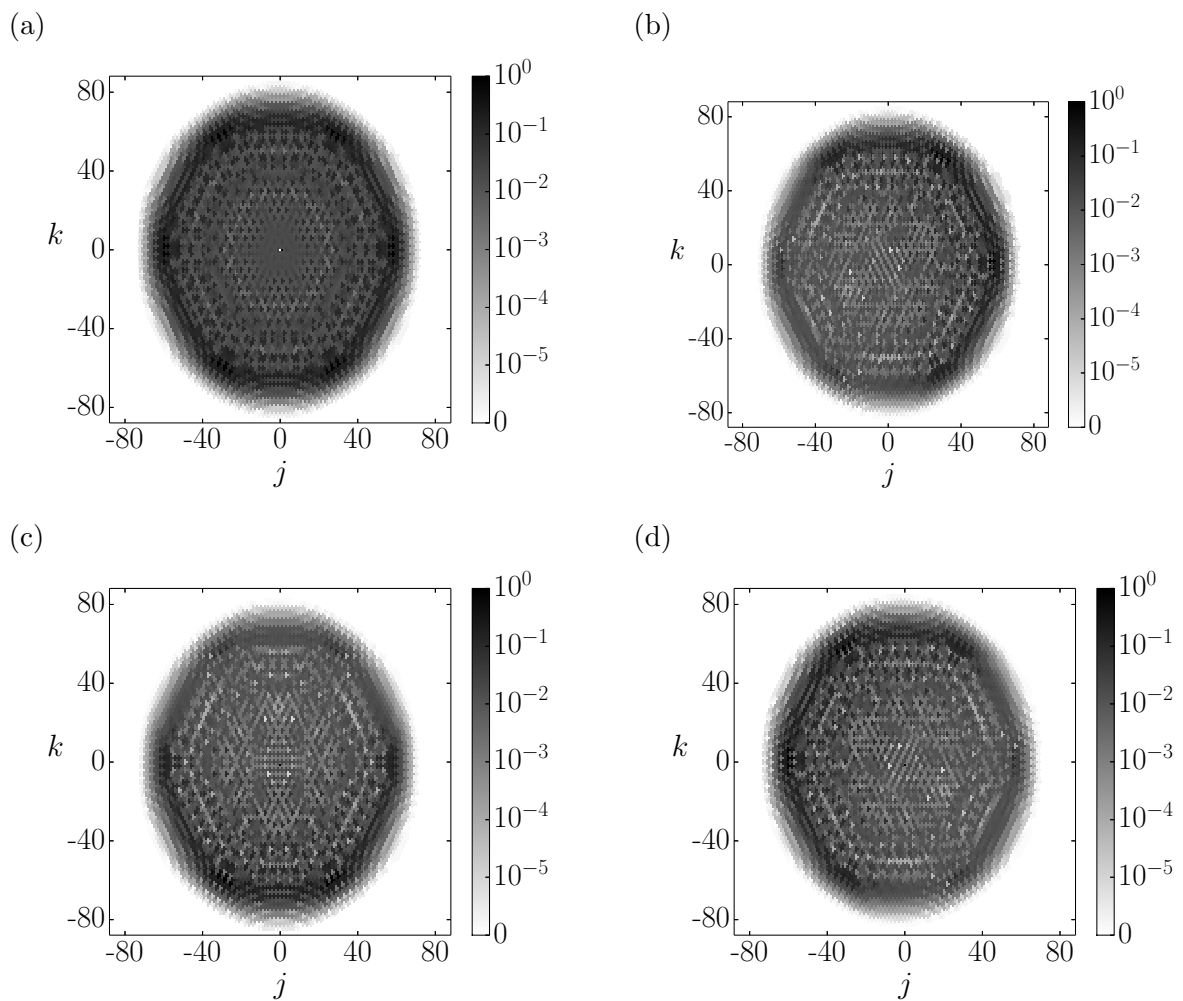
$$P_c(+, n) \neq P_c(-, n) = P_c(0, n), \quad (5.42)$$

onde a igualdade na equação acima se deve ao fato que a matriz trata da mesma forma os estados com  $\sigma = 0$  e  $\sigma = -1$ . Além disso,  $P_c(\sigma, n)$  rapidamente converge para uma distribuição cujo comportamento é oscilatório ao longo do tempo, como pode ser observado na gráfico da fig. (5.11), onde é exposto  $P_c(\sigma, n)$  em função dos passos de tempo  $n$  para essas duas caminhadas.

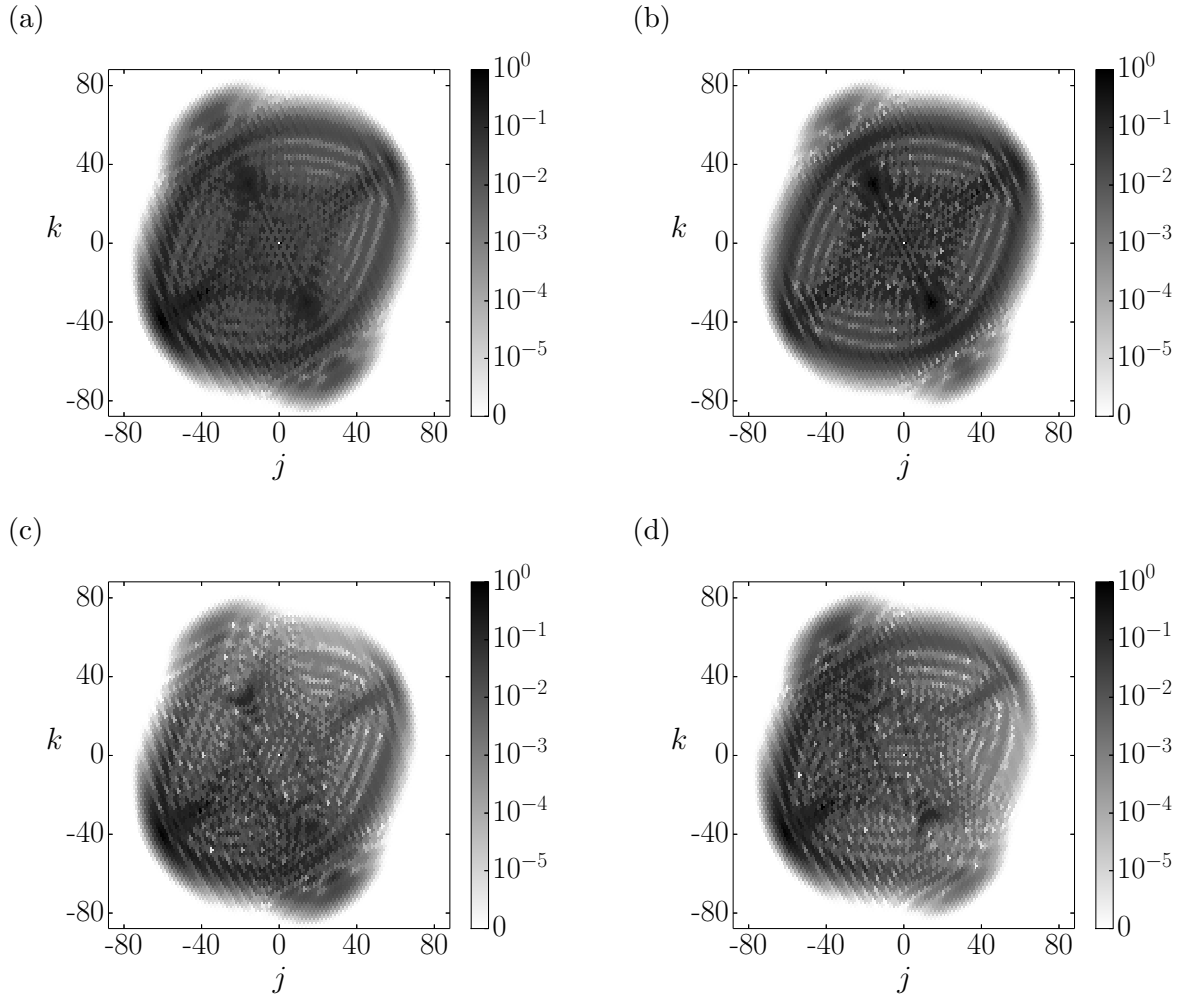
O comportamento de  $P_c(\sigma, n)$  para as CQEs com essas duas matrizes é corroborado quando analisamos as distribuições de probabilidades espaciais dadas pelo módulo quadrado das componentes  $\sigma$  da função de onda,  $|\psi_\sigma(j, k, n)|^2 = |\langle \sigma, j, k | \Psi_n \rangle|^2$ , para  $n = 100$ , figs. (5.12) e (5.13). Como esperado, para a CQE com a matriz IMP, observamos o mesmo padrão nas três componentes  $|\psi_\sigma(j, k, n)|^2$  mas em direções rotacionadas em  $120^\circ$ . Para as CQEs com a matriz TDF, observamos que a distribuição  $|\psi_+(j, k, n)|^2$  é totalmente distinta das  $|\psi_0(j, k, n)|^2$  e  $|\psi_-(j, k, n)|^2$ ; já para as duas últimas uma é reflexão da outra.



**Figura 5.11:** Comportamento da distribuição de probabilidades  $P_c(\sigma, n)$  em função dos passos de tempo para duas CQs utilizando as matrizes IMP e TDF.



**Figura 5.12:** Em (a) distribuições de probabilidades,  $P_v(j, k, n)$ , e de densidade para os módulos quadrados das componentes  $\sigma$  da função de onda, (b)  $|\psi_+(j, k, n)|^2$ , (c)  $|\psi_0(j, k, n)|^2$  e (d)  $|\psi_-(j, k, n)|^2$ , após 100 passos de tempo, considerando a matriz de IMP. Os gráficos foram reescalados.



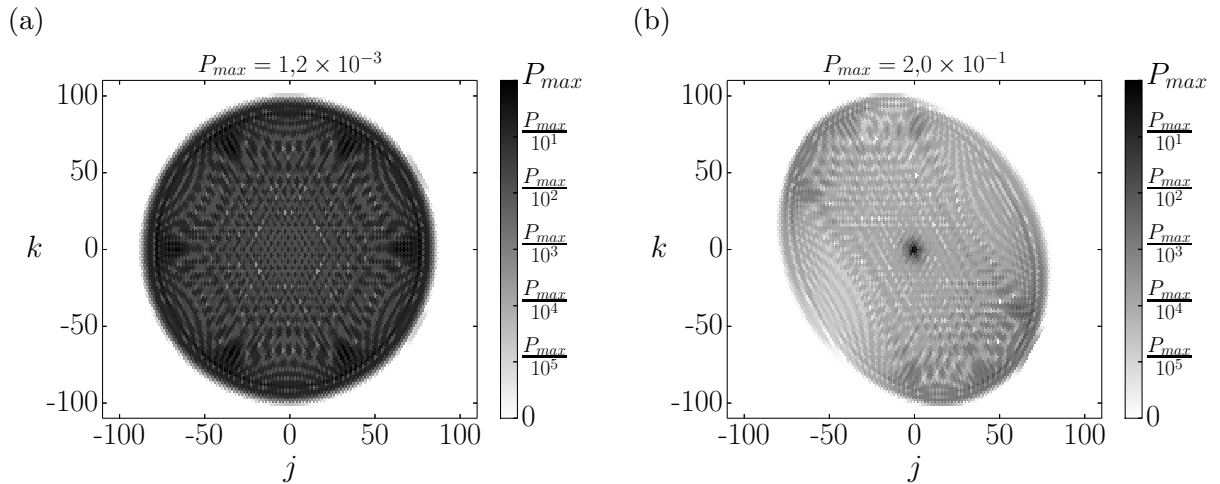
**Figura 5.13:** Em (a) distribuição de probabilidades,  $P_v(j, k, n)$ , e distribuições de densidade para os módulo quadrados das componentes  $\sigma$  da função de onda, (b)  $|\psi_+(j, k, n)|^2$ , (c)  $|\psi_0(j, k, n)|^2$  e (d)  $|\psi_-(j, k, n)|^2$ , após 100 passos de tempo, considerando a matriz TDF. Os gráficos foram reescalados.

As duas próximas matrizes que consideramos são as matrizes GRO, eq. (5.26), e a matriz LGRO, eq. (5.32),

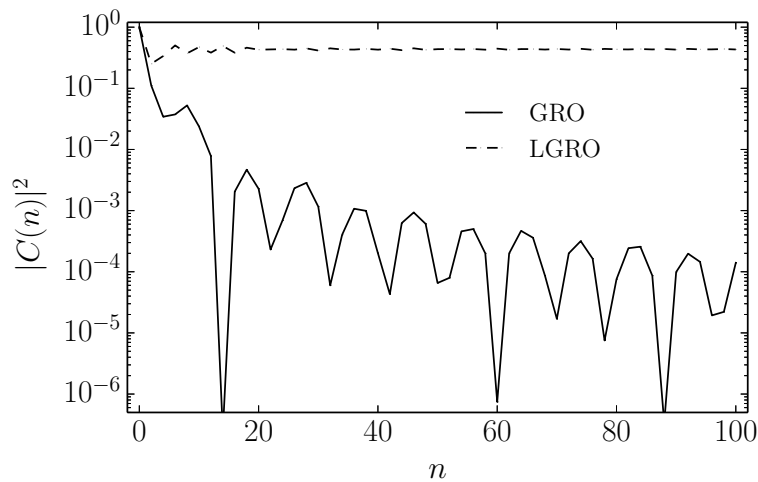
$$\hat{\Gamma}_{GRO} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \hat{\Gamma}_{LGRO} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -1 & 2 & -2 \\ 2 & -1 & -2 \\ -2 & -2 & -1 \end{pmatrix}.$$

Essas duas matrizes fornecem as mesmas probabilidades da partícula ser espalhada em dada direção quando ela incide sobre um vértice. Entretanto, elas impõem fases diferentes sobre os estados de base. A matriz GRO tem o mesmo comportamento da matriz IMP, ela não distingue os estados de base do sistema. O mesmo não ocorre com a matriz LGRO, devido às fases associadas a alguns de seus elementos fora da diagonal principal.

Na fig. (5.14) mostramos as distribuições de probabilidades  $P_v(j, k, n)$  normalizadas após 100 passos de tempo. Essas figuras revelam que as fases extras que a matriz LGRO possui levam a uma alta concentração relativa de probabilidades próximo à origem da rede. Já a matriz GRO gera um padrão de distribuição de probabilidades semelhante ao da matriz IMP, porém ele é mais disperso pela rede. Esses comportamentos são corroborados quando analisamos os gráficos da função de correlação entre o estado inicial do sistema e um estado em um tempo  $n$  qualquer,  $C(n) = \langle \Psi_0 | \Psi_n \rangle$ , fig. (5.15). Assim, como  $P_v(j, k, n)$  para a CQE com a matriz GRO se espalha rapidamente pela rede,  $|C(n)|^2$  decai rapidamente, e para a CQE com a matriz LGRO, devido à concentração de probabilidades próximo à origem,  $|C(n)|^2$  converge para um valor constante.



**Figura 5.14:** Distribuições de probabilidades  $P_v(j, k, n)$  após 100 passos de tempo, em (a) para a matriz GRO e em (b) para a matriz LGRO.



**Figura 5.15:** Comportamento do módulo quadrado da função de correlação entre o estado inicial e um estado em um tempo  $n$  qualquer em função dos passos de tempo para duas CQEs utilizando as matrizes GRO e LGRO.

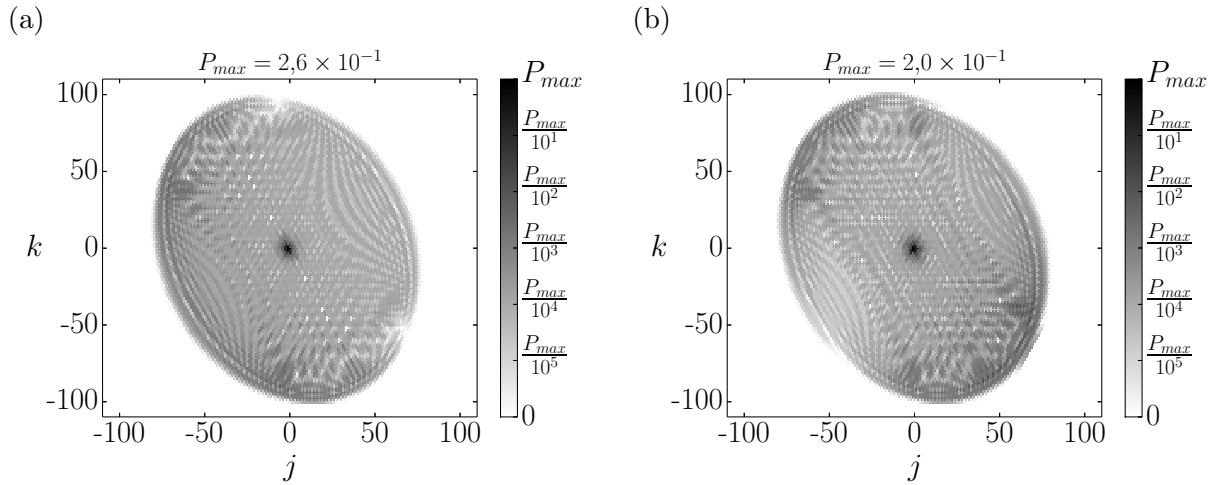
As duas últimas matrizes que vamos abordar nessa seção são as matrizes TDH, eq. (5.30), e a matriz LTDH, eq. (5.33),

$$\hat{\Gamma}_{TDH} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 2 & -1 + \sqrt{3} & -1 - \sqrt{3} \\ 2 & -1 - \sqrt{3} & -1 + \sqrt{3} \end{pmatrix}$$

e

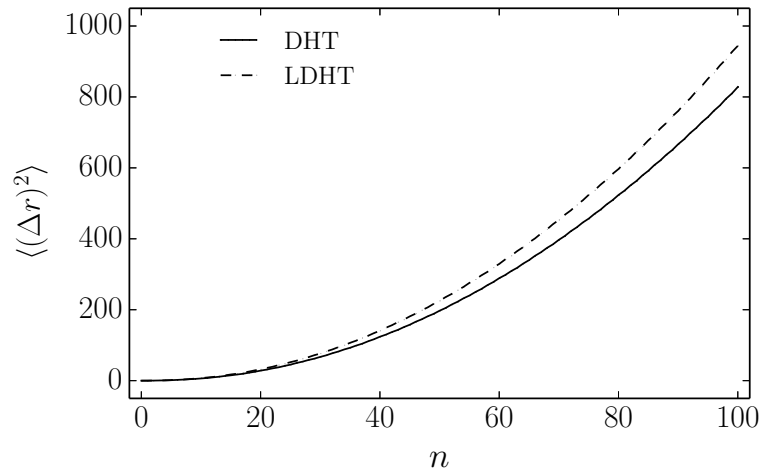
$$\hat{\Gamma}_{LTDH} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 2 & -2 & -2 \\ 2 & 1 - \sqrt{3} & -1 - \sqrt{3} \\ -2 & -1 - \sqrt{3} & 1 - \sqrt{3} \end{pmatrix}.$$

Essas duas matrizes, assim como as matrizes GRO e LGRO, possuem uma diferença de fase em alguns de seus elementos. Analisando o comportamento das distribuições de probabilidades  $P_v(j, k, n)$ , após 100 passos de tempo, constatamos que essas matrizes geram distribuições de probabilidades semelhantes, diferentemente do que ocorre para as matrizes GRO e LGRO. De maneira geral elas possuem um formato de uma “elipse” com uma alta concentração relativa de probabilidades na origem da rede, veja a fig. (5.16).



**Figura 5.16:** Distribuições de probabilidades  $P_v(j, k, n)$  após 100 passos de tempo em (a) para a matriz de TDH e em (b) para a matriz LTDH.

Apesar dessa alta concentração relativa de probabilidades próximo a origem, o comportamento do deslocamento quadrático médio é proporcional ao quadrado do número de passos de tempo. Isso pode ser verificado na fig. (5.17), que apresenta o gráfico de  $\langle(\Delta r)^2\rangle \times n$ .



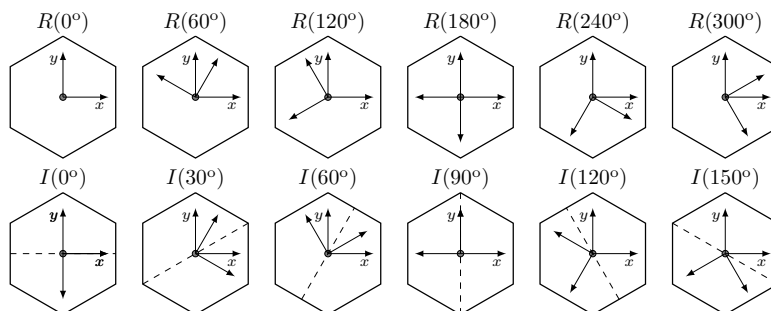
**Figura 5.17:** Comportamento do deslocamento quadrático médio em função dos passos de tempo para duas CQs utilizando as matrizes TDH e LTDH.

### 5.6.3 Família AB

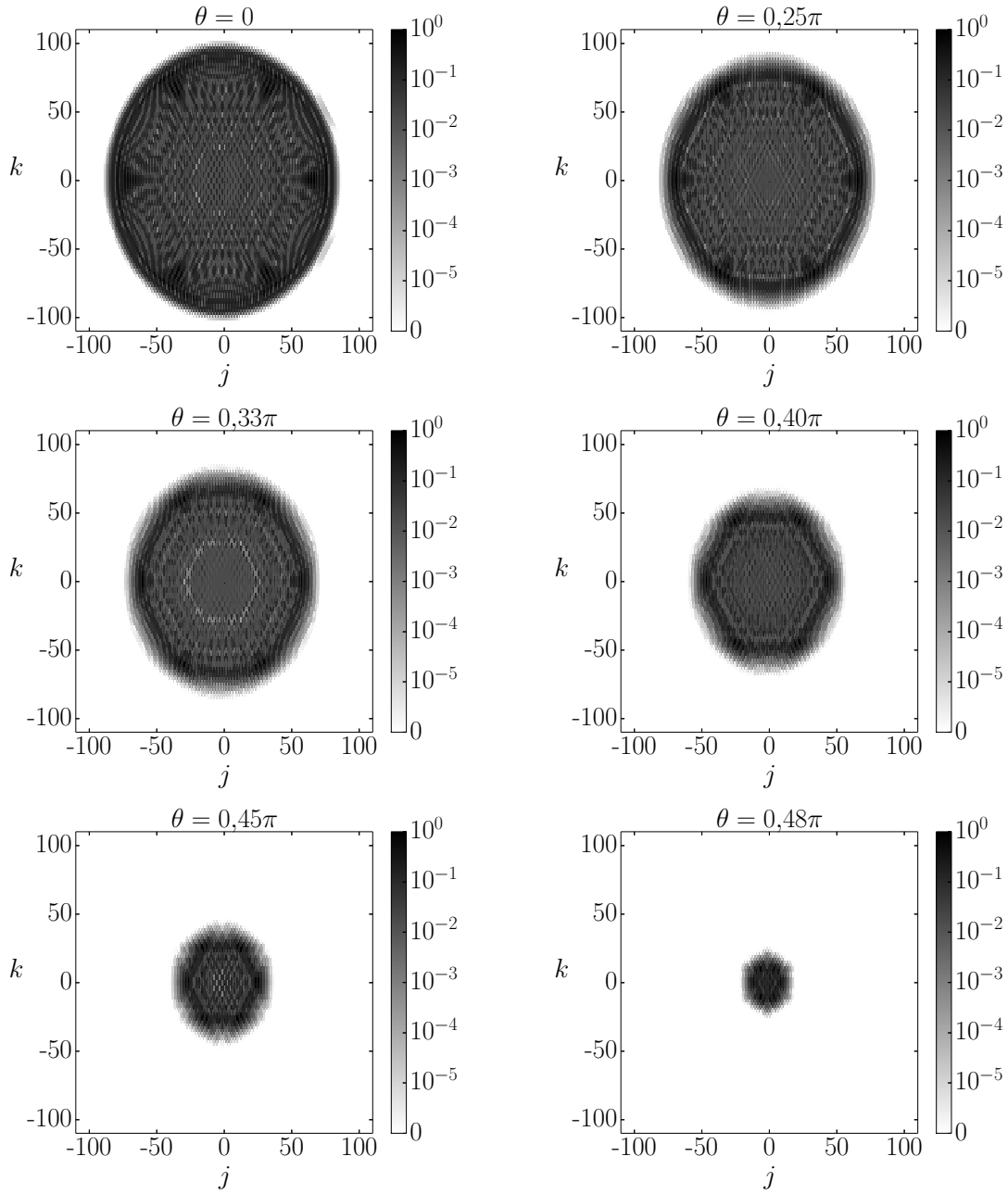
Nesta seção investigamos o comportamento de uma CQE, cujo estado inicial é dado pela eq. (5.37) e a matriz de espalhamento é dada pela matriz genérica da família AB, eq. (5.23),

$$\hat{\Gamma}^{(j,k)}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{5 + 4 \cos(2\theta)}} \begin{pmatrix} -e^{i\theta} & 2 \cos(\theta) & 2 \cos(\theta) \\ 2 \cos(\theta) & -e^{i\theta} & 2 \cos(\theta) \\ 2 \cos(\theta) & 2 \cos(\theta) & -e^{i\theta} \end{pmatrix}.$$

A matriz genérica da família AB é simétrica, isto é, os coeficientes de reflexão e de transmissão independem da direção de propagação da partícula. A combinação dessa matriz com o estado inicial simétrico dado na eq. (5.37) gera distribuições de probabilidades que exibem todas as simetrias pontuais de rotações e inversões de uma rede de Bravais triangular, ver fig. (5.18). Isto é um reflexo do fato que a rede hexagonal pode ser encarada como uma rede de Bravais triangular com dois sítios em sua base [143].



**Figura 5.18:** Simetrias pontuais de uma rede de Bravais Triangular.



**Figura 5.19:** Distribuições de probabilidades  $P_v(j, k, n)$ , após 100 passos de tempo, para uma CQEs cujo operador evolução é caracterizado pela matriz de espalhamento da família AB com diferentes valores do parâmetro  $\theta$  e o estado inicial dado pela eq. (5.37). Os gráficos foram reescalados.

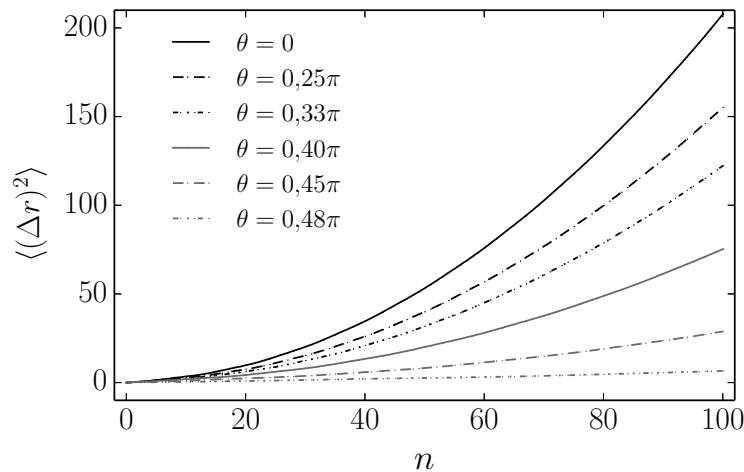
Na fig. (5.19) temos as distribuições de probabilidades  $P_v(j, k, n)$ , após 100 passos de tempo, para diversas evoluções com diferentes valores do parâmetro  $\theta$  e considerando o estado inicial simétrico da eq. (5.37). De maneira geral, tais distribuições são simétricas e tornam-se mais concentradas à medida que o valor de  $\theta$  se aproxima de  $\pi/2$ . Isto é um consequência direta do comportamento das amplitudes de espalhamento, uma vez que  $|r_A(\theta)|^2 \rightarrow 1$  e  $|t_B(\theta)|^2 \rightarrow 0$  a medida que  $\theta \rightarrow \pm\pi/2$ .



Comparando as distribuições de probabilidades dadas na fig. (5.19) com a fig. (5.18), constatamos que elas exibem toda as simetrias pontuais da rede de Bravais triangular. Essa característica decorre dos processos de interferência que os coeficientes de transmissão e reflexão impõem sobre a função de onda do sistema durante sua evolução temporal, uma vez eles geram os mesmos padrões de interferência independentemente do valor de  $\sigma$ . Isso pode ser exemplificado considerando a ação do operador evolução temporal, caracterizado com a matriz genérica da família AB, em um estado de base do sistema,

$$\hat{U}_{AB}|\sigma, j, k\rangle = \frac{1}{\sqrt{5 + 4 \cos(2\theta)}} \left( -e^{i\theta} |\sigma, f_{\sigma}^{(j,k)}, g_{\sigma}^{(j,k)}\rangle + 2 \cos(\theta) \sum_{\sigma' \neq \sigma} |\sigma', f_{\sigma'}^{(j,k)}, g_{\sigma'}^{(j,k)}\rangle \right).$$

Nas figs. (5.20), (5.21) e (5.22) apresentamos o comportamento do DQM para a coordenada radial ( $\langle(\Delta r)^2\rangle$ ) para CQEs cujo operador evolução é caracterizado pela matriz de espalhamento da família AB e o estado inicial dado pela eq. (5.37).

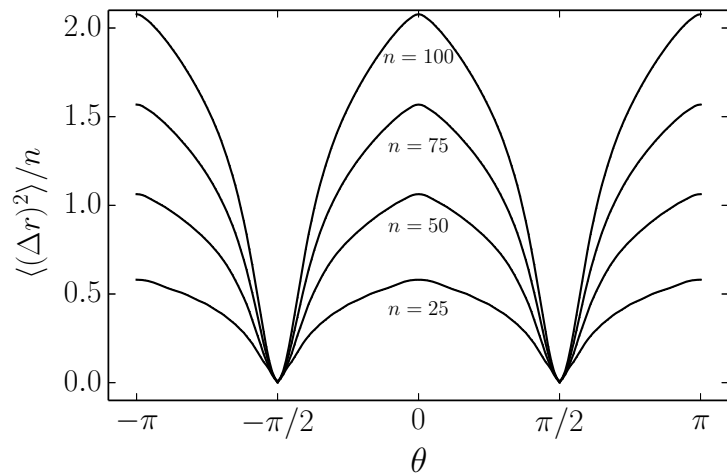


**Figura 5.20:** Comportamento do deslocamento quadrático médio em função dos passos de tempo, para CQEs cujo operador evolução é caracterizado pela matriz de espalhamento da família AB com diferentes valores do parâmetro  $\theta$  e o estado inicial dado pela eq. (5.37). Observe que independente do valor de  $\theta$ ,  $\langle(\Delta r)^2\rangle \sim n$ .

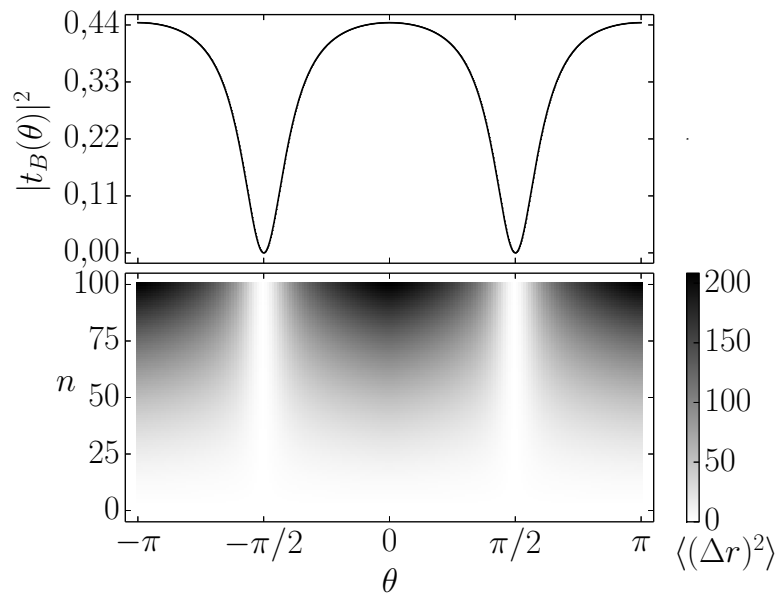
Mostramos na fig. (5.20) que independente do valor de  $\theta$ ,  $\langle(\Delta r)^2\rangle$  possui um comportamento que é proporcional a  $n^2$ . Nas figs. (5.21) e (5.22) verificamos que à medida que  $|t_B(\theta)|^2 \rightarrow 4/9$  ( $\theta \rightarrow \pm\pi$  ou  $0$ ),  $\langle(\Delta r)^2\rangle \rightarrow$  valor máximo. Assim, concluímos que

$$\langle(\Delta r)^2\rangle = K(\theta)n^2, \quad (5.43)$$

onde a constante de proporcionalidade  $K(\theta)$  possui um comportamento semelhante a probabilidade de transmissão em função do parâmetro  $\theta$ .



**Figura 5.21:** Comportamento da razão entre deslocamento quadrático médio e o número de passos em função do parâmetro  $\theta$  para CQEs cujo operador evolução é caracterizado pela matriz de espalhamento da família AB e o estado inicial dado pela eq. (5.37), para diferentes valores de passos de tempo.



**Figura 5.22:** Comparação entre o comportamento do DQM e da probabilidade da partícula sofrer um processo de transmissão,  $|t_B(\theta)|^2$ , em função do parâmetro  $\theta$  e do número de passos  $n$ , para CQEs cujo operador evolução é caracterizado pela matriz de espalhamento da família AB e o estado inicial dado pela eq. (5.37).

## Caminhadas Quânticas na Rede Hexagonal no Espaço de *Momenta*

Neste capítulo, determinamos as bandas de energia e as velocidades de grupo para uma CQEs na rede hexagonal, considerando uma matriz de espalhamento genérica e definida em termos de um parâmetro  $\theta$ , eq. (5.23). Além disso, realizamos uma comparação qualitativa entre as características das bandas de energia e das velocidade de grupo de uma CQE caracterizada pela matriz de Grover e do grafeno.

### 6.1 Rede de Bravais do Sistema

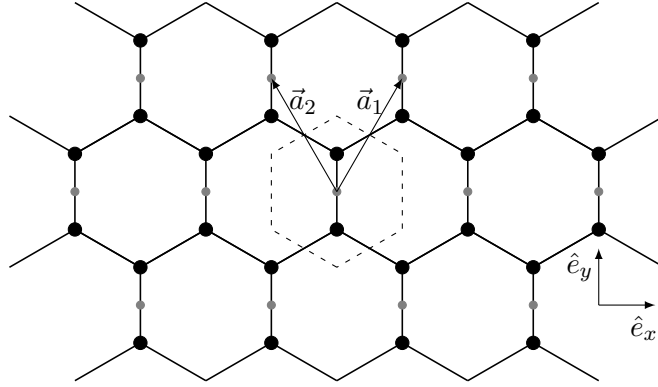
A rede hexagonal pode ser mapeada em uma rede de Bravais triangular (rede direta) com dois sítios, não equivalentes, em sua base, fig. (6.1). Assim, os vetores primitivos que definem essa rede são dados por

$$\vec{a}_1 = \frac{1}{2} \left( \sqrt{3}\hat{e}_x + 3\hat{e}_y \right) \quad \text{e} \quad \vec{a}_2 = \frac{1}{2} \left( -\sqrt{3}\hat{e}_x + 3\hat{e}_y \right), \quad (6.1)$$

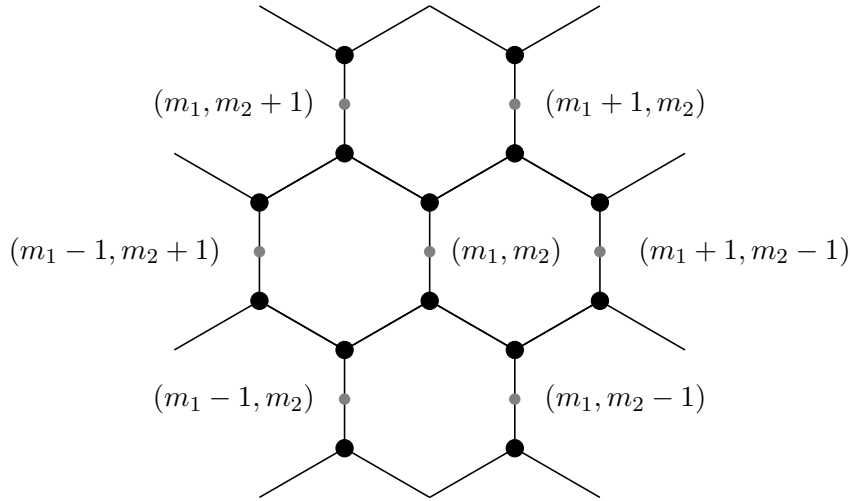
onde  $\hat{e}_x$  e  $\hat{e}_y$  são os versores em direções ortogonais no plano cartesiano. Portanto, a rede de Bravais pode ser obtida através do conjunto de pontos dados pelo vetor  $\vec{R}_{(m_1, m_2)}$ , tal que

$$\vec{R}_{(m_1, m_2)} = m_1\vec{a}_1 + m_2\vec{a}_2, \quad (6.2)$$

com  $m_1$  e  $m_2$  pertencentes aos inteiros, ver fig. (6.2).



**Figura 6.1:** Mapeamento da rede hexagonal sítios pretos em uma rede de Bravais triangular (pontos cinzas). A área delimitada pela linha tracejada representa a célula de Wigner-Seitz, cujas translações por vetores  $\vec{R}_{(m_1, m_2)}$ , que são perpendiculares aos seus lados, recobrem todo o plano. Observe que a célula de Wigner-Seitz contém dois sítios não equivalentes.



**Figura 6.2:** Os seis primeiros vizinhos do ponto  $(m_1, m_2)$  da rede de Bravais triangular, dados pelo vetor  $\vec{R}_{(m_1, m_2)}$ , eq. (6.2).

A rede recíproca da rede de Bravais do sistema é de fundamental importância no estudo de estruturas periódicas, sobretudo quando o sistema exibe invariância de translações por vetores que definem a sua rede de Bravais [143]. Os vetores primitivos que definem a rede recíproca, são determinados a partir dos vetores primitivos da rede direta, ou seja,

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \hat{e}_z}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \hat{e}_z)}, \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\hat{e}_z \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \hat{e}_z)}, \quad (6.3)$$

onde  $\hat{e}_z$  é o versor perpendicular aos versores  $\hat{e}_x$  e  $\hat{e}_y$ , isto é,  $\hat{e}_z = \hat{e}_x \times \hat{e}_y$ . Além disso, os vetores primitivos que definem as redes direta e recíproca satisfazem a

$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}. \quad (6.4)$$

Assim, considerando que os vetores primitivos da rede direta são dados pela eq. (6.1),

temos

$$\vec{b}_1 = 2\pi \left( \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{e}_x + \frac{1}{3} \hat{e}_y \right), \quad \vec{b}_2 = 2\pi \left( -\frac{1}{\sqrt{3}} \hat{e}_x + \frac{1}{3} \hat{e}_y \right). \quad (6.5)$$

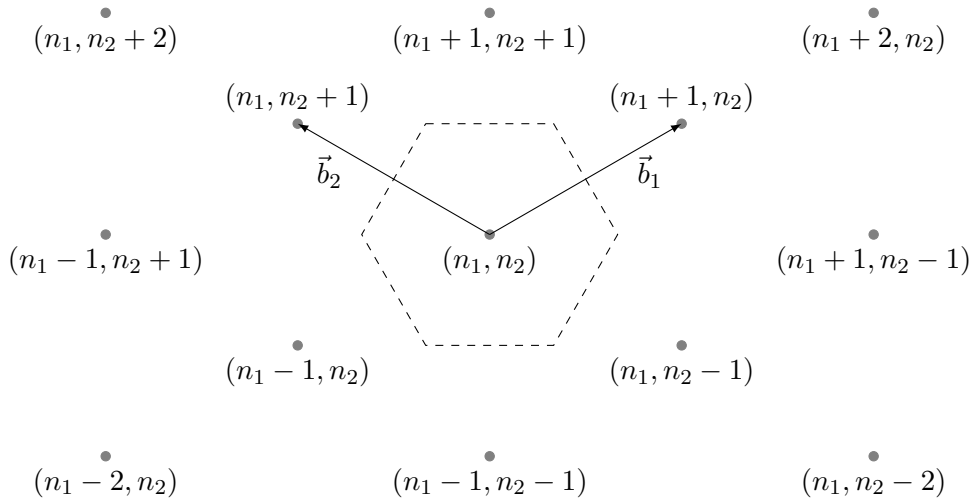
Portanto, os pontos que definem a rede de recíproca do sistema são dados pelo vetor

$$\vec{G}_{(n_1, n_2)} = n_1 \vec{b}_1 + n_2 \vec{b}_2, \quad (6.6)$$

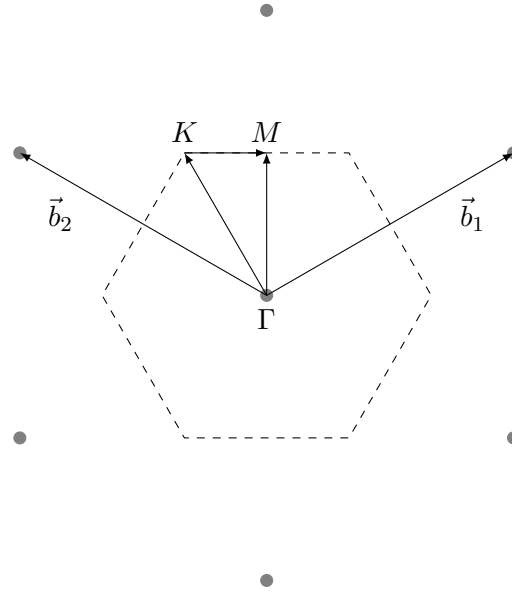
onde  $n_1$  e  $n_2$  pertencem aos inteiros. Além disso, observe que, enquanto  $\vec{R}_{(m_1, m_2)}$  possui dimensão de comprimento,  $[L]$ ,  $\vec{G}_{(n_1, n_2)}$  tem dimensão de inversos de comprimento,  $[L]^{-1}$ . Ademais, considerando a eq. (6.4), verifica-se que

$$\vec{G}_{(n_1, n_2)} \cdot \vec{R}_{(m_1, m_2)} = 2\pi(n_1 m_1 + n_2 m_2). \quad (6.7)$$

Na fig. (6.3), temos o conjunto de pontos dados pelo vetor  $\vec{G}_{(n_1, n_2)}$ , considerando os vetores primitivos da eq. (6.5). Observe que, a rede recíproca é uma rede de Bravais triangular, assim como sua rede direta, fig. (6.1). Podemos também definir a rede recíproca da rede recíproca, que não é mais do que a própria rede direta. Além disso, na fig. (6.3), também temos representado sua célula primitiva de Wigner-Seitz, que é conhecida como primeira zona de Brillouin e desempenha um papel central no estudo de vibrações cristalinas e teoria de bandas [143]. Na fig. (6.4) temos os pontos de alta simetria que são importantes na investigação da variação da relação de dispersão energia em função do vetor de onda  $\vec{k}$  nessas direções.



**Figura 6.3:** Rede recíproca associada a rede de Bravais da fig. (6.1). Assim como sua rede direta, ela é uma rede de Bravais triangular. A área delimitada pelo hexágono tracejado corresponde a primeira zona de Brillouin dessa rede.



**Figura 6.4:** Primeira zona de Brillouin e seus pontos de alta simetria, cujas coordenadas são dadas por  $\Gamma(0,0)$ ,  $K(-2\pi/3\sqrt{3}, 2\pi/3)$  e  $M(0, 2\pi/3)$ .

## 6.2 Bandas de Energia

As bandas de energia do sistema podem ser obtidas a partir dos autovalores do operador evolução temporal. Para determinar os autovalores de  $\hat{U}$ , vamos admitir que o sistema é invariante sob translações pelo vetor  $\vec{R}(m_1, m_2)$  que define os pontos da rede de Bravais do sistema, eq. (6.2). Isso implica que o operador de evolução comuta com o operador de translação  $\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}$ , cuja ação em um estado associado a posição  $\vec{r}$  resulta em

$$\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}|\psi(\vec{r})\rangle = |\psi(\vec{r} + \vec{R}(m_1, m_2))\rangle \quad (6.8)$$

e

$$\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}^\dagger|\psi(\vec{r})\rangle = |\psi(\vec{r} - \vec{R}(m_1, m_2))\rangle. \quad (6.9)$$

Associando ao estado de base  $|\sigma, j, k\rangle$  o vetor posição  $\vec{r}_v(j, k)$  do sítio  $(j, k)$  no plano cartesiano, cujas coordenadas são dadas pelas eqs. (5.1) e (5.2), tal que

$$|\sigma, j, k\rangle \equiv |\sigma, \vec{r}_v(j, k)\rangle, \quad (6.10)$$

e levando em conta que a ação do operador de translação em um estado que descreve o sistema na posição  $\vec{r}$ , eq. (6.8), a ação de  $\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}$  em um estado de base  $|\sigma, j, k\rangle$  é dada

por

$$\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}|\sigma, j, k\rangle = \hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}|\sigma, \vec{r}_v(j, k)\rangle = |\sigma, \vec{r}_v(j, k) + \vec{R}(m_1, m_2)\rangle = |\sigma, j', k'\rangle, \quad (6.11)$$

onde  $(j', k')$  representa o sítio associado à posição  $\vec{r}_v(j', k') = \vec{r}_v(j, k) + \vec{R}(m_1, m_2)$ . Assim, considerando as expressões das coordenadas no plano cartesiano dos vértices da rede, eqs. (5.1) e (5.2), e as dos vetores primitivos das redes de Bravais, eq. (6.1), pode-se mostrar que

$$\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}|\sigma, j, k\rangle = |\sigma, j + m_1 - m_2, k + 2(m_1 + m_2)\rangle \quad (6.12)$$

e

$$\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}^\dagger|\sigma, j, k\rangle = |\sigma, j - m_1 + m_2, k - 2(m_1 + m_2)\rangle. \quad (6.13)$$

Para demonstrar que os operadores de evolução temporal e translação comutam,

$$\left[ \hat{U}, \hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)} \right] = \hat{U}\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)} - \hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}\hat{U} = 0, \quad (6.14)$$

representamos  $\hat{U}$  na base  $\{|\sigma, j, k\rangle\}$ . Logo, da eq. (5.9), temos

$$\hat{U} = \sum_{j, k} \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j, k)} |\sigma', f(\sigma', j, k), g(\sigma', j, k)\rangle \langle \sigma, j, k|, \quad (6.15)$$

Assim, usando as eqs. (6.12) e (6.13), chegamos em

$$\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}\hat{U} = \sum_{j, k} \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j, k)} |\sigma', f(\sigma', j, k) + m_1 - m_2, g(\sigma', j, k) + 2(m_1 + m_2)\rangle \langle \sigma, j, k| \quad (6.16)$$

e

$$\hat{U}\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)} = \sum_{j, k} \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j, k)} |\sigma', f(\sigma', j, k), g(\sigma', j, k)\rangle \langle \sigma, j - m_1 + m_2, k - 2(m_1 + m_2)|. \quad (6.17)$$

Finalmente, realizando a seguintes mudanças de variáveis

$$j' = j - m_1 + m_2 \quad (6.18)$$

e

$$k' = k - 2(m_1 + m_2) \quad (6.19)$$

na eq. (6.17), e considerando que

$$f(\sigma, j + m_1 - m_2, k + 2(m_1, m_2)) = f(\sigma, j, k) + m_1 - m_2 \quad (6.20)$$

e

$$g(\sigma, j + m_1 - m_2, k + 2(m_1, m_2)) = g(\sigma, j, k) + 2(m_1 + m_2), \quad (6.21)$$

então se  $\hat{U}$  e  $\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}$  comutam, os coeficientes  $\Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j, k)}$ , devem obedecer a seguinte relação

$$\Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j, k)} = \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j+m_1-m_2, k+2(m_1+m_2))}. \quad (6.22)$$

ou seja, eles devem possuir a periodicidade da rede de Bravais do sistema, ou em outras palavras, todos os coeficientes  $\Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j, k)}$  associados com  $k$  de mesma paridade devem ser iguais, o que resulta em um sistema invariante sob translações pelo vetor que define a sua rede de Bravais. Desta forma podemos encontrar autovetores simultâneos de  $\hat{U}$  e  $\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}$ .

A equação de autovalores para o operador  $\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}$  é dada por

$$\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}|\sigma, \vec{k}\rangle = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}(m_1, m_2)}|\sigma, \vec{k}\rangle, \quad (6.23)$$

onde  $\vec{k}$  é denominado de vetor de onda e

$$\vec{k} = \kappa_x \hat{e}_x + \kappa_y \hat{e}_y. \quad (6.24)$$

Na base  $\{|\sigma, j, k\rangle\}$ , os autovetores de  $\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}$  são dados por

$$\begin{aligned} |\sigma, \vec{k}\rangle &= \sum_{j, k, \sigma'} |\sigma', j, k\rangle \langle \sigma', j, k | \sigma, \vec{k}\rangle = \sum_{j, k, \sigma'} |\sigma', \vec{r}_v(j, k)\rangle \langle \sigma', \vec{r}_v(j, k) | \sigma, \vec{k}\rangle \\ |\sigma, \vec{k}\rangle &= \frac{1}{2\pi} \sum_{j, k} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_v(j, k)} |\sigma, \vec{r}_v(j, k)\rangle = \frac{1}{2\pi} \sum_{j, k} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_v(j, k)} |\sigma, j, k\rangle. \end{aligned} \quad (6.25)$$

Assim, apesar de  $\hat{U}$  e  $\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}$  comutarem, os autovetores do operador translação, eq. (6.25), não são autovetores do operador evolução temporal, pois, considerando a ação do operador evolução em um estado da base  $\{|\sigma, j, k\rangle\}$ , eq. (5.9), temos

$$\hat{U}|\sigma, \vec{k}\rangle = \sum_{j, k} \sum_{\sigma'=1}^3 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_v(j, k)} \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j, k)} |\sigma', f_{\sigma'}(j, k), g_{\sigma'}(j, k)\rangle. \quad (6.26)$$

Isso ocorre devido à degenerescência associada ao número quântico  $\sigma$  nos autovalores de  $\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}$ . Entretanto, podemos encontrar combinações lineares dos autovetores de



$\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}$  que sejam autovetores de  $\hat{U}$ .

Para determinar os autovalores de  $\hat{U}$ , é necessário considerar que a estrutura de base possui dois vértices não-equivalentes, fig. (6.1). Portanto, para a partícula se deslocar de um vértice para outro equivalente, em uma célula unitária vizinha à que ele se encontra, são necessários dois passos de tempo. Assim, definimos um operador evolução efetivo,  $\hat{U}_{ef}$ , tal que

$$\hat{U}_{ef} = \hat{U}^2, \quad (6.27)$$

cuja equação de autovalores é dada por

$$\hat{U}_{ef}|u_{\vec{k}}\rangle = e^{-2i\omega(\vec{k})}|u_{\vec{k}}\rangle, \quad (6.28)$$

onde

$$|u_{\vec{k}}\rangle = C_+|+, \vec{k}\rangle + C_0|0, \vec{k}\rangle + C_-|-, \vec{k}\rangle \quad (6.29)$$

e  $\omega(\vec{k})$  é a energia associada ao autovetor  $|u_{\vec{k}}\rangle$ . A continuidade em  $\vec{k}$  da função  $\omega(\vec{k})$  associada com a periodicidade do sistema fazem com que o espectro dos autovalores de  $\hat{U}$  se separe em bandas de energia [143].

Lembrando que em cada célula unitária existem dois sítios não equivalentes, fig. (6.1), cujas coordenadas são dadas por  $(j, k_{par})$  e  $(j, k_{imp})$ , podemos expressar os autovetores do operador de translação, eq. (6.25), por

$$|\sigma, \vec{k}\rangle = \sum_{j, k_{par}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_v(j, k_{par})} |\sigma, j, k_{par}\rangle + \sum_{j, k_{imp}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_v(j, k_{imp})} |\sigma, j, k_{imp}\rangle. \quad (6.30)$$

Por consequência, considerando que os coeficientes de espalhamento são independentes de  $(j, k)$ , a ação de  $\hat{U}_{ef}$  em  $|\sigma, \vec{k}\rangle$  resulta em

$$\hat{U}_{ef}|\sigma, \vec{k}\rangle = \sum_{\sigma'=1}^3 \left( \sum_{j, k_{par}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_v(j, k_{par})} \tilde{\Gamma}_{\sigma'\sigma}^{(+)} |\sigma', j, k_{par}\rangle + \sum_{j, k_{imp}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_v(j, k_{imp})} \tilde{\Gamma}_{\sigma'\sigma}^{(-)} |\sigma', j, k_{imp}\rangle \right), \quad (6.31)$$

onde

$$\tilde{\Gamma}_{1\sigma}^{(\pm)} = \Gamma_{1\sigma}\Gamma_{11} + \Gamma_{2\sigma}\Gamma_{12}e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}(\mp 1, 0)} + \Gamma_{3\sigma}\Gamma_{13}e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_v(\mp 1, \pm 1)}, \quad (6.32)$$

$$\tilde{\Gamma}_{2\sigma}^{(\pm)} = \Gamma_{1\sigma}\Gamma_{21}e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}(\pm 1, 0)} + \Gamma_{2\sigma}\Gamma_{22} + \Gamma_{3\sigma}\Gamma_{23}e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}(0, \pm 1)}, \quad (6.33)$$

$$\tilde{\Gamma}_{3\sigma}^{(\pm)} = \Gamma_{1\sigma}\Gamma_{31}e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}(\pm 1, \mp 1)} + \Gamma_{2\sigma}\Gamma_{32}e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}(0, \mp 1)} + \Gamma_{3\sigma}\Gamma_{33}. \quad (6.34)$$

Finalmente, podemos reduzir a eq. (6.28) no sistema de equações dado por

$$\begin{pmatrix} \tilde{\Gamma}_{11}^{(\pm)} & \tilde{\Gamma}_{12}^{(\pm)} & \tilde{\Gamma}_{13}^{(\pm)} \\ \tilde{\Gamma}_{21}^{(\pm)} & \tilde{\Gamma}_{22}^{(\pm)} & \tilde{\Gamma}_{23}^{(\pm)} \\ \tilde{\Gamma}_{31}^{(\pm)} & \tilde{\Gamma}_{32}^{(\pm)} & \tilde{\Gamma}_{33}^{(\pm)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_+ \\ C_0 \\ C_- \end{pmatrix} = e^{-2i\omega(\vec{k})} \begin{pmatrix} C_+ \\ C_0 \\ C_- \end{pmatrix}. \quad (6.35)$$

Conseqüentemente, para encontrar os autovalores de  $\hat{U}_{ef}$ , que fornece a relação de dispersão da energia em função do vetor de onda  $\vec{k}$  e a eq. (6.35) ter solução não-trivial, devemos resolver a equação característica dada por

$$\begin{vmatrix} \tilde{\Gamma}_{11}^{(\pm)} - e^{-2i\omega(\vec{k})} & \tilde{\Gamma}_{12}^{(\pm)} & \tilde{\Gamma}_{13}^{(\pm)} \\ \tilde{\Gamma}_{21}^{(\pm)} & \tilde{\Gamma}_{22}^{(\pm)} - e^{-2i\omega(\vec{k})} & \tilde{\Gamma}_{23}^{(\pm)} \\ \tilde{\Gamma}_{31}^{(\pm)} & \tilde{\Gamma}_{32}^{(\pm)} & \tilde{\Gamma}_{33}^{(\pm)} - e^{-2i\omega(\vec{k})} \end{vmatrix} = 0. \quad (6.36)$$

### 6.3 Exemplos de Bandas de Energia

Para exemplificar o cálculo dos autovalores do operador evolução temporal, vamos admitir que os coeficientes da matriz de espalhamento são dados pelos elementos da matriz  $\Gamma_{AB}(\theta)$ , eq. (5.23). Assim, lembrando que

$$\vec{k} = \kappa_x \hat{e}_x + \kappa_y \hat{e}_y, \quad (6.37)$$

e considerando as eqs. (6.1) e (6.2), pode-se mostrar que

$$\vec{k} \cdot \vec{R}_{(m_1, m_2)} = \frac{\sqrt{3}\kappa_x}{2}(m_1 - m_2) + \frac{3\kappa_y}{2}(m_1 + m_2). \quad (6.38)$$

Substituindo esse resultado juntamente com os coeficientes da matriz  $\Gamma_{AB}^{(j,k)}(\theta)$  (ver eq. (5.23)) na eq. (6.36), obtemos a seguinte equação característica

$$(1 + h(\kappa_x, \kappa_y) \cos^2(\theta) + \cos(2\omega)(5 + 4 \cos(2\theta))) (3 \cos(\theta) \sin(\omega) + \sin(\theta) \cos(\omega)) = 0, \quad (6.39)$$

onde

$$h(\kappa_x, \kappa_y) = 2 - 4 \cos\left(\sqrt{3}\kappa_x\right) - 8 \cos\left(\frac{\sqrt{3}\kappa_x}{2}\right) \cos\left(\frac{3\kappa_y}{2}\right). \quad (6.40)$$

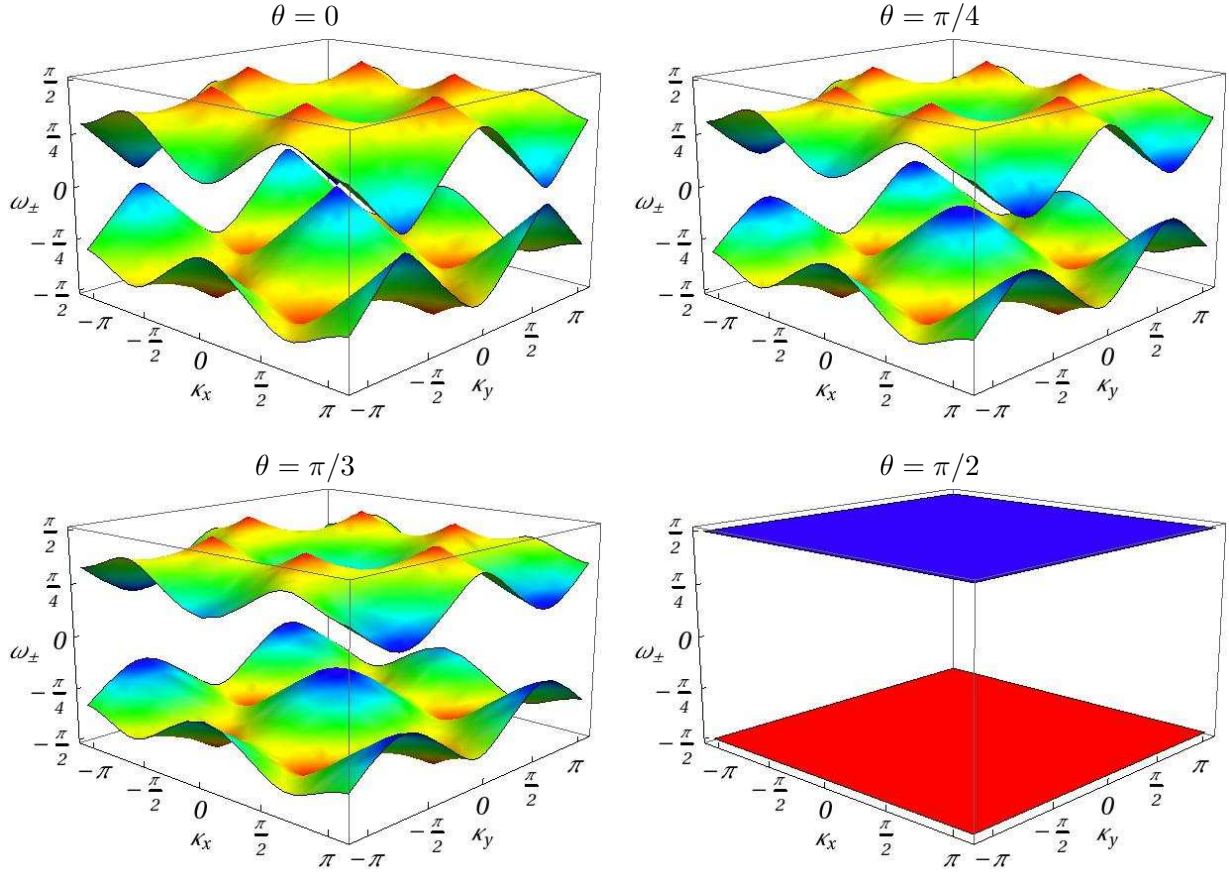
A eq. (6.39) possui três soluções dadas por

$$\omega_0(\kappa_x, \kappa_y, \theta) = \arctan\left(-\frac{1}{3} \tan(\theta)\right) \quad (6.41)$$

e

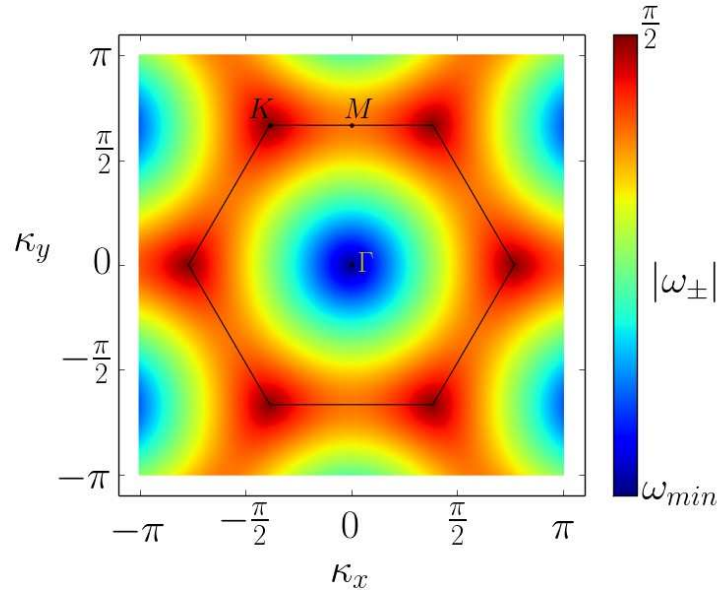
$$\omega_{\pm}(\kappa_x, \kappa_y, \theta) = \pm \frac{1}{2} \arccos \left( -\frac{1 + h(\kappa_x, \kappa_y) \cos^2(\theta)}{5 + 4 \cos(2\theta)} \right). \quad (6.42)$$

Observe que  $\omega_0$  independe de vetor de onda, isto é, fixando o valor de  $\theta$ , ela é uma constante. Na figs. (6.5), (6.6) e (6.7) mostramos as bandas de energia para diversos valores de  $\theta$ .

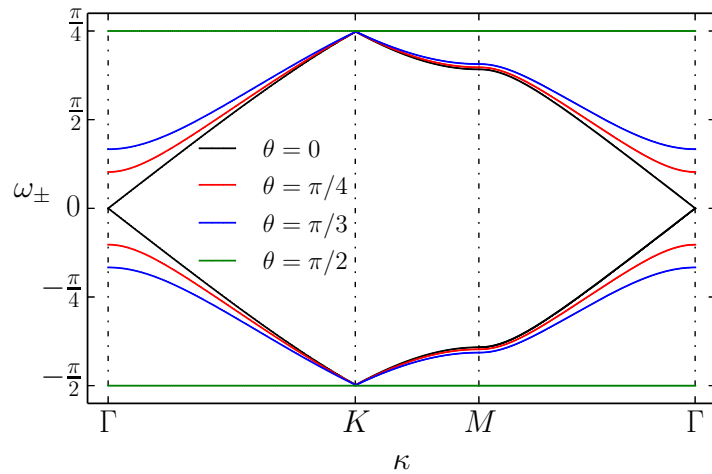


**Figura 6.5:** Comportamento das bandas de energia para diversos valores do parâmetro  $\theta$ . As bandas superiores corresponde a  $\omega_+$  e as inferiores a  $\omega_-$ . Observe que para  $\theta = 0$  as bandas se tocam no ponto  $\Gamma(0, 0)$ .

Dois situações interessantes ocorrem para  $\theta = \pi/2$  e  $\theta = 0$ . No primeiro caso as duas bandas de energia são constantes e o valor do *gap* entre elas é o maior possível. Isto ocorre porque neste caso a partícula encontra 100% de probabilidade de sofrer um processo de reflexão ( $|r_A(\theta)|^2 = 1$ ), ou seja, ela não tem mobilidade pela rede. A situação oposta ocorre para  $\theta = 0$ , onde o valor do *gap* é zero. Isto reflete o fato da partícula ter a maior probabilidade possível de sofrer um processo de transmissão ( $2|t_B(\theta)|^2 = 8/9$ ), o que lhe confere uma grande mobilidade pela rede.



**Figura 6.6:** Densidade de energia da função  $|\omega_{\pm}|$  para  $|\theta| < \pi/2$ , onde  $\omega_{min}$  corresponde ao valor mínimo de  $|\omega_{\pm}|$ . Além disso, representamos a primeira zona de Brillouin (hexágono) e os pontos de alta simetria do sistema. Observa-se que o valor máximo de  $|\omega_{\pm}|$  ocorre sobre os vértices da primeira zona de Brillouin e o valor mínimo no ponto de alta simetria  $\Gamma(0,0)$ .

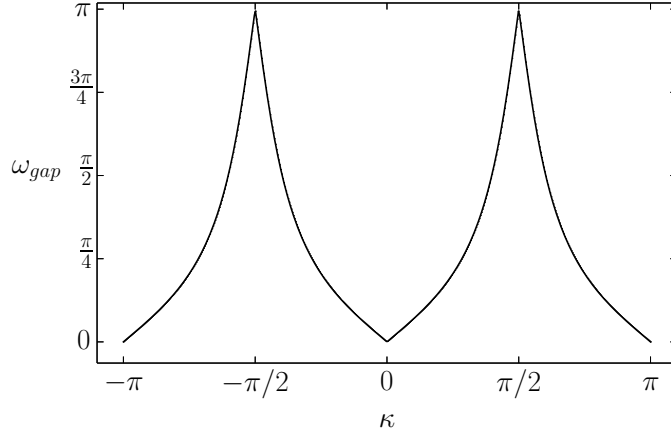


**Figura 6.7:** Comportamento das bandas de energia na direção das retas que ligam os pontos de alta simetria e para diversos valores de  $\theta$ .

De maneira geral observa-se que, para  $|\theta| < \pi/2$ , o comportamento assintótico de  $\omega_{\pm}$  não varia em relação a  $\theta$ , por exemplo, o mínimo da banda  $\omega_{+}(\kappa_x, \kappa_y, \theta)$  e o valor máximo de  $\omega_{-}(\kappa_x, \kappa_y, \theta)$  estão localizados no ponto  $\Gamma(0,0)$ . Conseqüentemente, a expressão para o *gap* de energia entre essas duas bandas é dada por

$$\omega_{gap} = \omega_{+}(0, 0, \theta) - \omega_{-}(0, 0, \theta) = \arccos\left(\frac{5 \cos(2\theta) + 4}{4 \cos(2\theta) + 5}\right). \quad (6.43)$$

O gráfico de  $\omega_{gap}$  em função do parâmetro  $\theta$  é dado na fig. (6.8). De maneira geral, observa-se que o comportamento de tal quantidade é qualitativamente igual ao gráfico da probabilidade de reflexão, ver fig. (5.5). Isto ocorre porque a matriz de espalhamento define o operador de evolução temporal e consequentemente o hamiltoniano do sistema.



**Figura 6.8:** Comportamento do  $gap$  entre as bandas de energia em função do parâmetro  $\theta$ .

O passo seguinte é determinar a velocidade de grupo das autofunções do sistema, pois como mencionado no capítulo (3), elas são diretamente responsáveis pela distribuição de energia pela rede. Generalizando a eq. (3.109) para duas dimensões, temos que a velocidade média da partícula, quando o estado do sistema é um autoestado de  $\hat{U}$  com autovalor  $\omega_\mu(\vec{\kappa})$ , é dada por

$$\vec{v}_\mu(\vec{\kappa}) = \nabla_{\vec{\kappa}} \omega_\mu(\vec{\kappa}). \quad (6.44)$$

Assim, se o estado do sistema é o autovetor de  $\hat{U}$  com autovalor  $\omega_0(\vec{\kappa})$ , que para um dado valor de  $\theta$  é constante, ver eq. (6.41), então

$$\vec{v}_0(\vec{\kappa}) = 0, \quad (6.45)$$

isto é, se o estado do sistema é dado pelo autovetor correspondente ao autovalor  $\omega_0(\vec{\kappa})$ , a partícula não possui mobilidade pela rede. Entretanto, se o estado da partícula é o autovetor de  $\hat{U}$  com autovalores  $\omega_\pm(\vec{\kappa})$  dados na eq. (6.42), então

$$\vec{v}_\pm(\kappa_x, \kappa_y) = \pm v_x(\kappa_x, \kappa_y) \hat{e}_x \pm v_y(\kappa_x, \kappa_y) \hat{e}_y, \quad (6.46)$$

onde

$$v_x(\kappa_x, \kappa_y) = - \frac{2\sqrt{3} \cos^2(\theta) \left( \sin\left(\frac{\sqrt{3}\kappa_x}{2}\right) \cos\left(\frac{3\kappa_y}{2}\right) + \sin(\sqrt{3}\kappa_x) \right)}{\sqrt{(4 \cos(2\theta) + 5)^2 - (\cos^2(\theta) h(\kappa_x, \kappa_y) + 1)^2}} \quad (6.47)$$

e

$$v_y(\kappa_x, \kappa_y) = \frac{6 \cos^2(\theta) \cos\left(\frac{\sqrt{3}\kappa_x}{2}\right) \sin\left(\frac{3\kappa_y}{2}\right)}{\sqrt{(4 \cos(2\theta) + 5)^2 - (\cos^2(\theta)h(\kappa_x, \kappa_y) + 1)^2}}. \quad (6.48)$$

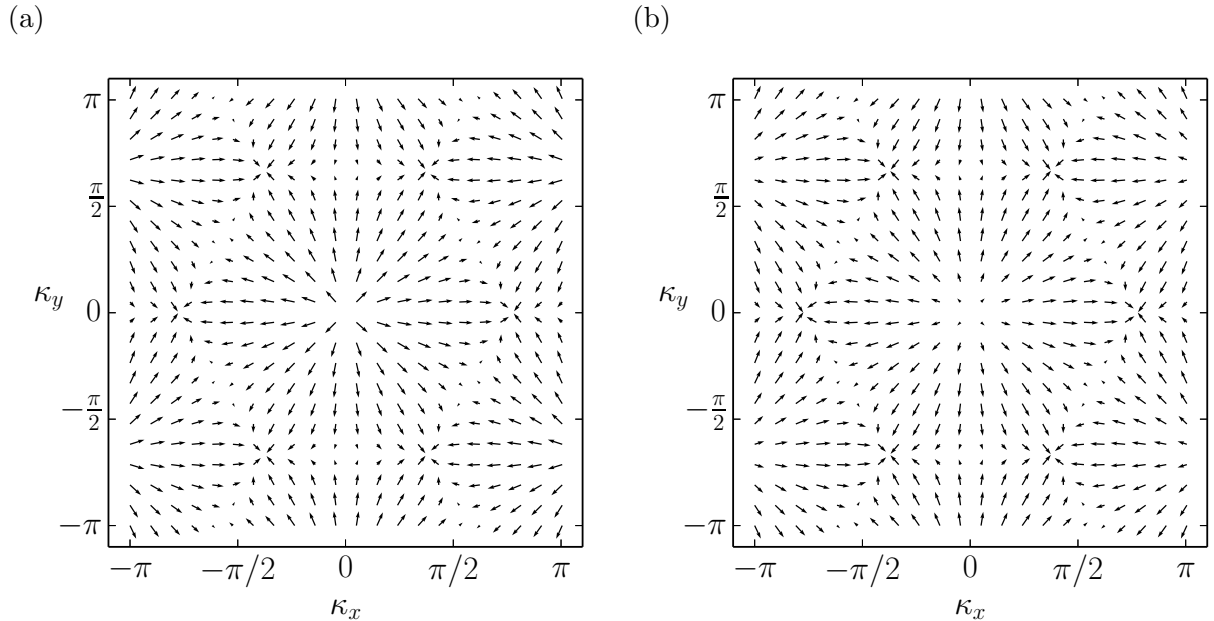
Além disso, o módulo da velocidade de grupo é dado por

$$v_{\pm}(\kappa_x, \kappa_y) = \frac{2\sqrt{3} \sqrt{\cos^4(\theta) \left( 3 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}\kappa_y}{2}\right) \sin^2\left(\frac{3\kappa_y}{2}\right) + \left( \sin\left(\frac{\sqrt{3}\kappa_y}{2}\right) \cos\left(\frac{3\kappa_y}{2}\right) + \sin(\sqrt{3}\kappa_y) \right)^2 \right)}}{(4 \cos(2\theta) + 5)^2 - (\cos^2(\theta)h(\kappa_x, \kappa_y) + 1)^2}. \quad (6.49)$$

Nas figs. (6.9) e (6.10) apresentamos, respectivamente, o campo vetorial e a distribuição de densidade do módulo da velocidade de grupo do sistema para diferentes valores de  $\theta$ . Ademais, verifica-se que

$$\lim_{\theta \rightarrow \pi/2} v_{\pm} = 0, \quad (6.50)$$

isto é, a  $v_{\pm}$  vai a zero para  $\theta = \pi/2$  porque nesta situação a probabilidade de reflexão é 100% e a função de onda do sistema tende a ficar confinada nas arestas associadas ao estado inicial.



**Figura 6.9:** Campo vetorial da velocidade de grupo,  $\vec{v}_+(\kappa_x, \kappa_y)$ , para (a)  $\theta = 0$  e (b)  $\theta = \pi/3$ .

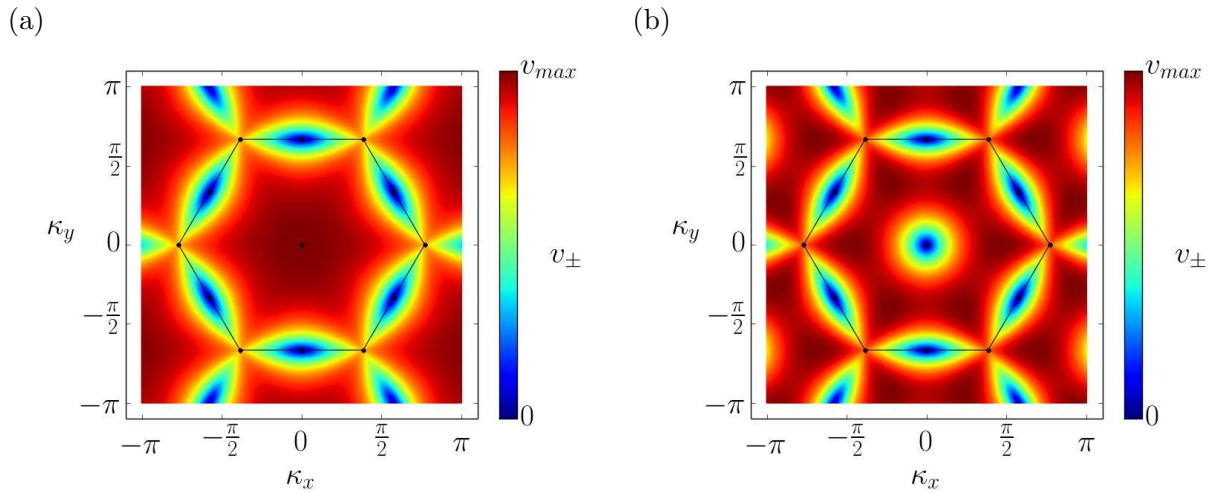
Os pontos onde a velocidade de grupo se anula são importantes na determinação da densidade de estados do sistema, uma vez que

$$g_{\pm}(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\omega}{|v_{\pm}(\omega)|^2} \quad (6.51)$$

é a densidade de estado em função da energia  $\omega$  que é parametrizada por  $\kappa_x$  e  $\kappa_y$  [145]. Logo, igualando as eqs. (6.47) e (6.48) a zero, obtemos o seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} \sin\left(\frac{\sqrt{3}\kappa_{xi}}{2}\right) \cos\left(\frac{3\kappa_{yi}}{2}\right) + \sin(\sqrt{3}\kappa_{xi}) = 0, \\ \cos\left(\frac{\sqrt{3}\kappa_{yi}}{2}\right) \sin\left(\frac{3\kappa_{xi}}{2}\right) = 0, \end{cases} \quad (6.52)$$

cuja solução, dentro da primeira zona de Brillouin são os pontos destacados na fig. (6.10).



**Figura 6.10:** Módulo da velocidade de grupo para (a)  $\theta = 0$  e (b)  $\theta = \pi/3$ . O hexágono nas figuras representam a primeira zona de Brillouin e nos pontos destacados em preto a velocidade se anula.

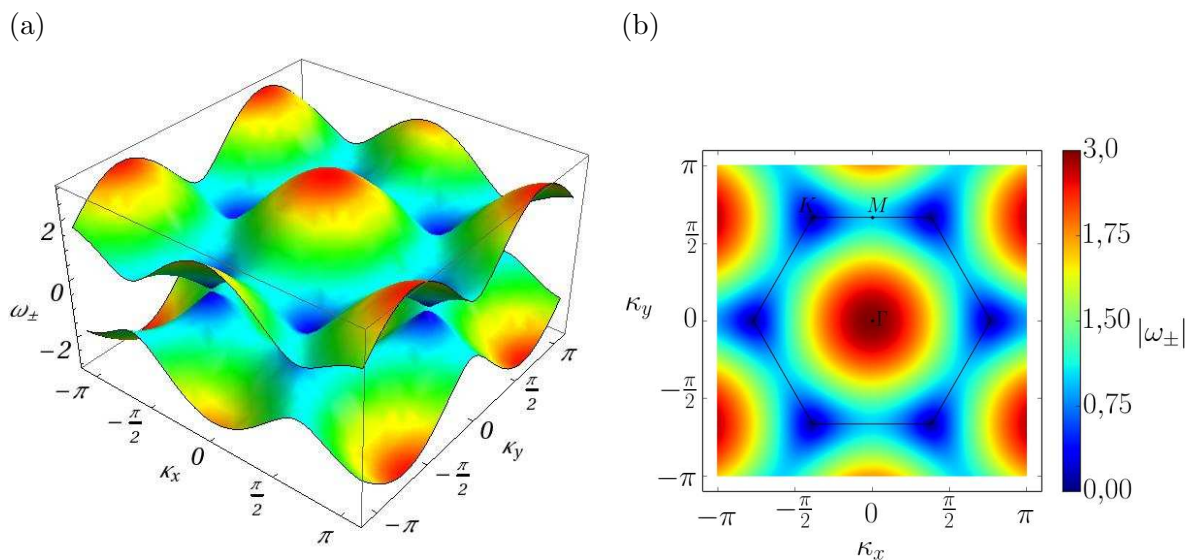
## 6.4 Caminhadas Quânticas e o Grafeno

Na década de 30 do século XX, L. D. Landau e R. Peierls questionavam a possibilidade da existência de um cristal bidimensional perfeito. Segundo eles tais materiais seriam termodinamicamente instáveis e conseqüentemente em teoria não poderiam existir [165, 166]. Entretanto, no início do século XXI, os físicos russos A. Geim e K. Novoselov descobriram experimentalmente o grafeno [113, 115], que é um cristal bidimensional com topologia hexagonal. Logo, utilizando o método de *tight-binding* pode-se mostrar que as bandas de energias para os elétrons do orbital  $p_z$ , que definem as principais propriedades de transporte de carga na presença de campos eletromagnéticos não intensos, são dadas por [114]

$$\omega_{\pm}^{(gra)} = \pm \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}\kappa_x}{2}\right) \cos\left(\frac{3\kappa_y}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}\kappa_x}{2}\right)}, \quad (6.53)$$

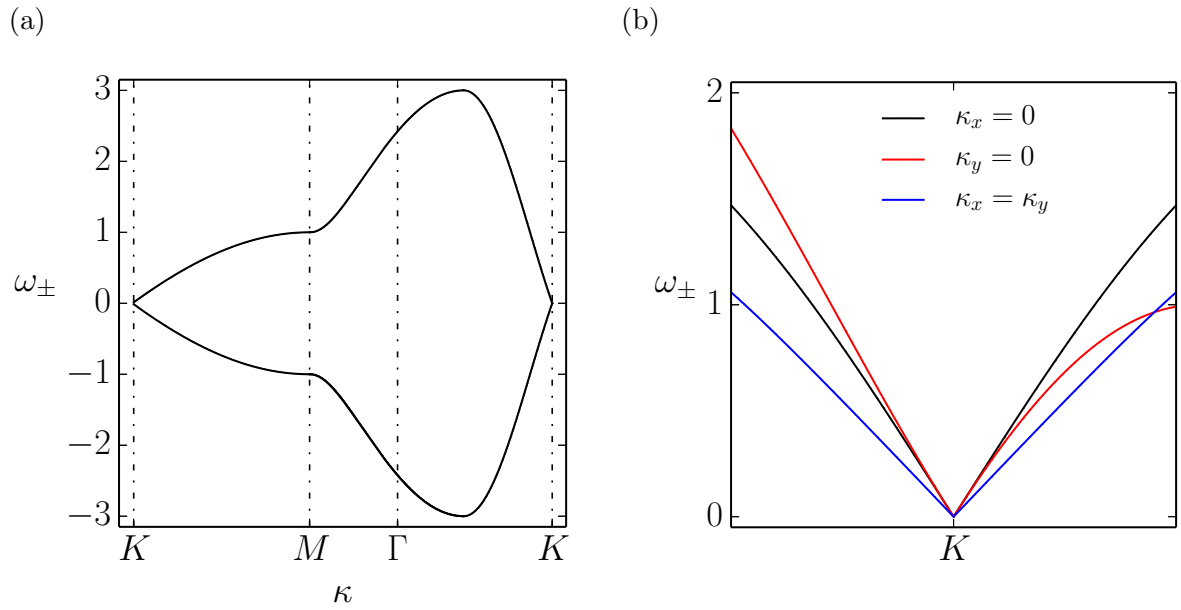
onde é assumido apenas interação entre os primeiros vizinhos, e que a distância entre dois átomos de carbono adjacentes e a taxa de *hopping* sejam iguais a unidade. Na fig. (6.11) mostramos gráficos de  $\omega_{\pm}^{(gra)}$ . Observe que, as bandas de energia se tocam no pontos que correspondem aos vértices do hexágono que delimita a primeira zona de Brillouin. Tais pontos são denominados “pontos de Dirac”, e próximo a eles a relação de dispersão de energia com o número onda é linear. Este comportamento das bandas de energia próximo aos pontos de Dirac, leva à descrição dos elétrons do orbital  $p_z$  por teoria análoga a que descreve de férmions de Dirac sem massa [112–114].

Retornando às CQEs caracterizada pela matriz de espalhamento da família  $AB$ , observamos que para  $\theta = 0$ , que resulta na matriz de espalhamento dada pela matriz de Grover, eq. (5.26), as bandas de energia possuem um comportamento linear próximo ao  $\Gamma(0, 0)$ , ver fig. (6.14b). Além disso, verificamos também que nesse ponto o *gap* de energia é zero. Este comportamento é análogo ao que ocorre para as bandas de energia do grafeno, com a diferença na posição onde as bandas de energia se tocam. Portanto, podemos descrever a partícula próximo ao ponto  $\Gamma(0, 0)$  por uma teoria efetiva de férmions de Dirac sem massa [99]. Logo, devido a essa similaridade entre os comportamentos desses dois sistemas, acreditamos que seja possível uma descrição (talvez mais simplificada) das propriedades do grafeno através de caminhadas quânticas. Entretanto, precisamos encontrar uma transformação unitária ou uma nova matriz de espalhamento adequada para obter bandas de energias com os pontos de Dirac coincidindo com o caso das bandas de energia do grafeno.

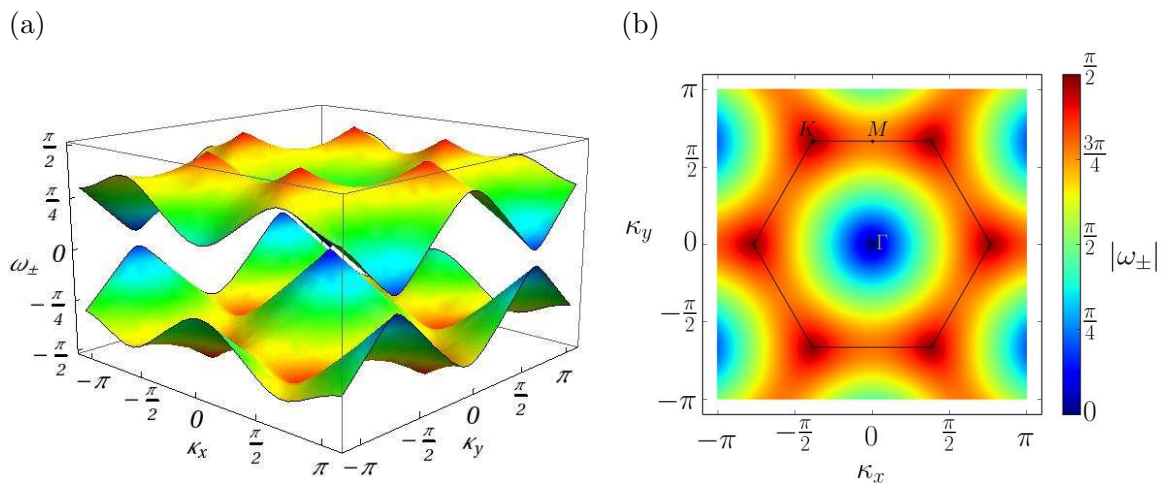


**Figura 6.11:** Bandas de energia para o grafeno. Em (a) bandas superiores corresponde a  $\omega_{+}^{(gra)}$  e as inferiores a  $\omega_{-}^{(gra)}$ ; (b) densidade de energia de  $|\omega_{\pm}^{(gra)}|$ , delimitação da primeira zona de Brillouin (hexágono) e a localização dos pontos de alta simetria do sistema.

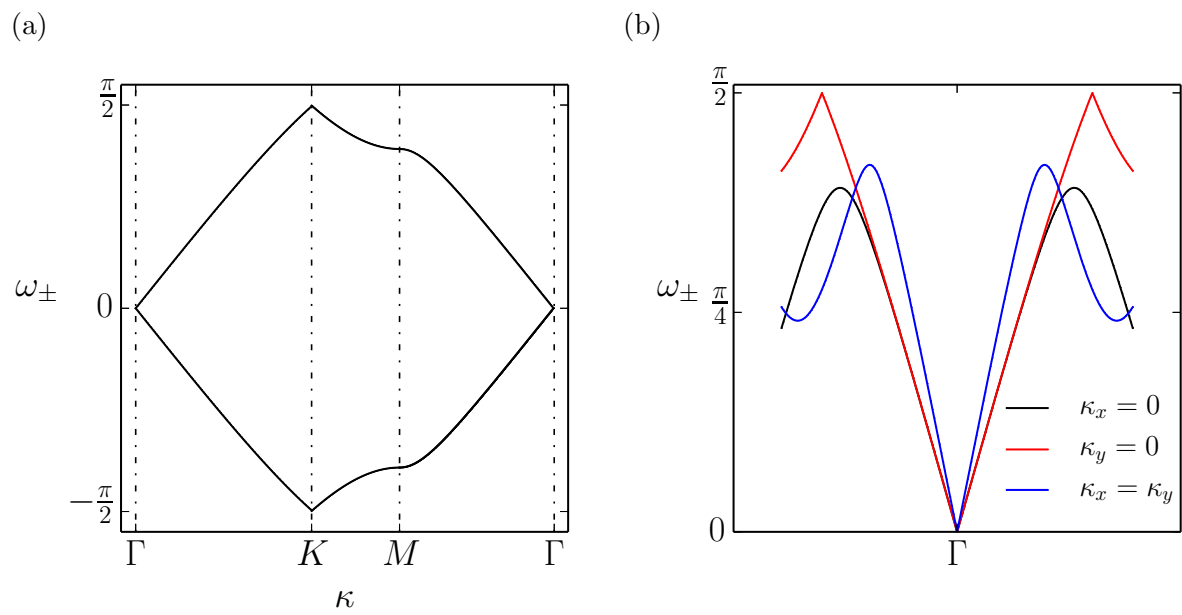




**Figura 6.12:** Em (a) apresentamos comportamento das bandas de energia na direção das retas que ligam os pontos de alta simetria, e em (b) comportamento linear das bandas de energia próximo aos pontos de Dirac, para o grafeno.



**Figura 6.13:** Bandas de energia para uma CQEs caracterizada pela matriz de Grover. Em (a) bandas superiores corresponde a  $\omega_+$  e as inferiores a  $\omega_-$ ; (b) densidade de energia de  $|\omega_{\pm}|$ , delimitação da primeira zona de Brillouin (hexágono) e a localização dos pontos de alta simetria do sistema.



**Figura 6.14:** Em (a) mostramos o comportamento das bandas de energia na direção das retas que ligam os pontos de alta simetria, e em (d) comportamento linear das bandas de energia próximo ao ponto  $\Gamma(0,0)$ , para uma CQEs caracterizada pela matriz de Grover.

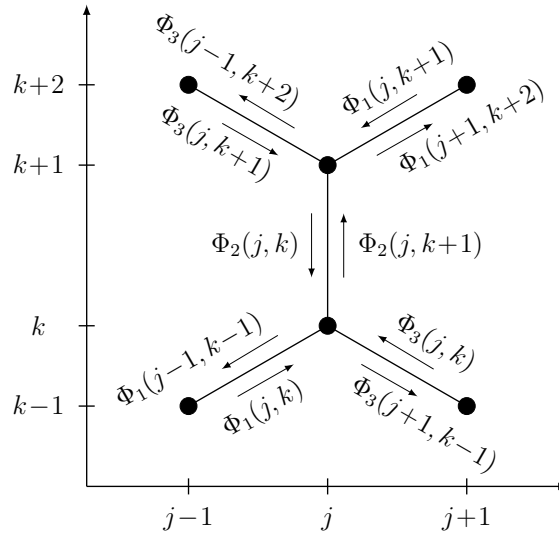
## Caracterizando as CQEs na Rede Hexagonal Através do Grau de Liberdade Direcional

Investigações exploratórias anteriores [92] indicavam que a rede hexagonal permitiria diversas formulações para as CQEs. Este ponto foi levantado mas não explorado em nossa dissertação de mestrado [123]. Assim, neste capítulo retomamos esse ponto, e propomos formulações distintas para as CQs na rede hexagonal. Tal desenvolvimento é possível devido à topologia dessa rede que permite uma grande variedade na forma de associar os valores do número quântico  $\sigma$  com as possíveis direções de propagação da partícula, propiciando uma grande diversidade de padrões para a distribuição de probabilidades do sistema. De maneira geral, as formulações são baseadas em três funções  $\Phi_m(j, k)$ , denominadas de “funções topológicas direcionais” que descrevem as associações dos valores de  $\sigma$  com as direções das arestas em cada sítio da rede, associadas diretamente à topologia da rede.

### 7.1 Definindo as Funções Topológicas Direcionais

Na rede hexagonal, a partícula pode se propagar em três direções distintas. Assim, diferentemente do que foi feito no capítulo (5) onde usamos valores fixos para descrever a partícula se propagando pelas arestas, neste capítulo associamos a cada direção uma função topológica direcional  $\Phi_m(j, k)$ , com  $m = 1, 2, 3$ , de acordo com a fig. (7.1). Portanto, os valores de  $\sigma$  são dados, em cada vértice, pelas funções  $\Phi_m(j, k)$ , ou seja

$$\sigma = \Phi_m(j, k). \quad (7.1)$$



**Figura 7.1:** Associação das funções topológicas direcionais com as direções e o sentido de propagação da partícula, onde estamos assumindo que  $k$  é par.

A ação do operador evolução em um estado de base, eq. (5.9), nessa nova perspectiva, é dada por

$$\hat{U}|\sigma, j, k\rangle = \sum_{m=1}^3 \Gamma_{\Phi_m[f_m(j,k), g_m(j,k)], \sigma}^{(j,k)} |\Phi_m[f_m(j, k), g_m(j, k)], f_m(j, k), g_m(j, k)\rangle, \quad (7.2)$$

onde  $f_m(j, k)$  e  $g_m(j, k)$  são dadas por

$$f_m(j, k) = \begin{cases} j - (-1)^k & \text{se } m = 1 \\ j & \text{se } m = 2 \\ j + (-1)^k & \text{se } m = 3 \end{cases} \quad (7.3)$$

e

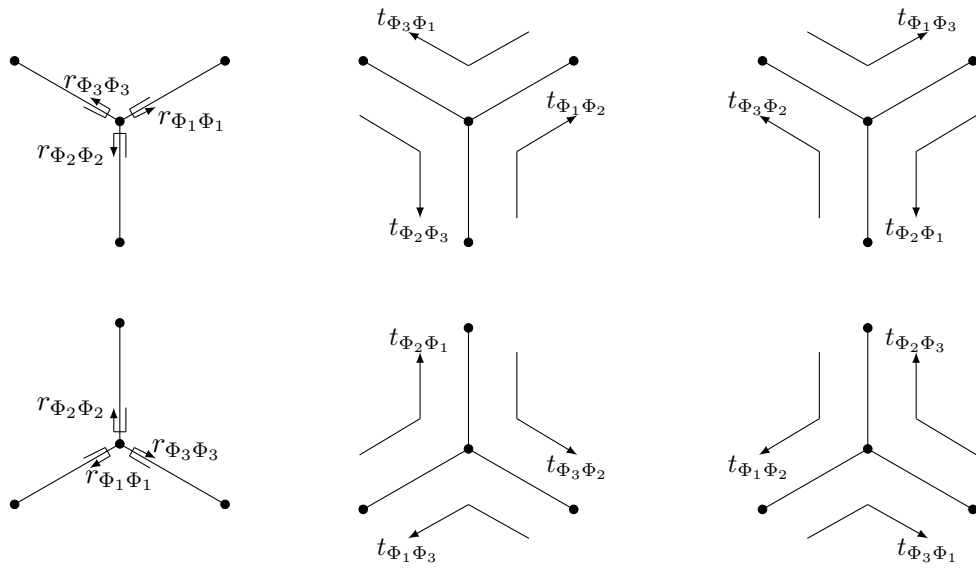
$$g_m(j, k) = \begin{cases} k - (-1)^k & \text{se } m = 1 \\ k + (-1)^k & \text{se } m = 2 \\ k - (-1)^k & \text{se } m = 3 \end{cases} . \quad (7.4)$$

Além disso, observe que  $\Gamma_{\Phi_m[f_m(j,k), g_m(j,k)], \Phi_{m'}(j,k)}^{(j,k)}$  representa um coeficiente de reflexão se  $m = m'$  e de transmissão se  $m \neq m'$ , veja a fig. (7.2). Logo,

$$\Gamma_{\Phi_m[f_m(j,k), g_m(j,k)], \Phi_m(j,k)}^{(j,k)} = r_{\Phi_m[f_m(j,k), g_m(j,k)], \Phi_m(j,k)}^{(j,k)} \quad (7.5)$$

e

$$\Gamma_{\Phi_m[f_m(j,k), g_m(j,k)], \Phi_{m'}(j,k)}^{(j,k)} = t_{\Phi_m[f_m(j,k), g_m(j,k)], \Phi_{m'}(j,k)}^{(j,k)}. \quad (7.6)$$



**Figura 7.2:** Distribuição dos coeficientes de reflexão e transmissão em vértices da rede.

## 7.2 Propriedades das Funções Topológicas Direcionais

Uma vez assumido que  $\sigma = \Phi_m(j, k)$ , as funções topológicas direcionais,  $\Phi_m$ 's, devem exibir as seguintes propriedades: elas devem ser localmente adaptáveis [121], biunívocas e seu conjunto imagem deve possuir três valores distintos.

Entende-se por funções localmente adaptáveis as funções que (i) podem ser construídas em qualquer vértice da rede; (ii) em cada sítio  $(j, k)$  elas dependem apenas da estrutura dos vértices ligado a ele; e (iii) são bem definidas independentemente do número de vértices ligados ao sítio  $(j, k)$ . Elas são biunívocas, pois para cada valor de  $(j, k)$ ,  $\Phi_m(j, k)$  possui um único valor. A terceira propriedade decorre do fato do número quântico  $\sigma$  assumir apenas três valores na rede hexagonal. Logo, para manter a consistência na descrição da evolução do sistema, ou seja, para não haver estados chegando ou de maneira equivalente saindo rotulados pelo mesmo valor de  $\sigma$  em um dado vértice, veja a fig. (7.1), as funções  $\Phi_m$ 's devem obedecer as seguintes relações de consistência:

$$\Phi_1(j, k) \neq \Phi_2(j, k) \neq \Phi_3(j, k) \quad (7.7)$$

e

$$\Phi_1(j - (-1)^k, k - (-1)^k) \neq \Phi_2(j, k + (-1)^k) \neq \Phi_3(j + (-1)^k, k - (-1)^k). \quad (7.8)$$

Da estrutura topológica da rede, sem perda de generalidade, podemos estudar as funções  $\Phi_m$ 's separadamente para valores de  $k$  par e  $k$  ímpar. Assim, considerando  $k$  par, as relações de consistência dadas pela eq. (7.8) são

$$\Phi_1(j-1, k_{par}-1) \neq \Phi_2(j, k_{par}+1) \neq \Phi_3(j+1, k_{par}-1). \quad (7.9)$$

Portanto, para o sítio  $(j, k_{par}+1)$ , as funções  $\Phi_m(j, k_{par}+1)$  associadas a ele devem obedecer a

$$\Phi_1(j, k_{par}+1) \neq \Phi_2(j+1, k_{par}+3) \neq \Phi_3(j+2, k_{par}+1), \quad (7.10)$$

$$\Phi_1(j-1, k_{par}-1) \neq \Phi_2(j, k_{par}+1) \neq \Phi_3(j+1, k_{par}-1) \quad (7.11)$$

e

$$\Phi_1(j-2, k_{par}+1) \neq \Phi_2(j-1, k_{par}+3) \neq \Phi_3(j, k_{par}+1). \quad (7.12)$$

Das eqs. (7.10)-(7.12), observamos que, para  $k_{imp} = k_{par} \pm 1$  as funções  $\Phi_m(j, k_{imp})$  ficam completamente caracterizadas apenas pela coordenada  $j$ . Além disso, uma vez que o conjunto imagem das funções  $\Phi_m(j, k_{imp})$  assume no máximo três valores distintos, admitimos que elas possuem uma periodicidade em três unidades de  $j$ , ou seja,

$$\Phi_m(j, k'_{imp}) = \Phi_m(j+3, k''_{imp}). \quad (7.13)$$

Considerando as eqs. (7.7), (7.10)-(7.12) e (7.13), descobrimos três conjuntos de funções que as satisfazem,

$$\begin{cases} \phi_1^{(i)}(j, k_{imp}) = \lambda, \\ \phi_2^{(i)}(j, k_{imp}) = \kappa, \\ \phi_3^{(i)}(j, k_{imp}) = \mu; \end{cases} \quad (7.14)$$

$$\begin{cases} \phi_1^{(ii)}(j, k_{imp}) = \begin{cases} \lambda, & \text{se } [j]_2 = 0 \\ \mu, & \text{se } [j]_2 = 1 \end{cases}, \\ \phi_2^{(ii)}(j, k_{imp}) = \kappa, \\ \phi_3^{(ii)}(j, k_{imp}) = \begin{cases} \mu, & \text{se } [j]_2 = 0 \\ \lambda, & \text{se } [j]_2 = 1 \end{cases}; \end{cases} \quad (7.15)$$

e

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi_1^{(iii)}(j, k_{imp}) = \begin{cases} \lambda, \text{ se } [j]_3 = 0 \\ \kappa, \text{ se } [j]_3 = 1 \\ \mu, \text{ se } [j]_3 = 2 \end{cases} , \\ \phi_2^{(iii)}(j, k_{imp}) = \begin{cases} \kappa, \text{ se } [j]_3 = 0 \\ \mu, \text{ se } [j]_3 = 1 \\ \lambda, \text{ se } [j]_3 = 2 \end{cases} , \\ \phi_3^{(iii)}(j, k_{imp}) = \begin{cases} \mu, \text{ se } [j]_3 = 0 \\ \lambda, \text{ se } [j]_3 = 1 \\ \kappa, \text{ se } [j]_3 = 2 \end{cases} ; \end{array} \right. \quad (7.16)$$

onde  $[X]_Y$  é definido como sendo o resto da divisão  $X/Y$ . A mesma análise pode ser feita para  $k$  ímpar tal que as funções resultantes possuem as mesmas forma que as eqs. (7.14)-(7.16). Portanto, para  $k_{par} = k_{imp} \pm 1$ ,

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_1^{(i)}(j, k_{par}) = \alpha, \\ \varphi_2^{(i)}(j, k_{par}) = \beta, \\ \varphi_3^{(i)}(j, k_{par}) = \gamma, \end{array} \right. \quad (7.17)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_1^{(ii)}(j, k_{par}) = \begin{cases} \alpha, \text{ se } [j]_2 = 0 \\ \gamma, \text{ se } [j]_2 = 1 \end{cases} , \\ \varphi_2^{(ii)}(j, k_{par}) = \beta, \\ \varphi_3^{(ii)}(j, k_{par}) = \begin{cases} \gamma, \text{ se } [j]_2 = 0 \\ \alpha, \text{ se } [j]_2 = 1 \end{cases} ; \end{array} \right. \quad (7.18)$$

e

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_1^{(iii)}(j, k_{par}) = \begin{cases} \alpha, \text{ se } [j]_3 = 0 \\ \gamma, \text{ se } [j]_3 = 1 \\ \beta, \text{ se } [j]_3 = 2 \end{cases} , \\ \varphi_2^{(iii)}(j, k_{par}) = \begin{cases} \beta, \text{ se } [j]_3 = 0 \\ \alpha, \text{ se } [j]_3 = 1 \\ \gamma, \text{ se } [j]_3 = 2 \end{cases} , \\ \varphi_3^{(iii)}(j, k_{par}) = \begin{cases} \gamma, \text{ se } [j]_3 = 0 \\ \beta, \text{ se } [j]_3 = 1 \\ \alpha, \text{ se } [j]_3 = 2 \end{cases} . \end{array} \right. \quad (7.19)$$

Finalmente, usando o fato de que

$$[k]_2 = \begin{cases} 0, & \text{se } k \text{ é ímpar} \\ 1, & \text{se } k \text{ é par} \end{cases}, \quad (7.20)$$

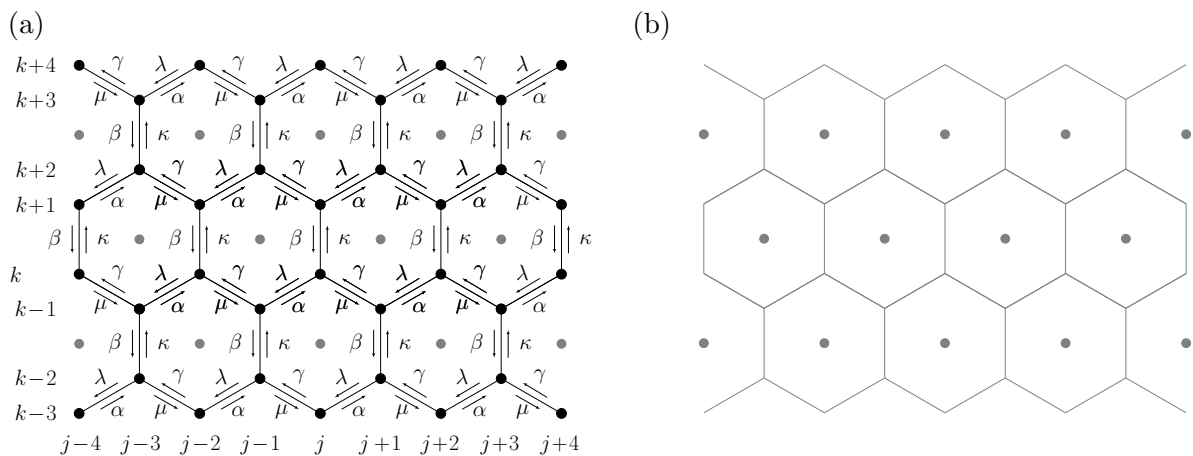
podemos escrever as funções topológicas direcionais ( $\Phi_m(j, k)$ ) em termos das funções  $\varphi_m(j, k_{par})$  e  $\phi_m(j, k_{imp})$ ,

$$\Phi_m(j, k) = \varphi_m(j, k)[k + 1]_2 + \phi_m(j, k)[k]_2. \quad (7.21)$$

### 7.3 Estruturas Topológicas

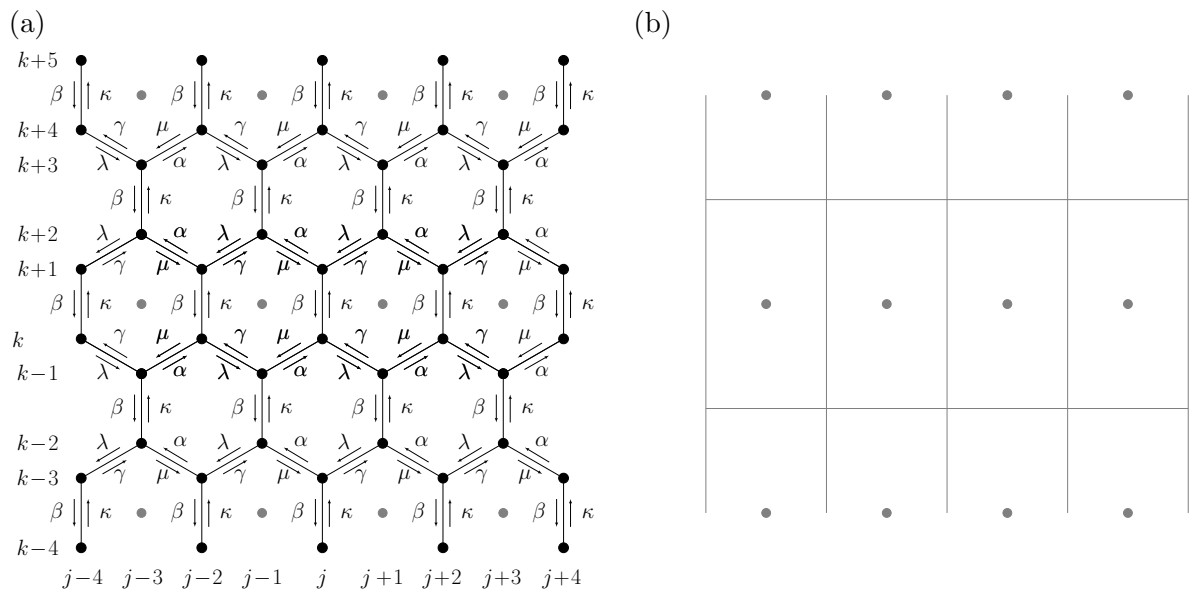
Nesta seção, investigamos as consequências na estrutura topológica da rede considerando que os valores do número quântico  $\sigma$  são dados pelas funções  $\Phi_m(j, k)$ , lembrando que, se a partícula está convergindo para um sítio com  $(j, k_{par})$ , os valores de  $\sigma$  são dados por  $\{\alpha, \beta, \gamma\}$ , se ela está propagando-se para um vértice com  $(j, k_{imp})$ , então os valores de  $\sigma$  são dados por  $\{\lambda, \kappa, \mu\}$ .

Analisando as distribuições dos valores para o número quântico  $\sigma$ , dadas pelos conjuntos de funções (i), eqs. (7.14) e (7.17), e (iii), eqs. (7.16) e (7.19), elas resultam em redes de Bravais triangulares (hexagonais), figs. (7.3) e (7.5), e para o conjunto de funções (ii), eqs. (7.15) e (7.18), ela é uma rede de Bravais retangular, fig. (7.4).

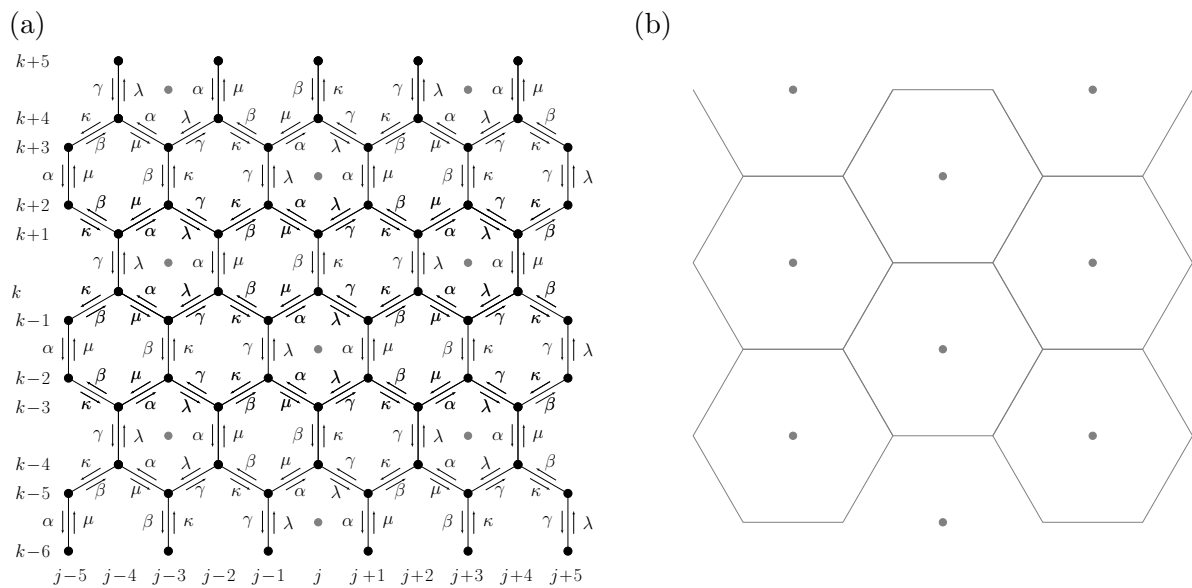


**Figura 7.3:** Em (a) temos a distribuição dos valores de  $\sigma$  dados pelos conjuntos de funções (ii), eqs. (7.14) e (7.17), que nomearemos de rede (ii). Em (b) temos a rede de Bravais retangular, pontos em cinza, com sua respectiva célula unitária (de Wigner-Seitz) associada à tal distribuição. Aqui estamos considerando que  $[k]_2 = [j]_2 = 0$ .



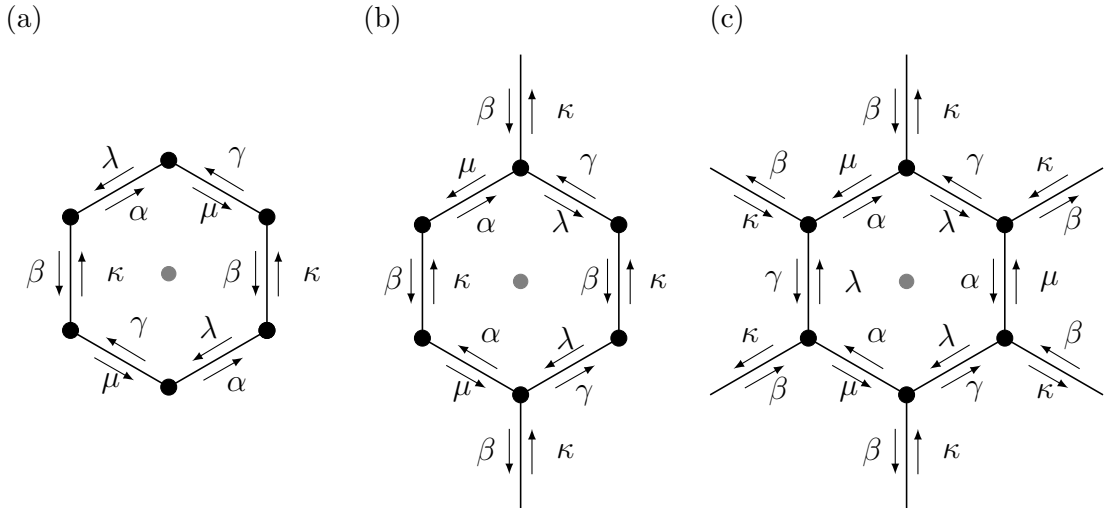


**Figura 7.4:** Em (a) temos a distribuição dos valores de  $\sigma$  dados pelos conjuntos de funções (ii), eqs. (7.15) e (7.18), que nomearemos de rede (ii). Em (b) temos a rede de Bravais retangular, pontos em cinza, com sua respectiva célula unitária (de Wigner-Seitz) associada à tal distribuição. Aqui estamos considerando que  $[k]_2 = [j]_2 = 0$ .



**Figura 7.5:** Em (a) temos a distribuição dos valores de  $\sigma$  dados pelos conjuntos de funções (iii), eqs. (7.16) e (7.19), que nomearemos de rede (iii). Em (b) temos a rede de Bravais triangular (hexagonal), pontos em cinza, com sua respectiva célula unitária (de Wigner-Seitz) associada à tal distribuição. Aqui estamos considerando que  $[k]_2 = [j]_3 = 0$ .

Na fig. (7.6) temos as estruturas bases associadas às redes (i), (ii) e (iii), ver eqs. (7.14)-(7.19). Essas estruturas possuem, respectivamente, dois, quatro e seis vértices não-equivalentes.



**Figura 7.6:** Em (a), (b) e (c) temos, respectivamente, as estruturas bases com a quais preenchemos as células unitárias a fim de construir as redes (i), (ii) e (iii).

Da eq. (7.7), os conjunto de valores  $\Xi_{\varphi_m(j,k_{par})} = \{\alpha, \beta, \gamma\}$  e  $\Xi_{\phi_m(j,k_{imp})} = \{\lambda, \kappa, \mu\}$ , devem satisfazer a

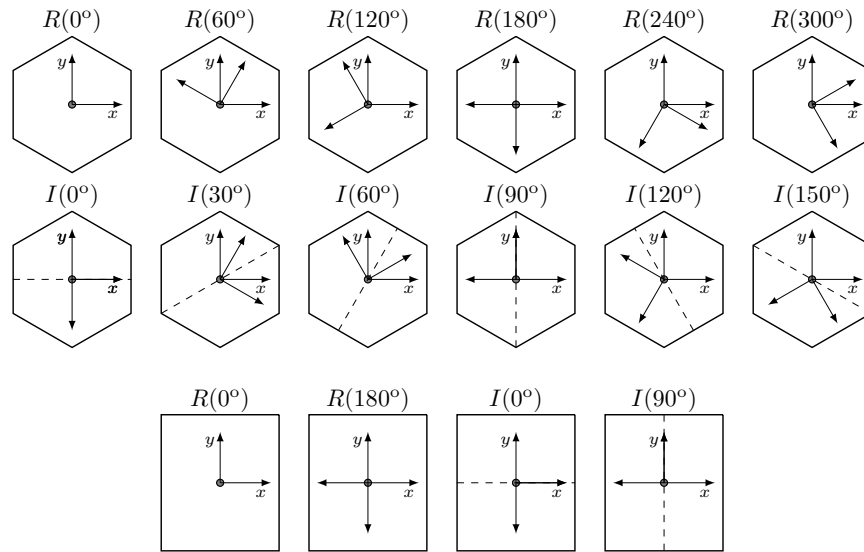
$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \text{ e } \lambda \neq \kappa \neq \mu. \quad (7.22)$$

Uma vez que as funções  $\Phi_m$ 's assumem no máximo três valores, podemos relacionar os elementos dos conjuntos  $\Xi_{\varphi_m(j,k_{par})}$  e  $\Xi_{\phi_m(j,k_{imp})}$  através de uma das seis configurações da tab. (7.1).

Config. A	Config. B	Config. C	Config. D	Config. E	Config. F
$\alpha = \lambda$	$\alpha = \mu$	$\alpha = \kappa$	$\alpha = \lambda$	$\alpha = \mu$	$\alpha = \kappa$
$\beta = \kappa$	$\beta = \lambda$	$\beta = \mu$	$\beta = \mu$	$\beta = \kappa$	$\beta = \lambda$
$\gamma = \mu$	$\gamma = \kappa$	$\gamma = \lambda$	$\gamma = \kappa$	$\gamma = \lambda$	$\gamma = \mu$

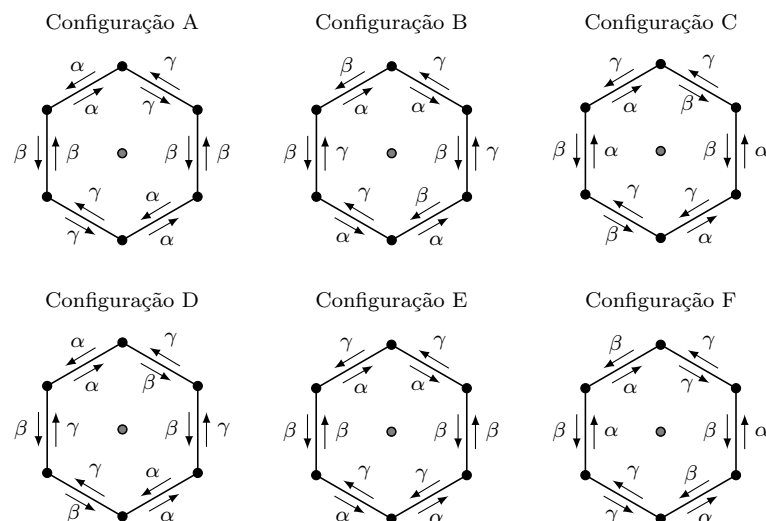
**Tabela 7.1:** As seis possíveis relações para os valores assumidos pelas funções  $\varphi_m(j, k_{par})$  e  $\phi_m(j, k_{imp})$ .

Desconsiderando a estrutura interna gerada pela distribuição dos valores de  $\sigma$  em uma célula unitária, a rede triangular (hexagonal) possui as seguintes simetrias pontuais que a deixam invariante sob rotações em  $0^\circ$ ,  $60^\circ$ ,  $120^\circ$ ,  $180^\circ$ ,  $240^\circ$  e  $300^\circ$ , e inversões (reflexões) em  $0^\circ$ ,  $30^\circ$ ,  $60^\circ$ ,  $90^\circ$ ,  $120^\circ$  e  $150^\circ$ , fig. (7.7), e a rede retangular possui rotações em  $0^\circ$  e  $180^\circ$ , e inversões em  $0^\circ$  e  $90^\circ$ , fig. (7.7). Isso pode ser verificado analisando a célula de Wigner-Seitz da rede de Bravais do sistema, pois todas as simetrias pontuais dela também são simetrias pontuais da rede. Entretanto, ao adicionar uma estrutura interna à células unitárias, algumas dessas simetrias pontuais são perdidas [143].



**Figura 7.7:** Rotações,  $R(x)$ , e inversões,  $I(x)$ , pontuais que as redes Bravais triangular (hexagonal) e retangular exibem.

Nas figs. (7.8), (7.9) e (7.10) temos as distribuições dos valores de  $\sigma$  nas estruturas base das redes (i), (ii) e (iii), considerando as relações da tab. (7.1). Como esperado, verifica-se a quebra de algumas simetrias pontuais dessas redes, compare as figs. (7.8), (7.9) e (7.10) com a fig.(7.7). Na tab. (7.2) temos as simetrias pontuais que cada configuração exhibe quando adicionamos as estruturas base nas células unitárias. Observe que de acordo com a tab. (7.2), a configuração A para as três redes e a configuração e para as redes (ii) e (iii) são as mais simétricas, pois elas exibem todas as simetrias pontuais das redes de Bravais correspondentes.



**Figura 7.8:** Estruturas base para a rede (i) considerando as configurações da tab. (7.1).

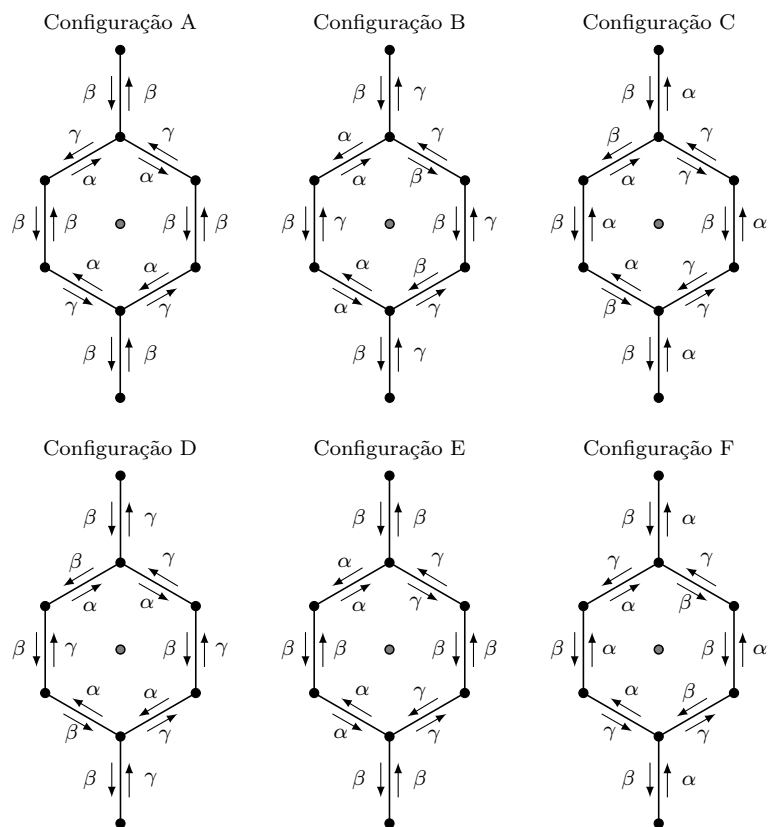


Figura 7.9: Estruturas base para a rede (ii) considerando as configurações da tab. (7.1).

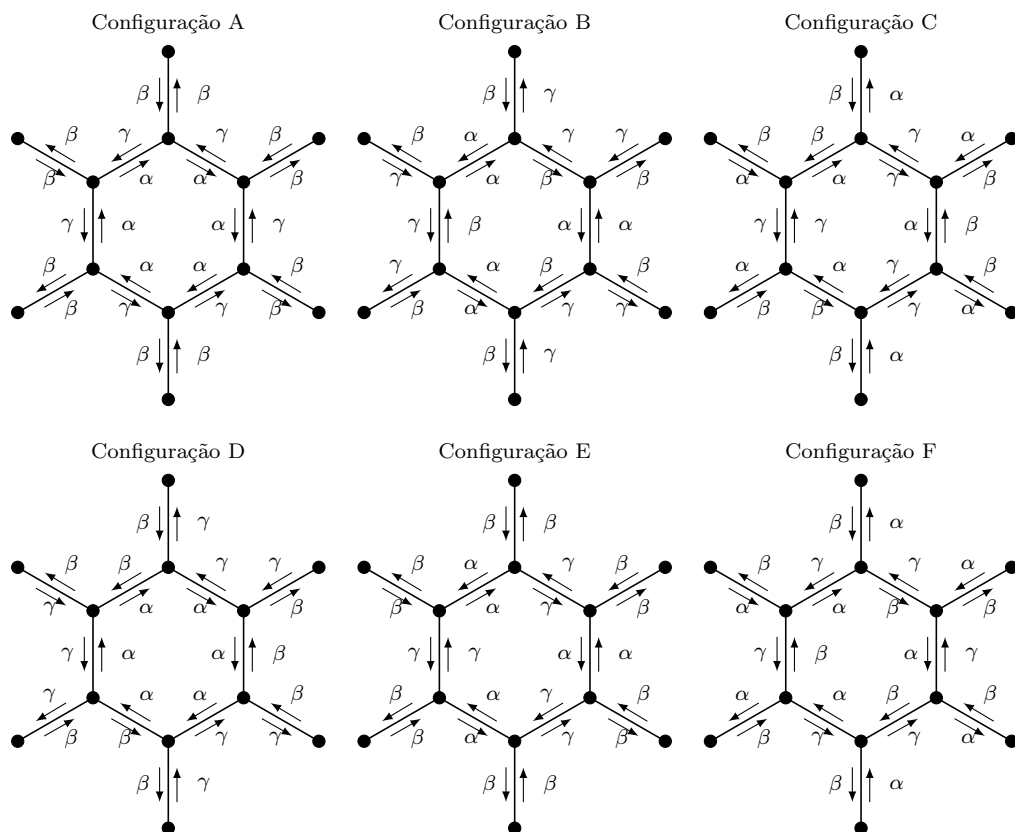
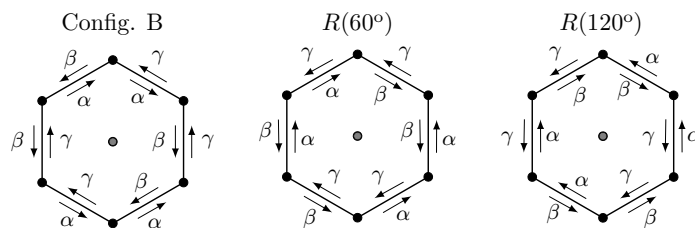


Figura 7.10: Estruturas base para a rede (iii) considerando as configurações da tab. (7.1).

Conf.	Rede (i) - Hexagonal	Rede (ii) - Retangular	Rede (iii) - Hexagonal
A	Todas rotações Todas inversões	Todas rotações Todas inversões	Todas rotações Todas inversões
B	$R(0^\circ), R(120^\circ), R(240^\circ)$ $I(0^\circ), I(60^\circ), I(120^\circ)$	$R(0^\circ)$ $I(0^\circ)$	$R(0^\circ), R(120^\circ), R(240^\circ)$ $I(0^\circ), I(60^\circ), I(120^\circ)$
C	$R(0^\circ), R(120^\circ), R(240^\circ)$ $I(0^\circ), I(60^\circ), I(120^\circ)$	$R(0^\circ)$ $I(0^\circ)$	$R(0^\circ), R(120^\circ), R(240^\circ)$ $I(0^\circ), I(60^\circ), I(120^\circ)$
D	$R(0^\circ), R(180^\circ)$ $I(30^\circ), I(120^\circ)$	$R(0^\circ), R(180^\circ)$	Todas rotações
E	$R(0^\circ), R(180^\circ)$ $I(0^\circ), I(90^\circ)$	Todas rotações Todas inversões	Todas rotações Todas inversões
F	$R(0^\circ), R(180^\circ)$ $I(60^\circ), I(150^\circ)$	$R(0^\circ), R(180^\circ)$	Todas rotações

**Tabela 7.2:** Simetrias pontuais que cada rede exibe quando consideramos as estruturas base nas células unitárias e as configuração da tab. (7.1).

Para exemplificar os resultados da tab. (7.2), considere, por exemplo, a configuração B da rede (i) e rotações dessa estrutura em  $60^\circ$  e  $120^\circ$ , fig. (7.11). Comparando a rotação em  $120^\circ$  com a disposição original vemos que se trocarmos os índices  $\alpha \rightarrow \gamma$ ,  $\beta \rightarrow \alpha$  e  $\gamma \rightarrow \beta$ , elas coincidem. O mesmo não pode ser feito quando comparamos a rotação em  $60^\circ$  com a disposição original. Assim, neste contexto, assumimos que as configurações original e a rotacionada em  $120^\circ$  são equivalentes, ou em outras palavras, a configuração B da rede (i) exibe simetria de rotação em  $120^\circ$ .



**Figura 7.11:** Configuração B e suas rotações em  $60^\circ$  e  $120^\circ$ . Observe que  $R(120^\circ)$  resulta na configuração B se trocarmos os índices  $\alpha \rightarrow \gamma$ ,  $\beta \rightarrow \alpha$  e  $\gamma \rightarrow \beta$ . O mesmo não pode ser feito para  $R(60^\circ)$ .

## 7.4 As Dez Formulações

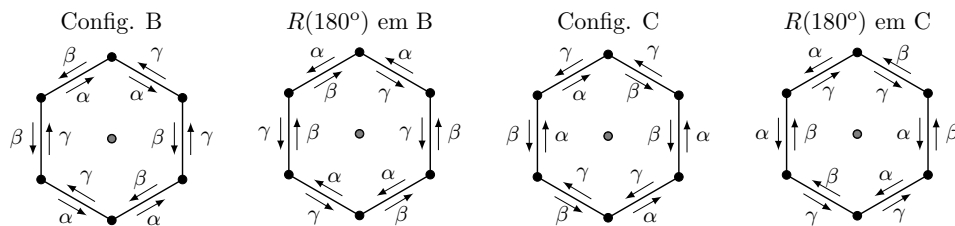
Comparando as seis configurações da tab. (7.1) para cada rede, observamos que existem algumas que são equivalentes entre si através de operações de simetria pontuais

que foram perdidas com a adição da base na célula unitária, veja a tab. (7.3).

	Transformação de Simetria
Rede (i) - Hexagonal	A
	B $\rightarrow$ C: $R(60^\circ), R(180^\circ), R(300^\circ), I(30^\circ), I(90^\circ), I(150^\circ)$
	C $\rightarrow$ B: $R(60^\circ), R(180^\circ), R(300^\circ), I(30^\circ), I(90^\circ), I(150^\circ)$
	D $\rightarrow$ E: $R(60^\circ), R(240^\circ), I(60^\circ), I(150^\circ)$
	D $\rightarrow$ F: $R(120^\circ), R(300^\circ), I(0^\circ), I(90^\circ)$
	E $\rightarrow$ D: $R(120^\circ), R(300^\circ), I(60^\circ), I(150^\circ)$
	E $\rightarrow$ F: $R(60^\circ), R(240^\circ), I(30^\circ), I(120^\circ)$
	F $\rightarrow$ D: $R(60^\circ), R(240^\circ), I(0^\circ), I(90^\circ)$
	F $\rightarrow$ E: $R(120^\circ), R(300^\circ), I(30^\circ), I(120^\circ)$
Rede (ii) - Retangular	A
	B $\rightarrow$ C: $R(180^\circ), I(90^\circ)$
	C $\rightarrow$ B: $R(180^\circ), I(90^\circ)$
	D $\rightarrow$ F: $I(0^\circ), I(90^\circ)$
	E
	F $\rightarrow$ D: $I(0^\circ), I(90^\circ)$
Rede (iii) - Hexagonal	A
	B $\rightarrow$ C: $R(60^\circ), R(180^\circ), R(300^\circ), I(30^\circ), I(90^\circ), I(150^\circ)$
	C $\rightarrow$ B: $R(60^\circ), R(180^\circ), R(300^\circ), I(30^\circ), I(90^\circ), I(150^\circ)$
	D $\rightarrow$ F: $I(0^\circ), I(30^\circ), I(60^\circ), I(90^\circ), I(120^\circ), I(150^\circ)$
	E
	F $\rightarrow$ D: $I(0^\circ), I(30^\circ), I(60^\circ), I(90^\circ), I(120^\circ), I(150^\circ)$

**Tabela 7.3:** Configurações que são equivalentes entre si através de operações de simetria da rede de Bravais do sistema.

Para exemplificar os resultados da tab. (7.3), consideramos as configurações B e C para a rede (i) e suas rotações em  $180^\circ$ , fig. (7.12). Observe que a troca dos índices  $\alpha \rightarrow \gamma, \beta \rightarrow \alpha$  e  $\gamma \rightarrow \beta$ , leva a rotação em  $180^\circ$  de B em C, e a troca de  $\alpha \rightarrow \beta, \beta \rightarrow \gamma$  e  $\gamma \rightarrow \alpha$ , leva a rotação em  $180^\circ$  de C em B.



**Figura 7.12:** Configurações B e C para a rede (i) e suas rotações em  $180^\circ$ . Observe que a troca de  $\alpha \rightarrow \gamma, \beta \rightarrow \alpha$  e  $\gamma \rightarrow \beta$ , leva a rotação em  $180^\circ$  de B em C, e a troca de  $\alpha \rightarrow \beta, \beta \rightarrow \gamma$  e  $\gamma \rightarrow \alpha$ , leva a rotação em  $180^\circ$  de C em B.

Da análise das simetrias pontuais da rede (iii), constatamos que não existe nenhuma operação que leve a configuração A na B ou C da tab. (7.1), veja a fig. (7.10) e a tab. (7.3). Entretanto, as distribuições dos valores de  $\sigma$  para essas três configurações são equivalentes mediante a uma nova escolha da origem do sistema de coordenadas. Assim,

para uma rede infinita ou com condições de contorno periódica, escolhendo  $j' = j + 1$  e  $k' = k + 2$  na configuração B e  $j'' = j - 1$  e  $k'' = k + 2$  na configuração C, elas são equivalentes à configuração A.

Finalmente, considerando as configurações que são equivalentes por alguma simetria pontual da rede de Bravais correspondente, e a discussão do parágrafo anterior sobre as configurações A, B e C da rede (iii), concluímos que existem dez formas distintas de distribuir os valores do número quântico  $\sigma$  na rede que não são equivalentes entre si. Portanto, cada um desses conjuntos de distribuições dos valores de  $\sigma$  correspondem a uma formulação possível para as caminhadas quânticas na rede hexagonal, veja tab. (7.4).

Formulação	Rede	Configurações Equivalentes
1	(i)	<u>A</u>
2	(i)	<u>B</u> e C
3	(i)	D, <u>E</u> e F
4	(ii)	<u>A</u>
5	(ii)	<u>B</u> e C
6	(ii)	<u>D</u> e F
7	(ii)	<u>E</u>
8	(iii)	<u>A</u> , B e C
9	(iii)	<u>D</u> e F
10	(iii)	<u>E</u>

**Tabela 7.4:** As dez formulações para as caminhadas quânticas na rede hexagonal. Para futuras discussões consideramos apenas as configurações sublinhadas em cada formulação.

Nas fig. (7.13)-(7.17) temos a distribuição dos valores do número quântico  $\sigma$ , dados pelas funções  $\Phi_m(j, k)$ , eq. (7.21), em segmentos de rede para as dez formulações. Assim, fica fácil verificar que a formulação desenvolvida no capítulo (5) corresponde à formulação 1 com  $\alpha = +1$ ,  $\beta = 0$  e  $\gamma = -1$  e o desenvolvimento na referência [92] corresponde à formulação 9 com  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 1$  e  $\gamma = 2$ , onde  $\{\alpha, \beta, \gamma\}$  são os valores atribuídos às funções  $\Phi_m(j, k)$ . Assim, uma vez que em cada arestas associamos dois valores de  $\sigma$ , pois existem duas possíveis direções de propagação, constatamos que: nas formulações 1, 7 e 10, esses dois valores de  $\sigma$  são iguais; nas formulações 2, 6 e 9 esses dois valores são diferentes; e nas formulações 3, 4, 5 e 8 em uma das arestas adjacente a um dado vértices os dois valores de  $\sigma$  são iguais, e conseqüentemente nas outras duas eles são diferentes.

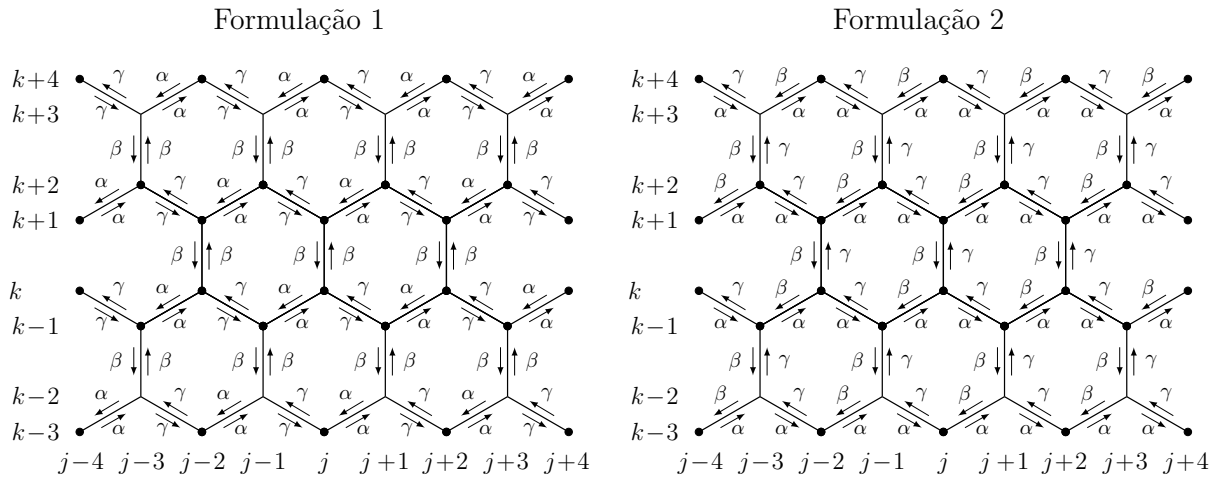


Figura 7.13: Distribuição dos valores em segmentos de rede para as formulações 1 e 2.

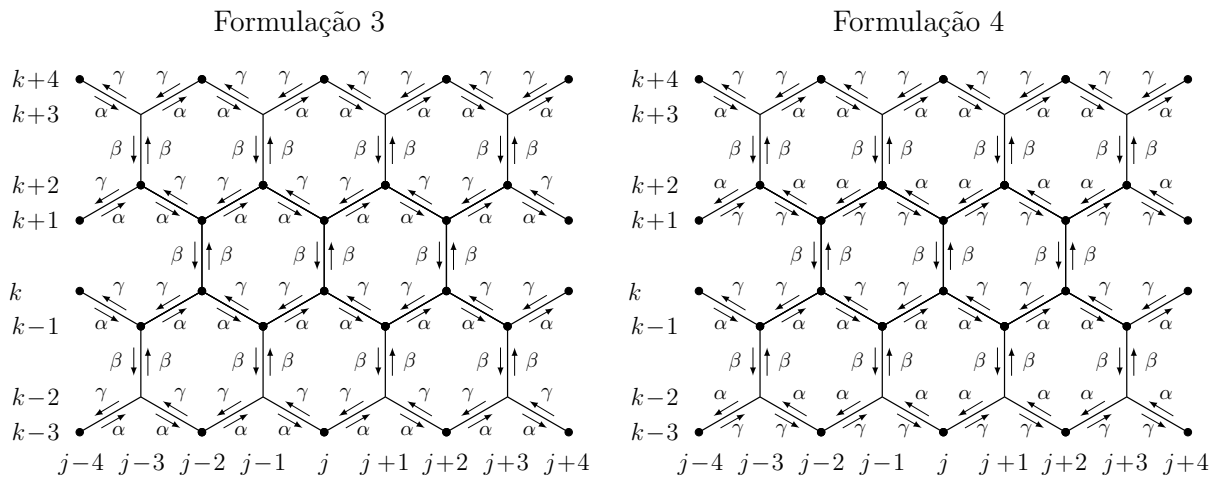


Figura 7.14: Distribuição dos valores em segmentos de rede para as formulações 3 e 4.

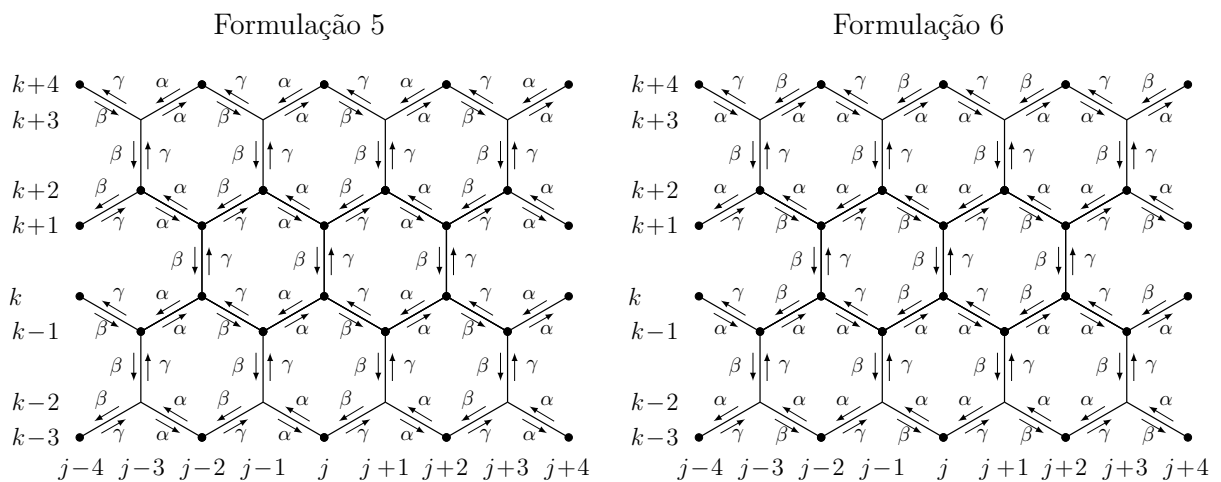


Figura 7.15: Distribuição dos valores em segmentos de rede para as formulações 5 e 6.



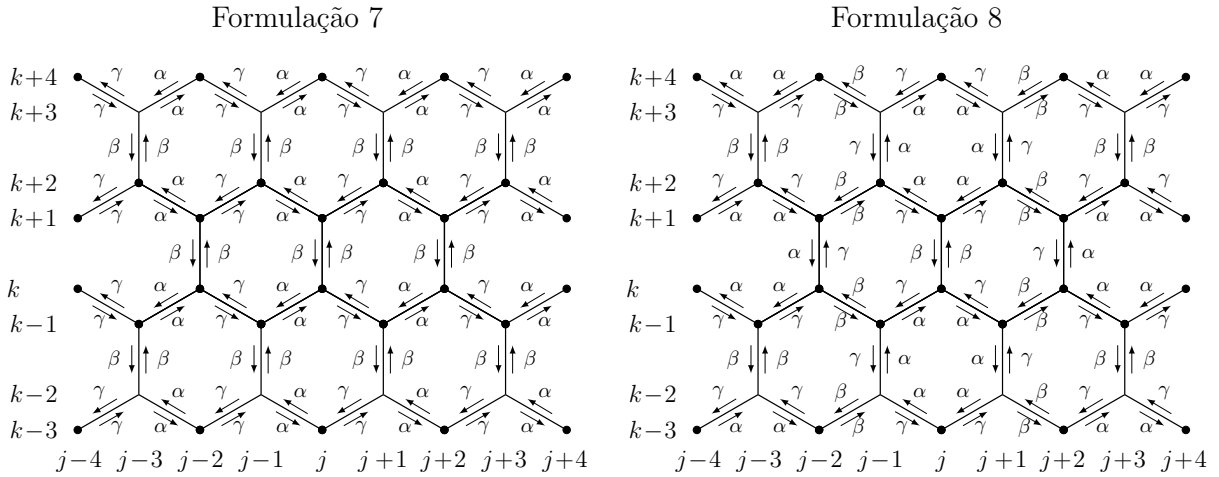


Figura 7.16: Distribuição dos valores em segmentos de rede para as formulações 7 e 8.

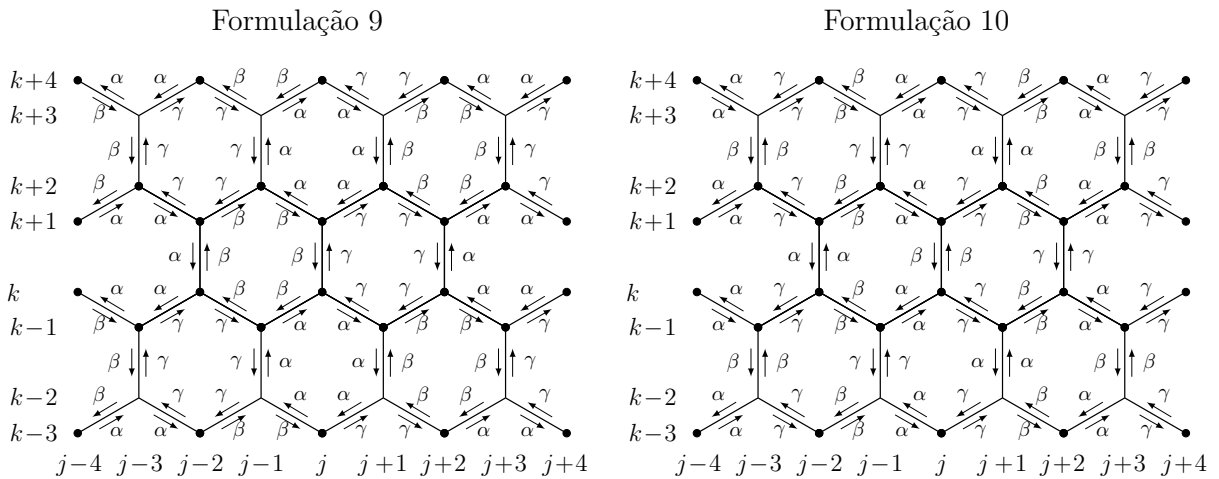


Figura 7.17: Distribuição dos valores em segmentos de rede para as formulações 9 e 10.

Após analisar as dez formulações das caminhadas quânticas na rede hexagonal, observa-se que uma evolução temporal particular onde o estado do sistema em cada passo de tempo possui o mesmo valor para o número quântico  $\sigma$ , ou seja, uma sequência dinâmica específica levando à

$$\dots |\sigma, j_1, k_1\rangle \xrightarrow{\hat{U}} |\sigma, j_2, k_2\rangle \xrightarrow{\hat{U}} |\sigma, j_3, k_3\rangle \dots, \quad (7.23)$$

resulta em caminhadas com propriedades particulares em cada formulação. Tal evolução pode ser encarada como uma “trajetória fundamental” associada a cada formulação. Além disso, em cada formulação temos três possíveis trajetórias fundamentais, que são governadas pelas funções  $\Phi_m$ 's. Na tab. (7.5), temos um resumo dessas trajetórias para cada formulação. A probabilidade da partícula, ao incidir em um dado vértice, seguir a

trajetória fundamental associada a  $\Phi_m(j, k) = \sigma$  é dada por

$$p_\sigma^{(j,k)} = |\Gamma_{\sigma\sigma}^{(j,k)}|^2, \quad (7.24)$$

que corresponde ao módulo quadrado dos elementos da diagonal principal da matriz de espalhamento, eq. (7.27). De maneira análoga, definimos a probabilidade da partícula não seguir uma trajetória fundamental por

$$q_\sigma^{(j,k)} = \sum_{\sigma' \neq \sigma} |\Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j,k)}|^2. \quad (7.25)$$

Assim, é fácil ver que

$$p_\sigma^{(j,k)} + q_\sigma^{(j,k)} = 1. \quad (7.26)$$

Formulação	$\Phi_m(j, k) = \sigma = \alpha$	$\Phi_m(j, k) = \sigma = \beta$	$\Phi_m(j, k) = \sigma = \gamma$
1	confinamento	confinamento	confinamento
2	zigue-zague	zigue-zague	zigue-zague
3	zigue-zague	confinamento	zigue-zague
4	zigue-zague	confinamento	zigue-zague
5	confinamento	<i>armchair</i>	armchair
6	zigue-zague	<i>armchair</i>	<i>armchair</i>
7	confinamento	confinamento	confinamento
8	<i>loop</i>	confinamento	<i>loop</i>
9	<i>loop</i>	<i>loop</i>	<i>loop</i>
10	confinamento	confinamento	confinamento

**Tabela 7.5:** Trajetórias fundamentais dada pela sequência de passos dada na eq. (7.23) para as formulações da tab. (7.4), veja as figs. (7.13)-(7.17). Tais trajetos são controlados pelos elementos da diagonal principal da matriz de espalhamento, eq. (7.27) e o estado inicial do sistema. Aqui é identificado o tipo de comportamento resultante de uma dada trajetória fundamental.

Finalmente, nestas novas formulações os elementos da diagonal principal não representam necessariamente coeficientes de reflexão, como no desenvolvimento realizado no capítulo 5. Assim, considerando a matriz de espalhamento dada por

$$\Gamma^{(j,k)} = \begin{pmatrix} \Gamma_{\alpha\alpha}^{(j,k)} & \Gamma_{\alpha\beta}^{(j,k)} & \Gamma_{\alpha\gamma}^{(j,k)} \\ \Gamma_{\beta\alpha}^{(j,k)} & \Gamma_{\beta\beta}^{(j,k)} & \Gamma_{\beta\gamma}^{(j,k)} \\ \Gamma_{\gamma\alpha}^{(j,k)} & \Gamma_{\gamma\beta}^{(j,k)} & \Gamma_{\gamma\gamma}^{(j,k)} \end{pmatrix}. \quad (7.27)$$

e analisando as figs. (7.13)-(7.17), pode-se constatar facilmente que os elementos da

diagonal principal são dados por:

- formulações 1, 7 e 10

$$\Gamma_{\alpha\alpha}^{(j,k)} = r_{\alpha\alpha}^{(j,k)}, \quad \Gamma_{\beta\beta}^{(j,k)} = r_{\beta\beta}^{(j,k)}, \quad \Gamma_{\gamma\gamma}^{(j,k)} = r_{\gamma\gamma}^{(j,k)}; \quad (7.28)$$

- formulações 2, 6 e 9

$$\Gamma_{\alpha\alpha}^{(j,k)} = t_{\alpha\alpha}^{(j,k)}, \quad \Gamma_{\beta\beta}^{(j,k)} = t_{\beta\beta}^{(j,k)}, \quad \Gamma_{\gamma\gamma}^{(j,k)} = t_{\gamma\gamma}^{(j,k)}; \quad (7.29)$$

- formulações 3, 4 e 8

$$\Gamma_{\alpha\alpha}^{(j,k)} = t_{\alpha\alpha}^{(j,k)}, \quad \Gamma_{\beta\beta}^{(j,k)} = r_{\beta\beta}^{(j,k)}, \quad \Gamma_{\gamma\gamma}^{(j,k)} = t_{\gamma\gamma}^{(j,k)}; \quad (7.30)$$

- formulação 5

$$\Gamma_{\alpha\alpha}^{(j,k)} = r_{\alpha\alpha}^{(j,k)}, \quad \Gamma_{\beta\beta}^{(j,k)} = t_{\beta\beta}^{(j,k)}, \quad \Gamma_{\gamma\gamma}^{(j,k)} = t_{\gamma\gamma}^{(j,k)}; \quad (7.31)$$

onde  $r_{\sigma\sigma}^{(j,k)}$  e  $t_{\sigma\sigma}^{(j,k)}$  são, respectivamente coeficientes de reflexão e de transmissão.

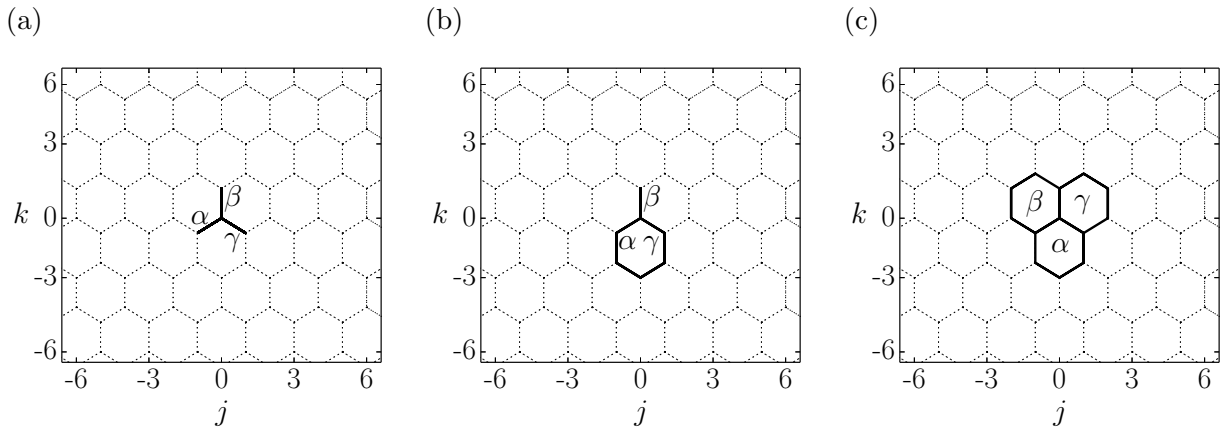
## 7.5 Resultados

Para exemplificar e caracterizar as formulações das CQEs desenvolvidas na seção anterior, admitimos que o estado inicial do sistema é dado por

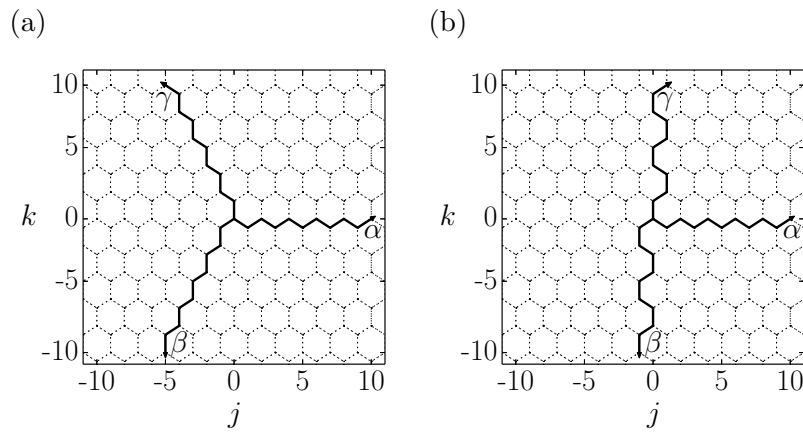
$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|\alpha, 0, 0\rangle + |\beta, 0, 0\rangle + |\gamma, 0, 0\rangle). \quad (7.32)$$

Observe que este estado inicial não privilegia nenhum sentido de propagação em particular, pois ele é simétrico e independe da formulação adotada.

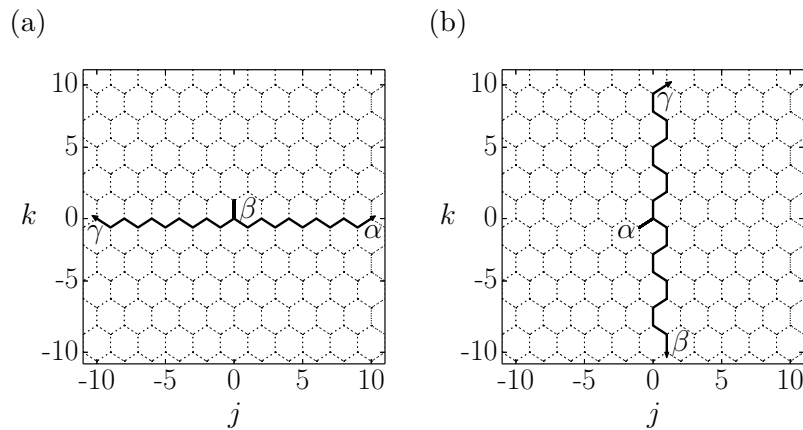
Cada formulação possui trajetórias fundamentais que são controladas pelos elementos da diagonal principal da matriz de espalhamento. Para o estado inicial da. (7.32), as trajetórias fundamentais são dadas nas figs. (7.18)-(7.20). Podemos classificá-las em três categorias: confinantes, livres e parcialmente confinantes. No primeiro caso, a partícula tende a ser confinada em um conjunto de arestas e/ou anéis da rede, como pode ser visto na fig. (7.18). Nas trajetórias livres, a partícula se difunde pela rede por um caminho específico, trajetórias zigue-zague ou *armchair*, veja a fig. (7.19). As trajetórias parcialmente confinantes são um misto dos dois casos anteriores, onde uma das três trajetórias confinam a partícula e as outras duas permitem a sua difusão pela rede, fig. (7.20).



**Figura 7.18:** Trajetórias fundamentais, considerando o estado inicial dado pela eq. (7.32). Em (a) para as formulações 1, 7 e 10, onde  $\Gamma_{\sigma\sigma} = r_{\sigma\sigma}$ ; em (b) para a formulação 8, onde  $\Gamma_{\alpha\alpha} = t_{\alpha\alpha}$ ,  $\Gamma_{\beta\beta} = r_{\beta\beta}$  e  $\Gamma_{\gamma\gamma} = t_{\gamma\gamma}$ ; e em (c) para a formulação 9, onde  $\Gamma_{\sigma\sigma} = t_{\sigma\sigma}$ .



**Figura 7.19:** Trajetórias fundamentais, considerando o estado inicial dado pela eq. (7.32). Em (a) para a formulação 2, onde  $\Gamma_{\sigma\sigma} = t_{\sigma\sigma}$ ; e em (b) para a formulação 6, onde  $\Gamma_{\sigma\sigma} = t_{\sigma\sigma}$ .



**Figura 7.20:** Trajetórias fundamentais, considerando o estado inicial dado pela eq. (7.32). Em (a) para as formulações 3 e 4, onde  $\Gamma_{\alpha\alpha} = t_{\alpha\alpha}$ ,  $\Gamma_{\beta\beta} = r_{\beta\beta}$  e  $\Gamma_{\gamma\gamma} = t_{\gamma\gamma}$ ; e em (b) para a formulação 5, onde  $\Gamma_{\alpha\alpha} = r_{\alpha\alpha}$ ,  $\Gamma_{\beta\beta} = t_{\beta\beta}$  e  $\Gamma_{\gamma\gamma} = t_{\gamma\gamma}$ .

Além do estado inicial dado pela eq. (7.32), consideramos as seguintes matrizes de espalhamento, independentes das coordenadas  $(j, k)$  de cada vértice, dadas por:

- matrizes da família AB, eq. (5.23):

– matriz “trajetória” (TRA)

$$\Gamma_{TRA} = \frac{1}{3\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -4e^{i \arccos(-31/32)/2} & 1 & 1 \\ 1 & -4e^{i \arccos(-31/32)/2} & 1 \\ 1 & 1 & -4e^{i \arccos(-31/32)/2} \end{pmatrix}; \quad (7.33)$$

– matriz de Grover (GRO)

$$\Gamma_{GRO} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \end{pmatrix}; \quad (7.34)$$

- matrizes imparciais:

– a matriz imparcial da família AB (IMP)

$$\Gamma_{IMP} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -e^{i\pi/3} & 1 & 1 \\ 1 & -e^{i\pi/3} & 1 \\ 1 & 1 & -e^{i\pi/3} \end{pmatrix}; \quad (7.35)$$

– a matriz da transformada discreta de Fourier (DFT)

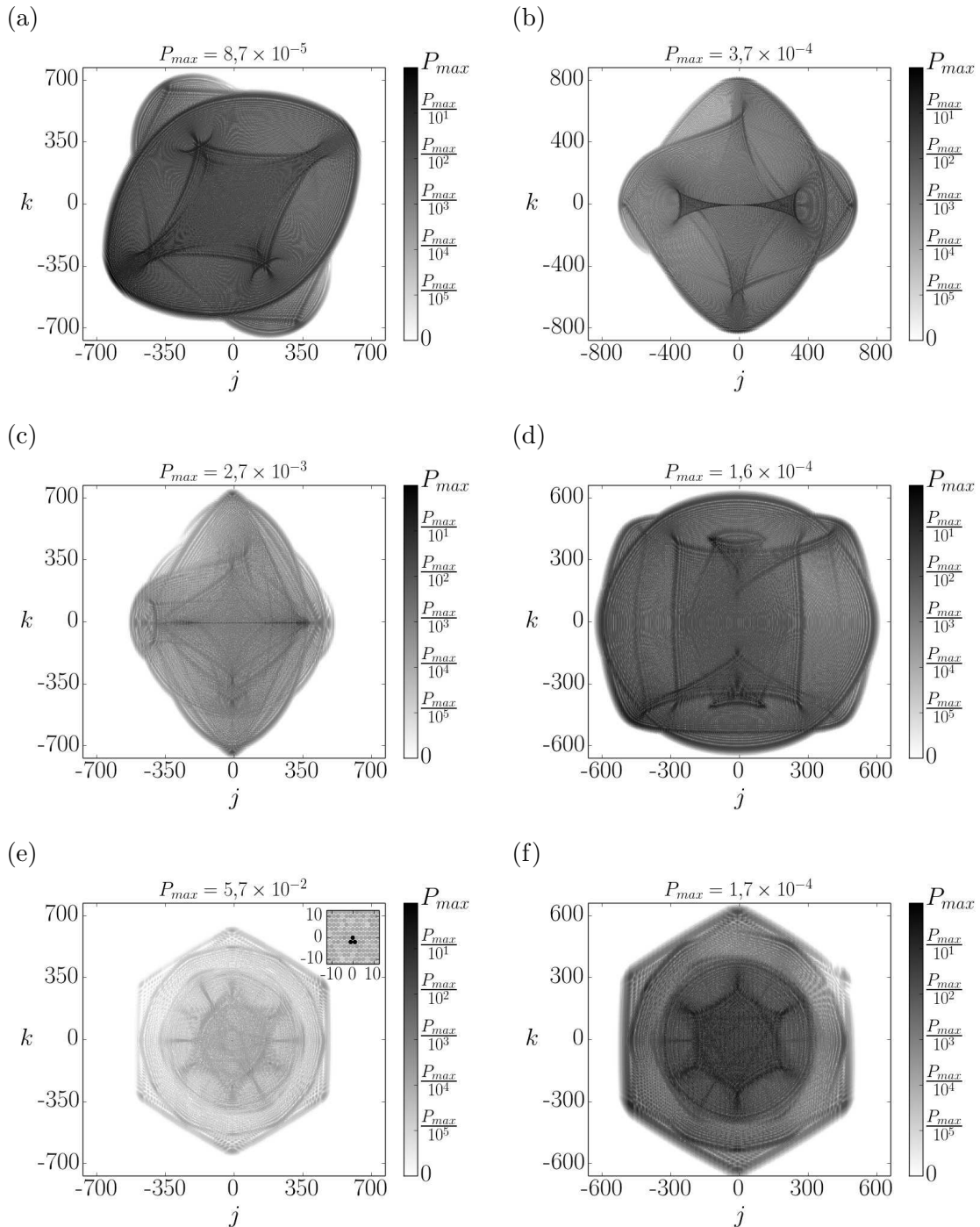
$$\Gamma_{DFT} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & e^{-2i\pi/3} & e^{2i\pi/3} \\ 1 & e^{2i\pi/3} & e^{-2i\pi/3} \end{pmatrix}. \quad (7.36)$$

### 7.5.1 Matrizes Imparciais

Como discutido na seção (5.6.2), os processos de interferência construtivos ou destrutivos, que a função de onda sofre durante sua evolução temporal, são dependentes das probabilidades da partícula ser espalhada em uma dada direção e das diferenças de fase que a matriz de espalhamento impõe sobre os estados de base nos processos de espalhamento. Assim, utilizamos as matrizes imparciais, eqs. (7.35) e (7.36), porque elas fornecem iguais probabilidades da partícula ser espalhada em qualquer direção, uma vez

que  $|\Gamma_{\sigma\sigma'}|^2 = 1/3$ . Portanto, nesses casos os processos de interferência que a função de onda sofre depende apenas das diferenças de fases impostas pela matriz de espalhamento nos estados de base.

Na fig. (7.21) apresentamos as distribuições de probabilidades após 1000 passos de tempo para CQEs nas 10 formulações, cujo operador evolução é caracterizado pela matriz DFT, eq. (7.36).



**Figura 7.21:** Distribuições de probabilidades  $P_v(j, k, 1000)$  para as CQEs para as formulações (a) 1, (b) 2 e 3, (c) 4 e 6, (d) 5 e 7, (e) 8 e 9 e (f) 10. utilizando a matriz DFT.

A não uniformidade das distribuições de probabilidade, para as CQEs utilizando a matriz DFT é resultado das diferenças de fase que ela introduz dependendo do valor do número quântico  $\sigma$ . De maneira geral, considerando o estado inicial da eq. (7.32), as superposições construtivas associadas a  $\alpha$  são mais recorrentes, por exemplo, a ação do operador evolução sobre o estado  $|\Psi_0\rangle$ , dado pela eq. (7.32), resulta em

$$\hat{U}_{DFT}|\Psi_0\rangle = |\alpha, j_\alpha, k_\alpha\rangle, \quad (7.37)$$

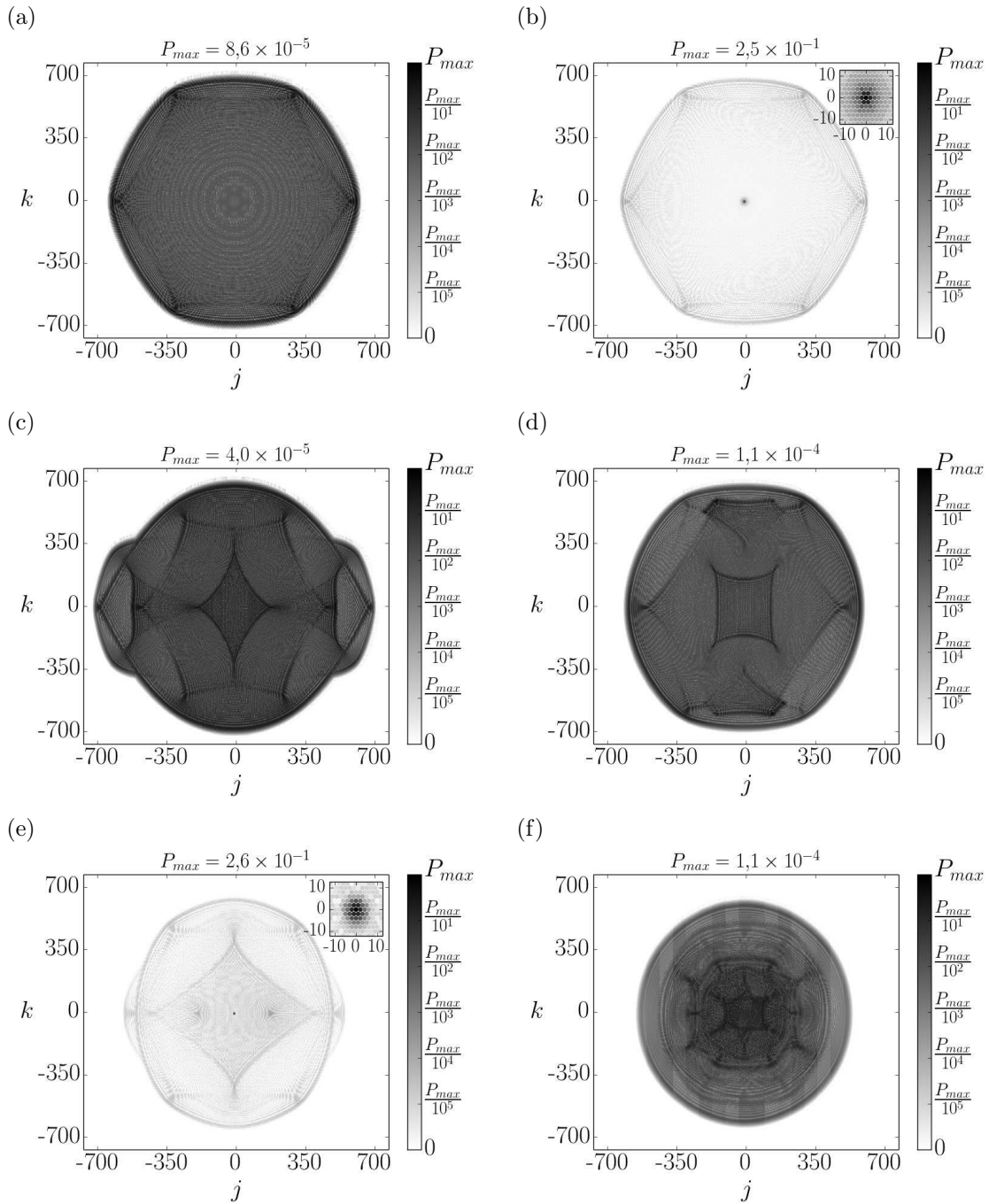
onde  $(j_\alpha, k_\alpha)$  é o vértice adjacente ao vértice  $(0, 0)$  na direção  $\alpha$ . Assim, uma vez que, a matriz DFT fornece igual probabilidade da partícula sofrer espalhamento em uma dada direção, a forma da distribuição de probabilidades espacial é controlada pela maneira com que  $\alpha$  está distribuído pela rede. Compare os gráficos da figs. (7.21) com as figs. (7.13)-(7.17). Em geral, devido à igualdade de probabilidade da partícula ser espalhada nas três direções possíveis,  $P_v(j, k, 100)$  não deveria exibir altas concentrações. Isto é observado para todas as formulações, com exceção da 8 e 9, fig. (7.21e). Nestes casos, a trajetória associada a  $\alpha$  são *loops* nos anéis da rede, figs. (7.16) e (7.17), o que resulta em um confinamento substancial da distribuição de probabilidades em torno da origem.

Na fig. (7.22), apresentamos as distribuições de probabilidades após 100 passos de tempo para CQEs nas 10 formulações, cujo operador evolução é caracterizado pela matriz IMP, eq. (7.35).

A matriz IMP impõe uma fase igual a  $\theta_{\sigma\sigma} = \pi/3$  nos processos de espalhamento associados às trajetórias fundamentais, uma vez que elas são governadas pelos elementos da diagonal principal. Assim, uma vez que para as formulações 1, 7 e 10 os elementos da diagonal principal representam os três processos de reflexão, veja a eq. (7.28), obtivemos uma distribuição simétrica, fig. (7.22a).

Para as formulações 2 e 9 as trajetórias fundamentais são distintas, enquanto que na primeira elas se difundem pela rede, na segunda elas são *loops*, veja as figs (7.19a) e (7.18c). Entretanto, apesar dessa diferença entre as trajetórias fundamentais, as CQEs nesses dois casos apresentam as mesmas distribuições de probabilidades (na seção (7.5.2) discutimos porque isso ocorre). Além disso, as trajetórias fundamentais estão simetricamente distribuídas em torno do sítio  $(0, 0)$ . Logo, a combinação desses fator com a simetria da matriz IMP gera uma distribuição de probabilidades simétrica, fig. (7.22b).

As duas distribuições de probabilidades (para as formulações 1, 7 e 10 e para as formulações 2 e 9) exibem as doze simetrias pontuais de rotação e inversão da rede de Bravais de uma rede triangular, veja a fig. (5.18). Entretanto, devido aos diferentes processos de



**Figura 7.22:** Distribuições de probabilidades  $P_v(j, k, 100)$  para as CQEs nas formulações (a) 1, 7 e 10, (b) 2 e 9, (c) 3 e 4, (d) 5, (e) 6 e (f) 8, utilizando a matriz IMP, eq. (7.35), onde o estado inicial é dado pela eq. (7.32).

interferência que ocorrem em cada formulação, associados aos valores do número quântico  $\sigma$ , na primeira situação os picos máximos na distribuição de probabilidades tendem a se afastar do vértice  $(0, 0)$  e no segundo se concentram em torno da origem, compare as figs. (7.22a). e (7.22b).

Finalmente, para as demais formulações 3, 4, 5, 6 e 8, as distribuições de probabilidades não exibem as doze simetrias pontuais da rede de Bravais triangular. Isso ocorre



porque nesses casos as trajetórias fundamentais não são simétricas como nas situações descritas anteriormente, veja as figs. (7.22c), (7.22d), (7.22e) e (7.22f).

## 7.5.2 Matrizes da Família AB

As matrizes da família AB foram escolhidas para ilustrar situações completamente antagônicas no que diz respeito às probabilidades da partícula seguir ou não uma trajetória fundamental. Na tab. (7.6), apresentamos os valores dos módulos quadrados dos coeficientes das matrizes e das probabilidades da partícula seguir ou não uma trajetória fundamentais, eqs. (7.24) e (7.25), para as matrizes TRA, eq. (7.33), e GRO, eq. (7.34).

Matriz	$ \Gamma_{\sigma\sigma} ^2$	$ \Gamma_{\sigma\sigma'} ^2$	$p_\sigma$	$q_\sigma$	Característica
TRA, eq. (7.33)	8/9	1/18	8/9	1/9	A partícula deve seguir as trajetórias associadas aos coeficientes da diagonal principal.
GRO, eq. (7.34)	1/9	4/9	1/9	8/9	A partícula deve escapar das trajetórias associadas aos coeficientes da diagonal principal.

**Tabela 7.6:** Relação dos módulos quadrados dos elementos das matrizes de espalhamento,  $|\Gamma_{\sigma\sigma}|^2$  e  $|\Gamma_{\sigma\sigma'}|^2$ , e das probabilidades da partícula seguir ou não as trajetórias fundamentais,  $p_\sigma$  e  $q_\sigma$ , eqs. (7.24) e (7.25).

A seguir apresentamos as distribuições de probabilidades  $P_v(j, k, 100)$  após 100 passos de tempo, para CQEs nas dez formulações desenvolvidas neste capítulo, utilizando as matrizes da família AB dadas nas eqs. (7.33) e (7.34), e o estado inicial dado pela eq. (7.32).

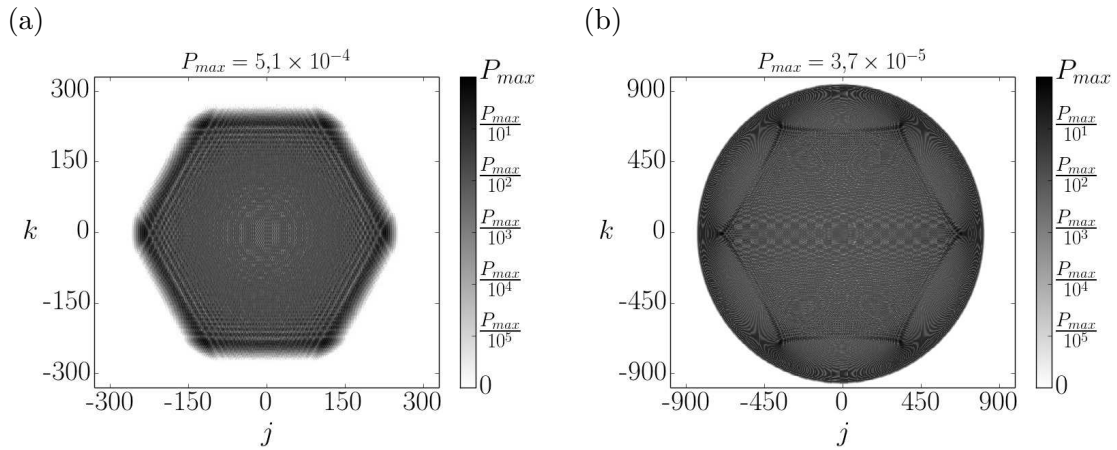
A primeira característica que observamos, decorre da simetria das matrizes da família AB, veja eq. (5.23). Tal propriedade combinada com as estruturas topológicas de cada formulação, as quais são apresentadas nas figs. (7.13)-(7.17), resultam em CQEs para diferentes formulações fornecendo as mesmas distribuições de probabilidades espaciais. Isso ocorre para as formulações 1, 7 e 10, e nas formulações 3 e 4. Nesses casos, verificamos que

$$P_v^{(r)}(j, k, t) = P_v^{(s)}(j, k, t), \quad (7.38)$$

onde os rótulos  $(r)$  e  $(s)$  estão associados a duas formulações distintas. Esse fenômeno também ocorre para as caminhadas com a matriz DFT, eq. (7.36), para as formulações 2 e 3; 4 e 6; 5 e 7; e 8 e 9; figs. (7.21), e a matriz IMP, eq. (7.35), as formulações 1, 7 e 10; 2 e 9; e 3 e 4; fig. (7.22).

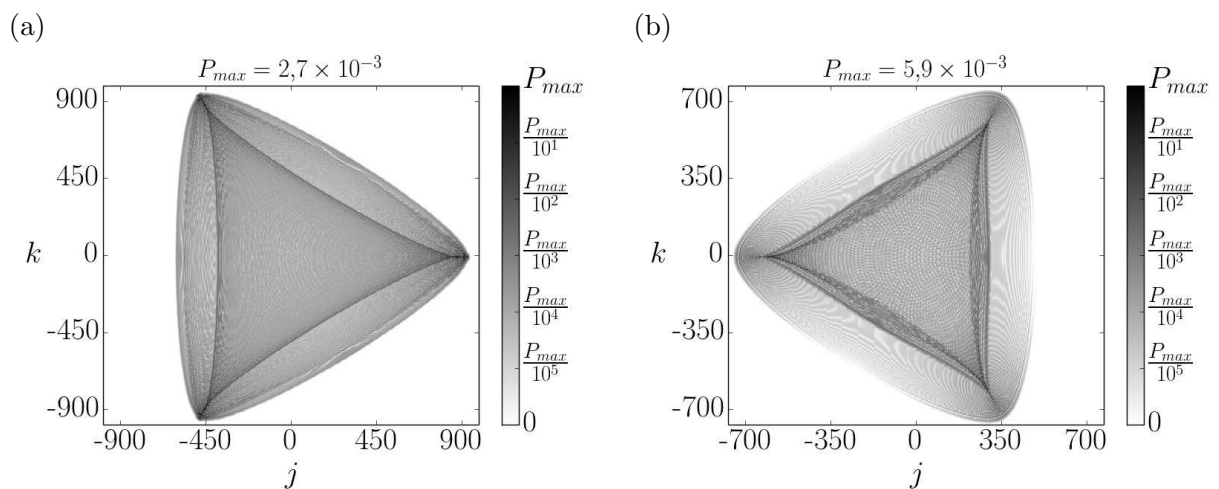
Para as formulações 1, 7 e 10, as trajetórias fundamentais tendem a confinar a partícula

nas arestas ligadas ao vértice da origem, veja a fig. (7.18a). Assim, para as CQEs utilizando a matriz GRO a distribuição de probabilidade tende a se espalhar mais pela rede do que para a matriz TRA, veja a fig. (7.23).

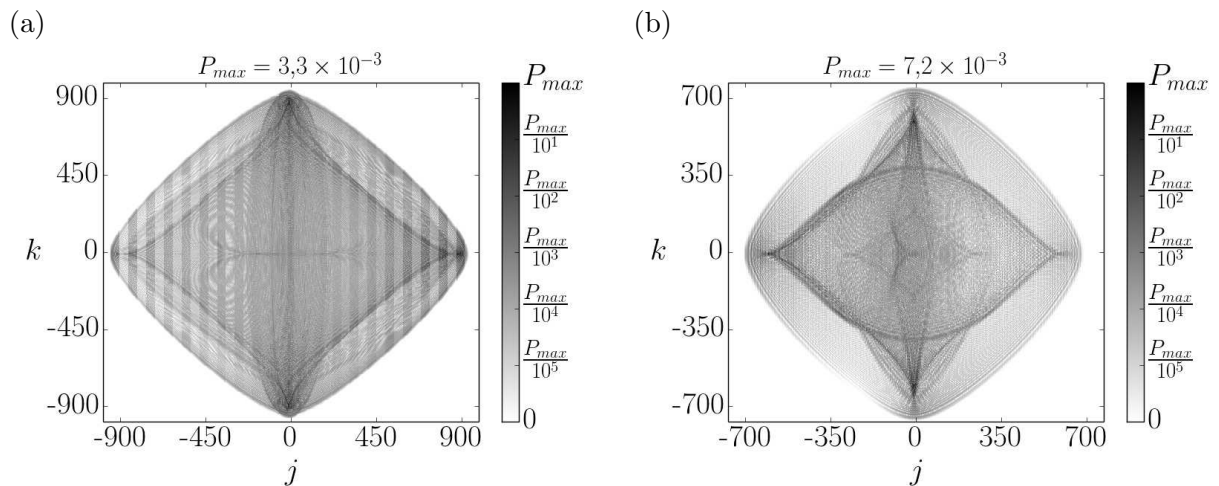


**Figura 7.23:** Distribuições de probabilidades  $P_v(j, k, 100)$  normalizadas para as CQEs nas formulações 1, 7 e 10 utilizando as matrizes (a) TRA, eq. (7.33), e (b) GRO, eq. (7.34).

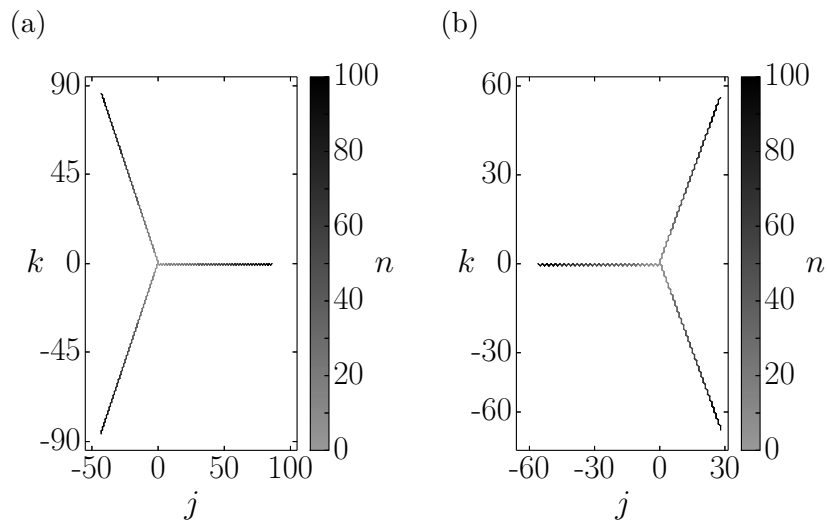
Para as formulações 2 e 6 as trajetórias fundamentais tendem a se difundir pela rede, veja a fig. (7.19). Portanto, para as CQEs utilizando a matriz TRA a partícula tende a seguir essas trajetórias e para a matriz de GRO ela tende a escapar delas. Isso é corroborado pelas distribuições de probabilidades, veja a fig. (7.24). Além disso, na fig. (7.26) apresentamos a trajetória do valor máximo da distribuição de probabilidades para as CQEs na formulação 2 utilizando essas matrizes. Tais trajetórias são coincidentes com as trajetórias descritas na fig. (7.19(a)).



**Figura 7.24:** O mesmo que na fig. (7.23), mas para a formulação 2.



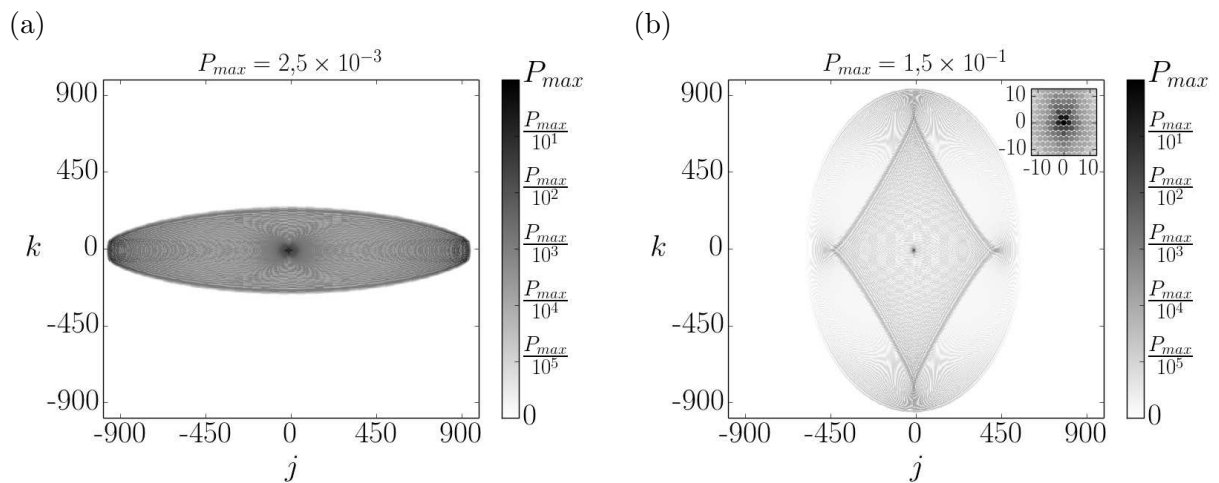
**Figura 7.25:** O mesmo que na fig. (7.23), mas para a formulação 6.



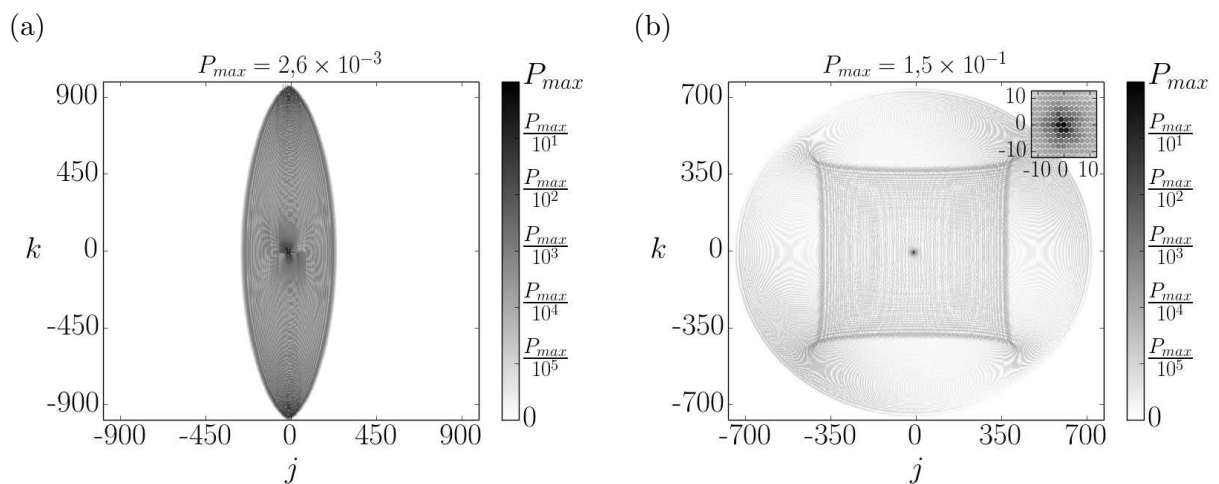
**Figura 7.26:** Trajetórias do valor máximo de  $P_v(j, k, t)$  para a formulação 2 utilizando as matrizes (a) TRA e (b) GRO. Compare essas trajetórias com às dadas na fig. (7.19a), que apresentam as trajetórias fundamentais para essa formulação.

Nas formulações 3, 4 e 5 duas das três trajetórias fundamentais tendem a dispersar a partícula pela rede, enquanto que a terceira tende a confinar a partícula em uma aresta, veja a fig. (7.20). Assim, para uma mesma matriz de espalhamento as CQEs nessas formulações possuem características semelhantes. Analisando as figs. (7.27a) e (7.28a) que descrevem as distribuições de probabilidades para as CQEs utilizando a matriz TRA, observamos a ocorrência de três picos, um próximo à origem da rede, associado à trajetória confinante, e outros dois nas direções das trajetórias fundamentais que se difundem pela rede. Para a matriz GRO, a distribuição de probabilidades exibe um pico central em torno da origem. Este pico está associado à tendência que essa matriz impõe em fazer

a partícula escapar das trajetórias fundamentais que se difundem pela rede, veja as figs. (7.27b) e (7.28b).



**Figura 7.27:** O mesmo que na fig. (7.23), mas para a formulações 3 e 4.

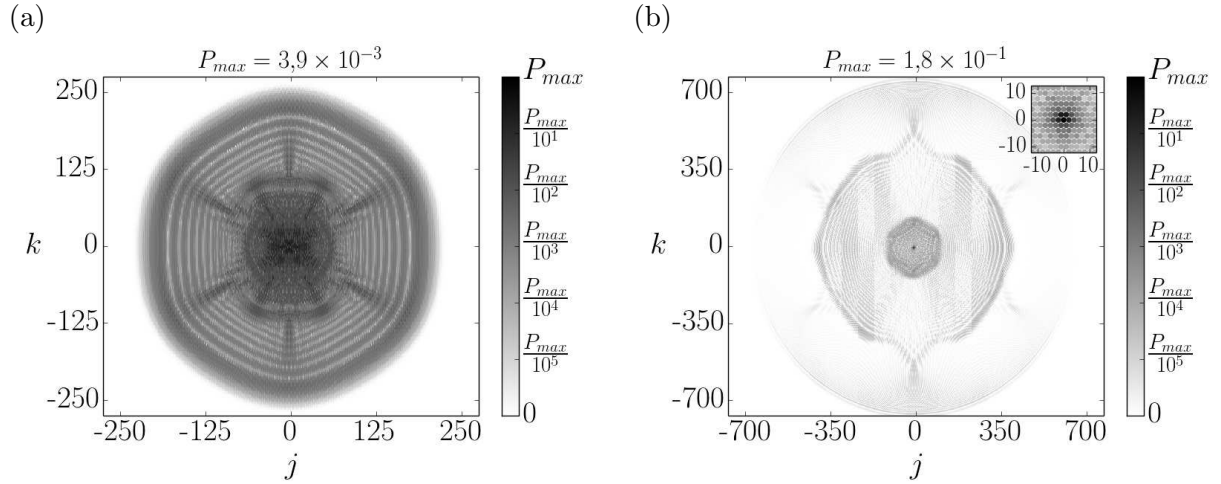


**Figura 7.28:** O mesmo que na fig. (7.23), mas para a formulação 5.

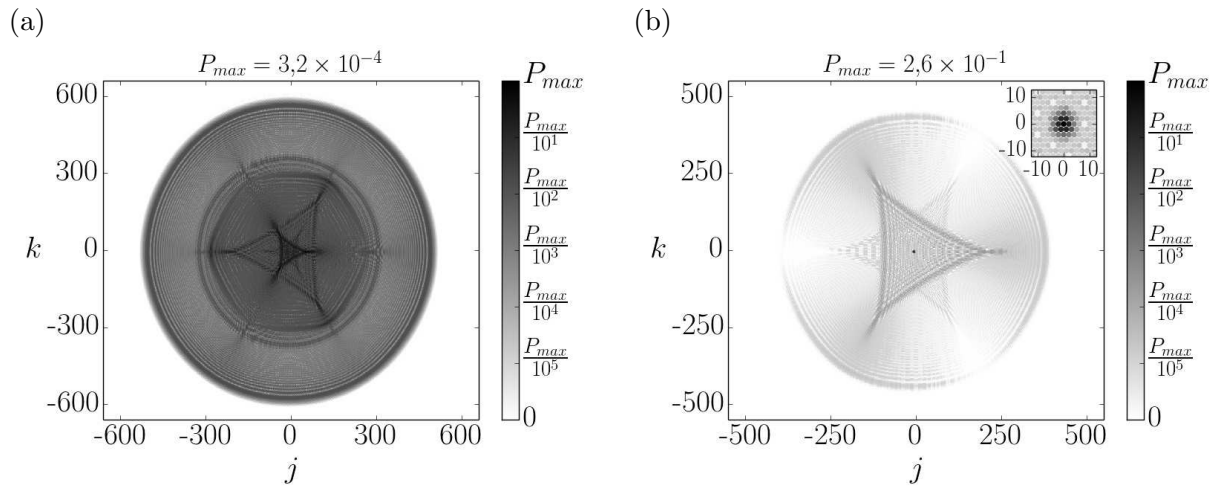
Na formulação 8, uma das trajetórias fundamentais confina a partícula em uma aresta e as outras duas levam ela a descrever um *loop* em um anel da rede, fig. (7.18b). Neste caso a CQE caracterizada pela matriz TRA, eq. (7.33), nessa formulação tende a se concentrar em torno da origem, uma vez que para essa matriz a partícula tende a seguir as trajetórias fundamentais, o que pode ser visto na distribuição de probabilidades  $P_v(j, k, 100)$ , fig. (7.29a). Já para matriz GRO, eq. (7.34), a distribuição de probabilidades tende a se espalhar mais pela rede, uma vez que para essa matriz existe uma grande probabilidade da partícula escapar das trajetórias fundamentais, fig.(7.29b). Entretanto observa-se um pico em  $P_v(j, k, 100)$  próximo à origem, o qual pode ser atribuído aos processos de interferência.

Já para a formulação 9 as trajetórias são *loops* nos anéis em torno da origem, fig. (7.18c). Assim, esta característica combinada com os processos de interferência que as

matrizes de espalhamento impõem sobre o estado do sistema durante a evolução leva a um pico de concentração em  $P_v(j, k, 100)$  em torno da origem tanto para a matriz TRA, eq. (7.33), quanto para a matriz GRO, eq. (7.34), fig (7.30).



**Figura 7.29:** O mesmo que na fig. (7.23), mas para a formulação 8.



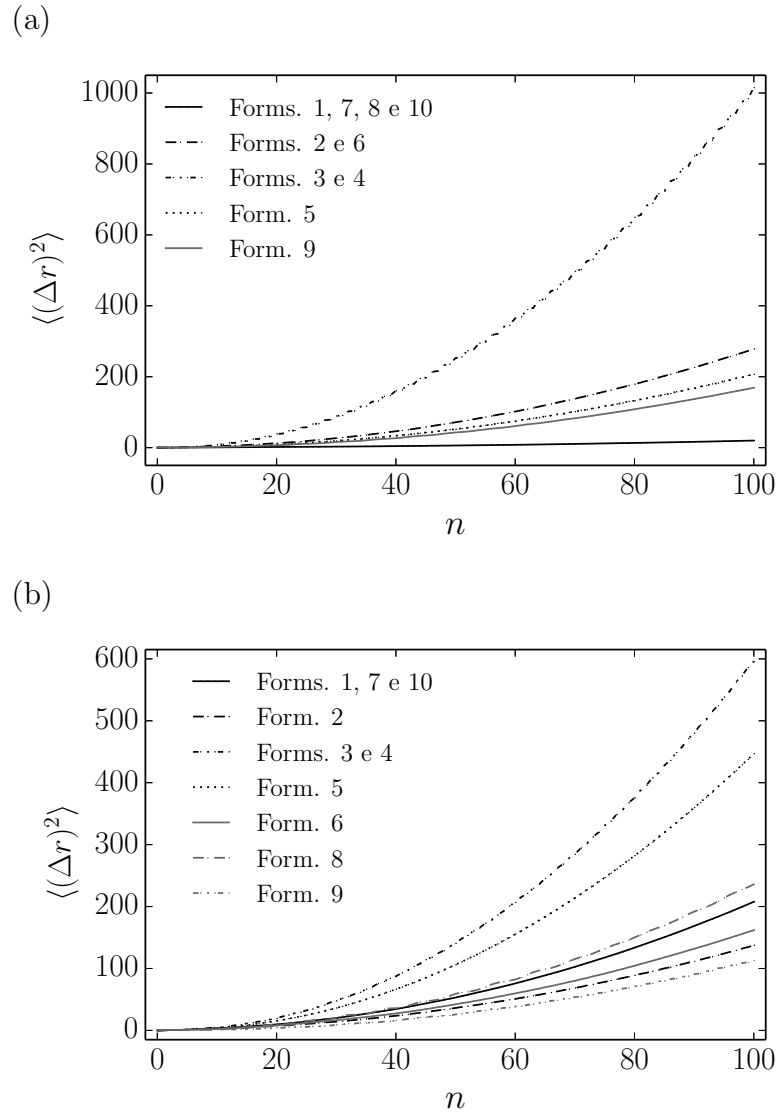
**Figura 7.30:** O mesmo que na fig. (7.23), mas para a formulação 9.

O comportamento temporal do DQM é regido diretamente pela forma que a distribuição de probabilidades evolui, e isso difere as caminhadas clássicas das quânticas, como discutido em capítulos anteriores da tese. Nos gráficos da fig. (7.31) apresentamos o DQM para a coordenada radial para as caminhadas exemplificadas nesta subseção. Como esperado, essa grandeza possui um comportamento dado por

$$\langle(\Delta r)^2\rangle \sim n^2, \quad (7.39)$$

mesmo nos casos onde existe uma concentração de probabilidades próximo à origem. Isso

ocorre porque o comportamento do DMQ é regido pela parcela da distribuição de probabilidades que se espalha pela rede, mesmo nos casos onde ocorrem picos de probabilidades próximos.



**Figura 7.31:** Comportamento do DMQ radial em função dos passos de tempo para as dez formulações usando as matrizes (a) TRA, eq. (7.33), e (b) GRO, eq. (7.34).

## Conclusão

Nesta tese apresentamos um formalismo matemático totalmente geral para a implementação das caminhadas quânticas em tempo discreto no modelo de espalhamento (CQEs) na rede hexagonal. Esta construção resultou em dez formulações distintas para as CQEs em tal rede. O operador evolução temporal, em cada uma dessas formulações, é caracterizado pelas funções topológicas direcionais ( $\Phi$ 's), que especificadas adequadamente geraram dinâmicas cujos comportamentos estão relacionados com trajetórias fundamentais distintas.

Nos capítulos 2 e 3, introduzimos as CQEs, tomando como exemplo o caso mais simples em uma dimensão. Esse desenvolvimento serviu de modelo para o desenvolvimento das CQEs na rede hexagonal. Além disso, como em geral na literatura estudos teóricos sobre as caminhadas quânticas possuem uma perspectiva da área de computação e informação quântica [44], tomamos o cuidado para abordar o assunto sob um ponto de vista físico, ou seja, propagação em rede. Assim, adotamos a versão das caminhadas quânticas introduzida por M. Hillery *et al* [36], que pode ser encarada como uma partícula quântica movendo-se em uma rede e sendo espalhada nos sítios a cada passo de tempo. No capítulo 3, investigamos esse sistema no espaço de *momentum*, onde determinamos as relações de dispersão entre as bandas de energia e o número de onda, as velocidades de grupo associadas às autofunções do operador evolução temporal e a densidade de estados do sistema.

No capítulo 4 apresentamos uma metodologia geral, a qual foi desenvolvida em nossa dissertação de mestrado [123], para a construção das CQEs em rede regulares. Tal construção serviu de balizamento para o desenvolvimento no capítulo 5 das CQEs na rede hexagonal. Além disso, investigamos diversas matrizes de espalhamentos que podem ser usadas na investigação, implementação e controle quântico das CQEs, obtendo alguns

casos particulares, como o da matriz de Grover, que é comumente utilizada na exemplificação desses sistemas. Comparando os exemplos numéricos para diferentes matrizes de espalhamento, entre elas destacamos as matrizes de Grover e da transformada discreta de Fourier, obtivemos uma grande diversidade de dinâmicas que resultaram nos mais variados padrões de distribuições de probabilidades espaciais. Ademais, verificamos que as CQEs na rede hexagonal sempre exibem a marca registradas das CQs, isto é, o comportamento  $\langle(\Delta r)^2\rangle \sim n^2$ , para o deslocamento quadrático médio em função dos passos de tempo [28].

Uma motivação desse trabalho foi a possível aplicação das CQEs na investigação das propriedades do grafeno, que é um material constituído por uma monocamada de átomo de carbono organizados em uma rede hexagonal. Logo, através da exploração da estrutura de bandas das CQEs desenvolvida no capítulo 6, foi possível comparar as estruturas das bandas de energia de uma CQE, caracterizada pela matriz de espalhamento de Grover, com as do grafeno. De maneira qualitativa, esses dois sistemas possuem comportamentos similares. Eles apresentam duas bandas de energias separadas por um *gap* zero e a relação de dispersão da energia com o vetor de onda é linear em torno dos pontos onde as bandas se tocam (pontos de Dirac), o que leva a uma descrição efetiva de férmions de Dirac sem massa próximo desses pontos [99, 112–114].

Através de uma simples exploração da estrutura topológica da rede hexagonal foi possível investigar as CQEs sob novas perspectivas propiciando um leque de novas possibilidades de dinâmicas quânticas para esse sistema. Assim, com o desenvolvimento do formalismo realizado no capítulo 7, que resultou em dez formulações com características espaciais distintas, denominadas de *trajetórias fundamentais*, é possível “controlar espacialmente” as CQEs nessa rede, isto é, é possível fazer a função de onda do sistema tender a seguir as trajetórias características. Tal “controle” pode ser feito de duas maneiras: (i) pode-se moldar as matrizes de espalhamento de maneira independente em cada vértice da rede (pelo menos em teoria), tal que o resultado leva a função de onda se concentrar em uma trajetória fundamental, entretanto, devemos trabalhar com matrizes de espalhamento distintas em cada vértice, e isto pode gerar complexidades na descrição matemática do sistema; ou (ii) podemos usar a nossa metodologia, onde associamos os valores do número quântico  $\sigma$  com as funções topológicas direcionais ( $\Phi$ 's) que combinada com uma única matriz de espalhamento específica faz a função de onda tender a seguir uma trajetória fundamental desejada.

Na seção (7.5), exemplificamos as dez formulações desenvolvidas no capítulo 7 para três matrizes de espalhamento com características distintas, obtendo assim uma ampla gama de resultados com as mais diversas características. De maneira geral obtivemos as



características descritas pelas dez formulações, veja por exemplo o caso da formulação 2 utilizando a matriz trajetória, eq. (7.33), fig. (7.24b). Neste caso, o valor máximo da distribuição de probabilidades espacial segue as trajetórias características da formulação, figs. (7.26b). Além disso, constatamos que esse controle não altera a principal característica que distingue as caminhadas quânticas das caminhadas aleatórias clássicas, o comportamento quadrático do deslocamento quadrático médio com o tempo.

Finalmente, acreditamos que nosso trabalho apresenta uma perspectiva para a aplicação das CQEs na descrição de sistema em física do estado sólido (ao menos de forma simplificada e qualitativa devido à simplicidade e elegância das CQEs), sobretudo na descrição das propriedades de sistemas envolvendo o grafeno. Além disso, devido ao grande potencial de aplicabilidade tecnológicas do grafeno [111], o formalismo desenvolvido nesta tese pode ser a ponte para uma eventual utilização desse material na construção de um computador quântico a base desse material, uma vez que, essas máquinas são essencialmente baseadas em caminhadas quânticas [49–51].

Por fim, apesar da ampla discussão das CQEs na rede hexagonal abordada nesta tese, ainda existe espaço para o estudos de outras características desses sistemas. A seguir listamos alguns possíveis temas para trabalhos futuros:

- a construção de uma CQEs que reproduza as principais características da estrutura de bandas do grafeno, pois os resultados que obtivemos possui apenas um aspecto em comum com o grafeno, isto é, ela apresenta um ponto de Dirac, entretanto, ele está localizado em coordenadas diferente no espaço de *momentum*;
- o desenvolvimento completo das CQEs no espaço de *momentum*, isto é, a determinação das autofunções, das bandas de energia, das velocidades de grupo e da densidade de estados para as dez formulações desenvolvidas nesse trabalho, como foi realizado para as CQEs em uma dimensão no capítulo 2, pois tal quantidade é fundamental para a compreensão das propriedades de transporte;
- a determinação de uma possível soluções analítica para o deslocamento quadrático médio em função do parâmetro  $\theta$  para CQEs caracterizada pela matriz genérica da família  $AB$ , eq. (5.23) ;
- a investigação do comportamento das propriedades do sistema para matrizes de espalhamento dependentes do tempo;
- a implementação das CQEs em outras redes com o padrão hexagonal, por exemplo, redes com defeitos (buracos, ou vértices com mais ligações), condições de con-

torno periódica, com fronteiras (por exemplo, o fulereno, nanofitas, nanotubos de carbono;), uma vez que os materiais reais são finitos e possuem defeitos em sua constituição;

- a aplicação das CQEs para a compreensão das propriedades de transporte de materiais, por exemplo no grafeno e seus derivados, utilizando as caminhadas quânticas.

## Referências Bibliográficas

- [1] K. Pearson. The problem of the random walk. *Nature* **72**, 1865, 294 (1905).
- [2] M. Kac. Random walk and the theory of Brownian motion. *American Mathematical Monthly* **54**, 7, 369–391 (1947).
- [3] A. Einstein e R. Fürth. *Investigations on the Theory of the Brownian Movement*. Dover Books on Physics (Dover Publications, 1956).
- [4] P. Mörters e Y. Peres. *Brownian motion*, volume 30 (Cambridge University Press, 2010).
- [5] H. C. Berg. *Random Walks in Biology* (Princeton University Press, 1993).
- [6] G. H. Weiss. Random Walks and Their Applications: Widely used as mathematical models, random walks play an important role in several areas of physics, chemistry, and biology. *American Scientist* **71**, 1, 65–71 (1983).
- [7] P. Cootner. *The Random Character of Stock Market Prices* (M.I.T.P, 1964).
- [8] J. E. Neigel e J. C. Avise. Application of a Random Walk Model to Geographic Distributions of Animal Mitochondrial DNA Variation. *Genetics* **135**, 1209–1220 (1993).
- [9] V. Komkov e V. Dannon. Random Walk Simulation of Chemical Reactions Represented by Nonlinear Reaction-Diffusion Equations. *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* **71**, 3, 135–150 (1991).
- [10] R. Motwani e P. Raghavan. *Randomized Algorithms* (Cambridge University Press, 1995).

- 
- [11] A. B. Shiflet e G. W. Shiflet. *Introduction to Computational Science: Modeling and Simulation for the Sciences* (Princeton University Press, 2014).
- [12] N. G. Van Kampen. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (Elsevier Science, 2011).
- [13] C. Gardiner. *Handbook of Stochastic Methods: For Physics, Chemistry, and the Natural Sciences*. Springer Series in Synergetics (Springer-Verlag, 2004).
- [14] E. P. Raposo, S. M. de Oliveira, A. M. Nemirovsky e M. D. Coutinho-Filho. Random walks: A pedestrian approach to polymers, critical phenomena, and field theory. *American Journal of Physics* **59**, 7, 633–645 (1991).
- [15] M. Doi e S. F. Edwards. *The theory of polymer dynamics*, volume 73 (oxford university press, 1988).
- [16] O. C. Ibe. *Elements of Random Walk and Diffusion Processes* (Wiley, 2013).
- [17] Y. Aharonov, L. Davidovich e N. Zagury. Quantum random walks. *Physical Review A* **48**, 2, 1687 (1993).
- [18] R. P. Feynman. Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics. *Reviews of Modern Physics* **20**, 2, 367 (1948).
- [19] R. Feynman e A. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals* (Dover Publications, Incorporated, 2012).
- [20] R. P. Feynman. Quantum mechanical computers. *Foundations of Physics* **16**, 6, 507–531 (1986).
- [21] B. A. Chase e A. J. Landahl. Universal quantum walks and adiabatic algorithms by 1D Hamiltonians. arXiv preprint arXiv:0802.1207 (2008).
- [22] D. A. Meyer. From quantum cellular automata to quantum lattice gases. *Journal of Statistical Physics* **85**, 5-6, 551–574 (1996).
- [23] P. Kurzyński. Relativistic effects in quantum walks: Klein’s paradox and zitterbewegung. *Physics Letters A* **372**, 40, 6125–6129 (2008).
- [24] I. Białynicki-Birula. Weyl, Dirac, and Maxwell equations on a lattice as unitary cellular automata. *Physical Review D* **49**, 12, 6920–6927 (1994).
- [25] M. Hamada, N. Konno e E. Segawa. Relation between coined quantum walks and quantum cellular automata. arXiv preprint quant-ph/0408100 (2004).

- [26] N. Konno, K. Mistuda, T. Soshi e H. J. Yoo. Quantum walks and reversible cellular automata. *Physics Letters A* **330**, 6, 408–417 (2004).
- [27] S. Gudder. *Quantum Probability* (Academic Press, 1988).
- [28] J. Kempe. Quantum Random Walks - an Introductory Overview. *Contemporary Physics* **44**, 4, 307–327 (2003).
- [29] A. Ambainis, E. Bach e J. Watrous. Quantum Random Walks and the Analysis of Discrete Quantum Processes. Em *Proceedings of STOC'01* (Citeseer, 2000).
- [30] A. Nayak e A. Vishwanath. Quantum walk on the line. arXiv preprint quant-ph/0010117 (2000).
- [31] D. Aharonov, A. Ambainis, J. Kempe e U. Vazirani. Quantum walks on graphs. Em *Proceedings of the Thirty-Third Annual ACM Symposium on Theory of Computing*, páginas 50–59 (ACM, 2001).
- [32] A. Ambainis, E. Bach, A. Nayak, A. Vishwanath e J. Watrous. One-dimensional quantum walks. Em *Proceedings of the Thirty-Third Annual ACM Symposium on Theory of Computing*, páginas 37–49 (ACM, 2001).
- [33] A. M. Childs, E. Farhi e S. Gutmann. An example of the difference between quantum and classical random walks. *Quantum Information Processing* **1**, 1-2, 35–43 (2002).
- [34] A. Ambainis. Quantum walks and their algorithmic applications. *International Journal of Quantum Information* **1**, 04, 507–518 (2003).
- [35] B. Tregenna, W. Flanagan, R. Maile e V. Kendon. Controlling discrete quantum walks: coins and initial states. *New Journal of Physics* **5**, 1, 83 (2003).
- [36] M. Hillery, J. Bergou e E. Feldman. Quantum walks based on an interferometric analogy. *Physical Review A* **68**, 3, 032314 (2003).
- [37] E. Feldman e M. Hillery. Scattering theory and discrete-time quantum walks. *Physics Letters A* **324**, 4, 277–281 (2004).
- [38] E. Feldman e M. Hillery. Quantum walks on graphs and quantum scattering theory. *Contemporary Mathematics* **381**, 71 (2005).
- [39] V. Kendon. Quantum walks on general graphs. *International Journal of Quantum Information* **4**, 05, 791–805 (2006).

- [40] N. Konno. Quantum walks. Em *Quantum Potential Theory*, páginas 309–452 (Springer, 2008).
- [41] C. Chandrashekar, R. Srikanth e R. Laflamme. Optimizing the discrete time quantum walk using a SU (2) coin. *Physical Review A* **77**, 3, 032326 (2008).
- [42] V. Kendon. Where to quantum walk. arXiv preprint arXiv:1107.3795 (2011).
- [43] A. Souza e R. Andrade. Coin state properties in quantum walks. *Scientific Reports* **3** (2013).
- [44] S. E. Venegas-Andraca. Quantum walks for computer scientists. *Synthesis Lectures on Quantum Computing* **1**, 1, 1–119 (2008).
- [45] F. M. Andrade e M. G. E. da Luz. Green-function approach for scattering quantum walks. *Phys. Rev. A* **84**, 042343 (2011).
- [46] F. M. Andrade e M. G. E. da Luz. Superdiffusivity of Quantum Walks: A Feynman Sum-Over-Paths Description. *Physical Review A* **86**, 4, 042309 (2012).
- [47] S. E. Venegas-Andraca. Quantum Walks: a Comprehensive Review. *Quantum Information Processing* **11**, 5, 1015–1106 (2012).
- [48] R. Portugal. *Quantum walks and search algorithms* (Springer Science & Business Media, 2013).
- [49] A. M. Childs. Universal computation by quantum walk. *Physical Review Letters* **102**, 18, 180501 (2009).
- [50] N. B. Lovett, S. Cooper, M. Everitt, M. Trevers e V. Kendon. Universal quantum computation using the discrete-time quantum walk. *Physical Review A* **81**, 4, 042330 (2010).
- [51] M. S. Underwood e D. L. Feder. Universal quantum computation by discontinuous quantum walk. *Physical Review A* **82**, 4, 042304 (2010).
- [52] T. Oka, N. Konno, R. Arita e H. Aoki. Breakdown of an electric-field driven system: a mapping to a quantum walk. *Physical Review Letters* **94**, 10, 100602 (2005).
- [53] M. Mohseni, P. Rebentrost, S. Lloyd e A. Aspuru-Guzik. Environment-assisted quantum walks in photosynthetic energy transfer. *The Journal of Chemical Physics* **129**, 17, 174106 (2008).

- [54] P. Reberntrost, M. Mohseni, I. Kassal, S. Lloyd e A. Aspuru-Guzik. Environment-assisted quantum transport. *New Journal of Physics* **11**, 3, 033003 (2009).
- [55] I. G. Karafyllidis e D. C. Lagoudas. Microtubules as mechanical force sensors. *Biosystems* **88**, 1, 137–146 (2007).
- [56] F. De Nicola, L. Sansoni, A. Crespi, R. Ramponi, R. Osellame, V. Giovannetti, R. Fazio, P. Mataloni e F. Sciarrino. Quantum simulation of bosonic-fermionic noninteracting particles in disordered systems via a quantum walk. *Physical Review A* **89**, 3, 032322 (2014).
- [57] C. Chandrashekar e R. Laflamme. Quantum phase transition using quantum walks in an optical lattice. *Physical Review A* **78**, 2, 022314 (2008).
- [58] P. Kurzyński e A. Wójcik. Discrete-time quantum walk approach to state transfer. *Physical Review A* **83**, 6, 062315 (2011).
- [59] C. Chandrashekar. Disordered-quantum-walk-induced localization of a Bose-Einstein condensate. *Physical Review A* **83**, 2, 022320 (2011).
- [60] G. Leung, P. Knott, J. Bailey e V. Kendon. Coined quantum walks on percolation graphs. *New Journal of Physics* **12**, 12, 123018 (2010).
- [61] B. Kollár, J. Novotný, T. Kiss e I. Jex. Discrete time quantum walks on percolation graphs. *The European Physical Journal Plus* **129**, 5, 1–20 (2014).
- [62] S. Venegas-Andraca, J. Ball, K. Burnett e S. Bose. Quantum walks with entangled coins. *New Journal of Physics* **7**, 1, 221 (2005).
- [63] A. Oliveira, R. Portugal e R. Donangelo. Decoherence in two-dimensional quantum walks. *Physical Review A* **74**, 1, 012312 (2006).
- [64] O. Maloyer e V. Kendon. Decoherence versus entanglement in coined quantum walks. *New Journal of Physics* **9**, 4, 87 (2007).
- [65] V. Kendon e B. Tregenna. Decoherence in discrete quantum walks. Em *Decoherence and Entropy in Complex Systems*, páginas 253–267 (Springer, 2004).
- [66] V. Kendon. Decoherence in quantum walks—a review. *Mathematical Structures in Computer Science* **17**, 06, 1169–1220 (2007).
- [67] K. Rapedius e H. Korsch. Interaction-induced decoherence in non-Hermitian quantum walks of ultracold bosons. *Physical Review A* **86**, 2, 025601 (2012).

- [68] M. A. Broome, A. Fedrizzi, B. P. Lanyon, I. Kassal, A. Aspuru-Guzik e A. G. White. Discrete single-photon quantum walks with tunable decoherence. *Physical Review Letters* **104**, 15, 153602 (2010).
- [69] D. Bouwmeester, I. Marzoli, G. P. Karman, W. Schleich e J. Woerdman. Optical galton board. *Physical Review A* **61**, 1, 013410 (1999).
- [70] P. L. Knight, E. Roldán e J. Sipe. Quantum walk on the line as an interference phenomenon. *Physical Review A* **68**, 2, 020301 (2003).
- [71] W. Dür, R. Raussendorf, V. M. Kendon e H.-J. Briegel. Quantum walks in optical lattices. *Physical Review A* **66**, 5, 052319 (2002).
- [72] K. Eckert, J. Mompart, G. Birkel e M. Lewenstein. One-and two-dimensional quantum walks in arrays of optical traps. *Physical Review A* **72**, 1, 012327 (2005).
- [73] Y. Lahini, M. Verbin, S. D. Huber, Y. Bromberg, R. Pugatch e Y. Silberberg. Quantum walk of two interacting bosons. *Physical Review A* **86**, 1, 011603 (2012).
- [74] O. Kálmán, T. Kiss e P. Földi. Quantum walk on the line with quantum rings. *Physical Review B* **80**, 3, 035327 (2009).
- [75] K. Manouchehri e J. Wang. Solid state implementation of quantum random walks on general graphs. arXiv preprint arXiv:0811.1795 (2008).
- [76] B. C. Travaglione e G. J. Milburn. Implementing the quantum random walk. *Physical Review A* **65**, 3, 032310 (2002).
- [77] F. Zähringer, G. Kirchmair, R. Gerritsma, E. Solano, R. Blatt e C. Roos. Realization of a quantum walk with one and two trapped ions. *Physical Review Letters* **104**, 10, 100503 (2010).
- [78] R. Matjeschk, C. Schneider, M. Enderlein, T. Huber, H. Schmitz, J. Glueckert e T. Schaetz. Experimental simulation and limitations of quantum walks with trapped ions. *New Journal of Physics* **14**, 3, 035012 (2012).
- [79] H. B. Perets, Y. Lahini, F. Pozzi, M. Sorel, R. Morandotti e Y. Silberberg. Realization of quantum walks with negligible decoherence in waveguide lattices. *Physical Review Letters* **100**, 17, 170506 (2008).
- [80] A. Peruzzo, M. Lobino, J. C. Matthews, N. Matsuda, A. Politi, K. Poulios, X.-Q. Zhou, Y. Lahini, N. Ismail, K. Wörhoff et al.. Quantum walks of correlated photons. *Science* **329**, 5998, 1500–1503 (2010).



- [81] K. Poulios, R. Keil, D. Fry, J. D. Meinecke, J. C. Matthews, A. Politi, M. Lobino, M. Gräfe, M. Heinrich, S. Nolte et al.. Quantum walks of correlated photon pairs in two-dimensional waveguide arrays. *Physical Review Letters* **112**, 14, 143604 (2014).
- [82] C. Ryan, M. Laforest, J. Boileau e R. Laflamme. Experimental implementation of a discrete-time quantum random walk on an NMR quantum-information processor. *Physical Review A* **72**, 6, 062317 (2005).
- [83] G. S. Agarwal e P. K. Pathak. Quantum random walk of the field in an externally driven cavity. *Physical Review A* **72**, 3, 033815 (2005).
- [84] B. C. Sanders, S. D. Bartlett, B. Tregenna e P. L. Knight. Quantum quincunx in cavity quantum electrodynamics. *Physical Review A* **67**, 4, 042305 (2003).
- [85] J. Wang e K. Manouchehri. *Physical implementation of quantum walks* (Springer, 2013).
- [86] J. F. D. Diniz. *Implementation of two-dimensional quantum walks: Implementação de passeios quânticos em duas dimensões*. Dissertação de mestrado em física, Universidade Estadual de Campinas (2016).
- [87] J. K. Asbóth. Symmetries, topological phases, and bound states in the one-dimensional quantum walk. *Phys. Rev. B* **86**, 195414 (2012).
- [88] B. Tarasinski, J. K. Asbóth e J. P. Dahlhaus. Scattering theory of topological phases in discrete-time quantum walks. *Phys. Rev. A* **89**, 042327 (2014).
- [89] H. Obuse, J. K. Asbóth, Y. Nishimura e N. Kawakami. Unveiling hidden topological phases of a one-dimensional Hadamard quantum walk. *Phys. Rev. B* **92**, 045424 (2015).
- [90] F. Cardano, M. Maffei, F. Massa, B. Piccirillo, C. de Lisio, G. De Filippis, V. Cataudella, E. Santamato e L. Marrucci. Statistical moments of quantum-walk dynamics reveal topological quantum transitions. *Nature communications* **7** (2016).
- [91] I. Carneiro, M. Loo, X. Xu, M. Girerd, V. Kendon e P. L. Knight. Entanglement in coined quantum walks on regular graphs. *New Journal of Physics* **7**, 1, 156 (2005).
- [92] B. Venancio, F. Andrade e M. da Luz. Unveiling and exemplifying the unitary equivalence of discrete time quantum walk models. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **46**, 16, 165302 (2013).

- [93] A. M. Childs, R. Cleve, E. Deotto, E. Farhi, S. Gutmann e D. A. Spielman. Exponential algorithmic speedup by a quantum walk. Em *Proceedings of the thirty-fifth annual ACM symposium on Theory of computing*, páginas 59–68 (ACM, 2003).
- [94] N. Inui, Y. Konishi e N. Konno. Localization of two-dimensional quantum walks. *Phys. Rev. A* **69**, 052323 (2004).
- [95] J. Kempe. Quantum random walks hit exponentially faster. arXiv preprint quant-ph/0205083 (2002).
- [96] H. Krovi e T. A. Brun. Hitting time for quantum walks on the hypercube. *Phys. Rev. A* **73**, 032341 (2006).
- [97] A. Makmal, M. Zhu, D. Manzano, M. Tiersch e H. J. Briegel. Quantum walks on embedded hypercubes. *Phys. Rev. A* **90**, 022314 (2014).
- [98] P. Arnault e F. Debbasch. Landau levels for discrete-time quantum walks in artificial magnetic fields. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **443**, 179–191 (2016).
- [99] C. Chandrashekar. Two-component Dirac-like Hamiltonian for generating quantum walk on one-, two-and three-dimensional lattices. arXiv preprint arXiv:1309.3911 (2013).
- [100] B. Kollár, M. Štefaňák, T. Kiss e I. Jex. Recurrences in three-state quantum walks on a plane. *Physical Review A* **82**, 1, 012303 (2010).
- [101] G. Abal, R. Donangelo, F. L. Marquezino e R. Portugal. Spatial search on a honeycomb network. *Mathematical Structures in Computer Science* **20**, 06, 999–1009 (2010).
- [102] C. Chandrashekar e T. Busch. Quantum percolation and transition point of a directed discrete-time quantum walk. *Scientific reports* **4** (2014).
- [103] C. Lyu, L. Yu e S. Wu. Localization in quantum walks on a honeycomb network. *Physical Review A* **92**, 5, 052305 (2015).
- [104] D. Sarkar, N. Paul, K. Bhattacharya e T. K. Ghosh. An Effective Hamiltonian Approach to Quantum Random Walk. arXiv preprint arXiv:1505.01435 (2015).
- [105] I. G. Karafyllidis. Quantum walks on graphene nanoribbons using quantum gates as coins. *Journal of Computational Science* **11**, 326–330 (2015).

- [106] J. Kepler. *The Harmony of the World* (American Philosophical Society, 1997).
- [107] B. Grünbaum e G. C. Shephard. Tilings by regular polygons. *Mathematics Magazine* páginas 227–247 (1977).
- [108] D. P. Cravey. *Periodic Tilings and Tilings by Regular polygons*. Phd thesis in mathematics, University of Wisconsin (1984).
- [109] S. D. Sarma, S. Adam, E. Hwang e E. Rossi. Electronic transport in two-dimensional graphene. *Reviews of Modern Physics* **83**, 2, 407 (2011).
- [110] K. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. Booth, V. Khotkevich, S. Morozov e A. Geim. Two-dimensional atomic crystals. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* **102**, 30, 10451–10453 (2005).
- [111] A. C. Neto e K. Novoselov. New directions in science and technology: two-dimensional crystals. *Reports on Progress in Physics* **74**, 8, 082501 (2011).
- [112] I. E. Abbott's. Graphene: exploring carbon flatland. *Physics Today* **60**, 8, 35 (2007).
- [113] K. Novoselov, A. K. Geim, S. Morozov, D. Jiang, M. Katsnelson, I. Grigorieva, S. Dubonos e A. Firsov. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature* **438**, 7065, 197–200 (2005).
- [114] C. Dartora, M. J. S. Jimenez e F. Zanella. (Fundamentals of the massless Dirac fermion physics in (1+ 2)-D and graphene). *Revista Brasileira de Ensino de Física* **37**, 3, 3301–1 (2015).
- [115] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. Dubonos, I. Grigorieva e A. Firsov. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science* **306**, 5696, 666–669 (2004).
- [116] A. K. Geim. Nobel Lecture: Random walk to graphene. *Reviews of Modern Physics* **83**, 3, 851 (2011).
- [117] K. Novoselov. Nobel lecture: graphene: materials in the flatland. *Reviews of Modern Physics* **83**, 3, 837 (2011).
- [118] A. C. Neto, F. Guinea, N. Peres, K. S. Novoselov e A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Reviews of modern physics* **81**, 1, 109 (2009).

- [119] T. Kitagawa. Topological phenomena in quantum walks: elementary introduction to the physics of topological phases. *Quantum Information Processing* **11**, 5, 1107–1148 (2012).
- [120] F. Cardano, F. Massa, H. Qassim, E. Karimi, S. Slussarenko, D. Paparo, C. de Lisio, F. Sciarrino, E. Santamato, R. W. Boyd et al.. Quantum walks and wavepacket dynamics on a lattice with twisted photons. *Science advances* **1**, 2, e1500087 (2015).
- [121] F. Andrade e M. da Luz. Equivalence between discrete quantum walk models in arbitrary topologies. *Physical Review A* **80**, 5, 052301 (2009).
- [122] S. K. Goyal, T. Konrad e L. Diósi. Unitary equivalence of quantum walks. *Physics Letters A* **379**, 3, 100–104 (2015).
- [123] B. F. Venancio. *Caminhadas Quânticas em Redes Regulares 2D, Um Tratamento Geral*. Dissertação de mestrado em física, Universidade Federal do Paraná (2013).
- [124] G. Lawler. *Introduction to Stochastic Processes, Second Edition* (CRC Press INC, 2006).
- [125] F. Spitzer. *Principles of Random Walk* (Springer London, Limited, 2001).
- [126] T. Tomé e M. Oliveira. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade* (EDUSP, 2001).
- [127] G. Lawler e V. Limic. *Random Walk: A Modern Introduction* (Cambridge University Press, 2010).
- [128] L. Lovász. Random walks on graphs: A survey. *Combinatorics, Paul Erdos is Eighty* **2**, 1, 1–46 (1993).
- [129] R. Burioni e D. Cassi. Random walks on graphs: ideas, techniques and results. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **38**, 8, R45 (2005).
- [130] L. Rayleigh. The problem of the random walk. *Nature* **72**, 1866, 318 (1905).
- [131] R. J. Glauber. Coherent and incoherent states of the radiation field. *Physical Review* **131**, 6, 2766 (1963).
- [132] A. Romanelli, A. S. Schifino, R. Siri, G. Abal, A. Auyuanet e R. Donangelo. Quantum random walk on the line as a Markovian process. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **338**, 3, 395–405 (2004).
- [133] J. Neto. *Mecânica Newtoniana, Lgrangiana e Hamiltoniana* (Editora Livraria da Física, 2004).

- [134] J. C. A. Barata. *Curso de Física Matemática* (Universidade de São Paulo, São Paulo, 2006).
- [135] E. Wigner e J. Griffin. *Group Theory and Its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra* (Academic Press, 1959).
- [136] J. J. Sakurai e J. Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. Pearson new international edition (Pearson, 2013).
- [137] M. A. Nielsen e I. L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, 2010).
- [138] S. Agaian. *Hadamard matrices and their applications*, volume 1168 (Springer, 2006).
- [139] W. De Launey e D. L. Flannery. *Algebraic design theory*, volume 175 (American mathematical society Providence, 2011).
- [140] A. Hedayat, W. Wallis et al.. Hadamard matrices and their applications. *The Annals of Statistics* **6**, 6, 1184–1238 (1978).
- [141] K. J. Horadam. *Hadamard matrices and their applications* (Princeton University Press, 2007).
- [142] K. H. Leung e B. Schmidt. New restrictions on possible orders of circulant Hadamard matrices. *Designs, Codes and Cryptography* **64**, 1, 143–151 (2012).
- [143] N. W. Ashcroft e N. D. Mermin. *Solid state physics* (Saunders College, 1976).
- [144] C. Kittel. *Introdução à física do estado sólido* (Grupo Gen-LTC, 2000).
- [145] M. Sachs. *Solid state theory* (McGraw-Hill, 1963).
- [146] H. Dym e H. P. McKean. *Fourier Series and Integrals* (Academic Press, 1972).
- [147] G. Avila. O Método da Fase Estacionaria. *Matemática Universitária* **9**, 10, 133–143 (1989).
- [148] L. Van Hove. The occurrence of singularities in the elastic frequency distribution of a crystal. *Physical Review* **89**, 6, 1189 (1953).
- [149] B. Reimer, H. Baessler, J. Hesse e G. Weiser. Optical Properties of a Polydiacetylene Single Crystal Evidence for van Hove Singularities. *physica status solidi (b)* **73**, 2, 709–716 (1976).

- [150] J.-C. Charlier, X. Blase e S. Roche. Electronic and transport properties of nanotubes. *Reviews of modern physics* **79**, 2, 677 (2007).
- [151] D. West. *Introduction to graph theory* (Prentice Hall, 2001).
- [152] V. Voloshin. *Introduction to Graph Theory* (Nova Science Pub Incorporated, 2009).
- [153] R. Wilson. *Introduction to graph theory* (Longman, 1996).
- [154] L. K. Grover. A fast quantum mechanical algorithm for database search. Em *Proceedings of the twenty-eighth annual ACM symposium on Theory of computing*, páginas 212–219 (ACM, 1996).
- [155] L. K. Grover. From Schrodinger's equation to the quantum search algorithm. *American Journal of Physics* **69**, 7, 769–777 (2001).
- [156] N. Shenvi, J. Kempe e K. B. Whaley. Quantum random-walk search algorithm. *Physical Review A* **67**, 5, 052307 (2003).
- [157] J. W. Cooley e J. W. Tukey. An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series. *Mathematics of Computation* **19**, 90, 297–301 (1965).
- [158] P. Duhamel e M. Vetterli. Fast Fourier transforms: a tutorial review and a state of the art. *Signal Processing* **19**, 4, 259–299 (1990).
- [159] J. O. Smith. *Mathematics of the discrete Fourier transform (DFT): with audio applications* (Julius Smith, 2007).
- [160] R. N. Bracewell. Discrete hartley transform. *Journal of the Optical Society of America* **73**, 12, 1832–1835 (1983).
- [161] S. Boussakta, O. H. Alshibami e M. Aziz. Radix -  $2 \times 2 \times 2$  Algorithm for the 3-D discrete Hartley Transform. *Signal Processing, IEEE Transactions on* **49**, 3145 – 3156 (2001). doi: 10.1109/78.969521.
- [162] H. V. Sorensen, D. L. Jones, C. S. Burrus e M. Heideman. On computing the discrete Hartley transform. *Acoustics, Speech and Signal Processing, IEEE Transactions on* **33**, 5, 1231–1238 (1985).
- [163] S. Alves e M. Dalcin. Mosaicos do plano. *Revista do Professor de Matemática* **40**, 3 (1999).
- [164] J. B. Bronzan. Parametrization of SU (3). *Physical Review D* **38**, 6, 1994 (1988).

- 
- [165] L. Landau. Zur Theorie der phasenumwandlungen II. *Phys. Z. Sowjetunion* **11**, 26–35 (1937).
- [166] R. Peierls. Quelques propriétés typiques des corps solides. Em *Annales de l'institut Henri Poincaré*, volume 5, páginas 177–222 (1935).