

Universidade Federal do Paraná
Programa de Pós-graduação em Física
Dissertação de Mestrado

Bruno Felipe Venancio

Caminhadas Quânticas em Redes Regulares 2D, Um
Tratamento Geral

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Setor de Ciências Exatas da Universidade do Paraná como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Física.

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

Curitiba - PR

2013

*Dedicado ao meu filho Artur José, que ele cresça forte,
inteligente e se torne um grande homem.*

Agradecimentos

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

Resumo

Neste trabalho abordamos as duas versões mais conhecidas de caminhadas quânticas em tempos discretos, denominadas modelo de moeda e de espalhamento. Discutimos e revisamos a formulação matemática geral para tais caminhadas e revisitamos a demonstração de que tais modelos são unitariamente equivalentes em qualquer topologia e para coeficientes de transição arbitrários. Além disso, particularizamos a construção geral para o caso de redes regulares, fazendo uma análise detalhada de redes lineares, quadradas e hexagonais. Para tais redes específicas, realizamos cálculos de evolução temporal considerando diferentes matrizes para as amplitudes quânticas de transição. Tanto para o modelo de moeda quanto para o de espalhamento discutimos os casos Hadamard, Grover, Transformada Discreta de Fourier, além da Transformada Discreta de Hartley (que é incomum na área mas bastante usada e útil em análise de sinais). Através de nossos exemplos numéricos, discutimos as semelhanças e diferenças entre os modelos de espalhamento e de moeda, bem como verificamos explicitamente a equivalência unitária entre eles. Por último, abordamos em detalhes caminhadas quânticas na rede hexagonal, o que nos permite investigar alguns aspectos interessantes desta topologia, tais como, comportamento similar a uma partícula livre, características de evolução quando há simetria axial, e efeitos de confinamento em anéis da rede.

Abstract

In this paper we approach the two most popular versions of quantum walks in discrete time, called coin and scattering model. We discuss and review the general mathematical formulation for such walks and revisit the demonstration that such models are unitarily equivalent in any topology and arbitrary transition coefficients. Furthermore, reduced the general construction for the case of regular lattices, making a detailed analysis of linear lattices, square and hexagonal. For such specific lattices, we performed calculations considering different temporal evolution matrices for quantum transition amplitudes. Both the model for coin as for scattering discussed cases Hadamard, Grover, Discrete Fourier Transform, and Discrete Hartley Transform (which is unusual in the area but widely used and useful in signal analysis). Through our numerical examples, we discuss the similarities and differences between models of scattering and coin, as well as verified explicitly unitary equivalence between them. Finally, we discuss in detail in the hexagonal lattice quantum walks, which allows us to investigate some interesting aspects of this topology such as behavior similar to a free particle, characteristics of evolution when there is axial symmetry and confinement effects in ring lattice.

Sumário

Agradecimentos	3
Resumo	4
Abstract	5
Sumário	6
1 Introdução	1
2 Grafos e Caminhadas Aleatórias Clássicas	4
2.1 Grafos	4
2.1.1 Definição	6
2.1.2 Adjacências	6
2.1.3 Isomorfismo	8
2.1.4 Tipos de Grafos	10
2.1.5 Redes Regulares	10
2.2 Caminhadas Aleatórias Clássicas	11
2.2.1 Caminhadas Aleatórias Clássicas Unidimensionais	11
2.2.2 Caminhadas Aleatórias Clássicas Bidimensionais	14
2.2.3 Caminhadas Aleatórias em Grafos	20

3	Caminhadas Quânticas Discretas na Linha	22
3.1	Modelo de Caminhada Quântica de Moeda	23
3.2	Modelo Espalhamento	26
3.3	Determinação das Probabilidades	29
3.4	Equivalência Unitária	29
3.5	Exemplos Numéricos	32
4	Caminhas Quânticas Discretas em Grafos	40
4.1	Modelo de Moeda	40
4.2	Modelo de Espalhamento	44
4.3	Equivalência Unitária dos Modelos	47
4.4	Caminhadas Quânticas em Redes Regulares Bidimensionais	50
5	Caminhadas Quânticas Discretas na Rede Quadrada	54
5.1	Construção do Modelo de Moeda	54
5.2	Construção do Modelo de Espalhamento	56
5.3	Exemplos Numéricos	58
6	Caminhadas Quânticas Discretas na Rede Hexagonal	66
6.1	Estados de Base	67
6.2	Construção do Modelo de Moeda	71
6.2.1	U_c em Termos dos Elementos de Φ_1	71
6.2.2	U_c em Termos dos Elementos de Φ_2	72
6.3	Modelo de Espalhamento	73
6.3.1	U_s em Termos dos Elementos de Φ_1	73
6.3.2	U_s em Termos dos Elementos de Φ_2	74
7	Explorando as Caminhadas Quânticas na Rede Hexagonal	77
7.1	Exemplos de Evoluções das Caminhadas	77

7.1.1	Caminhadas Usando a Formulação com Φ_1	79
7.1.2	Caminhadas Usando a Formulação com Φ_2	88
7.2	Dispersão na Posição	95
7.3	Caminhadas Tendenciosas e Simétricas	97
7.3.1	Matrizes Unitárias de Ordem 3	97
7.3.2	Caminhadas com “Trajetórias” Tendenciosas	101
7.3.3	Caminhada com Simetrias	114
8	Conclusão	122
	Referências Bibliográficas	125

Introdução

O conceito de caminhadas quânticas foi proposto inicialmente por Y. Aharonov e colaboradores [1], sendo basicamente o análogo quântico dos passeios aleatórios clássicos. De forma bem simplificada (os detalhes serão apresentados ao longo do trabalho), caminhadas quânticas representam evoluções unitárias, dando-se em um espaço discreto (grafos), cujos estados bases são localizados e todas as transições quânticas ocorrendo nos vértices do grafo. Desde sua introdução [1–3], mostrou-se uma classe de sistemas bastante simples [4], porém de forma até mesmo surpreendente, apresentando aplicações em muitas áreas do conhecimento [5], sobretudo em computação quântica. De fato, atualmente são usadas, por exemplo, para resolver problemas de busca [6–8] (incluindo identificação e comparação de partes de grafos [6–8]), no estudo de propriedades de transporte em sistemas biológicos [9–11], na análise de redistribuição de condensados de Bose-Einstein [12], e em processos de decoerência [13]. Em computação, são úteis como ferramentas para o desenvolvimento de algoritmos quânticos de diversos propósitos [14–17]. Obviamente que um desafio importante é a concreta implementação física de tais modelos. Nesta linha, existem várias propostas (algumas bastante promissoras), dentre elas podemos destacar: armadilha de átomos em redes ópticas [18], pontos quânticos [19], elementos ópticos passivos [20] e ressonância magnética nuclear de estado líquido [21].

Com relação à dinâmica, caminhadas quânticas podem ser formuladas em tempo contínuo [22] ou em tempo discreto [15, 23–26], mas sempre em um espaço de posições discretas (rede ou grafo). Nesta dissertação estudaremos apenas caminhadas quânticas em tempo discreto, que basicamente podem ser implementadas de duas maneiras distintas, com base no que nós assumimos como processos primários para descrever os estados quânticos do sistema. Na primeiro caso, usualmente chamada de caminhadas quânticas de moeda [15, 23], os estados quânticos descrevem o sistema nas posições dos vértices da

rede e a partícula possui graus de liberdade auxiliares responsáveis em direcioná-la a cada passo de tempo. No segundo caso, chamada de caminhada quântica de espalhamento [24–26], os estados quânticos são definidos sobre as arestas da rede. Ele é baseado em uma analogia interferométrica, onde a partícula se comporta como um feixe de fótons que se desloca através das ligações da rede, e cada vértice funciona como um divisor de feixe de um interferômetro ótico, que permite a passagem de parte dos fótons e reflete o restante. Podemos ainda enxergar cada vértice como sendo um centro espalhador, assim ao chegar por uma aresta em um vértice a partícula é espalhada (com certas probabilidades de ser transmitida e de ser refletida, determinada por amplitudes quânticas específicas). Esses dois modelos de caminhadas, apesar de terem representações (vértices e arestas) contrastantes, são unitariamente equivalentes, pois sempre existe uma transformação unitária que mapeia os estados de um no outro (tal resultado foi demonstrado recentemente na referência [27]).

Um enfoque que também é proposta deste trabalho é salientar similaridades e distinções entre os casos clássicos e quânticos. Na verdade, como já mencionamos, as caminhadas quânticas foram introduzidas como uma proposta de analogia quântica às caminhadas clássicas. Entretanto existem algumas diferenças entre esses modelos. Por exemplo, o caso clássico é definido em termos das probabilidades da partícula se deslocar para uma dada direção a cada passo de tempo. Além disso, a partícula está sempre em um lugar específico do espaço (embora só saibamos as probabilidades de sua localização). Já o caso quântico é descrito em termos de amplitudes de probabilidades, isto por exemplo, permite que o sistema se encontre em uma superposição de estados que podem descrever posições diferentes. Outro aspecto importante que diferencia o quântico do clássico é como evoluem ao longo do tempo. Nas caminhadas aleatórias clássicas, o sistema é governado por transformações estocásticas. Já nas caminhadas quânticas o sistema, quando isolado, evolui de maneira unitária, ou seja, para o caso quântico dado um estado final, é possível determinar qual era seu estado inicial, o que não ocorre no caso clássico. Outro ponto interessante é a dispersão na posição, Δr . Enquanto para as caminhadas aleatórias clássicas a dispersão escala com $\Delta r \sim \sqrt{t}$, para as caminhadas quânticas num grande número de situações é proporcional ao tempo, $\Delta r \sim t$.

Apesar do grande número de trabalhos sobre caminhadas quânticas e sobre suas duas mais importantes formulações discretas, moeda e espalhamento, e também da demonstração de que tais formulações podem ser mapeadas entre si, quase nada existe na literatura explorando esta equivalência. Além disso, em geral as construções são feitas para amplitudes de transição que tenham o mesmo valor ao longo de toda a rede, e um formalismo

mais geral raramente é proposto. Finalmente, diferentes aspectos de redes regulares (mais simples de construir) via de regra não são bem explorados e discutidos. Assim, como um primeiro passo tentando sanar os pontos acima, a presente dissertação tem por objetivos construir uma descrição matemática geral para grafos regulares, descrever em detalhes três casos representativos, redes lineares, quadradas e hexagonais, e comparar a evolução nestas topologias usando os modelos moeda e espalhamento. De forma mais concreta, o trabalho está organizado da seguinte maneira: no capítulo 2 fazemos uma rápida introdução sobre teoria de grafos e discutimos brevemente as caminhadas aleatórias clássicas; no capítulo 3 abordamos os dois modelos de caminhadas quânticas para uma rede linear; no capítulo 4 desenvolvemos o método geral para implementar as caminhadas quânticas em tempo discreto em grafos simples com topologias arbitrárias, particularizamos tal metodologia para redes regulares, além de discutir a equivalência unitária entre os modelos de moeda e de espalhamento; no capítulo 5 implementamos e exemplificamos as caminhadas quânticas na rede quadrada; no capítulo 6 desenvolvemos duas versões para implementar as caminhadas quânticas na rede hexagonal; no capítulo 7 implementamos as formulações desenvolvidas para a rede hexagonal, além de analisar e discutir algumas caminhadas com trajetórias “tendenciosas”; e no capítulo 8 temos a conclusão deste trabalho.

Grafos e Caminhadas Aleatórias Clássicas

Neste capítulo faremos uma pequena revisão de dois tópicos importantes para entender os diferentes aspectos de caminhadas quânticas. Primeiro, discutiremos alguns conceitos básicos de grafos, que são a base “geométrica” para definirmos caminhadas quânticas. Para maiores detalhes sobre a teoria dos grafos, as seguintes referências introdutórias são indicadas [28–30]. Depois, relembremos as ideias mais elementares de caminhadas aleatórias clássicas. Iniciamos com a caminhada clássica unidimensional usual, que como mostraremos pode ser vista como um processo em uma rede unidimensional. Tal enfoque para o caso clássico é um bom guia no entendimento da construção quântica feita no capítulo 3. Em seguida abordamos de forma resumida caminhadas clássicas em duas dimensões, porém em redes discretas. Para tal, consideramos redes regulares (quadrada e hexagonal) e estenderemos tal conceito para grafos simples genéricos (para o leitor com maior interesse, existem boas referências introdutórias sobre caminhadas aleatórias clássicas e suas generalizações, com destaque para [31–36]).

2.1 Grafos

A teoria dos grafos encontra aplicações em diversas áreas da ciência, por exemplo, na engenharia, na química, na física, entre outras. Na engenharia elétrica ela é usada na análise de circuitos [37], na química para o estudo de compostos químicos [38] e na física na construção de grafos quântico [39].

O conceito de grafo foi introduzido por Leonhard Euler, em 1736, ao mostrar que o problema das pontes de Königsberg não tinha solução. Königsberg (atual Kaliningrado na Rússia) era uma cidade na antiga Prússia cortada pelo rio Pregel. O problema das

pontes Königsberg consistia do desafio, proposto pelos moradores locais, de realizar um trajeto atravessando apenas uma vez as sete pontes que ligavam duas ilhas e as margens do rio e retornar ao ponto de partida [28, 38, 40]. Na Fig. (2.1) temos um esquema das pontes e das ilhas. Euler percebeu que neste problema as distâncias percorridas nos trajetos eram irrelevantes, o importante era como as porções de terra estavam conectadas entre si. Assim, uma maneira de representar o problema é usar o esquema da Fig. (2.2). Esse esquema é um exemplo de grafo onde cada vértice representa uma porção de terra e as arestas representam as sete pontes.

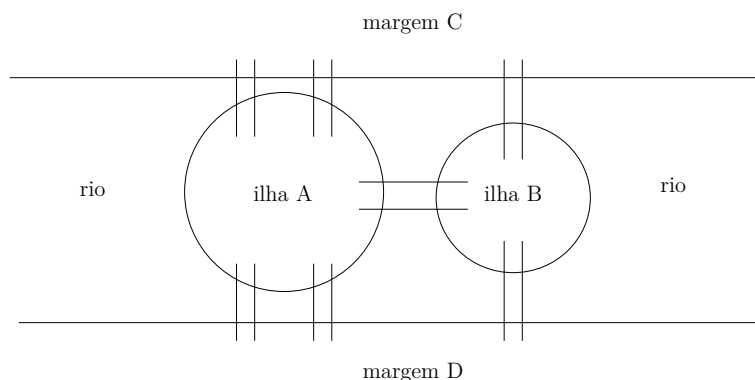


Figura 2.1: Representação das ilhas e as pontes que as ligam entre si e às margens do rio Pregel na cidade de Königsberg.

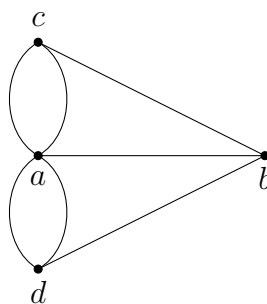


Figura 2.2: Esquema do problema das pontes de Königsberg, onde os vértices a , b , c e d representam respectivamente as ilhas A e B, e as margens C e D e cada aresta está associada a uma ponte.

Para resolver esse problema, Euler procurou descobrir em quais tipos de grafos poderia se fazer um caminho fechado, passando por todas as arestas uma única vez. Esse tipo de caminho foi chamado “passeio de Euler”, e um grafo onde pode se estabelecer um passeio de Euler foi denominado “grafo de Euler”. Portanto, para saber se o problema das pontes de Königsberg tem solução ou não, basta mostrar que o grafo correspondente é ou não um grafo de Euler. Mostraremos na próxima seção que o grafo da Fig. (2.2) não é um grafo de Euler, logo o problema das pontes de Königsberg não tem solução.

2.1.1 Definição

Um grafo G é definido pelos conjuntos V , de N vértices, e E , de M pares de elementos denominados arestas. Denotaremos um grafo por

$$G = (V, E), \quad (2.1)$$

onde

$$V = (v_1, v_2, v_3, \dots, v_N) \quad (2.2)$$

$$E = (e_1, e_2, e_3, \dots, e_M) \quad (2.3)$$

com

$$e_k = (v_i, v_j). \quad (2.4)$$

O grafo da Fig. (2.3) é formado por um conjunto de cinco vértices,

$$V = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5\}$$

e por outro de quatro arestas,

$$E = \{e_1 = (v_1, v_2), e_2 = (v_1, v_3), e_3 = (v_1, v_4), e_4 = (v_1, v_5)\}.$$

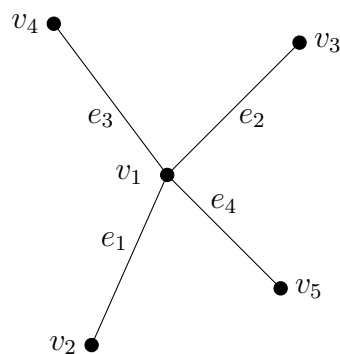


Figura 2.3: Exemplo de um grafo com $N=5$ e $M=4$.

2.1.2 Adjacências

Dois vértices de um grafo são ditos adjacentes se existe pelo menos uma aresta unindo-os, da mesma forma duas arestas são adjacentes se elas estão ligadas em um mesmo vértice.

Na Fig. (2.3) os vértices v_2, \dots, v_5 são adjacentes a v_1 e as arestas, e_1, \dots, e_4 são adjacentes entre si. A maneira que os vértices estão conectados em um grafo pode ser descrita pela matriz adjacência, $A(G)$ de dimensões $N \times N$, cujos elementos são:

$$A_{v_i, v_j} = A_{v_j, v_i} = \begin{cases} m, & \text{se } v_i \neq v_j, \text{ onde } v_i \text{ e } v_j \text{ estão conectados por } m \text{ ligações;} \\ 2m, & \text{se } v_i = v_j, \text{ e existem } m \text{ laços no vértice } v_j; \\ 0, & \text{se } v_i \text{ e } v_j \text{ não estão conectados.} \end{cases} \quad (2.5)$$

As Eqs. (2.6) e (2.7) exemplificam a construção das matrizes adjacências dos grafos do problema das pontes de Königsberg, Fig. (2.2) e para o caso da Fig. (2.3),

$$A(G) = \begin{pmatrix} A_{a,a} & A_{a,b} & A_{a,c} & A_{a,d} \\ A_{b,a} & A_{b,b} & A_{b,c} & A_{b,d} \\ A_{c,a} & A_{c,b} & A_{c,c} & A_{c,d} \\ A_{d,a} & A_{d,b} & A_{d,c} & A_{d,d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

$$A(G) = \begin{pmatrix} A_{v_1, v_1} & A_{v_1, v_2} & A_{v_1, v_3} & A_{v_1, v_4} & A_{v_1, v_5} \\ A_{v_2, v_1} & A_{v_2, v_2} & A_{v_2, v_3} & A_{v_2, v_4} & A_{v_2, v_5} \\ A_{v_3, v_1} & A_{v_3, v_2} & A_{v_3, v_3} & A_{v_3, v_4} & A_{v_3, v_5} \\ A_{v_4, v_1} & A_{v_4, v_2} & A_{v_4, v_3} & A_{v_4, v_4} & A_{v_4, v_5} \\ A_{v_5, v_1} & A_{v_5, v_2} & A_{v_5, v_3} & A_{v_5, v_4} & A_{v_5, v_5} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Observe que as matrizes são simétricas, os elementos da diagonal principal são nulos, pois não há laços nos vértices desses grafos. Na matriz da Eq. (2.6) temos elemento com valor 2 pois existem vértices com duas ligações no grafo correspondente, Fig. (2.2).

Para simplificar a construção das caminhadas quânticas, nesta dissertação não vamos considerar grafos com vértices que possuem laços ou com pares de vértices com mais de uma ligação entre si (pares de vértice com múltiplas ligações em paralelo), neste caso a expressão dos elementos da matriz adjacência se reduz a

$$A_{v_i, v_j} = A_{v_j, v_i} = \begin{cases} 1, & \text{se } v_i \neq v_j \text{ estão conectados por uma aresta;} \\ 0, & \text{se } v_i \text{ e } v_j \text{ não estão conectados ou } v_i = v_j. \end{cases} \quad (2.8)$$

Define-se o grau, g_{v_i} , de um vértice v_i como sendo o número de arestas ligadas a ele (número de ligações que ele faz com sua vizinhança), e ele pode ser determinado em termos dos elementos da matriz adjacência,

$$g_{v_i} = \sum_{j=1}^N A_{v_i, v_j}. \quad (2.9)$$

onde N é o número total de vértices.

O número M de arestas em um grafo também pode ser dado em função dos elementos da matriz adjacência,

$$M = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N A_{v_i, v_j}. \quad (2.10)$$

Por exemplo, é fácil constatar das Eqs. (2.6) e (2.9) que o vértice a grafo da Fig. (2.2) possui grau cinco $g_a = 5$ e das Eqs. (2.6) e (2.10) que tal grafo possui sete ligações entre seus vértices, $M = 7$.

Voltando ao problema das pontes de Königsberg, para demonstrar que ele não tem solução vamos usar o seguinte teorema:

Teorema 2.1.1 *Um grafo conexo G é um grafo de Euler se e somente se todos os seus vértices são de grau par.*

Para provar o teorema (2.1.1), percebemos que se G é um grafo que admite um caminho de Euler, então para cada vértice que visitarmos devemos ter um par de aresta, uma para entrar e outra para sair dele. Assim se um vértice tiver m arestas, com m par, podemos entrar e sair $m/2$ vezes desse vértice por arestas distintas. Caso um vértice tiver m arestas, com m ímpar, podemos entrar $m/2$ vezes por arestas diferentes nesse vértice, mas só poderemos sair $(m-1)/2$ vezes sem caminhar sobre uma aresta já visitada. Assim o caminho não pode prosseguir, uma vez que vamos cruzar uma aresta mais de uma vez. Logo para um grafo G admitir um caminho de Euler todos os seus vértices devem ter grau par.

Analisando o grafo que representa o problema das pontes de Königsberg, Fig. (2.2), observa-se que todos os vértices possuem grau ímpar, logo ele não admite um caminho de Euler. Isso significa que o problema não possui solução.

2.1.3 Isomorfismo

Dois grafos, $G_1(V, E)$ e $G_2(W, F)$, são ditos isomorfos quando existe uma correspondência biunívoca para cada elemento dos grafos, ou seja, para cada vértice e aresta de G_1 existe um vértice e uma aresta correspondente em G_2 , levando-se em conta o grau de cada vértice. Além disso as matrizes adjacência $A(G_1)$ e $A(G_2)$ podem ser levadas uma na outra por simples trocas de linhas e/ou colunas.

A Fig. (2.4) apresenta um exemplo de dois grafos isomorfos. Levando em conta o

grau de cada vértice em ambos os grafos, eles podem ser mapeados um no outro através das relação de correspondências dadas na Fig. (2.5).

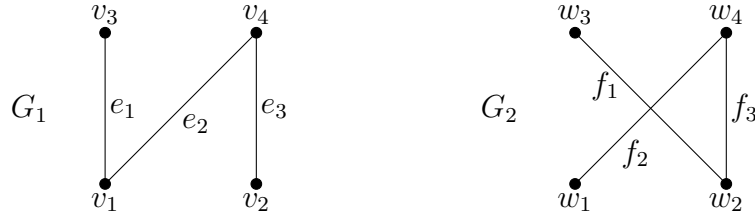


Figura 2.4: Exemplo de grafos isomórfos

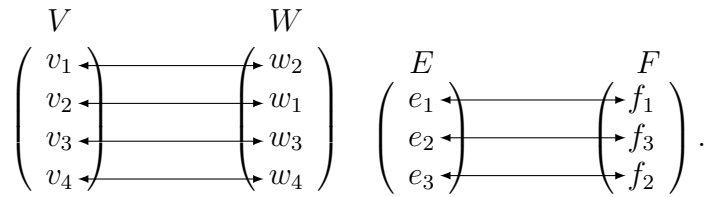


Figura 2.5: Correspondências para mapear os grafos da Fig. (2.4).

As matrizes adjacências para os grafos da Fig. (2.4) são dadas por

$$A(G_1) = \begin{pmatrix} A_{v_1,v_1} & A_{v_1,v_2} & A_{v_1,v_3} & A_{v_1,v_4} \\ A_{v_2,v_1} & A_{v_2,v_2} & A_{v_2,v_3} & A_{v_2,v_4} \\ A_{v_3,v_1} & A_{v_3,v_2} & A_{v_3,v_3} & A_{v_3,v_4} \\ A_{v_4,v_1} & A_{v_4,v_2} & A_{v_4,v_3} & A_{v_4,v_4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

$$A(G_2) = \begin{pmatrix} A_{w_1,w_1} & A_{w_1,w_2} & A_{w_1,w_3} & A_{w_1,w_4} \\ A_{w_2,w_1} & A_{w_2,w_2} & A_{w_2,w_3} & A_{w_2,w_4} \\ A_{w_3,w_1} & A_{w_3,w_2} & A_{w_3,w_3} & A_{w_3,w_4} \\ A_{w_4,w_1} & A_{w_4,w_2} & A_{w_4,w_3} & A_{w_4,w_4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Trocando a primeira coluna pela segunda e depois trocando a segunda linha pela primeira, a matriz adjacência $A(G_2)$ é levada na matriz adjacência $A(G_1)$,

$$A(G_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{C_1 \leftrightarrow C_2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{L_2 \leftrightarrow L_1} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = A(G_1).$$

2.1.4 Tipos de Grafos

Existe uma grande variedade de grafos, porém vamos nos concentrar apenas nos grafos simples, regulares e completos.

Um grafo é dito simples quando cada par de vértices adjacentes estão conectados por apenas uma aresta e eles não possuem laços. Além disso, uma característica dos grafos simples é que os elementos de matriz $A_{v_i, v_j} \in \{0, 1\}$ com os elementos de sua diagonal principal nulos, $A_{v_i, v_i} = 0$.

Os grafos regulares são grafos simples, onde cada vértice possui o mesmo grau (número de ligações). Um grafo simples é completo quando cada par de vértices possui uma ligação, ou seja, cada vértice está ligado a todos os outros vértices do grafo. Pode-se mostrar que um grafo completo que possui N vértices, o número de aresta é dado por $N(N - 1)/2$ arestas. As Figs. (2.6) são exemplos de um grafo simples, um regular e um completo.

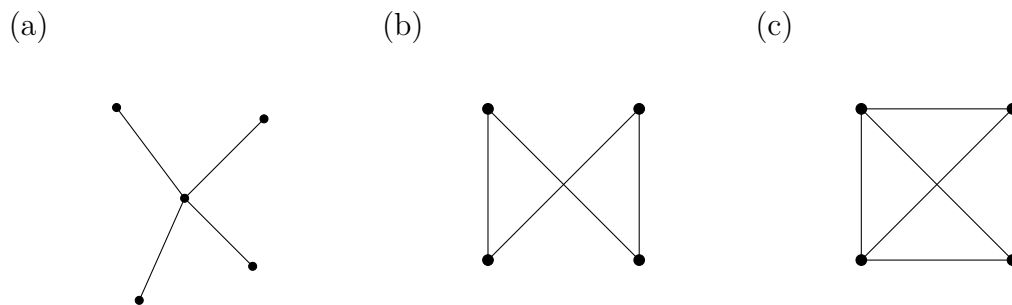


Figura 2.6: Exemplos de um grafo em (a) simples, (b) regular e (c) completo. Observe que todo grafo completo é regular e simples, e todo grafo regular é simples.

2.1.5 Redes Regulares

Redes são sistemas cujos elementos possuem ligações entre si, elas podem ser físicas: por exemplo, a instalação elétrica de uma casa, onde cada tomada, interruptor e lâmpadas são elemento conectados pelos fios que conduzem a eletricidade; ou podem ser virtuais: por exemplo, as redes sociais na internet que conectam pessoas por vínculos de amizade, de parentesco, de trabalho, etc. No entanto essas redes sempre podem ser representadas por grafos, onde cada elemento das redes são os vértices e as ligações entre eles são as arestas do grafo.

Definimos uma rede como sendo regular quando ela contém uma determinada estrutura que se repete de maneira ordenada, veja a Tab. (2.1). Um aspecto interessante das redes regulares bidimensionais é que existem apenas três maneiras de recobrir o plano utilizando um mesmo tipo de polígono regular dispostos lado a lado, sem superpô-los.

Isto pode ser feito utilizando apenas triângulos equiláteros, quadrados ou hexágonos [41].

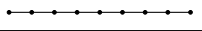

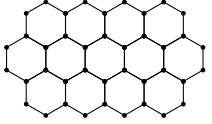

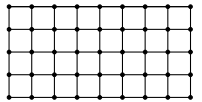

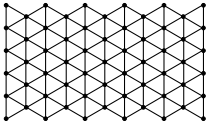

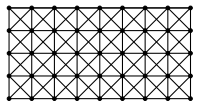

Nome da Rede	Rede	Estrutura Base	Grau dos Vértices
Linear			2
Hexagonal			3
Quadrada			4
Triangular			6
Quadrada-diagonal			8

Tabela 2.1: Exemplos de redes regulares bidimensionais com todos os vértices de mesmo grau.

2.2 Caminhadas Aleatórias Clássicas

As caminhadas aleatórias clássicas, além de serem o análogo clássico das caminhadas quânticas, constituem uma classe de sistemas extremamente estudada em física, apresentando uma fenomenologia muito rica, além de possuir uma gama enorme de aplicações; desde de genética populacional (por exemplo, no estudo de propriedades estatísticas de deriva genética [42]); até na descrição de polímeros [43, 44]; e nos fundamentos de uma ciência muito recente, Econofísica [45]. Historicamente, foi usada no entendimento do movimento browniano, e hoje em dia sendo um elemento chave na compreensão de processos difusivos arbitrários [46, 47].

2.2.1 Caminhadas Aleatórias Clássicas Unidimensionais

Considere um sistema formado por uma partícula clássica que está se movendo em uma reta, partindo da posição inicial $x_0 = 0$ em $t_0 = 0$. A cada intervalo de tempo τ , ela percorre uma distância L com velocidade de módulo constante v . Nas posições $x_j = jL$, onde j é um número inteiro, aleatoriamente (e instantaneamente) a partícula pode mudar o sentido de propagação, assim existe uma probabilidade p de sua velocidade ser $\vec{v} = v\hat{e}_x$ e $q = 1 - p$ de ser $-\vec{v} = -v\hat{e}_x$.

Para descrever a mudança no sentido de propagação da partícula nas posições $x_j = jL$ a cada instante de tempo $t_k = k\tau$, onde $k = 1, 2, 3, \dots$, introduzimos as variáveis aleatórias independentes σ_k , que podem assumir os valores ± 1 conforme a escolha do novo sentido de propagação. Se $\sigma_k = +1$ a partícula vai se propagar no sentido \hat{e}_x , caso contrário $\sigma_k = -1$ ela vai se mover no sentido $-\hat{e}_x$.

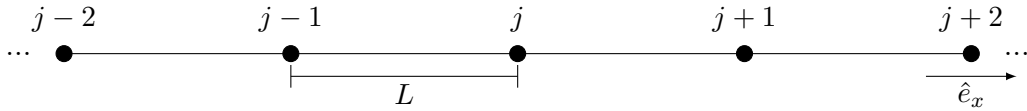


Figura 2.7: A propagação da partícula pode ser encarada como dois processos: (i) um puramente estocástico (escolha das direções), que ocorre nos “sítios da rede” jL ; e (ii) outro puramente determinístico (movimento balístico), que ocorre ao longo das “ligações da rede”.

A probabilidade, $P(m, n)$, de encontrar a partícula a uma distância mL da origem após n passos de tempo τ pode ser determinada utilizando a relação de recorrência

$$P(m, n) = pP(m + 1, n - 1) + qP(m - 1, n - 1), \quad (2.13)$$

e as condições iniciais

$$P(0, 0) = 1 \text{ e } P(m \neq 0, 0) = 0. \quad (2.14)$$

Assim pode-se mostrar que

$$P(m, n) = \begin{cases} \frac{n!}{\left(\frac{n+m}{2}\right)!\left(\frac{n-m}{2}\right)!} p^{(n+m)/2} q^{(n-m)/2}, & \text{se } m = -n, -n + 2, \dots, n - 2, -n; \\ 0 & \text{se } m \neq -n, -n + 2, \dots, n - 2, -n. \end{cases} \quad (2.15)$$

Outros resultados importantes são o valor médio, $\langle x \rangle$, e a dispersão, Δx da posição da partícula. Pode-se mostrar analiticamente que

$$\langle x \rangle = \sum_m P(m, n) mL = n(p - q)L \quad (2.16)$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\left(\sum_m P_n(m) m^2 - \left(\sum_m P_n(m) m \right)^2 \right) L^2} = (2\sqrt{pqn}) L \quad (2.17)$$

No gráfico da Fig. (2.8) temos a evolução de três caminhadas, com $L = \tau = 1$, em função do número de passos de tempo, n , e considerando-se que partícula tem probabilidades iguais de ir para esquerda ou direita a cada passo de tempo, ou seja, $p = q = 0,5$. Na Fig. (2.9) apresenta a distribuição de probabilidades dada pela Eq.(2.15) após 100 passos

de tempo em função das posições, m , da partícula. A distribuição de probabilidades tem a forma de uma função gaussiana centrada na posição $x_0 = 0$, que é o valor médio da posição da partícula para qualquer instante de tempo, veja a Eq. (2.16). Finalmente a dispersão na posição, que é dada por $\Delta x = \sqrt{n}$, está disposta no gráfico da Fig. (2.10).

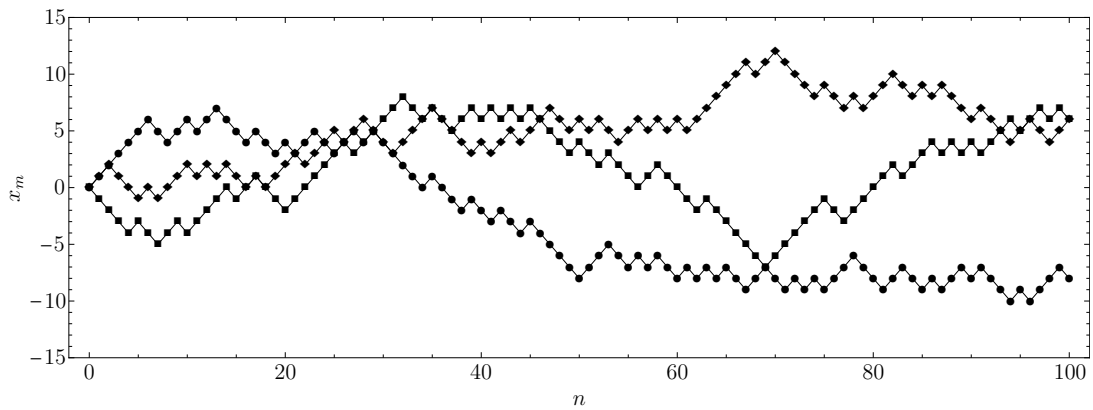


Figura 2.8: Trajetória da evoluções de três caminhadas aleatórias clássicas.

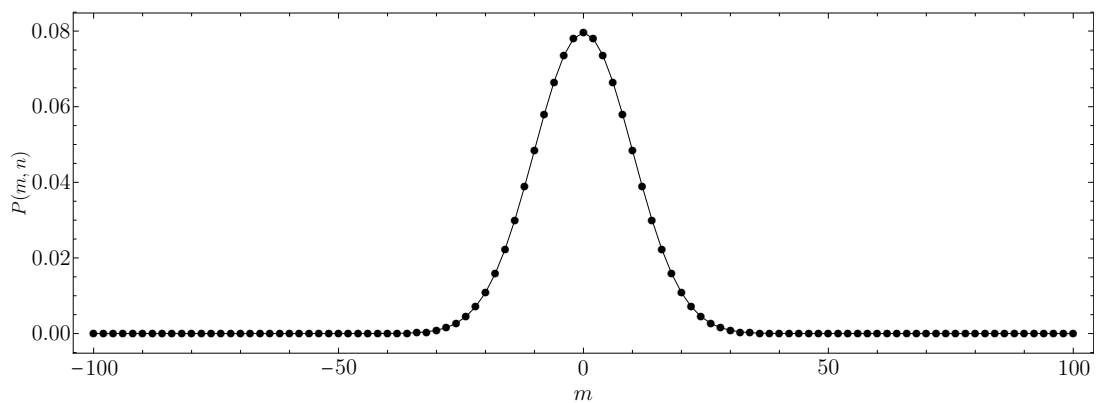


Figura 2.9: Distribuição de probabilidades para a caminhada aleatória após 100 passos de tempo e com $p = q = 0,5$. Apenas as probabilidades para m par foram plotadas.

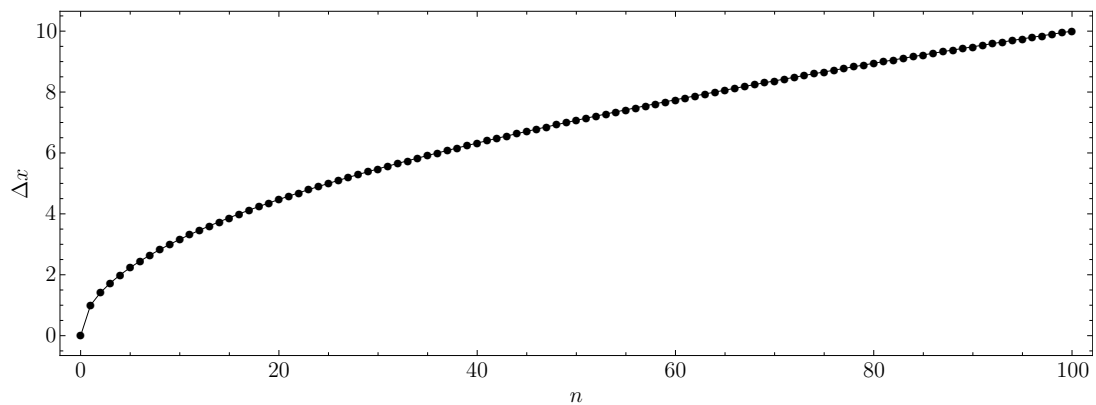


Figura 2.10: Dispersão Δx em função das etapas de tempo n para $p = q = 0.5$.

2.2.2 Caminhadas Aleatórias Clássicas Bidimensionais

Rede Quadrada

As caminhadas aleatórias clássicas na rede quadrada podem ser consideradas como uma extensão natural do caso unidimensional. Considere uma partícula movendo-se através dos vértices de uma rede quadrada, cujo espaçamento entre dois vértices adjacentes nas direções x ou y é fixa e vale L , Fig. (2.11a). Portanto as coordenadas de cada vértice são dadas por $(x_j = jL, y_k = kL)$, onde j e k são números inteiros.

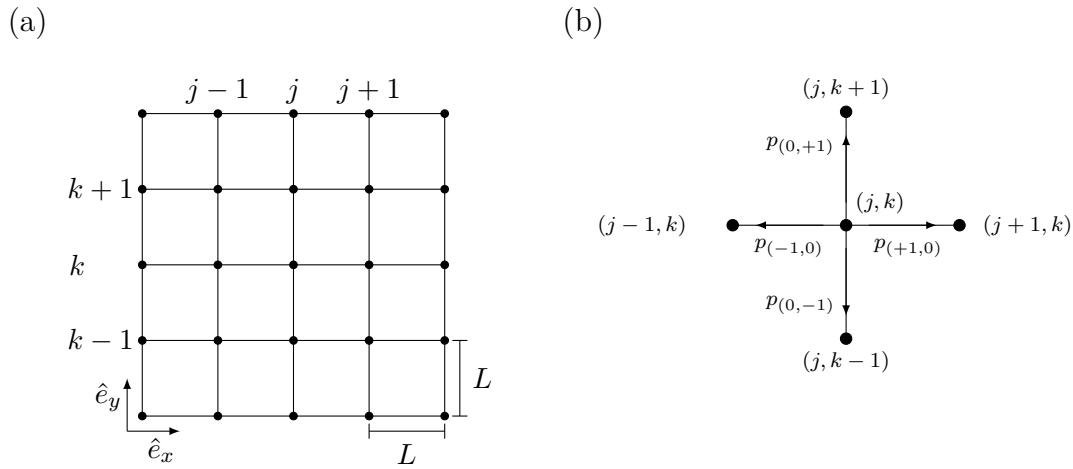


Figura 2.11: (a) Definições geométricas da rede quadrada. (b) Definições das probabilidades de transições da partícula no vértice (j, k) para os seus vértices adjacentes.

A cada passo de tempo fixo, τ , a partícula salta aleatoriamente para um vértice adjacente à sua posição atual. Esse processo, como no caso unidimensional, pode ser representado por pares de variáveis aleatórias $(\sigma_t^{(x)}, \sigma_t^{(y)})$ que podem assumir os valores $\{(-1, 0), (+1, 0), (0, -1), (0, +1)\}$. A escolha do par de variáveis aleatórias $(\sigma_t^{(x)}, \sigma_t^{(y)})$ está condicionada às probabilidades de transição $p_{(\alpha, \beta)}$ entre dois vértices adjacentes, de acordo com a definição da Fig. (2.11b), e que assumimos serem independentes dos vértices da rede e que devem satisfazer

$$\sum_{\sigma=\pm 1} (p_{(\sigma, 0)} + p_{(0, \sigma)}) = 1 \text{ e } p_{(\alpha, \beta)} \geq 0. \quad (2.18)$$

Se a partícula partir da origem do sistema a distribuição de probabilidades $P((j, k), n)$ de encontrar a partícula em um dado sítio (j, k) no instante de tempo n pode ser determinada através das condições iniciais

$$P((0, 0), 0) = 1 \text{ e } P((j \neq 0, k \neq 0), 0) = 0, \quad (2.19)$$

e da relação de recorrência

$$P((j, k), n) = \sum_{\sigma=\pm 1} \left(p_{(\sigma, 0)} P((j - \sigma, k), n - 1) + p_{(0, \sigma)} P((j, k - \sigma), n - 1) \right). \quad (2.20)$$

Finalmente, lembrando que no plano uma posição qualquer pode ser indicada pelo vetor

$$\vec{r} = x\hat{e}_x + y\hat{e}_y, \quad (2.21)$$

o valor médio e a dispersão das posições podem dados, respectivamente, por

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} \rangle &= \langle x \rangle \hat{e}_x + \langle y \rangle \hat{e}_y \\ \langle \vec{r} \rangle &= \sum_{j,k} P((j, k), n) (x_j(n)\hat{e}_x + y_k(n)\hat{e}_y) \\ \langle \vec{r} \rangle &= \sum_{j,k} P((j, k), n) (j\hat{e}_x + k\hat{e}_y) L, \end{aligned} \quad (2.22)$$

$$\begin{aligned} \Delta r &= (\langle \vec{r} \cdot \vec{r} \rangle - \langle \vec{r} \rangle \cdot \langle \vec{r} \rangle)^{\frac{1}{2}} \\ \Delta r &= \left(\sum_{j,k} P((j, k), n) ([x_j(n)]^2 + [y_k(n)]^2) - \left(\sum_{j,k} P((j, k), n) x_j(n) \right)^2 - \left(\sum_{j,k} P((j, k), n) y_k(n) \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ \Delta r &= \left(\sum_{j,k} P((j, k), n) (j^2 + k^2) - \left(\sum_{j,k} P((j, k), n) j \right)^2 - \left(\sum_{j,k} P((j, k), n) k \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} L. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Exemplo Numérico de uma Caminhada Aleatória Clássica na Rede Quadrada

Para este exemplo vamos assumir a distância característica da rede $L = 1$, o intervalo de tempo fixo $\tau = 1$, e que as probabilidades da partícula saltar de um sítio para outro são $p_{(\alpha, \beta)} = 1/4$. Na Fig. (2.17) representamos a evolução da trajetória de uma caminhada após 1.000 passos de tempo, sob tais condições, em que cada segmento de reta representa um ou mais saltos que a partícula executa entre os vértices conectados por eles a cada etapa de tempo.

Após 100 passos de tempo, levando em conta as condições iniciais dadas pela Eq. (2.19) e a relação de recorrência da Eq. (2.20), determinamos numericamente a distribuição de probabilidades para esta caminhada, apresentada no gráfico da Fig. (2.13). Tal distribuição tem um formato de uma distribuição gaussiana centrada no ponto $(0, 0)$, como no caso unidimensional. Além disso, o valor médio e a dispersão das posições tam-

bém seguem o caso linear: com $|\langle \vec{r} \rangle| = 0$ e $\Delta r = \sqrt{n}$. Na Fig (2.14) temos o gráfico da dispersão das posições em função das etapas de tempo.

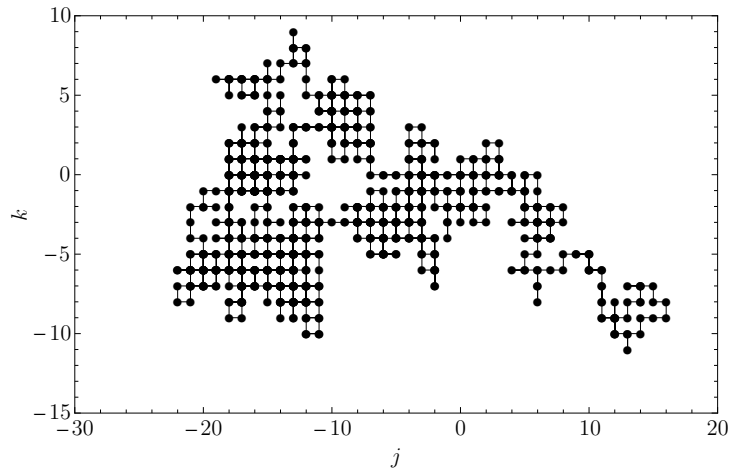


Figura 2.12: Trajetória de uma caminhada aleatória clássica na rede quadrada após 1.000 passos de tempo.

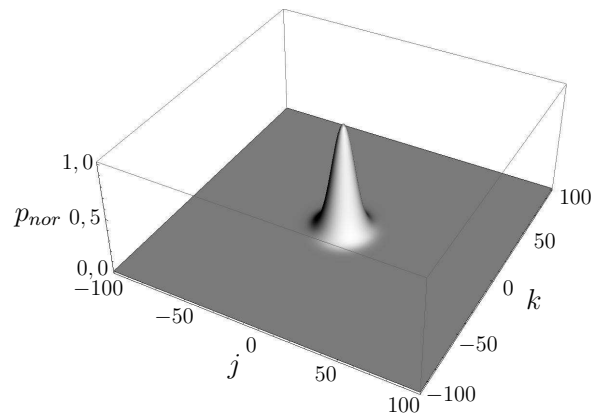


Figura 2.13: Distribuição de probabilidades normalizadas após 100 passos de tempo para uma caminhada aleatória na rede quadrada. Estão apresentadas apenas as probabilidades para os sítios (j, k) com $j + k$ par, pois as probabilidades dos sítios (j, k) com $j + k$ ímpar são nulas.

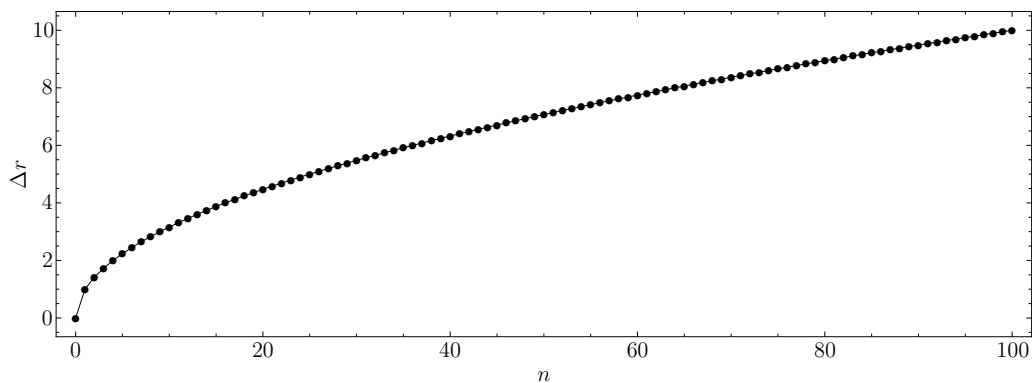


Figura 2.14: Dispersão das posições em função das etapas tempo n .

Rede Hexagonal

Vamos discutir brevemente a implementação das caminhadas aleatórias clássicas na rede hexagonal. Na Fig. (2.15) temos as definições dos rótulos dos vértices das probabilidades de transição entre dois sítios adjacentes, onde associamos aos vértices os pares ordenado (j, k) , relacionados às direções x e y . Analisando a Fig. (2.15), observamos que nem todos os pares de (j, k) representam um sítio, pois a rede hexagonal não é uma rede de Bravais em duas dimensões [48]. Sem perda de generalidade, vamos adotar a seguinte convenção de nomenclatura: se k é par, os vértices (j, k_{par}) são aqueles que possuem arestas apontando para as direções norte, sudoeste e sudeste; já se k é ímpar, os vértices (j, k_{impar}) têm arestas indicando o sul, nordeste e noroeste. Assim os vértices com k_{par} e k_{impar} representam dois conjuntos de vértices distintos.

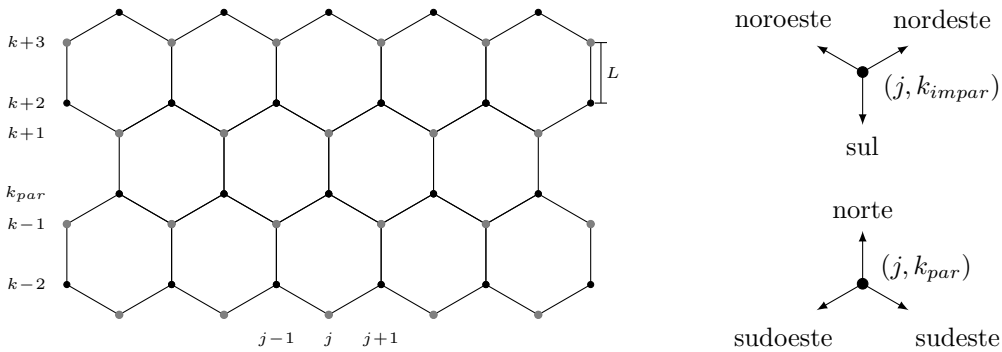


Figura 2.15: (a) Definições geométricas da rede hexagonal, observe que a distância entre dois vértices adjacentes é L . Os vértices pretos, que possuem coordenadas (j, k_{par}) , e os vértices cinzas, possuem coordenadas (j, k_{impar}) , representam os dois conjuntos de sítios não equivalentes que compõem a rede.

A Fig. (2.16) representa as probabilidades de transição entre dois vértices, que devem obedecer as seguintes condições:

$$p_{(-1,+1)} + p_{(+1,+1)} + p_{(0,-1)} = p_{(-1,-1)} + p_{(+1,-1)} + p_{(0,+1)} = 1, \quad p_{(\alpha,\beta)} \geq 0. \quad (2.24)$$

A cada passo de tempo a partícula salta aleatoriamente de um vértice para outro e, assim como no caso da rede quadrada, esse processo pode ser descrito por pares de variáveis aleatórias $(\sigma_l^{(x)}, \sigma_l^{(y)})$ independentes que assumem os valores $\{(0, +1), (-1, -1), (+1, -1)\}$, se k for par, e $\{(0, -1), (-1, +1), (+1, +1)\}$, se k for ímpar. Obviamente a escolha dos valores dessas variáveis estão associadas às probabilidades de transição dispostas da Fig. (2.15a).

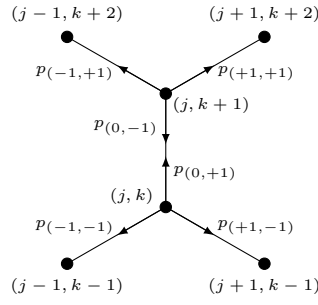


Figura 2.16: Definições das probabilidades de transições da partícula nos vértices (j, k) e $(j, k + 1)$ para seus vértices adjacentes.

A distribuição de probabilidades após n passos pode ser determinada através das condições iniciais, admitindo-se que a partícula parte do sítio $(0, 0)$,

$$P((0, 0), 0) = 1 \text{ e } P((j \neq 0, k \neq 0), 0) = 0, \quad (2.25)$$

e das relações de recorrência

$$\begin{aligned} P((j, k), n) &= p_{(0,-1)}P((j, k+1), n-1) + p_{(+1,+1)}P((j-1, k-1), n-1) + \\ &\quad + p_{(-1,+1)}P((j+1, k-1), n-1) \quad \text{para } k \text{ par;} \\ P((j, k), n) &= p_{(0,+1)}P((j, k-1), n-1) + p_{(+1,-1)}P((j-1, k+1), n-1) + \\ &\quad + p_{(-1,-1)}P((j+1, k+1), n-1) \quad \text{para } k \text{ ímpar.} \end{aligned} \quad (2.26)$$

Analisando a disposição dos vértices da rede hexagonal no plano cartesiano, vemos que a posição de um sítio rotulado por (j, k) é dada pelo par ordenado (x_j, y_k) , onde

$$x_j = \frac{\sqrt{3}jL}{2}, \quad (2.27a)$$

$$y_k = \frac{1}{4} \left(3k - 4 + \frac{9 + (-1)^{(k+1)}}{2} \right). \quad (2.27b)$$

Observe que a posição do vértice $(j = 0, k = 0)$ está na origem do sistema de coordenadas.

O valor médio e a dispersão na posição são dados por

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} \rangle &= \langle x \rangle \hat{e}_x + \langle y \rangle \hat{e}_y \\ \langle \vec{r} \rangle &= \sum_{j,k} P((j, k), n) (x_j(n) \hat{e}_x + y_k(n) \hat{e}_y), \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\begin{aligned}
\Delta r &= (\langle \vec{r} \cdot \vec{r} \rangle - \langle \vec{r} \rangle \cdot \langle \vec{r} \rangle)^{\frac{1}{2}} \\
\Delta r &= \left(\sum_{j,k} P((j,k),n) ([x_j(n)]^2 + [y_k(n)]^2) - \right. \\
&\quad \left. - \left(\sum_{j,k} P((j,k),n) x_j(n) \right)^2 - \left(\sum_{j,k} P((j,k),n) y_k(n) \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.29)
\end{aligned}$$

Exemplo Numérico de uma Caminhada Aleatória Clássica na Rede Hexagonal

Assim como no exemplo da rede quadrada, vamos assumir que a distância característica da rede seja $L = 1$, o intervalo de tempo fixo $\tau = 1$. Admitindo que as probabilidades da partícula saltar de um sítio para outro são $p_{(\alpha,\beta)} = 1/3$, evoluímos uma caminhada por 1.000 passos de tempo. A Fig. (2.17) representa a evolução dessa trajetória, onde cada segmento de reta representa um ou mais saltos que a partícula executa entre os vértices conectados por eles a cada etapa de tempo.

A distribuição de probabilidades foi determinada numericamente após 100 passos de tempo levando em conta as condições iniciais dadas pela Eq. (2.25) e as relações de recorrência da Eq. (2.26). Tal distribuição está representada no gráfico da Fig. (2.18), e possui uma forma gaussiana centrada na posição $(0,0)$. Para o valor médio e a dispersão das posições temos: $|\langle \vec{r} \rangle| = 0$ e $\Delta r = \sqrt{n}$, assim como no caso das redes linear e quadrada; onde calculamos $|\langle \vec{r} \rangle|$ e Δr usando as Eqs. (2.22) e (2.23), respectivamente. Na Fig (2.19) temos o gráfico da dispersão das posições em função das etapas de tempo.

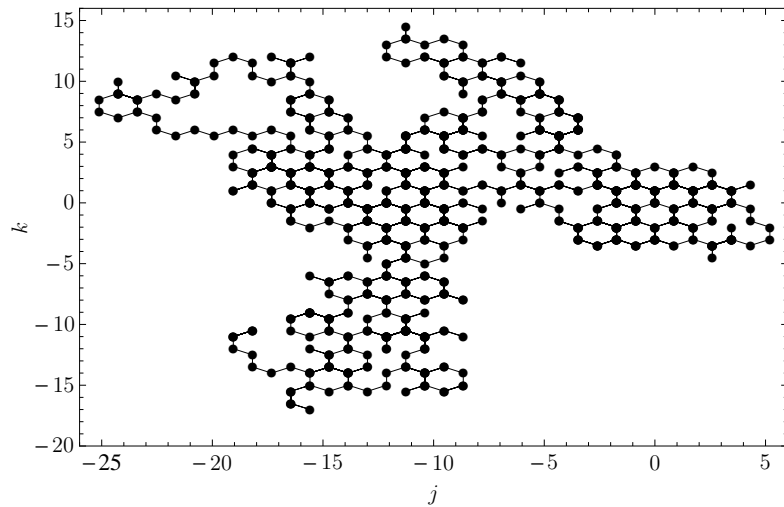


Figura 2.17: Trajetória de uma caminhada aleatória clássica na rede hexagonal após 1.000 passos de tempo.

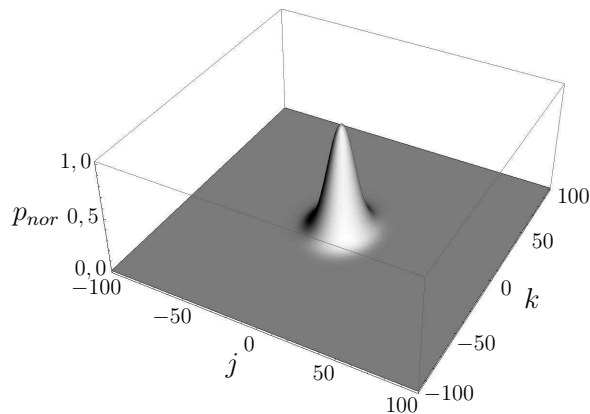


Figura 2.18: Distribuição de probabilidades normalizadas após 100 passos de tempo para uma caminhada aleatória na rede hexagonal. Estão apresentadas apenas as probabilidades para os sítios (j, k) com k par, pois as probabilidades dos sítios (j, k) com k ímpar são nulas.

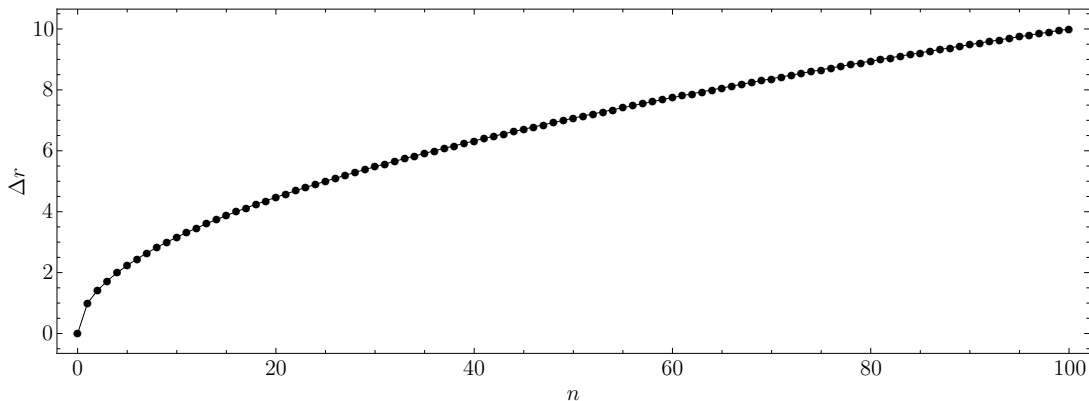


Figura 2.19: Dispersão das posições em função das etapas tempo n .

2.2.3 Caminhadas Aleatórias em Grafos

Considere um grafo simples $G(V, E)$. Define-se uma caminhada aleatória clássica nesse grafo a propagação de uma partícula através dos vértices de G , em passos de tempo discretos, tal que em cada passo a partícula escolhe aleatoriamente e instantaneamente um vértice adjacente ao vértice que ela se encontra para se deslocar.

Assumindo que em um certo instante de tempo, a partícula se encontra no vértice v_i , no passo seguinte ela encontra a probabilidade p_{v_i, v_j} de saltar para o vértice v_j . Levando em conta que a partícula não pode saltar entre vértices que não possuam uma aresta ligando-os, Fig. (2.20), p_{v_i, v_j} pode ser escrito como

$$p_{v_i, v_j} = \begin{cases} p_l^{(v_i)}, & \text{se } A_{v_i, v_j} = 1; \\ 0, & \text{se } A_{v_i, v_j} = 0; \end{cases} \quad (2.30)$$

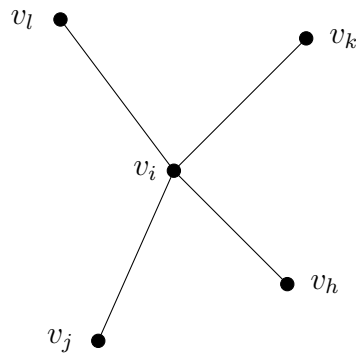


Figura 2.20: Exemplo do um vértice v_i e seu conjunto de vértices adjacentes.

onde A_{v_i, v_j} é um elemento da matriz adjacência dado, pela Eq. (2.8). Além disso, devemos ter

$$\sum_{l=1}^{g_{v_i}} p_l^{(v_i)} = 1, \quad (2.31)$$

onde g_{v_i} é o grau de v_i e $p_l^{(v_i)} \geq 0$.

O valor médio e a dispersão das posições da partícula dependem dos fatores geométricos da rede (disposição de cada vértice, distância entre eles). A probabilidade $P_n(v_j)$ de encontrar a partícula em um dado vértice v_j no instante de tempo n pode ser determinada em termos das condições iniciais e da fórmula de recorrência

$$P(v_j, n) = \sum_i A_{v_i, v_j} p_{v_i v_j} P(v_i, n - 1). \quad (2.32)$$

Caminhadas Quânticas Discretas na Linha

Neste capítulo vamos introduzir o conceito de caminhadas quânticas discretas formulando os dois modelos (moeda e espalhamento) como discutido no capítulo 1. Iniciaremos com o caso mais simples, a versão unidimensional de tais caminhadas, e através da construção e da implementação de exemplos numéricos vamos discutir algumas de suas propriedades.

Para termos uma analogia bem clara entre caminhadas aleatórias clássicas unidimensionais (descrita na seção (2.2.1)) e a versão quântica no caso 1D, vamos supor que o espaço de Hilbert em si do sistema quântico pode ser “visto” como a rede unidimensional do caso clássico.

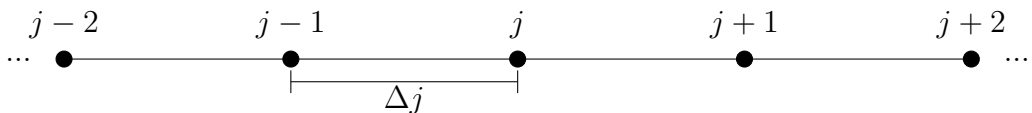


Figura 3.1: Rede unidimensional infinita. Associamos a distância entre dois vértices adjacentes a um comprimento característico Δj , onde $L \rightarrow \Delta j = (j + 1) - j = 1$.

Nas formulações das caminhadas quânticas discretas, o sistema evolui unitariamente em intervalos de tempos discretos, n , tal que,

$$|\psi(n + 1)\rangle = U|\psi(n)\rangle, \tag{3.1}$$

com os estados $|\psi(n)\rangle$ descrevendo o sistema no passo de tempo n e

$$U^\dagger U = U U^\dagger = \hat{\mathbf{1}} \Rightarrow U^\dagger = U^{-1}. \tag{3.2}$$

3.1 Modelo de Caminhada Quântica de Moeda

As caminhadas quânticas em redes unidimensionais no modelo moeda são muito bem discutidas na literatura, veja por exemplo a revisão em [4]. Vamos abordar a situação de maneira geral como feito em [49]. Neste modelo o sistema consiste de uma partícula que se movimenta através dos vértices de uma rede linear infinita. O estado $|j\rangle_p$ descreve a “localização” da partícula na rede, onde o subíndice p indica que tal estado está associado a posição do vértice j . O conjunto de estados $\{|j\rangle_p\}$ constituem um espaço vetorial, \mathcal{H}_p , que descrevem as posições dos sítios que a partícula pode visitar durante a caminhada. Além disso eles formam uma base para \mathcal{H}_p , ou seja,

$${}_p\langle j|j'\rangle_p = \delta_{jj'}, \quad (3.3a)$$

$$\hat{\mathbf{1}}_p = \sum_j |j\rangle_p {}_p\langle j|. \quad (3.3b)$$

A partícula é dotada de graus de liberdade auxiliares (ou de moeda - do inglês “*coin*”) responsáveis em direcionar seus saltos a cada etapa de tempo. Esses graus de liberdade auxiliares são descritos pelos estados $|\sigma\rangle_c$, com $\sigma = \pm 1$. Assim, se no instante de tempo n o estado de posição da partícula é $|j\rangle_p$ no instante posterior, $n + 1$, o novo estado posição será $|j + \sigma\rangle_p$. Finalmente os estados $|\sigma\rangle_c$ formam uma base para espaço vetorial \mathcal{H}_c (espaço de moeda) e obedecem as relações de ortonormalidade e completeza

$${}_c\langle \sigma|\sigma'\rangle_c = \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (3.4a)$$

$$\hat{\mathbf{1}}_c = \sum_{\sigma=\pm 1} |\sigma\rangle_c {}_c\langle \sigma|. \quad (3.4b)$$

Então o sistema é descrito pelos estados $|\sigma, j\rangle$, Fig. (3.2), onde

$$|\sigma, j\rangle = |\sigma\rangle_c \otimes |j\rangle_p \quad (3.5)$$

formam uma base para seu espaço de Hilbert do sistema, \mathcal{H}_{CM} , que é dado por

$$\mathcal{H}_{CM} \equiv \mathcal{H}_c \otimes \mathcal{H}_p. \quad (3.6)$$

Assim, para as relações de completeza e ortonormalidade em \mathcal{H}_{CM} temos

$$\langle \sigma, j|\sigma', j'\rangle = \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (3.7a)$$

$$\hat{\mathbf{1}}_{CM} = \hat{\mathbf{1}}_c \otimes \hat{\mathbf{1}}_p = \sum_j \sum_{\sigma=\pm 1} |\sigma, j\rangle \langle \sigma, j|. \quad (3.7b)$$

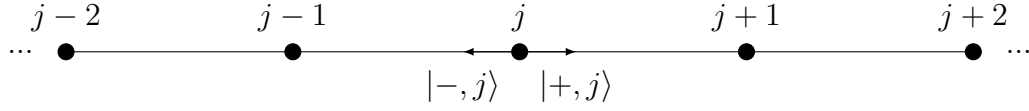


Figura 3.2: Regras para rotular os estados que descrevem as caminhadas quânticas no modelo moeda em uma rede unidimensional.

A cada passo de tempo o sistema evolui de acordo com a operação unitária dada pelo operador

$$U_c = S \times (C^{(j)} \otimes \hat{\mathbf{1}}_p), \quad (3.8a)$$

$$U_c^\dagger = (C^{(j)} \otimes \hat{\mathbf{1}}_p)^\dagger \times S^\dagger, \quad (3.8b)$$

onde S é o operador unitário denominado operador translação condicional, pois dependendo do valor de σ ele pode deslocar a partícula para a direita ou esquerda,

$$S = \sum_{\sigma=\pm 1} |\sigma, j + \sigma\rangle \langle \sigma, j| \quad (3.9a)$$

$$S^\dagger = \sum_{\sigma=\pm 1} |\sigma, j - \sigma\rangle \langle \sigma, j| \quad (3.9b)$$

e $C^{(j)}$ é um operador moeda dado por

$$C^{(j)} = \sum_{\sigma=\pm 1} \sum_{\sigma'=\pm 1} c_{\sigma,\sigma'}^{(j)} |\sigma\rangle_c \langle \sigma'|, \quad (3.10)$$

que atua apenas no espaço de estados \mathcal{H}_c e desempenha a função de “rodar” os estados $|\pm 1\rangle_c$, pois sua ação nesses estados é análoga à rotação de um vetor no plano cartesiano. Além disso ele tem uma função análoga à escolha do sentido de propagação da partícula por variáveis aleatórias a cada etapa de tempo nas caminhadas aleatórias clássicas. Os coeficientes $c_{\sigma,\sigma'}$ são dados em termos dos elementos de matriz de $C^{(j)}$ que, na base $\{|\sigma\rangle_c\}$, pode ser representada por

$$C^{(j)} = \begin{pmatrix} c_{\langle +1|C^{(j)}|+1\rangle_c} & c_{\langle +1|C^{(j)}|-1\rangle_c} \\ c_{\langle -1|C^{(j)}|+1\rangle_c} & c_{\langle -1|C^{(j)}|-1\rangle_c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{++}^{(j)} & c_{+-}^{(j)} \\ c_{-+}^{(j)} & c_{--}^{(j)} \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Levando em conta que os operadores de evolução temporal, U_c , e translação, S , são

unitários, $C^{(j)}$ também tem esta propriedade, que implica na relação

$$\sum_{\sigma=\pm 1} c_{\sigma',\sigma}^{(j)} c_{\sigma'',\sigma}^{(j)*} = \sum_{\sigma=\pm 1} c_{\sigma,\sigma'}^{(j)} c_{\sigma,\sigma''}^{(j)*} = \delta_{\sigma',\sigma''}. \quad (3.12)$$

Uma vez que as mais importantes aplicações das caminhadas quânticas discretas no modelo moeda são em computação quântica, é usual definir os elementos de matriz do operador $C^{(j)}$ de maneira a associá-los aos operadores de portas lógicas quânticas [50]. Isto explica, por exemplo, a frequente escolha na literatura da matriz de Hadamard (fundamental para a manipulação de q-bits). Para compreendermos melhor o papel do operador $C^{(j)}$ vamos fazê-lo independente dos vértices j e dado pela matriz de Hadamard 2×2 ,

$$C^{(j)} = C_{Had} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.13)$$

que, ao atuar nos estados $|\sigma\rangle_c$, produz o seguintes resultados

$$C_{Had}|+1\rangle_c = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+1\rangle_c + |-1\rangle_c)$$

$$C_{Had}|-1\rangle_c = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+1\rangle_c - |-1\rangle_c).$$

os quais podemos escrever simplificadamente como

$$C_{Had}|\sigma\rangle_c = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma|\sigma\rangle_c + |-\sigma\rangle_c). \quad (3.14)$$

A forma mais geral para a matriz que representa o operador moeda, Eq. (3.11), que obedece as relações da Eq. (3.12) e tendo a matriz de Hadamard 2×2 como um caso particular [51–53] é

$$C^{(j)} = e^{i\gamma_j} \begin{pmatrix} e^{i\xi_j} \cos(\theta_j) & e^{i\zeta_j} \sin(\theta_j) \\ e^{-i\zeta_j} \sin(\theta_j) & -e^{-i\xi_j} \cos(\theta_j) \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

Finalmente, combinando as Eqs. (3.8), (3.9a), (3.10) e usando a relação de completeza da pela Eq. (3.3b), o operador evolução temporal se reduz a

$$U_c = \sum_j \sum_{\sigma=\pm 1} \sum_{\sigma'=\pm 1} c_{\sigma,\sigma'}^{(j)} |\sigma, j + \sigma\rangle \langle \sigma', j| \quad (3.16a)$$

$$U_c^\dagger = \sum_j \sum_{\sigma=\pm 1} \sum_{\sigma'=\pm 1} c_{\sigma,\sigma'}^{(j-\sigma)*} |\sigma', j - \sigma\rangle \langle \sigma, j| \quad (3.16b)$$

cuja ação em um estado de base é

$$U_c|\sigma, j\rangle = c_{\sigma\sigma}^{(j)}|\sigma, j + \sigma\rangle + c_{-\sigma, \sigma}^{(j)}|-\sigma, j - \sigma\rangle, \quad (3.17a)$$

$$U_c^\dagger|\sigma, j\rangle = c_{\sigma\sigma}^{(j-\sigma)*}|\sigma, j - \sigma\rangle + c_{\sigma, -\sigma}^{(j-\sigma)*}|-\sigma, j - \sigma\rangle. \quad (3.17b)$$

Combinando as Eqs. (3.15) e (3.17a), obtemos

$$U_c|\sigma, j\rangle = \sigma e^{i(\gamma_j - \sigma\xi_j)} \cos(\theta_j)|\sigma, j + \sigma\rangle + e^{i(\gamma_j - \sigma\xi_j)} \sin(\theta_j)|-\sigma, j - \sigma\rangle. \quad (3.18)$$

3.2 Modelo Espalhamento

As caminhadas quânticas discretas na versão de espalhamento na linha foram introduzidas em [24]. Vamos abordar esse modelo de maneira geral como feito em [49]. Nesta implementação o sistema consiste de uma partícula deslocando-se através das arestas de uma rede linear infinita e sofrendo processos de espalhamento nos vértices a cada passo de tempo. O sistema é descrito pelos estados $|j \pm 1, j\rangle$, que representam o deslocamento da partícula do vértice $j \pm 1$ para o vértice j , Fig. (3.3).

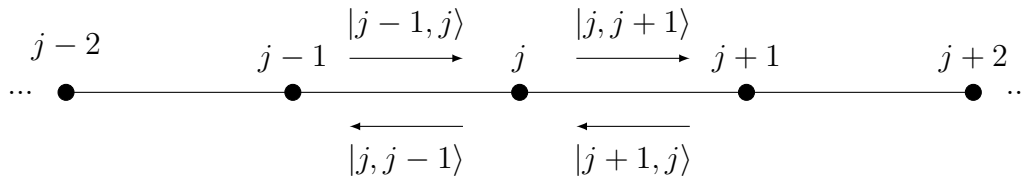


Figura 3.3: Regras para rotular os estados que descrevem as caminhadas quânticas de espalhamento em uma rede unidimensional (convenção usada na referência [24]).

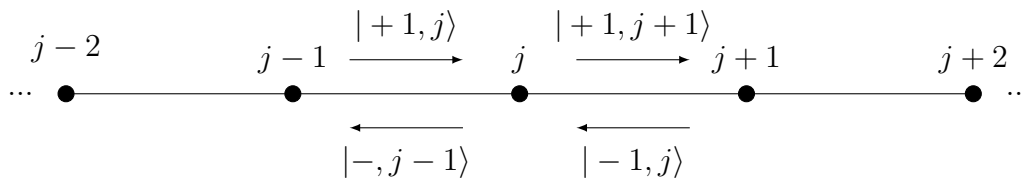


Figura 3.4: Regras para rotular os estados que descrevem as caminhadas quânticas de espalhamento em uma rede unidimensional (convenção usada na referência [49]).

Observe que neste modelo o sistema não necessita de graus de liberdade auxiliares para realizar a caminhada. Assim o espaço de Hilbert \mathcal{H}_{SM} do sistema não é mais o produto direto de dois subespaços, como no caso do modelo de moeda. Para simplificar

a notação dos estados do sistema, vamos adotar a nomenclatura utilizada em [49] de tal forma que

$$|j - \sigma, j\rangle \equiv |\sigma, j\rangle. \quad (3.19)$$

Portanto, os números quânticos $\sigma = \pm 1$ estão associado diretamente com o “sentido” de propagação da partícula ao longo de uma aresta. Se $\sigma = +1$, a partícula está se movendo do vértice $j - 1$ para o vértice j (deslocando-se para a direita); se $\sigma = -1$, a partícula está indo do vértice $j + 1$ para o vértice j (deslocando-se para a esquerda); veja a Fig. (3.4). Além disso, para as relações de ortonormalidade e completiza temos

$$\langle \sigma, j | \sigma', j' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (3.20)$$

$$\hat{\mathbf{1}}_{SM} = \sum_j \sum_{\sigma=\pm 1} |\sigma, j\rangle \langle \sigma, j|. \quad (3.21)$$

A cada etapa de tempo, n , o sistema evolui segundo a transformação unitária dada pelo operador evolução temporal U_s ,

$$U_s = T + R \quad (3.22)$$

onde T e R são os operadores que implementam os processos transmissão e reflexão que a partícula sofre nos vértices da rede. Assim temos

$$T|\sigma, j\rangle = t_{\sigma,\sigma}^{(j)} |\sigma, j + \sigma\rangle, \quad (3.23a)$$

$$R|\sigma, j\rangle = r_{-\sigma,\sigma}^{(j)} |-\sigma, j - \sigma\rangle, \quad (3.23b)$$

$$T^\dagger|\sigma, j\rangle = t_{\sigma,\sigma}^{(j-\sigma)*} |\sigma, j - \sigma\rangle, \quad (3.23c)$$

$$R^\dagger|\sigma, j\rangle = r_{\sigma,-\sigma}^{(j-\sigma)*} |-\sigma, j - \sigma\rangle. \quad (3.23d)$$

Usando a relação de completiza Eq. (3.21), podemos escrever o operador evolução da seguinte forma, com os coeficientes $\Gamma_{\sigma,\sigma'}^{(j)}$ definidos adiante,

$$U_s = \sum_j \sum_{\sigma=\pm 1} \sum_{\sigma'=\pm 1} \Gamma_{\sigma,\sigma'}^{(j)} |\sigma, j + \sigma\rangle \langle \sigma', j|, \quad (3.24a)$$

$$U_s^\dagger = \sum_j \sum_{\sigma=\pm 1} \sum_{\sigma'=\pm 1} \Gamma_{\sigma,\sigma'}^{(j-\sigma)*} |\sigma', j - \sigma\rangle \langle \sigma, j|, \quad (3.24b)$$

cuja ação em um estado de base é

$$U_s|\sigma, j\rangle = \Gamma_{\sigma\sigma}^{(j)}|\sigma, j + \sigma\rangle + \Gamma_{-\sigma, \sigma}^{(j)}|-\sigma, j - \sigma\rangle, \quad (3.25a)$$

$$U_s^\dagger|\sigma, j\rangle = \Gamma_{\sigma\sigma}^{(j-\sigma)*}|\sigma, j - \sigma\rangle + \Gamma_{-\sigma, -\sigma}^{(j-\sigma)*}|-\sigma, j - \sigma\rangle. \quad (3.25b)$$

Comparando as Eqs. (3.23a-b) com a Eq. (3.24a) e analisando a Fig. (3.5), concluímos que:

- se $\sigma' = \sigma$, temos um processo de transmissão, $\Gamma_{\sigma, \sigma}^{(j)} = t_{\sigma, \sigma}^{(j)}$;
- se $\sigma' = -\sigma$, temos um processo de reflexão, $\Gamma_{-\sigma, \sigma}^{(j)} = r_{-\sigma, \sigma}^{(j)}$.

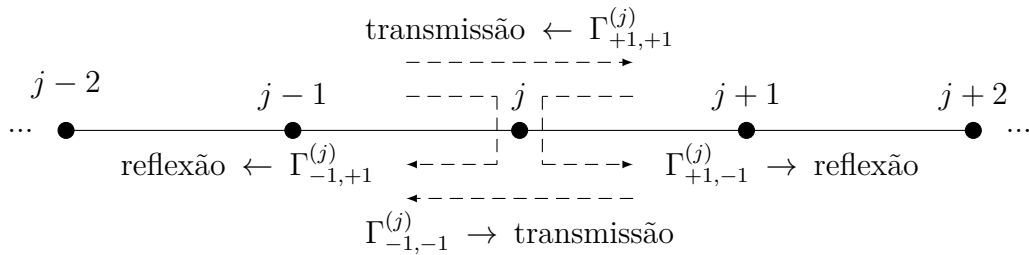


Figura 3.5: Coeficientes de reflexão e transmissão em um dado vértice j .

Da condição de unitariedade do operador evolução temporal, $U_s^\dagger = U_s^{-1}$, pode-se mostrar que os coeficientes $\Gamma_{\sigma, \sigma'}^{(j)}$ devem obedecer as seguintes relações:

$$\sum_{\sigma=\pm 1} \Gamma_{\sigma, \sigma'}^{(j)} \Gamma_{\sigma, \sigma''}^{(j)*} = \sum_{\sigma=\pm 1} \Gamma_{\sigma', \sigma}^{(j)} \Gamma_{\sigma'', \sigma}^{(j)*} = \delta_{\sigma' \sigma''}. \quad (3.26)$$

Para sistemas com reversão temporal, $t_{\sigma, \sigma}^{(j)} = t_{-\sigma, -\sigma}^{(j)}$ [54], as relações dadas pela Eq. (3.26) se reduzem a

$$|t_{\sigma, \sigma}^{(j)}|^2 + |r_{-\sigma, \sigma}^{(j)}|^2 = 1, \quad (3.27a)$$

$$|r_{-\sigma, \sigma}^{(j)}|^2 = |r_{\sigma, -\sigma}^{(j)}|^2, \quad (3.27b)$$

$$r_{\sigma, -\sigma}^{(j)} t_{\sigma, \sigma}^{(j)*} + t_{-\sigma, -\sigma}^{(j)} r_{-\sigma, \sigma}^{(j)*} = 0. \quad (3.27c)$$

Essas são exatamente as relações satisfeitas pelas amplitudes de reflexão e transmissão no problema de espalhamento quântico em uma dimensão [54–58] resultante da unitariedade da matriz de espalhamento S . As Eqs. (3.27) são automaticamente verificadas para qualquer j , se

$$t_{\sigma, \sigma}^{(j)} = \exp[i\lambda_j] \left(\sqrt{1 - \rho_j} \exp[i\sigma\phi_j] \right) \quad (3.28a)$$

$$r_{-\sigma,\sigma}^{(j)} = \exp [i\lambda_j] \left(\sigma \sqrt{\rho_j} \exp [i\sigma\varphi_j] \right) \quad (3.28b)$$

com $0 \leq \rho_j \leq 1$ e $0 \leq \lambda_j, \phi_j, \varphi_j < 2\pi$.

3.3 Determinação das Probabilidades

A projeção é um ingrediente essencial na definição das caminhadas quânticas, que diferem das caminhadas clássicas devido aos efeitos de interferência. Veja por exemplo a referência [59]. Assim as probabilidades, $p_{c,s}^{(j)}$, de encontrar a partícula no j -ésimo vértice (para o modelo de moeda), e na arestas que ligam os vértices $j-1$ e j (para o modelo de espalhamento), no passo de tempo n , podem ser determinadas calculando o valor médio dos projetores $\mathcal{P}_{c,s}^{(j)}$, definidos por:

- modelo de moeda

$$\mathcal{P}_c^{(j)} = \sum_{\sigma=\pm 1} |\sigma, j\rangle \langle \sigma, j|, \quad (3.29)$$

- modelo de espalhamento

$$\mathcal{P}_s^{(j)} = \sum_{\sigma=\pm 1} |\sigma, j + (\sigma - 1)/2\rangle \langle \sigma, j + (\sigma - 1)/2|, \quad (3.30)$$

logo

$$p_{c,s}^{(j)}(n) = \langle \psi(n) | \mathcal{P}_{c,s}^{(j)} | \psi(n) \rangle. \quad (3.31)$$

3.4 Equivalência Unitária

Finalmente pode-se estabelecer uma relação unitária de equivalência entre os dois modelos abordados acima [24, 27]. Primeiro observamos que pode-se estabelecer uma correspondência biunívoca entre os estados de base dos espaços de Hilbert e como mostraremos no capítulo 4, a dimensão de \mathcal{H}_{CM} é igual a dimensão de \mathcal{H}_{SM} . Então, segue diretamente a existência de um operador unitário isomorfo $E : \mathcal{H}_{SM} \rightarrow \mathcal{H}_{CM}$ dado por

$$E|\sigma, j\rangle_{sm} = |\sigma, j\rangle_{cm}, \quad (3.32a)$$

$$E^\dagger|\sigma, j\rangle_{cm} = |\sigma, j\rangle_{sm} \quad (3.32b)$$

onde $|\sigma, j\rangle_{sm}$ e $|\sigma, j\rangle_{cm}$ são respectivamente estados de base dos espaços de Hilbert dos modelos de espalhamento e de moeda.

Segundo, usando as Eqs. (3.32), (3.16a) e (3.24a), pode-se mostrar que os operadores U_c e U_s estão relacionados por

$$U_s = E^\dagger U_c E, \quad (3.33a)$$

$$U_c = E U_s E^\dagger. \quad (3.33b)$$

Para as igualdades da Eq. (3.34) serem verificadas, devemos ter as seguintes relações entre os coeficientes de reflexão e transmissão e os elementos da matriz moeda,

$$c_{\sigma,\sigma}^{(j)} = t_{\sigma,\sigma}^{(j)}, \quad (3.34a)$$

$$c_{-\sigma,\sigma}^{(j)} = r_{-\sigma,\sigma}^{(j)}. \quad (3.34b)$$

Como é conhecido, mesmo sendo os dois modelos das caminhadas quânticas discretas unitariamente equivalentes, as distribuições de probabilidades associadas aos vértices e arestas em geral não são iguais [24], ou seja,

$$\mathcal{P}_s^{(j)} \neq E^\dagger \mathcal{P}_c^{(j)} E, \quad (3.35a)$$

$$\mathcal{P}_c^{(j)} \neq E \mathcal{P}_s^{(j)} E^\dagger. \quad (3.35b)$$

Para visualizar essa situação vamos admitir por exemplo que

$$\mathcal{P}_c^{(j)} = E \mathcal{P}_s^{(j)} E^\dagger, \quad (3.36)$$

com $\mathcal{P}_c^{(j)}$ e $\mathcal{P}_s^{(j)}$ dadas pelas Eqs. (3.29) e (3.30), respectivamente, e que o sistema no modelo moeda se encontra no estado

$$|\psi\rangle_{cm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, j\rangle_{cm} + |-, j\rangle_{cm}). \quad (3.37)$$

Portanto, a probabilidade de encontrar a partícula no vértice j é dada por

$$\begin{aligned} p_c^{(j)} &= {}_{cm}\langle\psi|\mathcal{P}_c|\psi\rangle_{cm} \\ p_c^{(j)} &= {}_{cm}\langle\psi|\left(\sum_{\sigma=\pm 1}|\sigma, j\rangle_{cm} {}_{cm}\langle\sigma, j|\right)|\psi\rangle_{cm} \\ p_c^{(j)} &= \frac{1}{2}\left[({}_{cm}\langle+, j| + {}_{cm}\langle-, j|)\left(\sum_{\sigma=\pm 1}|\sigma, j\rangle_{cm} {}_{cm}\langle\sigma, j|\right)(|+, j\rangle_{cm} + |-, j\rangle_{cm})\right] \\ p_c^{(j)} &= 1. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Agora vamos determinar a probabilidade usando a Eq. (3.36),

$$\begin{aligned}
p_c^{(j)} &= {}_{cm}\langle\psi|\mathcal{P}_c|\psi\rangle_{cm} = {}_{cm}\langle\psi|E\mathcal{P}_sE^\dagger|\psi\rangle_{cm} & (3.39) \\
p_c^{(j)} &= {}_{cm}\langle\psi|E\left(\sum_{\sigma=\pm 1}|\sigma,\frac{j-\sigma}{2}\rangle_{sm}{}_{sm}\langle\sigma,\frac{j-\sigma}{2}| \right)E^\dagger|\psi\rangle_{cm} \\
p_c^{(j)} &= \frac{1}{2}\left[({}_{cm}\langle+,j|+{}_{cm}\langle-,j|)E\left(\sum_{\sigma=\pm 1}|\sigma,\frac{j-\sigma}{2}\rangle_{sm}{}_{sm}\langle\sigma,\frac{j-\sigma}{2}| \right)E^\dagger(|+,j\rangle_{cm}+|-,j\rangle_{cm})\right] \\
p_c^{(j)} &= \frac{1}{2}\left[({}_{sm}\langle+,j|+{}_{sm}\langle-,j|)E\left(\sum_{\sigma=\pm 1}|\sigma,\frac{j-\sigma}{2}\rangle_{sm}{}_{sm}\langle\sigma,\frac{j-\sigma}{2}| \right)E^\dagger(|+,j\rangle_{sm}+|-,j\rangle_{sm})\right] \\
p_c^{(j)} &= \frac{1}{2}.
\end{aligned}$$

Comparando os resultados das Eqs. (3.38) e (3.39), vemos que a expressão da Eq. (3.36) não é verdadeira. Isto ocorre porque estamos escolhendo representações contrastantes, estados associados aos vértices (modelo de moeda) e estados associados as arestas (modelo de espalhamento), para descrever o problema. Por exemplo, os dois estados que correspondem ao sítio j , $|\pm 1, j\rangle_{cm}$, no modelo moeda são mapeados em dois estados em ligações diferentes no modelo de espalhamento, Fig. (3.6). Assim,

$$|+1, j\rangle_{cm} \xrightarrow{E^\dagger} |+1, j\rangle_{sm}$$

corresponde a uma partícula se deslocando entre os vértices $j-1$ para o j , e

$$|-1, j\rangle_{cm} \xrightarrow{E^\dagger} |-1, j\rangle_{sm}$$

corresponde a uma partícula se deslocando entre os vértices $j+1$ para o j . Portanto, a probabilidade de encontrar a partícula em um único vértice não corresponde à probabilidade de encontrar a partícula em uma única aresta.

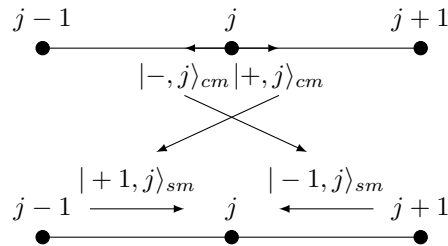


Figura 3.6: Representação geométrica do mapeamento dos estado do modelo de moeda nos estados do modelo de espalhamento.

Embora exista uma equivalência unitária na evolução temporal do sistema nos dois modelos (moeda e espalhamento), Eq. (3.33), eles não são equivalentes na hora de determinarmos as distribuições de probabilidades usando os operadores $\mathcal{P}_c^{(j)}$ e $\mathcal{P}_s^{(j)}$. Contudo esse quadro pode ser contornado simplesmente se definirmos novos operadores de projeção cruzados,

$$\bar{\mathcal{P}}_{s|c}^{(j)} = E^\dagger \mathcal{P}_c^{(j)} E, \quad (3.40a)$$

$$\bar{\mathcal{P}}_{c|s}^{(j)} = E \mathcal{P}_s^{(j)} E^\dagger, \quad (3.40b)$$

que atuam respectivamente em \mathcal{H}_{SM} e \mathcal{H}_{CM} . A probabilidade de encontrar a partícula em um vértice, $p_c^{(j)}$ (em uma aresta, $p_s^{(j)}$) pode ser determinada através dos estados obtidos da evolução do sistema no modelo de moda (no modelo de espalhamento) utilizando o projetor direto $\mathcal{P}_c^{(j)}$ ($\mathcal{P}_s^{(j)}$), bem como através dos estados obtidos através da evolução do sistema no modelo de espalhamento (modelo de moeda) utilizando o projetor cruzado $\bar{\mathcal{P}}_{s|c}^{(j)}$ ($\bar{\mathcal{P}}_{c|s}^{(j)}$),

$$p_c^{(j)}(n) = {}_{cm} \langle \psi(n) | \mathcal{P}_c^{(j)} | \psi(n) \rangle_{cm} = {}_{sm} \langle \psi(n) | \bar{\mathcal{P}}_{s|c}^{(j)} | \psi(n) \rangle_{sm}, \quad (3.41a)$$

$$p_s^{(j)}(n) = {}_{sm} \langle \psi(n) | \mathcal{P}_s^{(j)} | \psi(n) \rangle_{sm} = {}_{cm} \langle \psi(n) | \bar{\mathcal{P}}_{c|s}^{(j)} | \psi(n) \rangle_{cm}. \quad (3.41b)$$

3.5 Exemplos Numéricos

Para ilustrar os dois modelos discretos de caminhadas quânticas na linha, vamos lançar mão do exemplo usualmente feito na literatura [4, 24]. O operador $C^{(j)}$ para o modelo de moeda é dado pela matriz de Hadamard C_{Had} , Eq. (3.13). Levando em conta a equivalência unitária entre os dois modelos e a Eq. (3.34), os coeficientes de transmissão e reflexão correspondentes no modelo de espalhamento são

$$c_{+++}^{(j)} = t_{+++}^{(j)} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad c_{+-}^{(j)} = r_{+-}^{(j)} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad c_{-+}^{(j)} = r_{-+}^{(j)} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad c_{---}^{(j)} = t_{---}^{(j)} = -\frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Além disso, vamos considerar os seguintes estados iniciais:

$$|\psi(0)\rangle_{cm} = | + 1, 0 \rangle, \quad |\psi(0)\rangle_{sm} = E^\dagger |\psi(0)\rangle_{cm}; \quad (3.42)$$

$$|\psi(0)\rangle_{cm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (| + 1, 0 \rangle_{cm} + i | - 1, 0 \rangle_{cm}), \quad |\psi(0)\rangle_{sm} = E^\dagger |\psi(0)\rangle_{cm}. \quad (3.43)$$

Calculamos as evoluções das caminhadas para os dois modelos até $n = 100$ passos de tempo. Os gráficos das Figs. (3.7)-(3.10) apresentam as distribuições de probabilidades dadas pelas Eqs. (3.41a) e (3.41b).

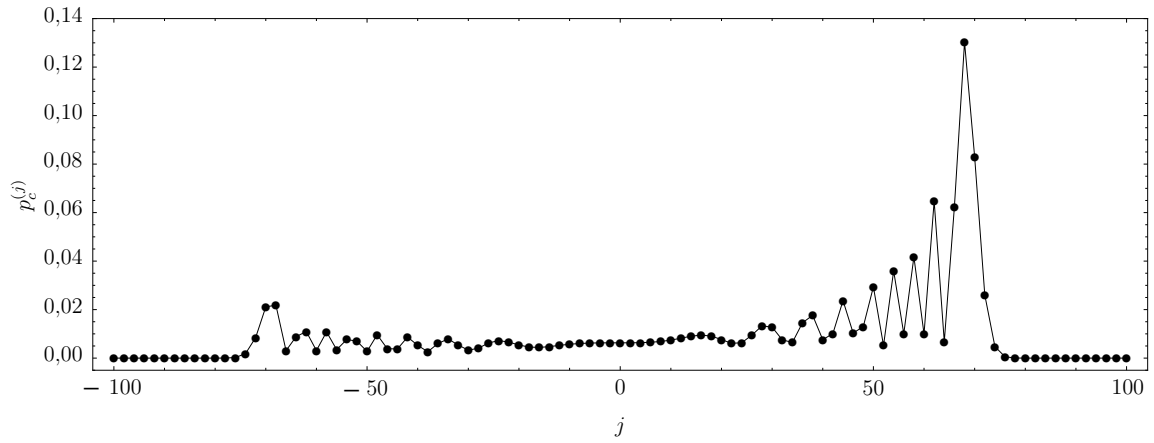


Figura 3.7: Distribuição de probabilidades para o modelo de moeda e estado inicial dado pela Eq. (3.42). Somente as probabilidades para j par foram plotadas, uma vez que para j ímpar elas são nulas.

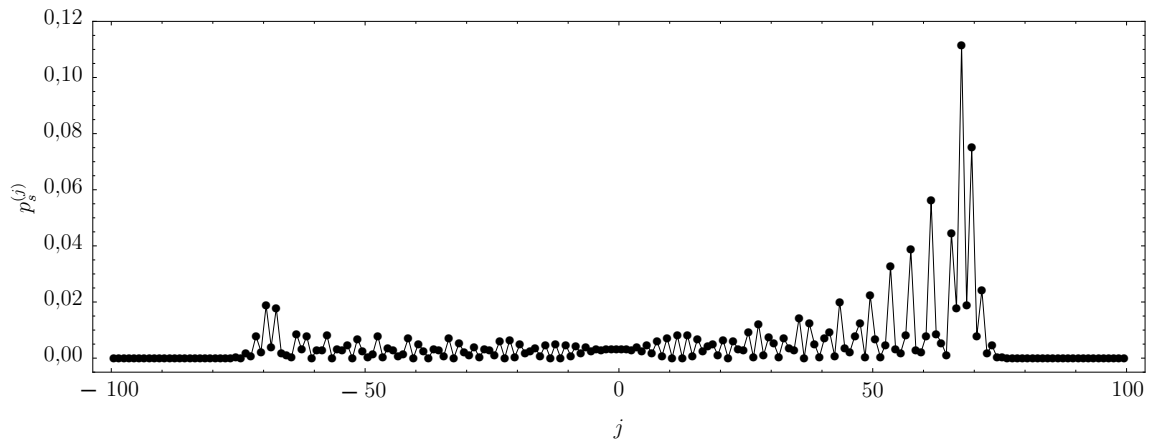


Figura 3.8: Distribuição de probabilidades para o modelo de espalhamento e o estado inicial dado pela Eq. (3.42).

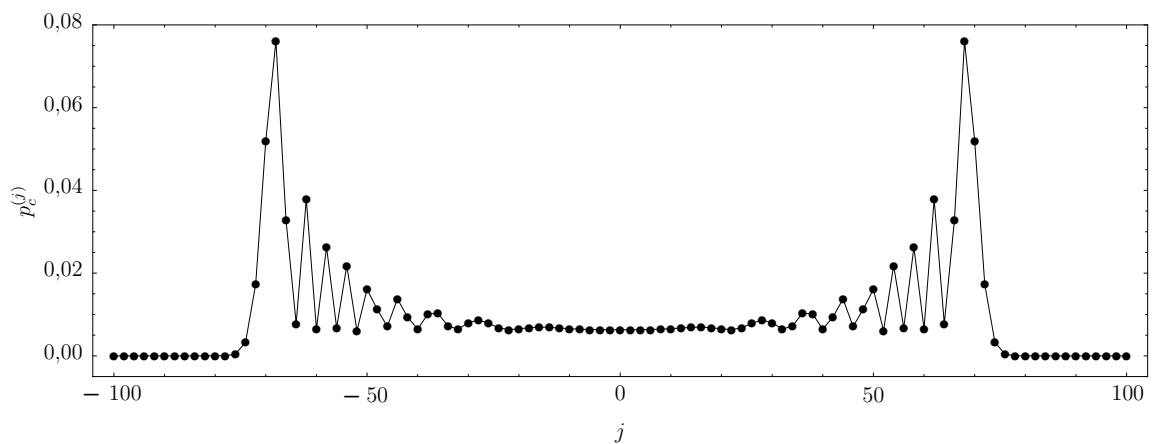


Figura 3.9: O mesmo que na Fig. (3.7), mas para o estado inicial dado pela Eq. (3.43).

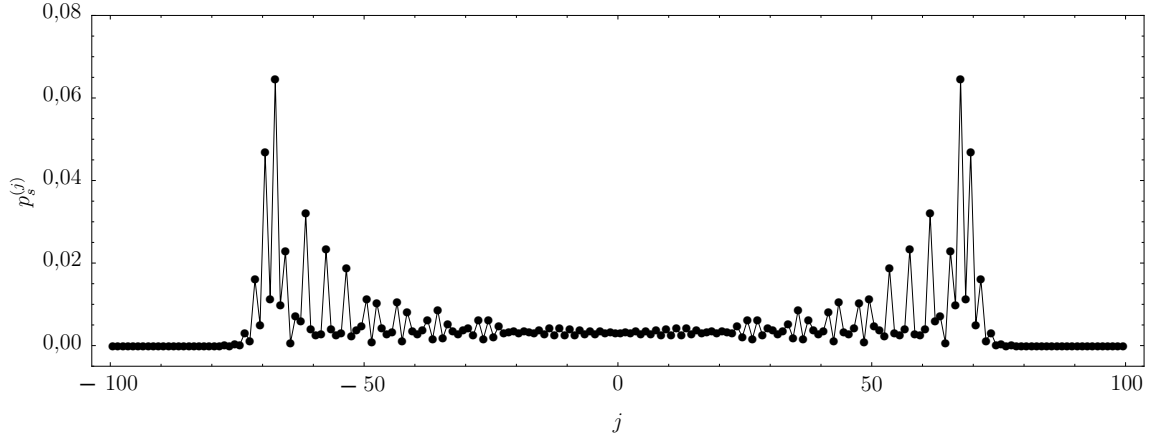


Figura 3.10: O mesmo que na Fig. (3.8), mas para o estado inicial dado pela Eq. (3.43).

Os padrões assimétricos das Figs. (3.7) e (3.8) ocorrem porque a matriz de Hadamard trata de maneira distinta estados associados a sentidos de propagação diferentes. Por exemplo, no modelo moeda, o resultado de sua ação sobre os estados $|\pm 1\rangle_{cm}$ difere por um fator de fase -1 , veja a Eq. (3.14). Assim, ao iniciarmos a caminhada no estado da Eq. (3.42), que está associado ao sentido crescente das posições, a matriz de Hadamard induz mais interferências destrutivas nas posições mais à esquerda e mais interferências construtivas à direita da origem [4]. Isso pode ser melhor visualizado na Tab. (3.1), onde os três primeiros passos da caminhada no modelo moeda foram calculados explicitamente. Essa assimetria pode ser removida iniciando o sistema no estado da Eq. (3.43), que não privilegia nenhum sentido de deslocamento da partícula.

$j \backslash n$	0	1	2	3
-3				$\frac{1}{2\sqrt{2}} -1, -3\rangle$
-2			$-\frac{1}{2} -1, -2\rangle$	
-1		$\frac{1}{\sqrt{2}} -1, -1\rangle$		$\frac{1}{2\sqrt{2}} \left(- +1, -1\rangle - \underbrace{ -1, -1\rangle + -1, -1\rangle}_{\text{interferência destrutiva}} \right)$
0	$ +1, 0\rangle$		$\frac{1}{2}(-1, 0\rangle + +1, 0\rangle)$	
+1		$\frac{1}{\sqrt{2}} +1, +1\rangle$		$\frac{1}{2\sqrt{2}} \left(-1, +1\rangle + \underbrace{ +1, +1\rangle + +1, +1\rangle}_{\text{interferência construtiva}} \right)$
+2			$\frac{1}{2} +1, +2\rangle$	
+3				$\frac{1}{2} +1, +3\rangle$

Tabela 3.1: Cálculo explícito dos três primeiros passos da caminhada no modelo moeda usando a matriz de Hadamard. Observe que as posições à esquerda da origem tendem a sofrer interferências destrutivas em oposição ao que ocorre nas posições à direita.

Um aspecto interessante na evolução das caminhadas quânticas, consiste na maneira que a função de onda sofre interferência. Considere que na etapa de tempo n os estado

do sistema, no modelo moeda, seja dado por

$$|\psi(n)\rangle = \underbrace{\sum_j A_{2j}^{(\sigma)} |\sigma, 2j\rangle}_{\text{componente par}} + \underbrace{\sum_{j'} A_{2j'+1}^{(\sigma')} |\sigma', 2j'+1\rangle}_{\text{componente ímpar}} \quad (3.44)$$

onde o as superposições de estados, do primeiro termo representa a partícula saindo de vértices com rótulos par (componente par), e do segundo termo representa a partícula saindo de vértices com rótulos ímpar (componente ímpar). Após um passo de tempo, temos

$$\begin{aligned} |\psi(n+1)\rangle &= U_c |\psi(n)\rangle \\ |\psi(n+1)\rangle &= U_c \left(\sum_j A_{2j}^{(\sigma)} |\sigma, 2j\rangle + \sum_{j'} A_{2j'+1}^{(\sigma')} |\sigma', 2j'+1\rangle \right) \\ |\psi(n+1)\rangle &= \sum_j A_{2j} \left[c_{\sigma,\sigma}^{(2j)} |\sigma, 2j+\sigma\rangle + c_{-\sigma,\sigma}^{(2j)} |-\sigma, 2j-\sigma\rangle \right] + \\ &\quad \sum_{j'} A_{2j'+1}^{(\sigma')} \left[c_{\sigma',\sigma'}^{(2j'+1)} |\sigma', 2j'+1+\sigma'\rangle + c_{-\sigma',\sigma'}^{(2j'+1)} |-\sigma', 2j'+1-\sigma'\rangle \right]. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Da Eq. (3.45), observamos que a componente par não interfere com a componente ímpar, pois os estados associados a sítios pares na etapa de tempo n , evoluem para estado associados a vértices ímpares, no passo de tempo $n+1$, e os estados associados a vértices ímpares em n , evoluem para sítios pares em $n+1$, veja a Tab. (3.2) e a Fig. (3.11a).

	n	$n+1$
componente par em n	$ \sigma, 2j\rangle$	$ \sigma, 2j \pm \sigma\rangle$
componente ímpar em n	$ \sigma', 2j'+1\rangle$	$ \sigma, 2j'+1 \pm \sigma'\rangle$

Tabela 3.2: Observe que um estado ligado a um vértice par na etapa de tempo n é levado para um estado ligado a um vértice na etapa de tempo $n+1$ (primeira linha), uma vez que σ assume os valores ± 1 , e um estado associado a um vértice ímpar em n é levado a um vértice par em $n+1$.

Portanto, quando o estado inicial do sistema for uma superposição de estados cujos os números quânticos j 's são todos pares, a superposição de estados resultantes da evolução do sistema no passo de tempo n vai possuir apenas componentes com j par, se n for par, e j ímpar, se n for ímpar. Isso pode ser visto nas Figs. (3.7) e (3.9), onde temos as distribuições de probabilidades após 20 passos de tempo, no modelo de moeda, para os estado iniciais dados pelas Eqs. (3.42) e (3.42), que representam o sítio com $j=0$.

Por outro lado, quando o estado inicial é uma superposição de estados com j 's de paridade diferentes, podemos encarar a caminhada como dois processos independentes,

pois estados resultantes de saltos de sítios com paridades distintas não interferem entre si. Por exemplo, ao evoluirmos uma caminhada no modelo de moeda, usando a matriz de Hadamard e com o estado inicial dado por

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (| - 1, -1\rangle + | + 1, 0\rangle), \quad (3.46)$$

observamos que o sistema se comporta como duas caminhadas distintas, uma para a esquerda associada à componente $| - 1, -1\rangle$ do estado inicial e outra para a direita relacionada a $| + 1, 0\rangle$, Fig. (3.11).

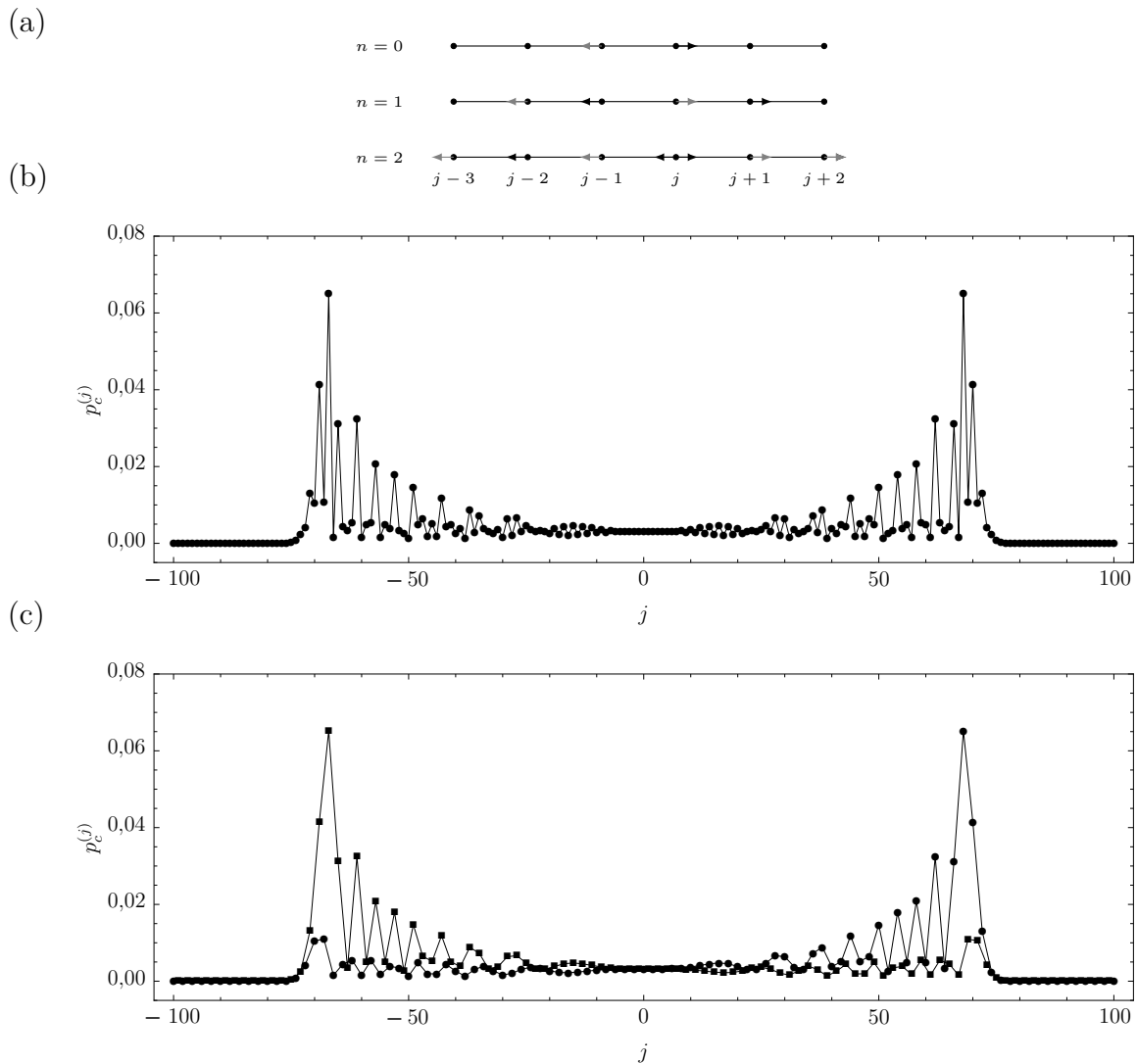


Figura 3.11: (a) sítios ocupados nos dois primeiros passos de tempo, as setas cinzas e pretas representam respectivamente estados associados às componentes do estado inicial $| - 1, -1\rangle$ e $| + 1, 0\rangle$; (b) distribuição de probabilidades após 100 passos de tempo; (c) distribuição de probabilidades decomposta em duas componentes, uma que se propaga para a esquerda (quadrados) e outra que se propaga para a direita (círculos), associadas respectivamente às componentes $| - 1, -1\rangle$ e $| + 1, 0\rangle$ do estado inicial.

Levando em conta a equivalência unitária entre os modelos de moeda e de espalhamento, Eqs. (3.33) e (3.34), o mesmo ocorre para o modelo de espalhamento. As componentes dos estado que descrevem uma partícula chegando em um sítio com j par não interferem com as componentes que descrevem a partícula chegando em um vértice com j ímpar durante a evolução do sistema. No entanto isso é mais difícil de ser visualizado para esse modelo, devido a diferença na forma que a função de onda se propaga ao longo da rede.

A diferença na forma de propagação da função de onda pela rede, se deve ao fato de usarmos representações contrastantes dos estados em cada modelo, como discutido na seção anterior. Enquanto que, no modelo de moedas os estados estão associados aos vértices, no modelo de espalhamento os estados estão associados as arestas. Portanto, podemos ter a situação onde uma superposição de estado que representa sítios diferentes no modelo de moeda pode representar uma mesma arestas no modelo de espalhamento. Para exemplificar isso, considere o estado dado pela Eq. (3.46), analisando a Fig. (3.12), observamos que ele representa dois vértices distintos no modelo de moeda e a mesma aresta no modelo de espalhamento.



Figura 3.12: Representações geométricas do estado da Eq. (3.46), para o modelo de moeda em (a), e para o modelo de espalhamento em (b).

A Fig. (3.13) representa a evolução dos primeiros passos das caminhadas no modelo de moedas, em (a), e do modelo de espalhamento, em (b), para o estado inicial dado pela Eq. (3.46). Observe que não existe interferência, em ambos os modelos, para os estados ligados aos vértices pares (setas em pretos) com os estados associados aos vértices ímpares (setas cinzas), como já discutido. Geometricamente isto é representado pela ausência de setas pretas e cinzas em um mesmo vértice ou aresta apontando para um mesmo sentido.

Como abordado nos parágrafos anteriores, quando estado inicial do sistema é uma superposição de estados associadas a vértices com paridades diferentes, podemos interpretar as caminhadas em cada modelo como dois processos independentes, um associado aos vértices pares e outro aos vértices ímpar. No entanto, quando levantamos as distribuições de probabilidades, esse fenômeno fica difícil de ser visualizado no modelo de espalhamento, uma vez que a função de onda se propaga pela rede através das arestas, e estados chegando a sítios vizinhos (com paridades distintas) podem contribuir para a

probabilidade de encontrar a partícula na arestas que os unem.

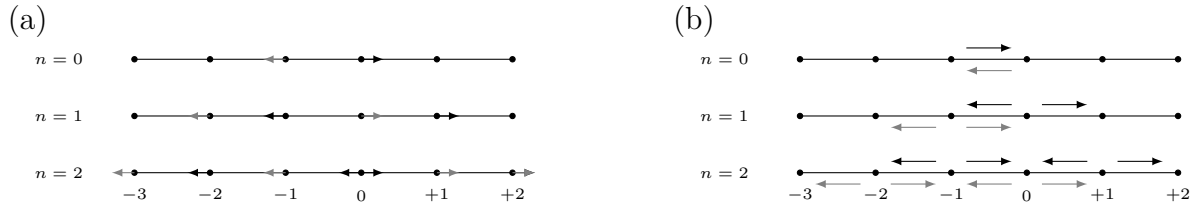


Figura 3.13: Representação geométrica, dos primeiros passos, da evolução das caminhadas para modelo de moeda em (a), e de espalhamento em (b), com o estado inicial dado pela Eq. (3.46).

A diferença das representações dos estados no modelo de moeda e de espalhamento, levam a padrões de distribuição de probabilidades distintos, o que pode ser observado comparando os gráficos das Figs. (3.7) e (3.9) com os das Figs. (3.8) e (3.10), respectivamente. No entanto sempre podemos obter a distribuição de probabilidades de encontrar a partícula em uma aresta através dos estados do modelo de moeda e vice-versa, utilizando os projetores cruzados dados pela Eq. (3.40).

Uma vez que os modelos de moeda e de espalhamento são unitariamente equivalentes, determinamos a dispersão Δx nas posições apenas para o modelo moeda, por ele ser mais semelhante às caminhadas aleatórias clássicas. Logo

$$\Delta x = \sqrt{\sum_j p_e^{(j)}(n)j^2 - \left(\sum_j p_e^{(j)}(n)j\right)^2}. \quad (3.47)$$

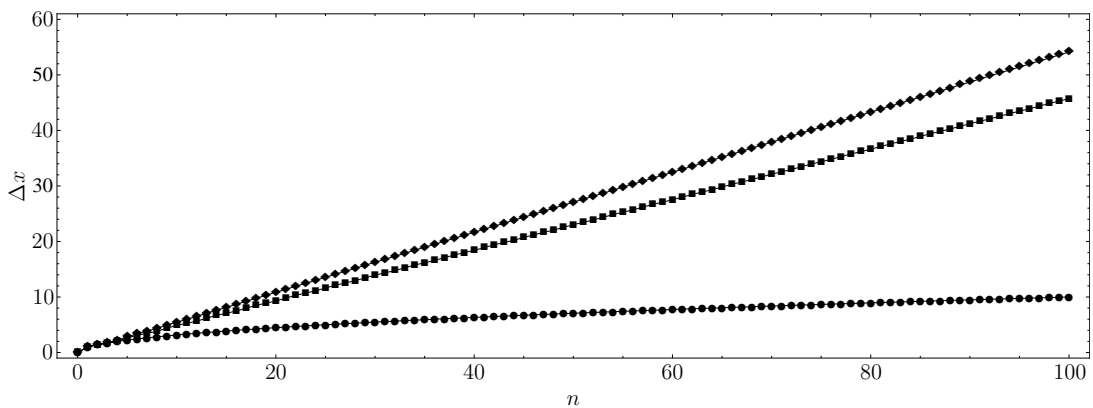


Figura 3.14: Dispersão nas posições em função das etapas de tempo. Círculos caminhada aleatória clássica, quadrado (losango) caminhada quântica assimétrica (simétrica).

Comparando o comportamento da dispersão nas posições em função das etapas de tempo, Fig.(3.14), das caminhadas aleatórias clássicas e das caminhadas quânticas, ob-

servamos que na versão clássica a dispersão é proporcional a raiz quadra das etapas de tempo, $\Delta x \sim \sqrt{n}$, enquanto que, na versão quântica, usando a matriz de Hadamard, temos $\Delta x \sim n$, veja a Fig. (3.15). Isso se deve ao comportamento das distribuições de probabilidades. Nas caminhadas aleatórias clássicas é uma distribuição gaussiana centrada em torno da origem. Já nas caminhadas quânticas, usando a moeda de Hadamard, ela se espalha no intervalo $[-\frac{T}{\sqrt{2}}, \frac{T}{\sqrt{2}}]$, onde T é o número total de passos de tempo [4].

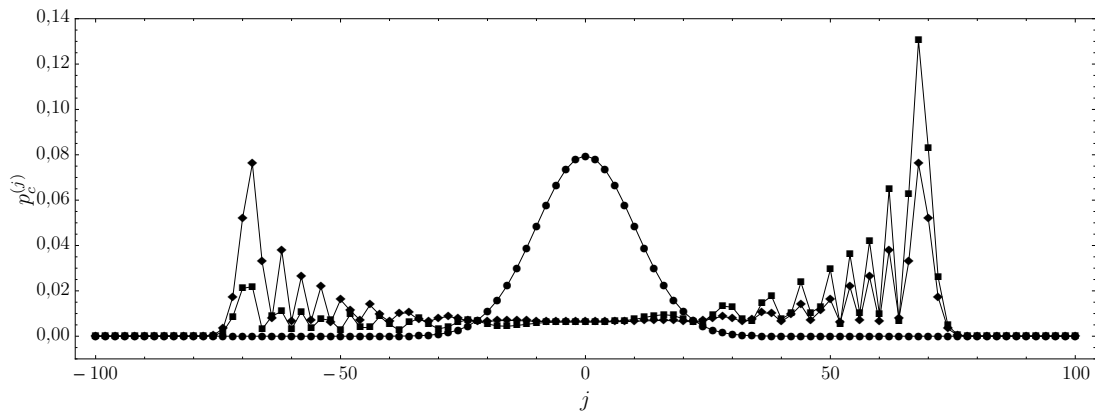


Figura 3.15: Comparação entre as distribuições de probabilidades para uma caminhada clássica com probabilidade igual da partícula se deslocar para esquerda ou direita a cada passo de tempo (círculos) e as caminhadas quânticas no modelo moeda usando a matriz de Hadamard para os estados da Eq. (3.42) (quadrados) e da Eq. (3.43) (losangos). Somente as probabilidades para j par foram plotadas, uma vez que para j ímpar elas são nulas.

Caminhas Quânticas Discretas em Grafos

Neste capítulo vamos revisar as formulações dos modelos de moeda e de espalhamento das caminhadas quânticas discretas em grafos simples arbitrários, bem como discutir a equivalência unitária destes modelos (como demonstrada na referência [27]). Vamos também particularizar os resultados gerais para o caso de redes regulares bidimensionais.

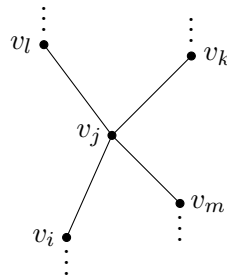


Figura 4.1: Exemplo de um grafo simples onde ocorrem as caminhadas quânticas. Lembrando que para um grafo ser simples, ele deve ser formado por arestas não direcionais, seus vértices devem ter no mínimo uma ligação com um dos seus vizinhos, não podem conter “*loops*” (auto-ligações) e não pode haver pares de sítios com mais de uma aresta conectando-os.

4.1 Modelo de Moeda

Neste modelo o sistema é formado por uma partícula quântica que se move em intervalos de tempo discretos, n , através dos vértices de um grafo simples $G(V, E)$. Os estados

que descrevem o sistema são dados por

$$|\sigma_m, v_j\rangle = |\sigma_m\rangle_c \otimes |v_j\rangle_p, \quad (4.1)$$

onde $|\sigma_m\rangle_c$ está associado a graus de liberdade auxiliares responsáveis por direcionar a partícula a cada etapa de tempo e $|v_j\rangle_p$ está associado à posição dos vértices no grafo. É importante salientar que em cada vértice v_j são necessários g_{v_j} estados associados aos graus de liberdade auxiliares, com g_{v_j} sendo o número de ligações que v_j faz com seus vizinhos (grau de v_j), Fig. (4.2). Além disso, o estado $|v_i\rangle_p$, apesar de estar associado a posição do vértice v_i , não é necessariamente auto-estado de posição.

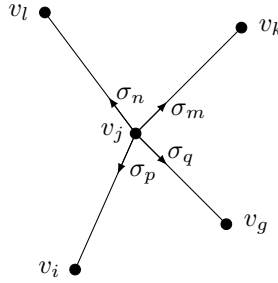


Figura 4.2: Exemplo de estados para o vértice v_j em um grafo simples. Observe que o vértice v_j possui quatro ligações, portanto são necessários quatro graus de liberdade auxiliares para direcionar a partícula para os vértices adjacentes, durante a caminhada.

O espaço de Hilbert do sistema \mathcal{H}_{CM} é dado pelo produto tensorial entre o espaço vetorial dos estados associados aos graus de liberdade auxiliares \mathcal{H}_c e o espaço vetorial dos estados associados às posições dos vértices \mathcal{H}_p ,

$$\mathcal{H}_{CM} = \mathcal{H}_c \otimes \mathcal{H}_p. \quad (4.2)$$

Os estados $|v_i\rangle_p$ e $|\sigma_m\rangle_c$ formam, respectivamente, uma base ortonormal para \mathcal{H}_p e \mathcal{H}_c , logo

$${}_p\langle v_i | v_j \rangle_p = \delta_{v_i v_j}, \quad (4.3a)$$

$$\hat{\mathbf{1}}_p = \sum_j |v_j\rangle_p {}_p\langle v_j|, \quad (4.3b)$$

$${}_c\langle \sigma_m | \sigma_n \rangle_c = \delta_{\sigma_m \sigma_n}, \quad (4.4a)$$

$$\hat{\mathbf{1}}_c = \sum_{m=1}^{g_{v_j}} |\sigma_m\rangle_c {}_c\langle \sigma_m|. \quad (4.4b)$$

Assim uma base para o espaço de Hilbert \mathcal{H}_{CM} do sistema é constituída pelos estados

$|\sigma_m, v_j\rangle$ dados pela Eq. (4.1), tal que

$$\langle \sigma_n, v_i | \sigma_m, v_j \rangle = \delta_{v_i v_j} \delta_{\sigma_m \sigma_n} \quad (4.5a)$$

$$\hat{\mathbf{1}}_{CM} = \hat{\mathbf{1}}_c \otimes \hat{\mathbf{1}}_p = \sum_j \sum_m^{g_{v_j}} |\sigma_m, v_j\rangle \langle \sigma_m, v_j|. \quad (4.5b)$$

Observe que cada vértice contribui com g_{v_j} estados. Utilizando as Eqs. (2.9) e (2.10) pode-se mostrar que a dimensão do espaço de Hilbert do sistema é dada pelo dobro do número de arestas do grafo,

$$\dim \{\mathcal{H}_{CM}\} = \sum_j g_{v_j} = \sum_i \sum_j A_{v_i, v_j} = 2M. \quad (4.6)$$

A evolução temporal do sistema é implementada pelo operador unitário U_c , com

$$|\psi(n+1)\rangle = U_c |\psi(n)\rangle, \quad (4.7)$$

a cada etapa de tempo n . O operador U_c é dado em termos do produto de dois operadores unitários

$$U_c = S \times (C^{(v_j)} \otimes \hat{\mathbf{1}}_p), \quad (4.8a)$$

$$U_c^\dagger = (C^{(v_j)} \otimes \hat{\mathbf{1}}_p)^\dagger \times S^\dagger. \quad (4.8b)$$

O operador S é o operador translação condicional que atua em \mathcal{H}_{CM} e é responsável pelos saltos da partícula entre dois vértices adjacentes, Fig. (4.3),

$$S|\sigma_m, v_j\rangle = |\phi_c(\sigma_m, v_j), f_c(\sigma_m, v_j)\rangle, \quad (4.9a)$$

$$S^\dagger|\sigma_m, v_j\rangle = |\tilde{\phi}_c(\sigma_m, v_j), \tilde{f}_c(\sigma_m, v_j)\rangle, \quad (4.9b)$$

onde as funções (f_c, \tilde{f}_c) e $(\phi_c, \tilde{\phi}_c)$ são funções biunívocas e localmente adaptáveis [27], que representam, respectivamente, um vértice adjacente a v_j e uma dada direção em tal vértice. Entende-se por funções localmente adaptáveis as funções que (i) podem ser construídas para qualquer vértice v_j ; (ii) para cada vértice v_j elas dependem apenas da estrutura dos vértices ligados a ele; e (iii) elas são bem definidas independentemente do número de vértices ligados a v_j . Além disso, da condição de unitariedade de S , $SS^\dagger = S^\dagger S = \hat{\mathbf{1}}_{CM}$, devemos ter

$$v_j = f_c(\tilde{f}_c(\sigma_m, v_j), \phi_c(\sigma_m, v_j)), \quad (4.10)$$

$$\sigma_m = \phi_c(\tilde{f}_c(\sigma_m, v_j), \tilde{\phi}_c(\sigma_m, v_j)), \quad (4.11)$$

$$v_j = \tilde{f}_c(\phi_c(\sigma_m, v_j), f_c(\sigma_m, v_j)), \quad (4.12)$$

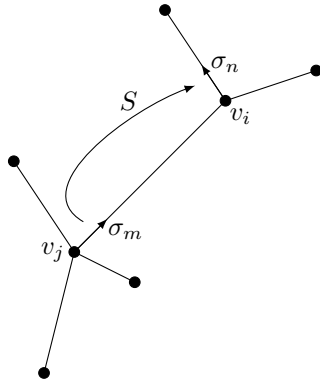
$$\sigma_m = \tilde{\phi}_c(\phi_c(\sigma_m, v_j), f_c(\sigma_m, v_j)). \quad (4.13)$$

Utilizando a relação de completeza do espaço vetorial \mathcal{H}_{CM} , Eq. (4.5b), podemos exprimir S como

$$S = \sum_j \sum_{m=1}^{g_{v_j}} |\phi_c(\sigma_m, v_j), f_c(\sigma_m, v_j)\rangle \langle \sigma_m, v_j|, \quad (4.14)$$

$$S^\dagger = \sum_j \sum_{m=1}^{g_{v_j}} |\tilde{\phi}_c(\sigma_m, v_j), \tilde{f}_c(\sigma_m, v_j)\rangle \langle \sigma_m, v_j|, \quad (4.15)$$

(a)



(b)

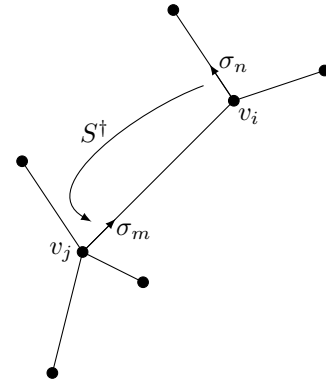


Figura 4.3: Ação do operador translação em (a), e do seu adjunto hermitiano em (b). Observe que cada estado $|(v_j, \sigma_m)\rangle$ ($|\sigma_n, v_i\rangle$), S (S^\dagger) implementam uma translação para um único estado $|\sigma_n, v_i\rangle$ ($|\sigma_m, v_j\rangle$), Eq. (4.9), com $v_i = f_c(\sigma_m, v_j)$ e $\sigma_n = \phi_c(\sigma_m, v_j)$ ($v_j = f_c(\sigma_n, v_i)$ e $\sigma_m = \phi_c(\sigma_n, v_i)$), por este motivo o operador S é chamado de operador translação condicional.

O operador $C^{(v_j)}$ desempenha a função de “rodar” os estados que descrevem os graus de liberdade auxiliares $|\sigma_m\rangle_c$ e atua em \mathcal{H}_c . Ele tem um papel análogo ao das variáveis aleatórias que determinam a direção em que a partícula se desloca nas caminhadas aleatórias clássicas. Por esse motivo, vamos denominá-lo operador moeda. De maneira geral ele é dado por

$$C^{(v_j)} = \sum_{m=1}^{g_{v_j}} \sum_{n=1}^{g_{v_j}} c_{\sigma_m, \sigma_n}^{(v_j)} |\sigma_m\rangle_c \langle \sigma_n|. \quad (4.16)$$

Da condição de unitariedade de $C^{(v_j)}$, $C^{(v_j)}C^{(v_j)\dagger} = C^{(v_j)\dagger}C^{(v_j)} = \hat{\mathbf{1}}_c$, os coeficientes $c_{\sigma_m \sigma_n}^{(v_j)}$ devem obedecer as seguintes relações

$$\sum_{k=1}^{g_{v_j}} c_{\sigma_k, \sigma_m}^{(v_j)*} c_{\sigma_k, \sigma_n}^{(v_j)} = \sum_{k=1}^{g_{v_j}} c_{\sigma_m, \sigma_k}^{(v_j)*} c_{\sigma_n, \sigma_k}^{(v_j)} = \delta_{\sigma_m \sigma_n}. \quad (4.17)$$

Usando as Eqs. (4.14), (4.15), (4.16) e (4.3a), o operador evolução temporal, Eq. (4.8), pode ser escrito na forma

$$U_c = \sum_j \sum_{m=1}^{g_{v_j}} \sum_{n=1}^{g_{v_j}} c_{\sigma_n, \sigma_m}^{(v_j)} |\phi_c(\sigma_n, v_j), f_c(\sigma_n, v_j)\rangle \langle \sigma_m, v_j|, \quad (4.18)$$

$$U_c^\dagger = \sum_j \sum_{m=1}^{g_{v_j}} \sum_{n=1}^{g_{\tilde{f}_c}} c_{\tilde{\phi}_c(\sigma_m, v_j), \sigma_n}^{(\tilde{f}_c(\sigma_m, v_j))^*} |\sigma_n, \tilde{f}_c(\sigma_m, v_j)\rangle \langle \sigma_m, v_j|. \quad (4.19)$$

Assim sua ação em um estado de base resulta em

$$U_c |\sigma_m, v_j\rangle = \sum_{n=1}^{g_{v_j}} c_{\sigma_m \sigma_n}^{(v_j)} |\phi_c(\sigma_m, v_j), f_c(\sigma_m, v_j)\rangle, \quad (4.20)$$

$$U_c^\dagger |\sigma_m, v_j\rangle = \sum_{n=1}^{g_{\tilde{f}_c}} c_{\tilde{\phi}_c(\sigma_m, v_j), \sigma_n}^{(\tilde{f}_c(\sigma_m, v_j))^*} |\sigma_n, \tilde{f}_c(\sigma_m, v_j)\rangle. \quad (4.21)$$

Finalmente, a probabilidade de encontrar a partícula em um dado vértice na etapa de tempo n , $p_c^{(v_j)}(n)$, é dada por

$$p_c^{(v_j)}(n) = \langle \psi(n) | \mathcal{P}_c^{(v_j)} | \psi(n) \rangle \quad (4.22)$$

onde $|\psi(n)\rangle$ descreve o sistema no instante de tempo n e $\mathcal{P}_c^{(v_j)}$ é o operador projetor,

$$\mathcal{P}_c^{(v_j)} = \sum_{m=1}^{g_{v_j}} |\sigma_m, v_j\rangle \langle \sigma_m, v_j|. \quad (4.23)$$

4.2 Modelo de Espalhamento

Nesta versão das caminhadas quânticas, a partícula se desloca através das arestas do grafo e a cada etapa de tempo, ao incidir sobre um vértice, ela pode sofrer um processo de espalhamento (reflexão ou transmissão). Em geral, na literatura [24], os estados do sistema são rotulados pelos vértices conectados pela aresta onde se encontra a partícula, no entanto adotaremos a nomenclatura usada em [27].

Considere um vértice v_j de um grafo $G(V, E)$, Fig. (4.1), o conjunto $V_j = \{v_{(1,j)}, \dots, v_{(g_{v_j}, j)}\}$ de g_{v_j} vértices adjacentes a v_j , onde g_{v_j} é o grau de v_j (número de ligações que v_j faz com sua vizinhança), e o conjunto $\Xi_j = \{\sigma_1, \dots, \sigma_{g_{v_j}}\}$ de g_{v_j} elementos que estão associados as direções e sentidos entre os vértices de V_j e v_j . Definimos os estados que descrevem o sistema como $|\sigma_m, v_j\rangle$, que indica que a partícula está se propagando do vértice $v_{(m,j)}$

para o vértice v_j através da aresta que os ligam, Fig. (4.4). O estado $|\sigma_m, v_j\rangle$ apesar de conter a informação da direção que a partícula está se propagando não é necessariamente auto-estado de momentum.

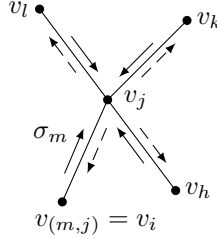


Figura 4.4: Descrição geométrica dos estados de base do sistema. Observe que cada aresta abriga dois estados, um chegando (seta contínua) e outro saindo de v_j (seta tracejada).

O conjunto de estados $\{|\sigma_m, v_j\rangle\}$ formam uma base para o espaço de Hilbert \mathcal{H}_{SM} do sistema, portanto são válidas as relações de ortonormalidade e completiza,

$$\langle \sigma_m, v_j | \sigma_n, v_i \rangle = \delta_{v_j v_i} \delta_{\sigma_m \sigma_n} \quad (4.24)$$

$$\hat{\mathbf{1}}_{SM} = \sum_j \sum_{m=1}^{g_{v_j}} |\sigma_m, v_j\rangle \langle \sigma_m, v_j| \quad (4.25)$$

A dimensão do espaço de Hilbert do sistema é dada pelo dobro do número de arestas do grafo, o que pode ser verificado contabilizando o número dos estados de base de \mathcal{H}_{SM} . Assim levando em conta que cada vértice contribui com g_{v_j} estados de base, e as Eqs. (2.9) e (2.10) temos

$$\dim \{\mathcal{H}_{SM}\} = \sum_j g_{v_j} = \sum_i \sum_j A_{v_i, v_j} = 2M. \quad (4.26)$$

O sistema evolui a cada etapa de tempo de acordo com a ação do operador unitário U_s ,

$$|\psi(n+1)\rangle = U_s |\psi(n)\rangle, \quad (4.27)$$

onde sua ação em um estado de base é definida por

$$U_s |\sigma_m, v_j\rangle = \sum_{n=1}^{g_{v_j}} \Gamma_{\phi_s(\sigma_n, v_j), \sigma_m}^{(v_j)} |\phi_s(\sigma_n, v_j), f_s(\sigma_n, v_j)\rangle, \quad (4.28)$$

$$U_s^\dagger |\sigma_m, v_j\rangle = \sum_{n=1}^{g_{f_s}} \Gamma_{\sigma_m, \sigma_n}^{(f_s(\sigma_m, v_j))^*} |\sigma_n, f_s(\sigma_m, v_j)\rangle, \quad (4.29)$$

onde f_s e ϕ_s são funções biunívocas e localmente adaptáveis, tal que f_s representa um vértice que pertence ao conjunto V_j e ϕ_s indica que a partícula está se propagando de v_j para f_s . Levando em conta a unitariedade de U_s , $U_s U_s^\dagger = U_s^\dagger U_s = \hat{\mathbf{1}}_{SM}$, se v_j e v_k são dois vértices adjacentes tal que os estados $|\sigma_m, v_j\rangle$ e $|\sigma_n, v_k\rangle$ indicam a direção e sentidos entre v_j e v_k , conforme a Fig. (4.5) devemos ter:

$$v_j = f_s(\sigma_n, v_k), \quad v_k = f_s(\sigma_m, v_j), \quad (4.30)$$

$$\sigma_m = \phi_s(\sigma_n, v_k), \quad \sigma_n = \phi_s(\sigma_m, v_j); \quad (4.31)$$

$$\sum_{k=1}^{g_{v_j}} \Gamma_{\phi(\sigma_k, v_j), \sigma_m}^{(v_j)*} \Gamma_{\phi(\sigma_k, v_j), \sigma_n}^{(v_j)} = \sum_{k=1}^{g_{v_j}} \Gamma_{\phi(\sigma_m, v_j), \sigma_k}^{(v_j)*} \Gamma_{\phi(\sigma_n, v_j), \sigma_k}^{(v_j)} = \delta_{\sigma_m \sigma_n}. \quad (4.32)$$

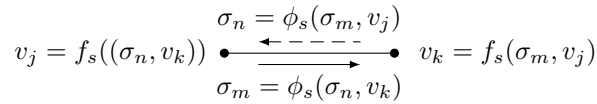


Figura 4.5: Associação entre os dois estados em uma mesma aresta e as funções f_s e ϕ_s .

Usando a relação de completeza $\hat{\mathbf{1}}_{SM}$, Eq. (4.25), podemos exprimir U_s e U_s^\dagger como segue

$$U_s = \sum_j \sum_{m=1}^{g_{v_j}} \sum_{n=1}^{g_{v_j}} \Gamma_{\phi_s(\sigma_n, v_j), \sigma_m}^{(v_j)} |\phi_s(\sigma_n, v_j), f_s(\sigma_n, v_j)\rangle \langle \sigma_m, v_j|, \quad (4.33)$$

$$U_s^\dagger = \sum_j \sum_{m=1}^{g_{v_j}} \sum_{n=1}^{g_{f_s}} \Gamma_{\sigma_m, \sigma_n}^{(f_s(\sigma_m, v_j))*} |\sigma_n, f_s(\sigma_m, v_j)\rangle \langle \sigma_m, v_j|. \quad (4.34)$$

Expandindo a Eq. (4.29) podemos separar a ação de U_s sobre os estados de base em duas contribuições, uma de reflexão e outra de transmissão,

$$U_s |\sigma_m, v_j\rangle = \underbrace{\Gamma_{\phi_s(\sigma_m, v_j), \sigma_m}^{(v_j)} |\phi_s(\sigma_m, v_j), f_s(\sigma_m, v_j)\rangle}_{\text{reflexão}} + \underbrace{\sum_{n \neq m} \Gamma_{\phi(\sigma_n, v_j), \sigma_m}^{(v_j)} |\phi_s(\sigma_n, v_j), f_s(\sigma_n, v_j)\rangle}_{\text{transmissão}}, \quad (4.35)$$

$$U_s^\dagger |\sigma_m, v_j\rangle = \underbrace{\Gamma_{\sigma_m, \phi_s(\sigma_m, v_j)}^{(f_s(\sigma_m, v_j))*} |\phi_s(\sigma_m, v_j), f_s(\sigma_m, v_j)\rangle}_{\text{reflexão}} + \underbrace{\sum_n \Gamma_{\sigma_m, \sigma_n}^{(f_s(\sigma_m, v_j))*} |\sigma_n, f_s(\sigma_m, v_j)\rangle}_{\text{transmissão}} \text{ com } \sigma_n \neq \phi_s(\sigma_m, v_j). \quad (4.36)$$

Assim, podemos definir o operador evolução temporal, U_s , em termos de dois novos operadores: um de reflexão, R , e um de transmissão, T ,

$$U_s = R + T \quad (4.37)$$

onde

$$R|\sigma_m^{(v_j)}, v_j\rangle = r_{\phi_s(\sigma_m, v_j), \sigma_m}^{(v_j)} |\phi_s(\sigma_m, v_j), f_s(\sigma_m, v_j)\rangle, \quad (4.38a)$$

$$T|\sigma_m^{(v_j)}, v_j\rangle = \sum_{n \neq m} t_{\phi(\sigma_n, v_j), \sigma_m}^{(v_j)} |\phi_s(\sigma_n, v_j), f_s(\sigma_n, v_j)\rangle, \quad (4.38b)$$

$$R^\dagger|\sigma_m^{(v_j)}, v_j\rangle = r_{\sigma_m, \phi_s(\sigma_m, v_j)}^{(f_s(\sigma_m, v_j))^*} |\phi_s(\sigma_m, v_j), f_s(\sigma_m, v_j)\rangle, \quad (4.38c)$$

$$T^\dagger|\sigma_m^{(v_j)}, v_j\rangle = \sum_n t_{\sigma_m, \sigma_n}^{(f_s(\sigma_m, v_j))^*} |\sigma_n, f_s(\sigma_m, v_j)\rangle \text{ com } \sigma_n \neq \phi_s(\sigma_m, v_j), \quad (4.38d)$$

e

- $r_{\phi(\sigma_m, v_j), \sigma_m} = \Gamma_{\phi(\sigma_m, v_j), \sigma_m}$ descreve um processo de reflexão;
- $t_{\phi(\sigma_n, v_j), \sigma_m} = \Gamma_{\phi(\sigma_n, v_j), \sigma_m}$ descreve um processo de transmissão;

Dado um estado do sistema, $|\psi(n)\rangle$, em uma etapa de tempo qualquer, a probabilidade de encontrar a partícula na aresta que liga os vértices v_i e v_j quando o sistema é descrito por este estado é dada por

$$p_s^{(v_i, v_j)} = p_s^{(v_j, v_i)} = \langle \psi(n) | \mathcal{P}_s^{(v_i, v_j)} | \psi(n) \rangle, \quad (4.39)$$

onde $\mathcal{P}_s^{(v_i, v_j)}$ é o projetor definido por

$$\mathcal{P}_s^{(v_i, v_j)} = \mathcal{P}_s^{(v_j, v_i)} = |\sigma_m^{(v_j)}, v_j\rangle \langle \sigma_m^{(v_j)}, v_j| + |\sigma_n^{(v_i)}, v_i\rangle \langle \sigma_n^{(v_i)}, v_i|. \quad (4.40)$$

Levando em conta as Eqs. (4.30) e (4.31) temos

$$\mathcal{P}_s^{(v_i, v_j)} = |\sigma_m, v_j\rangle \langle \sigma_m, v_j| + |\phi_s(\sigma_m, v_j), f(\sigma_m, v_j)\rangle \langle \phi_s(\sigma_m, v_j), f(\sigma_m, v_j)|, \quad (4.41)$$

$$\mathcal{P}_s^{(v_i, v_j)} = |\sigma_n, v_i\rangle \langle \sigma_n, v_i| + |\phi_s(\sigma_n, v_i), f(\sigma_n, v_i)\rangle \langle \phi_s(\sigma_n, v_i), f(\sigma_n, v_i)|. \quad (4.42)$$

4.3 Equivalência Unitária dos Modelos

A equivalência entre os modelos de moeda e de espalhamento em grafos arbitrários foi demonstrada na referência [27]. Para isso três passos são necessários: (i) estabelecer uma correspondência um a um entre os estados de base dos dois modelo, o que é possível pois o espaço de Hilbert tem a mesma dimensão em ambas formulações, Eqs. (4.6) e (4.26); (ii) relacionar adequadamente os dois operadores de evolução temporal; (iii) construir os operadores projetores adequados para obter a distribuição de probabilidade do modelo de moeda em função dos estados do modelo de espalhamento e vice-versa.

Para distinguir os estados dos modelos de moeda e de espalhamento, vamos usar as seguintes notações:

- estados do modelo de moeda: $|\sigma_m, v_j\rangle_{cm}$;
- estados do modelo de espalhamento: $|\sigma_m, v_j\rangle_{sm}$;

Primeiro temos que relacionar um a um os estados de base dos dois sistemas, para isso vamos lançar mão de um operador isomórfico unitário $E : \mathcal{H}_{SM} \rightarrow \mathcal{H}_{CM}$ [24],

$$E|\sigma_m^{(v_j)}, v_j\rangle_{sm} = |\alpha(\sigma_m, v_j), v_j\rangle_{cm}, \quad (4.43a)$$

$$E^\dagger|\sigma_m, v_j\rangle_{cm} = |\tilde{\alpha}(\sigma_m, v_j), v_j\rangle_{sm}. \quad (4.43b)$$

Os operadores E (E^\dagger) associam um dado estado das caminhadas quânticas no modelo de espalhamento (modelo de moeda) que está chegando (saindo) no vértice v_j pela direção σ_m com um estado do modelo de moeda (modelo de espalhamento) que está saindo (chegando) em v_j pela direção $\alpha(v_j, \sigma_m)$ ($\tilde{\alpha}(v_j, \sigma_m)$), veja a Fig (4.6), onde, as funções α e $\tilde{\alpha}$ são biunívocas e localmente adaptáveis.

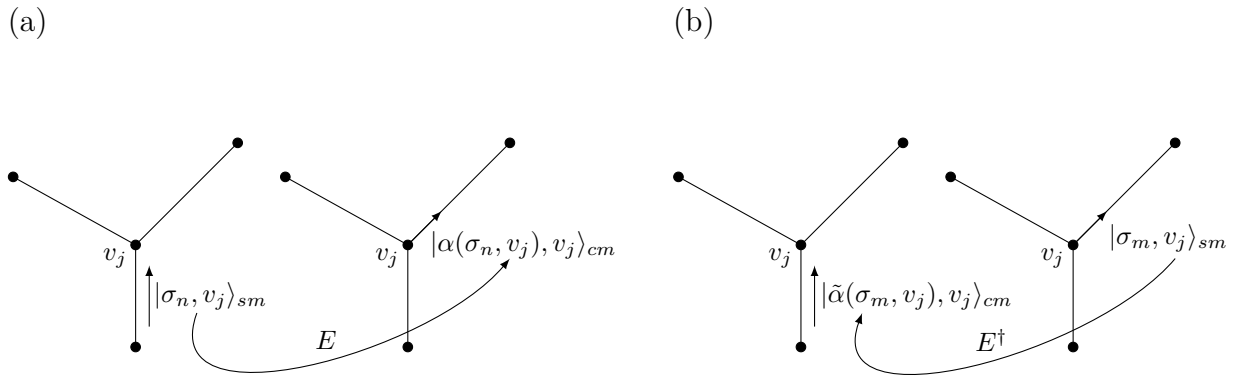


Figura 4.6: Representação geométrica da ação do operador isomórfico unitário E em (a), e do seu adjunto hermitiano em (b).

A equivalência unitária na evolução temporal do sistema é dada pelas relações entre os operadores U_s e U_c ,

$$U_s = E^\dagger U_c E, \quad (4.44a)$$

$$U_c = E U_s E^\dagger. \quad (4.44b)$$

Levando em conta as Eqs. (4.43), (4.18) e (4.33) temos

$$\begin{aligned} EU_s E^\dagger &= \sum_j \sum_{m=1}^{g_{v_j}} \sum_{n=1}^{g_{v_j}} \Gamma_{\phi_s(\sigma_n, v_j), \sigma_m}^{(v_j)} E |\phi_s(\sigma_n, v_j), f_s(\sigma_n, v_j)\rangle_{sm sm} \langle \sigma_m, v_j | E^\dagger, \\ EU_s E^\dagger &= \sum_j \sum_{m=1}^{g_{v_j}} \sum_{n=1}^{g_{v_j}} \Gamma_{\phi_s(\sigma_n, v_j), \sigma_m}^{(v_j)} |\alpha(\phi_s(\sigma_n, v_j), f_s(\sigma_n, v_j)), f_s(\sigma_n, v_j)\rangle_{cm cm} \langle \alpha(\sigma_m, v_j), v_j |, \end{aligned} \quad (4.45)$$

$$\begin{aligned} E^\dagger U_c E &= \sum_j \sum_{m=1}^{g_{v_j}} \sum_{n=1}^{g_{v_j}} c_{\sigma_n, \sigma_m}^{(v_j)} E^\dagger |\phi_c(\sigma_n, v_j), f_c(\sigma_n, v_j)\rangle_{cm cm} \langle \sigma_m, v_j | E, \\ E^\dagger U_c E &= \sum_j \sum_{m=1}^{g_{v_j}} \sum_{n=1}^{g_{v_j}} c_{\sigma_n, \sigma_m}^{(v_j)} |\tilde{\alpha}(\phi_c(\sigma_n, v_j), f_c(\sigma_n, v_j)), f_c(\sigma_n, v_j)\rangle_{sm sm} \langle \tilde{\alpha}(\sigma_m, v_j), v_j |. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Assim comparando respectivamente as Eqs. (4.45) e (4.46) com as Eqs. (4.18) e (4.33), para as relações entre U_c e U_s , dadas pela Eq. (4.44), serem verdadeiras, os coeficientes que descrevem a evolução temporal no dois modelos devem satisfazer as seguintes igualdades:

$$\Gamma_{\phi_s(\sigma_n, v_j), \sigma_m}^{(v_j)} = c_{\alpha(\phi_s(\sigma_n, v_j), f_s(\sigma_n, v_j)), \alpha(\sigma_m, v_j)}^{(v_j)}, \quad (4.47)$$

$$c_{\sigma_n, \sigma_m}^{(v_j)} = \Gamma_{\tilde{\alpha}(\phi_c(\sigma_n, v_j), f_c(\sigma_n, v_j)), \tilde{\alpha}(\sigma_m, v_j)}^{(v_j)}. \quad (4.48)$$

Os operadores projetores \mathcal{P}_c , responsáveis pela determinação das probabilidades de encontrar a partícula em um sítio ou arestas não podem ser associados de maneira unitária, ou seja,

$$\mathcal{P}_s \neq E^\dagger \mathcal{P}_s E, \quad (4.49a)$$

$$\mathcal{P}_c \neq E \mathcal{P}_s E^\dagger. \quad (4.49b)$$

Isto ocorre uma vez que os estados no modelo de moeda e de espalhamento são representações contrastantes como discutido na seção (3.4) para o caso unidimensional. Para contornar esse problema definimos novos projetores cruzados

$$\bar{\mathcal{P}}_{s|c}^{(v_i, v_j)} = E^\dagger \mathcal{P}_c^{(v_j)} E, \quad (4.50a)$$

$$\bar{\mathcal{P}}_{c|s}^{(v_j)} = E \mathcal{P}_s^{(v_i, v_j)} E^\dagger, \quad (4.50b)$$

que atuam, respectivamente, em \mathcal{H}_{SM} e \mathcal{H}_{CM} com $\mathcal{P}_c^{(v_j)}$ e $\mathcal{P}_s^{(v_i, v_j)}$ dados pelas Eqs. (4.23) e (4.40). Logo

$$p_c^{(v_j)}(n) = {}_c \langle \psi(n) | \mathcal{P}_c^{(v_j)} | \psi(n) \rangle_c = {}_s \langle \psi(n) | \bar{\mathcal{P}}_{s|c}^{(v_i, v_j)} | \psi(n) \rangle_s, \quad (4.51)$$

$$p_s^{(v_i, v_j)}(n) = {}_s \langle \psi(n) | \mathcal{P}_s^{(v_i, v_j)} | \psi(n) \rangle_s = {}_c \langle \psi(n) | \bar{\mathcal{P}}_{c|s}^{(v_j)} | \psi(n) \rangle_c. \quad (4.52)$$

Assim das Eqs. (4.51) e (4.52) podemos obter a distribuição de probabilidade de encontrar a partícula nos vértices (arestas) diretamente dos estados do modelo moeda (espalhamento) utilizando o operador projetor direto, $\mathcal{P}_c^{(v_j)}$ ($\mathcal{P}_s^{(v_i, v_j)}$), ou a partir dos estados no modelo de espalhamento (moeda), onde a descrição do sistema é feita sobre as arestas (vértices), utilizando o operador projetor cruzado, $\bar{\mathcal{P}}_{s|c}^{(v_i, v_j)}$ ($\bar{\mathcal{P}}_{c|s}^{(v_j)}$), como no caso unidimensional.

4.4 Caminhadas Quânticas em Redes Regulares Bidimensionais

Nesta seção vamos simplificar a metodologia, desenvolvida nas seções anterior, para implementar as caminhadas quânticas em grafos simples, quando elas ocorrem em redes regulares bidimensionais.

Considere uma rede regular bidimensional que possua todos os seus vértices com o mesmo grau g , por exemplo as redes da Tab. (2.1). De maneira geral podemos rotular seus vértices pelos pares ordenados (j, k) . Assim, levando em conta que todos os vértices das rede possuem o mesmo número de ligações, os estados de base do sistema, tanto no modelo de moeda como no modelo de espalhamento são definidos por

$$|\sigma_m, (j, k)\rangle, \text{ com } m = 1, \dots, g \text{ e } (j, k) \in \mathbb{Z}. \quad (4.53)$$

Para o modelo moeda vamos, assumir que o operador translação condicional, Eq. (4.14), seja dado por

$$S = \sum_{(j,k)} \sum_{m=1}^g |\sigma_m, (f_c(j, k, \sigma_m), g_c(j, k, \sigma_m))\rangle \langle \sigma_m, (j, k)|, \quad (4.54a)$$

$$S^\dagger = \sum_{(j,k)} \sum_{m=1}^g |\sigma_m, (\tilde{f}_c(j, k, \sigma_m), \tilde{g}_c(j, k, \sigma_m))\rangle \langle \sigma_m, (j, k)|, \quad (4.54b)$$

onde as funções f_c e \tilde{f}_c , da Eq. (4.9), se desdobraram em duas (f_c, g_c) e (\tilde{f}_c, \tilde{g}_c), pois estamos usando dois índices, (j, k) para rotular os vértices. Vamos admitir que as funções ϕ_c e $\tilde{\phi}_c$, da Eq. (4.9), se reduzem a

$$\phi_c(\sigma_m, (j, k)) = \tilde{\phi}_c(\sigma_m, (j, k)) = \sigma_m. \quad (4.55)$$

O operador moeda, Eq. (4.16), é dado por

$$C^{(j,k)} = \sum_{m=1}^g \sum_{n=1}^g c_{\sigma_m, \sigma_n}^{(j,k)} |\sigma_m, (j, k)\rangle \langle \sigma_n, (j, k)|. \quad (4.56)$$

Observe que podemos representar $C^{(j,k)}$ por uma matriz de ordem $g \times g$.

Combinando as expressões de S e $C^{(j,k)}$, podemos colocar o operador evolução temporal, $U_c = S \times (C^{(j,k)} \otimes \hat{\mathbf{1}}_p)$, na forma

$$U_c = \sum_{(j,k)} \sum_{m=1}^g \sum_{n=1}^g c_{\sigma_m, \sigma_n}^{(j,k)} |\sigma_m, (f_c(j, k, \sigma_m), g_c(j, k, \sigma_m))\rangle \langle \sigma_n, (j, k)|, \quad (4.57a)$$

$$U_c^\dagger = \sum_{(j,k)} \sum_{m=1}^g \sum_{n=1}^g c_{\sigma_n, \sigma_m}^{(\tilde{f}_c(j, k, \sigma_n), \tilde{g}_c(j, k, \sigma_n))^*} |\sigma_m, (\tilde{f}_c(j, k, \sigma_n), \tilde{g}_c(j, k, \sigma_n))\rangle \langle \sigma_n, (j, k)|, \quad (4.57b)$$

cuja ação em um estado de base é dada por

$$U_c |\sigma_n, (j, k)\rangle = \sum_{m=1}^g c_{\sigma_m, \sigma_n}^{(j,k)} |\sigma_m, (f_c(j, k, \sigma_m), g_c(j, k, \sigma_m))\rangle. \quad (4.58a)$$

$$U_c^\dagger |\sigma_n, (j, k)\rangle = \sum_{(j,k)} \sum_{m=1}^g c_{\sigma_n, \sigma_m}^{(\tilde{f}_c(j, k, \sigma_n), \tilde{g}_c(j, k, \sigma_n))^*} |\sigma_m, (\tilde{f}_c(j, k, \sigma_n), \tilde{g}_c(j, k, \sigma_n))\rangle, \quad (4.58b)$$

A probabilidade de encontrar a partícula em um dado sítio (j, k) pode ser determinada em termos do operador projeção

$$\mathcal{P}_c^{(j,k)} = \sum_{m=1}^g |\sigma_m, (j, k)\rangle \langle \sigma_m, (j, k)|. \quad (4.59)$$

No modelo de espalhamento, a expressão para o operador evolução temporal U_s , Eq. (4.33), se reduz a

$$U_s = \sum_{(j,k)} \sum_{m=1}^g \sum_{n=1}^g \Gamma_{\phi_s(\sigma_m, (j,k)), \sigma_n}^{(j,k)} |\phi_s(\sigma_m, (j, k)), (f_s(j, k, \sigma_m), g_s(j, k, \sigma_m))\rangle \langle \sigma_n, (j, k)|, \quad (4.60a)$$

$$U_s^\dagger = \sum_{(j,k)} \sum_{m=1}^g \sum_{n=1}^g \Gamma_{\sigma_n, \phi_s}^{(f_s(j, k, \sigma_n), g_s(j, k, \sigma_n))^*} |\sigma_m, (f_s(j, k, \sigma_n), g_s(j, k, \sigma_n))\rangle \langle \sigma_n, (j, k)|, \quad (4.60b)$$

assim como no caso do modelo de moeda, a função f_s , da Eq. (4.33), se desdobrou em duas, (f_s, g_s) . A ação de U_s em um estado de base $|\sigma_n, (j, k)\rangle$ é definida por

$$U_s |\sigma_n, (j, k)\rangle = \sum_{m=1}^g \Gamma_{\phi_s(\sigma_m, (j,k)), \sigma_n}^{(j,k)} |\phi_s(\sigma_m, (j, k)), (f_s(j, k, \sigma_m), g_s(j, k, \sigma_m))\rangle. \quad (4.61a)$$

$$U_s^\dagger |\sigma_n(j, k)\rangle = \sum_{(j,k)} \sum_{m=1}^g \Gamma_{\sigma_n, \sigma_m}^{(f_s(j,k, \sigma_n), g_s(j,k, \sigma_n))^*} |\sigma_m, (f_s(j, k, \sigma_n), g_s(j, k, \sigma_n))\rangle. \quad (4.61b)$$

A probabilidade de encontrar a partícula em uma dada aresta ligada ao vértice (j, k) e associada ao número quântico σ_m é dada em termos do projetor

$$P_s^{(j,k, \sigma_m)} = |\sigma_m, (j, k)\rangle \langle \sigma_m, (j, k)| + |\phi_s, (f_s, g_s)\rangle \langle \phi_s, (f_s, g_s)|, \quad (4.62)$$

onde

$$\phi = \phi_s(\sigma_m, (j, k)),$$

$$f_s = f_s(\sigma_m, j, k),$$

$$g_s = g_s(\sigma_m, j, k).$$

Levando em conta a regularidade da rede, a equivalência unitária entre os dois modelos fica totalmente estabelecida através da ação do operador isomórfico unitário E , Eq. (4.43), que é definido pelas relações

$$E |\sigma_m, (j, k)\rangle_{sm} = |\sigma_m, (j, k)\rangle_{cm}, \quad (4.63a)$$

$$E^\dagger |\sigma_m, (j, k)\rangle_{cm} = |\sigma_m, (j, k)\rangle_{sm}, \quad (4.63b)$$

com

$$\alpha(\sigma_m, (j, k)) = \sigma_m, \quad \tilde{\alpha}(\sigma_m, (j, k)) = \sigma_m. \quad (4.64)$$

Da relação entre U_c e U_s dos dois modelos, Eq. (4.44), e as Eq. (4.48), (4.55) e (4.64) os coeficientes que descrevem a evolução temporal nos modelos de moeda e espalhamento estão relacionados por

$$c_{\sigma_m, \sigma_n}^{(j,k)} = \Gamma_{\sigma_m, \sigma_n}^{(j,k)}. \quad (4.65)$$

Os coeficientes $c_{\sigma_m, \sigma_n}^{(j,k)}$ e $\Gamma_{\sigma_m, \sigma_n}^{(j,k)}$ podem ser representados por matrizes unitárias de ordem $g \times g$, assim temos,

$$C^{(j,k)} = \Gamma^{(j,k)} = \begin{pmatrix} c_{\sigma_1, \sigma_1}^{(j,k)} & c_{\sigma_1, \sigma_2}^{(j,k)} & \dots & c_{\sigma_1, \sigma_g}^{(j,k)} \\ c_{\sigma_2, \sigma_1}^{(j,k)} & c_{\sigma_2, \sigma_2}^{(j,k)} & \dots & c_{\sigma_2, \sigma_g}^{(j,k)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{\sigma_g, \sigma_1}^{(j,k)} & c_{\sigma_g, \sigma_2}^{(j,k)} & \dots & c_{\sigma_g, \sigma_g}^{(j,k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Gamma_{\sigma_1, \sigma_1}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_1, \sigma_2}^{(j,k)} & \dots & \Gamma_{\sigma_1, \sigma_g}^{(j,k)} \\ \Gamma_{\sigma_2, \sigma_1}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_2, \sigma_2}^{(j,k)} & \dots & \Gamma_{\sigma_2, \sigma_g}^{(j,k)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Gamma_{\sigma_g, \sigma_1}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_g, \sigma_2}^{(j,k)} & \dots & \Gamma_{\sigma_g, \sigma_g}^{(j,k)} \end{pmatrix} \quad (4.66)$$

Finalmente para implementar as caminhadas quânticas, nas redes regulares bidimensionais, devemos definir devemos seguir três passos:

- (i) definir os valores de σ_m que caracterizam os estado de base do sistema, $|\sigma_m, (j, k)\rangle$;
- (ii) construir as funções (f_c, g_c) , $(\tilde{f}_c, \tilde{g}_c)$, (f_s, g_s) e ϕ_s , em termos de σ_m e (j, k) , para determinar a evolução do sistema usando $U_{c,s}$;
- (iii) determinar a distribuição probabilidades de encontrar a partícula nos sítios da rede através do projetores diretos e cruzados.

Por exemplo, para a rede linear, discutida no capítulo 3 comparando as Eqs. (3.16a) e (3.24a) com as Eqs. (4.57a) e (4.60a) respectivamente concluimos que

$$f_c(j, \sigma) = f_s(j, \sigma) = j + \sigma, \quad \tilde{f}_c(j, \sigma) = j - \sigma, \quad \phi_s(j, \sigma) = \sigma, \quad (4.67)$$

onde σ assume os valores ± 1 .

Caminhadas Quânticas Discretas na Rede Quadrada

Aqui e nos próximos capítulos particularizaremos a construção geral apresentada no capítulo 4 para dois casos importantes de redes regulares bidimensionais as redes quadradas e hexagonais. Neste capítulo vamos construir e ilustrar as caminhadas quânticas na rede quadrada, representada na Fig. (5.1), que é uma extensão natural em duas dimensões das redes lineares. Também vamos exemplificar numericamente a equivalência entre os modelos de moeda e de espalhamento para tal topologia.

5.1 Construção do Modelo de Moeda

A rede quadrada é uma rede regular que possui todos os vértices com grau quatro. Portanto para definir o modelo moeda, cada sítio necessita de quatro graus de liberdade auxiliares. Seguindo um desenvolvimento análogo as caminhadas aleatórias clássicas, feito na seção (2.2.2), para cada grau de liberdade σ_m associado a um estado partindo de (j, k) vamos atribuir um par de valores (σ_x, σ_y) , Fig. (5.2), tal que

$$\sigma_1 = (-1, 0), \quad \sigma_2 = (+1, 0), \quad \sigma_3 = (0, -1), \quad \sigma_4 = (0, +1). \quad (5.1)$$

Assim, os estados de base são dados por

$$|\sigma_m, (j, k)\rangle = |(\sigma_x, \sigma_y), (j, k)\rangle, \quad (5.2)$$

com σ_m e (σ_x, σ_y) estão relacionados pela Eq. (5.1).

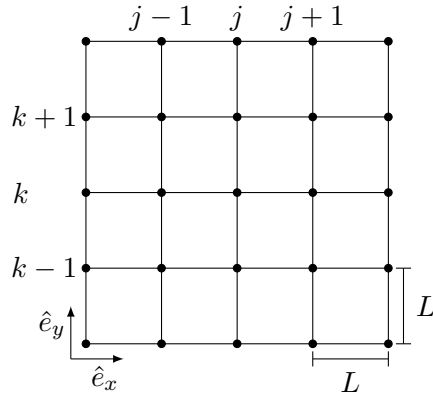


Figura 5.1: Definições geométricas da rede quadrada. Os sítios são rotulados por pares ordenados de números inteiros (j, k) , e vamos assumir que $L = 1$.

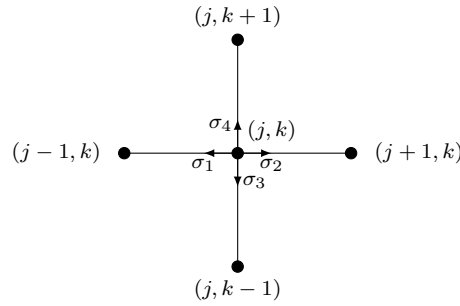


Figura 5.2: Associações entre os números quânticos σ_m e as direções e sentidos de propagação da partícula entre dois vértices adjacentes.

O operador evolução temporal é dado pelo produto dos operadores translação condicional S e o operador moeda C . Para a rede quadrada o primeiro é uma extensão do operador translação do caso unidimensional, Eq. (3.9a), dado por

$$S = \sum_{\sigma=\pm 1} [|(\sigma, 0), (j + \sigma, k)\rangle \langle(\sigma, 0), (j, k)| + |(0, \sigma), (j, k + \sigma)\rangle \langle(0, \sigma), (j, k)|], \quad (5.3)$$

onde o primeiro termo no somatório da Eq. (5.3) está associado com as translações na direção \hat{e}_x e o segundo com as translações na direção \hat{e}_y . O operador moeda $C^{(j,k)}$ pode ser expresso por

$$C^{(j,k)} = \sum_{m=1}^4 \sum_{n=1}^4 c_{\sigma_m, \sigma_n}^{(j,k)} |\sigma_m\rangle_c \langle \sigma_n|$$

$$C^{(j,k)} = \sum_{\sigma'=\pm 1} \sum_{\sigma=\pm 1} \left(c_{(\sigma', 0), (\sigma, 0)}^{(j,k)} |(\sigma', 0)\rangle_c \langle(\sigma, 0)| + c_{(0, \sigma'), (0, \sigma)}^{(j,k)} |(0, \sigma')\rangle_c \langle(0, \sigma)| \right) +$$

$$\sum_{\sigma'=\pm 1} \sum_{\sigma=\pm 1} \left(c_{(0, \sigma'), (0, \sigma)}^{(j,k)} |(0, \sigma')\rangle_c \langle(0, \sigma)| + c_{(\sigma', 0), (0, \sigma)}^{(j,k)} |(\sigma', 0)\rangle_c \langle(0, \sigma)| \right), \quad (5.4)$$

ou em termos de uma matriz 4×4 ,

$$C^{(j,k)} = \begin{pmatrix} c_{\sigma_1, \sigma_1}^{(j,k)} & c_{\sigma_1, \sigma_2}^{(j,k)} & c_{\sigma_1, \sigma_3}^{(j,k)} & c_{\sigma_1, \sigma_4}^{(j,k)} \\ c_{\sigma_2, \sigma_1}^{(j,k)} & c_{\sigma_2, \sigma_2}^{(j,k)} & c_{\sigma_2, \sigma_3}^{(j,k)} & c_{\sigma_2, \sigma_4}^{(j,k)} \\ c_{\sigma_3, \sigma_1}^{(j,k)} & c_{\sigma_3, \sigma_2}^{(j,k)} & c_{\sigma_3, \sigma_3}^{(j,k)} & c_{\sigma_3, \sigma_4}^{(j,k)} \\ c_{\sigma_4, \sigma_1}^{(j,k)} & c_{\sigma_4, \sigma_2}^{(j,k)} & c_{\sigma_4, \sigma_3}^{(j,k)} & c_{\sigma_4, \sigma_4}^{(j,k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{-0, -0}^{(j,k)} & c_{-0, +0}^{(j,k)} & c_{-0, 0-}^{(j,k)} & c_{-0, 0+}^{(j,k)} \\ c_{+0, -0}^{(j,k)} & c_{+0, +0}^{(j,k)} & c_{+0, 0-}^{(j,k)} & c_{+0, 0+}^{(j,k)} \\ c_{0-, -0}^{(j,k)} & c_{0-, +0}^{(j,k)} & c_{0-, 0-}^{(j,k)} & c_{0-, 0+}^{(j,k)} \\ c_{0+, -0}^{(j,k)} & c_{0+, +0}^{(j,k)} & c_{0+, 0-}^{(j,k)} & c_{0+, 0+}^{(j,k)} \end{pmatrix}, \quad (5.5)$$

com $c_{\sigma_m, \sigma_n}^{(j,k)} = \langle \sigma_m | C^{(j,k)} | \sigma_n \rangle$. Combinando as Eqs. (5.3) e (5.4), a ação de $U_c = S \times (C^{(j,k)} \otimes \hat{1}_p)$ em um estado de base é dada por

$$U_c |(\sigma, 0), (j, k)\rangle = \sum_{\sigma'=\pm 1} c_{(\sigma', 0), (\sigma, 0)}^{(j,k)} |(\sigma', 0), (j + \sigma', k)\rangle + c_{(0, \sigma'), (\sigma, 0)}^{(j,k)} |(0, \sigma'), (j, k + \sigma')\rangle \quad (5.6a)$$

$$U_c |(0, \sigma), (j, k)\rangle = \sum_{\sigma'=\pm 1} c_{(0, \sigma'), (0, \sigma)}^{(j,k)} |(0, \sigma'), (j, k + \sigma')\rangle + c_{(\sigma', 0), (0, \sigma)}^{(j,k)} |(\sigma', 0), (j + \sigma', k)\rangle. \quad (5.6b)$$

A distribuição de probabilidades de encontrar a partícula nos sítios da rede é dada através do operador projeção $\mathcal{P}_c^{(j,k)}$ definido por

$$\mathcal{P}_c^{(j,k)} = \sum_{\sigma=\pm 1} (|(\sigma, 0), (j, k)\rangle \langle (\sigma, 0), (j, k)| + |(0, \sigma), (j, k)\rangle \langle (0, \sigma), (j, k)|). \quad (5.7)$$

5.2 Construção do Modelo de Espalhamento

O esquema para o modelo de espalhamento é apresentada na Fig. (5.3), onde os números quânticos $\sigma_m = (\sigma_x, \sigma_y)$, para $\sigma_x, \sigma_y = \pm 1$, estão associados aos estados que estão convergindo para o sítio rotulado por (j, k) e

$$\sigma_1 = (-1, -1), \quad \sigma_2 = (+1, +1), \quad \sigma_3 = (+1, -1), \quad \sigma_4 = (-1, +1). \quad (5.8)$$

Assim os vetores de base são $|\sigma_m, (j, k)\rangle = |(\sigma_x, \sigma_y), (j, k)\rangle$.

A evolução temporal do sistema é dada por U_s , com

$$U_s |(\sigma_x, \sigma_y), (j, k)\rangle = \sum_{\alpha=\pm 1} \sum_{\beta=\pm 1} \Gamma_{(\alpha, \beta), (\sigma_x, \sigma_y)}^{(j,k)} |(\alpha, \beta), (f(j, \alpha, \beta), g(k, \alpha, \beta))\rangle, \quad (5.9)$$

onde as funções $f(j, \alpha, \beta)$ e $g(k, \alpha, \beta)$ foram construídas levando-se em conta a geometria da rede e os pares de valores atribuídos a σ_m . Assim,

$$f(j, \alpha, \beta) = j + \frac{\alpha|\alpha + \beta|}{2}, \quad (5.10a)$$

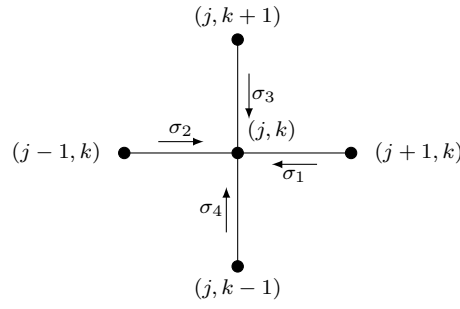


Figura 5.3: Associações entre os números quânticos σ_m e as direções e sentidos de propagação da partícula entre dois vértices adjacentes.

$$g(k, \alpha, \beta) = k + \frac{\beta|\alpha - \beta|}{2}. \quad (5.10b)$$

Os coeficientes $\Gamma_{\sigma_n, \sigma_m}^{(j,k)} = \Gamma_{(\alpha, \beta), (\sigma_x, \sigma_y)}^{(j,k)}$ representam:

- um processo de reflexão, se $(\alpha, \beta) = (-\sigma_x, -\sigma_y)$, $\Gamma_{(-\sigma_x, -\sigma_y), (\sigma_x, \sigma_y)}^{(j,k)} = r_{(-\sigma_x, -\sigma_y), (\sigma_x, \sigma_y)}^{(j,k)}$;
- um processo de transmissão, se $(\alpha, \beta) \neq (-\sigma_x, -\sigma_y)$, $\Gamma_{(\alpha, \beta), (\sigma_x, \sigma_y)}^{(j,k)} = t_{(\alpha, \beta), (\sigma_x, \sigma_y)}^{(j,k)}$.

Além disso eles podem ser organizados na matriz de espalhamento $\Gamma^{(j,k)}$ da seguinte forma,

$$\Gamma^{(j,k)} = \begin{pmatrix} \Gamma_{\sigma_1, \sigma_1}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_1, \sigma_2}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_1, \sigma_3}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_1, \sigma_4}^{(j,k)} \\ \Gamma_{\sigma_2, \sigma_1}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_2, \sigma_2}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_2, \sigma_3}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_2, \sigma_4}^{(j,k)} \\ \Gamma_{\sigma_3, \sigma_1}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_3, \sigma_2}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_3, \sigma_3}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_3, \sigma_4}^{(j,k)} \\ \Gamma_{\sigma_4, \sigma_1}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_4, \sigma_2}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_4, \sigma_3}^{(j,k)} & \Gamma_{\sigma_4, \sigma_4}^{(j,k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{--, --}^{(j,k)} & r_{--, ++}^{(j,k)} & t_{--, +-}^{(j,k)} & t_{--, -+}^{(j,k)} \\ r_{++, --}^{(j,k)} & t_{++, ++}^{(j,k)} & t_{++, +-}^{(j,k)} & t_{++, -+}^{(j,k)} \\ t_{+-, --}^{(j,k)} & t_{+-, ++}^{(j,k)} & t_{+-, +-}^{(j,k)} & t_{+-, -+}^{(j,k)} \\ r_{-+, --}^{(j,k)} & t_{-+, ++}^{(j,k)} & r_{-+, +-}^{(j,k)} & r_{-+, -+}^{(j,k)} \end{pmatrix}. \quad (5.11)$$

Para obter a distribuição de probabilidades definimos dois operadores de projeção: um que age nos estados que estão nas arestas horizontais se $(\sigma_x \times \sigma_y = +1)$ e outro que age nos estados das arestas verticais se $(\sigma_x \times \sigma_y = -1)$,

$$\mathcal{P}_s^{(j,k;+)} = \sum_{\sigma_x} |\sigma_x \sigma_x, (j + (\sigma_x - 1)/2, k)\rangle \langle \sigma_x \sigma_x, (j + (\sigma_x - 1)/2, k)|, \quad (5.12a)$$

$$\mathcal{P}_s^{(j,k;-)} = \sum_{\sigma_y} |-\sigma_y \sigma_y, (j, k + (\sigma_y - 1)/2)\rangle \langle -\sigma_y \sigma_y, (j, k + (\sigma_y - 1)/2)|. \quad (5.12b)$$

5.3 Exemplos Numéricos

Para ilustrar as caminhadas quânticas na rede quadrada, vamos analisar alguns casos particulares, onde assumimos que as matrizes moeda $C^{(j,k)}$ e a de espalhamento $\Gamma^{(j,k)}$ são independentes dos sítios (j,k) . Levando em conta que os modelos de moeda e de espalhamento são equivalentes e a construção das caminhadas em redes regulares, discutida na seção (4.4), da Eq. (4.65), temos que $C^{(j,k)} = \Gamma^{(j,k)}$, ou seja as matrizes moeda e de espalhamento tem a mesma forma,

$$C = \Gamma = \begin{pmatrix} c_{\sigma_1,\sigma_1} & c_{\sigma_1,\sigma_2} & c_{\sigma_1,\sigma_3} & c_{\sigma_1,\sigma_4} \\ c_{\sigma_2,\sigma_1} & c_{\sigma_2,\sigma_2} & c_{\sigma_2,\sigma_3} & c_{\sigma_2,\sigma_4} \\ c_{\sigma_3,\sigma_1} & c_{\sigma_3,\sigma_2} & c_{\sigma_3,\sigma_3} & c_{\sigma_3,\sigma_4} \\ c_{\sigma_4,\sigma_1} & c_{\sigma_4,\sigma_2} & c_{\sigma_4,\sigma_3} & c_{\sigma_4,\sigma_4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Gamma_{\sigma_1,\sigma_1} & \Gamma_{\sigma_1,\sigma_2} & \Gamma_{\sigma_1,\sigma_3} & \Gamma_{\sigma_1,\sigma_4} \\ \Gamma_{\sigma_2,\sigma_1} & \Gamma_{\sigma_2,\sigma_2} & \Gamma_{\sigma_2,\sigma_3} & \Gamma_{\sigma_2,\sigma_4} \\ \Gamma_{\sigma_3,\sigma_1} & \Gamma_{\sigma_3,\sigma_2} & \Gamma_{\sigma_3,\sigma_3} & \Gamma_{\sigma_3,\sigma_4} \\ \Gamma_{\sigma_4,\sigma_1} & \Gamma_{\sigma_4,\sigma_2} & \Gamma_{\sigma_4,\sigma_3} & \Gamma_{\sigma_4,\sigma_4} \end{pmatrix}. \quad (5.13)$$

Evoluímos as caminhadas (nos dois modelos) para quatro exemplos de matrizes, a de Hadamard desacoplada, de Hadamard acoplada, de Grover e da Transformada Discreta de Fourier (DFT). Essas matrizes foram escolhidas, pois elas são usadas na construção de algoritmos quânticos [50] e aparecem com frequência na literatura [23, 52, 60]. Assumindo ordenamento da Eq. (5.13) temos:

(a) Matriz de Hadamard desacoplada

$$C_{H_2} = \Gamma_{H_2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} +1 & +1 & 0 & 0 \\ +1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 & +1 \\ 0 & 0 & +1 & -1 \end{pmatrix}; \quad (5.14)$$

(b) Matriz de Hadamard acoplada

$$C_{H_4} = \Gamma_{H_4} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & -1 & -1 & +1 \end{pmatrix}; \quad (5.15)$$

(c) Matriz de Grover

$$C_{G_4} = \Gamma_{G_4} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 \end{pmatrix}; \quad (5.16)$$

(d) Matriz da transformada discreta de Fourier (DFT)

$$C_{DFT_4} = \Gamma_{DFT_4} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & +i & -1 & -i \\ +1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & -i & -1 & i \end{pmatrix}; \quad (5.17)$$

Calculamos $U_{c,s}^n |\psi(0)\rangle_{cm,sm}$, onde os estados iniciais são dados por

$$|\psi(0)\rangle_{sm} = \frac{1}{2} (|(+, +), (0, 0)\rangle + i|(-, -), (0, 0)\rangle + |(-, +), (0, 0)\rangle + i|(+, -), (0, 0)\rangle), \quad (5.18a)$$

$$|\psi(0)\rangle_{cm} = \frac{1}{2} (|(-, 0), (0, 0)\rangle + i|(0, -), (0, 0)\rangle + |(+, 0), (0, 0)\rangle + i|(0, +), (0, 0)\rangle), \quad (5.18b)$$

com $|\psi(0)\rangle_{cm} = E|\psi(0)\rangle_{sm}$, onde E é o operador que mapeia, de maneira unitária, os estados do modelo de espalhamento no estado do modelo de moeda.

Os resultados das distribuições de probabilidade após $n = 20$ passos de tempo para as matrizes de Hadamard desacoplada, Hadamard acoplada, Grover e DFT, são apresentadas nas Figs. (5.4)-(5.7) e foram obtidas, respectivamente, a partir de

$$(a) \quad p_c(20) = {}_{cm} \langle \psi(20) | \mathcal{P}_c | \psi(20) \rangle_{cm}, \quad (5.19a)$$

$$(b) \quad p_c(20) = {}_{sm} \langle \psi(20) | \bar{\mathcal{P}}_{s|c} | \psi(20) \rangle_{sm}, \quad (5.19b)$$

$$(c) \quad p_s(20) = {}_{sm} \langle \psi(20) | \mathcal{P}_s | \psi(20) \rangle_{sm}, \quad (5.19c)$$

$$(d) \quad p_s(20) = {}_{cm} \langle \psi(20) | \bar{\mathcal{P}}_{c|s} | \psi(20) \rangle_{cm}, \quad (5.19d)$$

tal que, p_c e p_s são as probabilidades normalizada de encontrar a partícula, respectivamente, em um vértice e uma aresta. Os projetores diretos, \mathcal{P}_c e \mathcal{P}_s , são dados pelas Eqs. (5.7) e (5.12). Os projetores cruzados, $\bar{\mathcal{P}}_{s|c}$ e $\bar{\mathcal{P}}_{c|s}$, estão relacionados com \mathcal{P}_c e \mathcal{P}_s pela Eq. (4.50).

Nos gráficos das Fig. (5.4)-(5.7) temos a seguinte organização dos resultados: (a) corresponde à distribuição de probabilidades de encontrar a partícula em um vértice obtida diretamente da evolução do sistema no modelo moeda; (b) apresenta a mesma distribuição que em (a), mas obtida através da evolução do sistema no modelo de espalhamento; em (c) temos a distribuição de probabilidades de encontrar a partícula em uma aresta obtida diretamente da evolução da caminhada no modelo de espalhamento; em (d) temos a mesma distribuição de probabilidades de (c), mas obtida a partir da evolução do sistema no modelo de moeda; em (e) e (f) temos, respectivamente, as planificações das distribuições de probabilidades de encontrar a partícula em um vértice e em uma aresta.

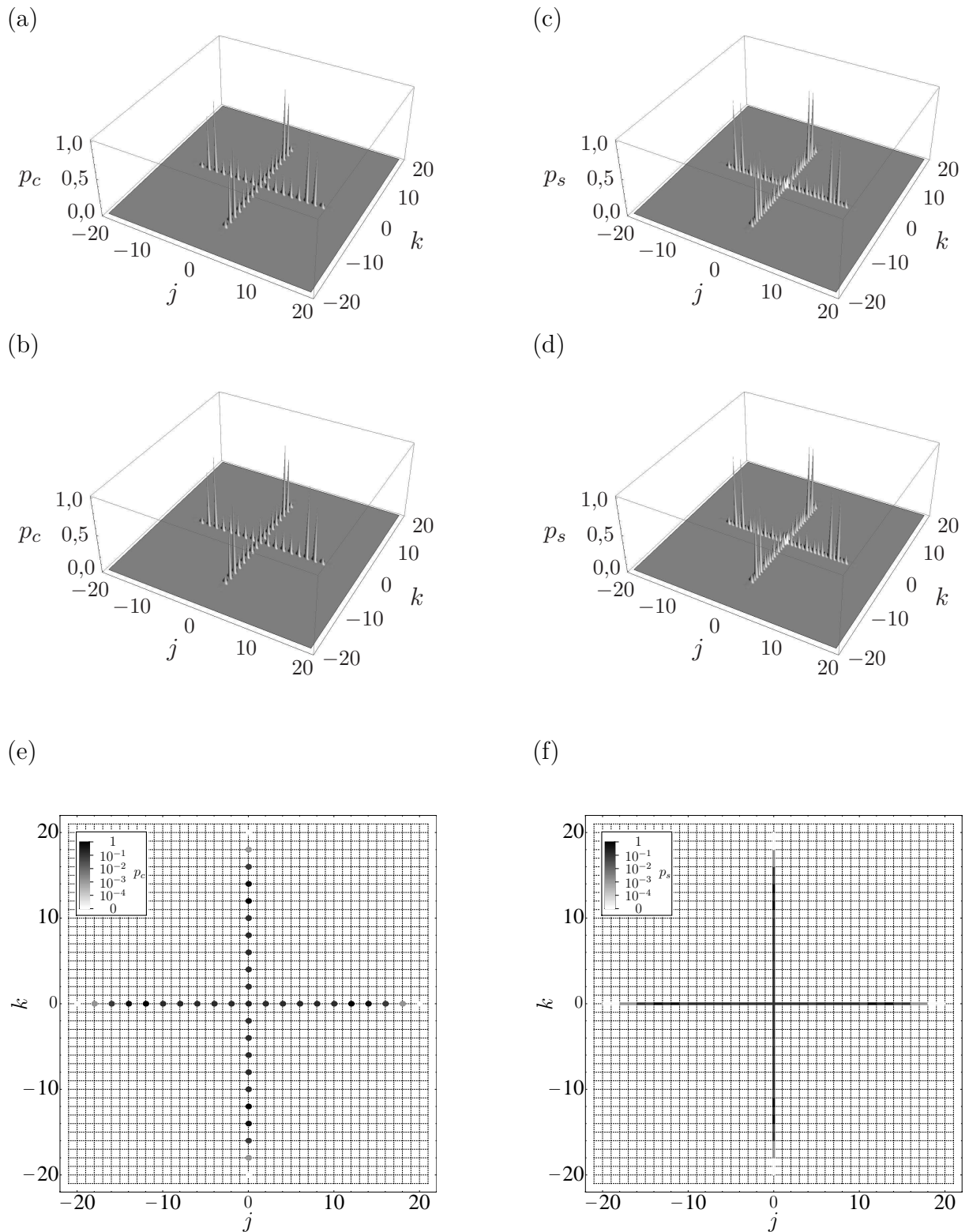
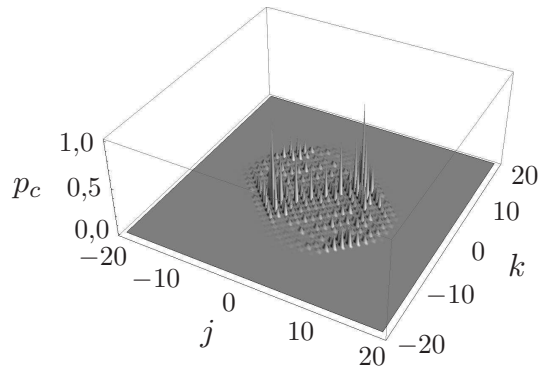
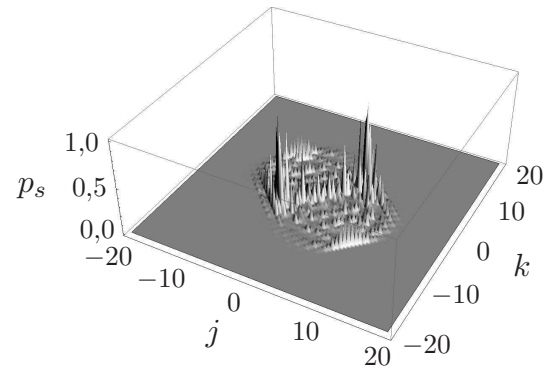


Figura 5.4: Distribuições de probabilidades normalizadas de encontrar a partícula nos vértices, p_c , e nas arestas, p_s , na rede quadrada após 20 passos de tempo, onde coeficientes que descrevem os operadores evolução são dados pelos elementos matriz de Hadamard desacoplada, Eq. (5.14) e $|\psi(0)\rangle$ dado pela Eq. (5.18). Os gráficos (a), (b), (c) e (d) foram obtidos a partir das Eqs. (5.19a-d). Em (e) e (f) temos as planificações de p_c e p_s , respectivamente.

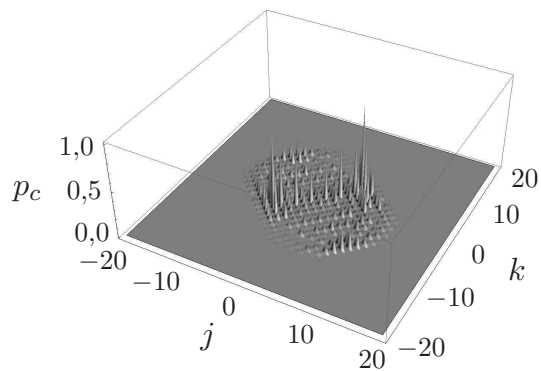
(a)



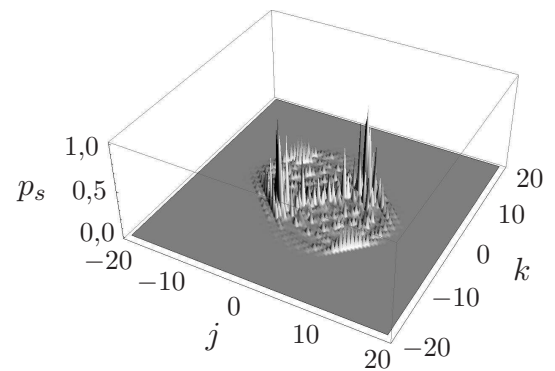
(c)



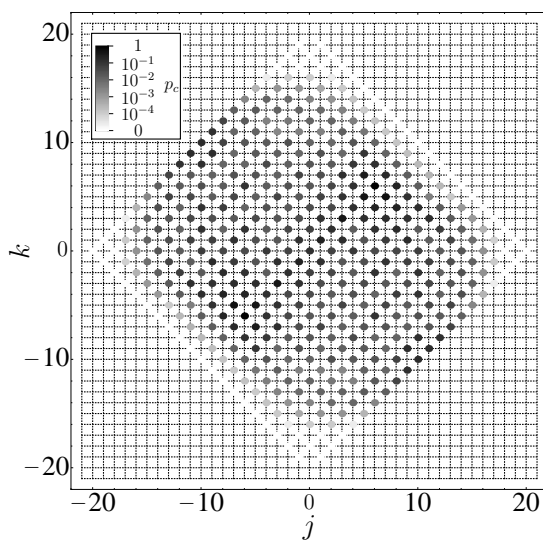
(b)



(d)



(e)



(f)

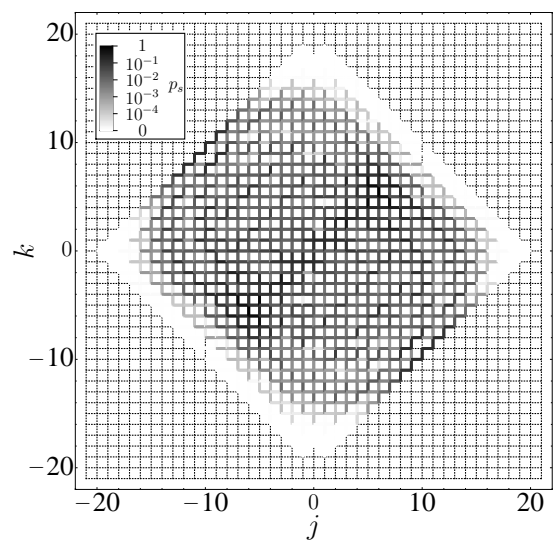
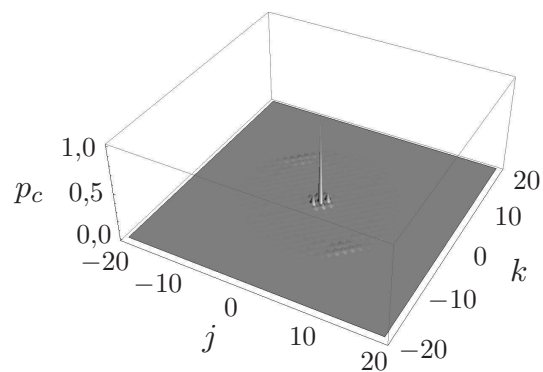
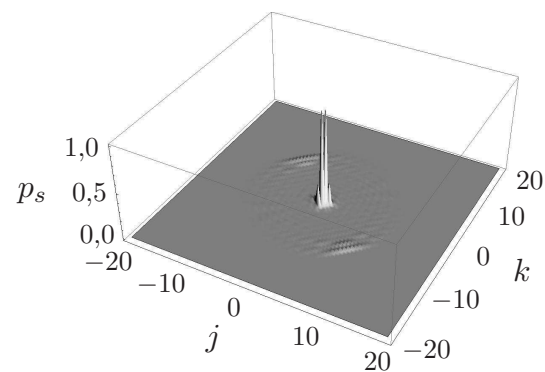


Figura 5.5: Idem a Fig. (5.4), mas para o coeficientes dados pela matriz de Hadamard acoplada, Eq. (5.15).

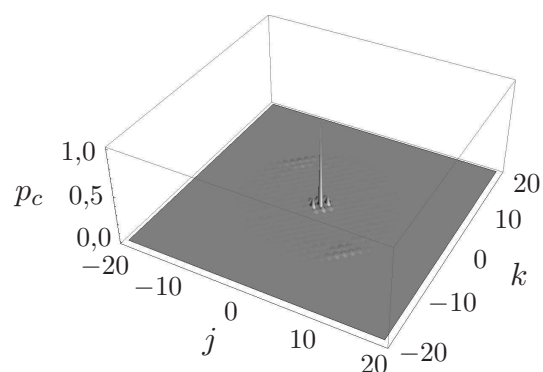
(a)



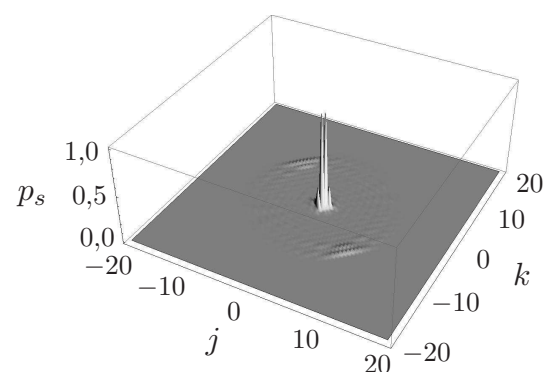
(c)



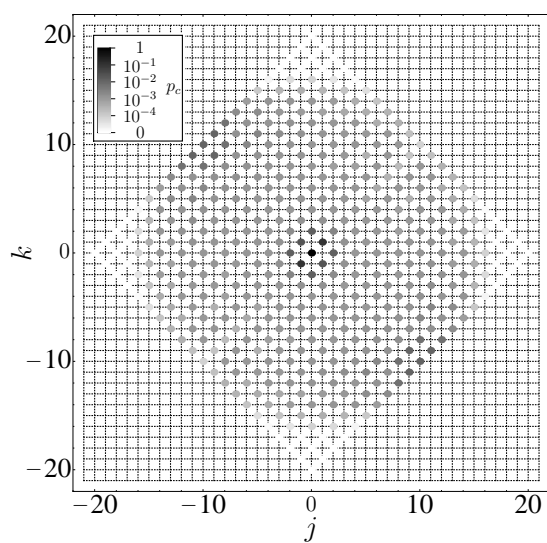
(b)



(d)



(e)



(f)

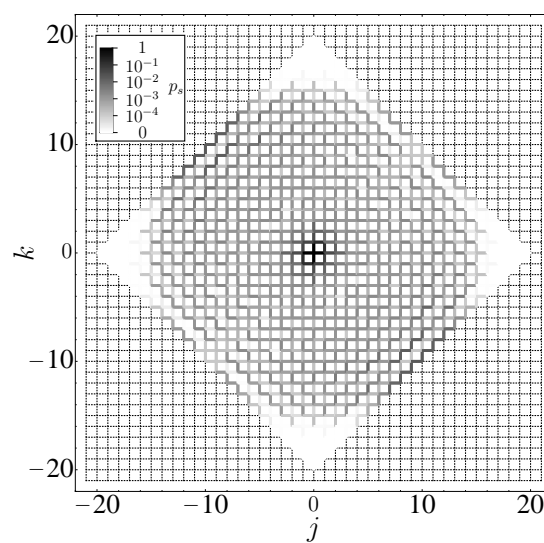
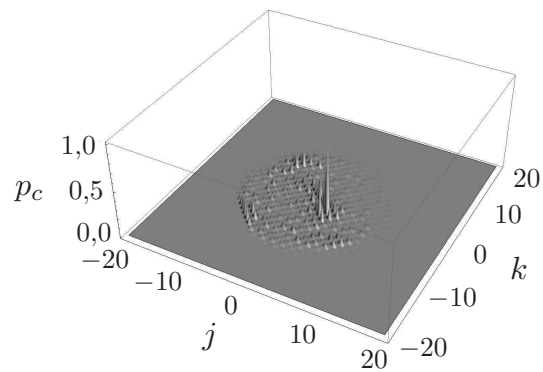
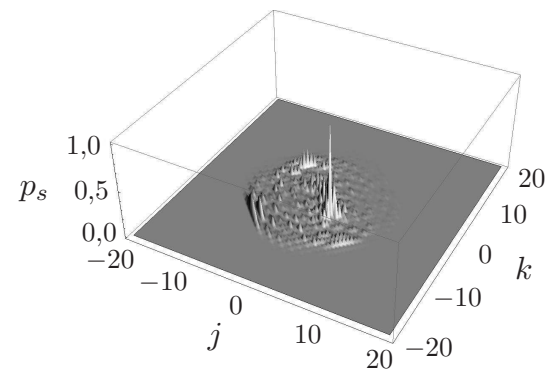


Figura 5.6: Idem a Fig. (5.4), mas para o coeficientes dados pela matriz de Grover, Eq. (5.16).

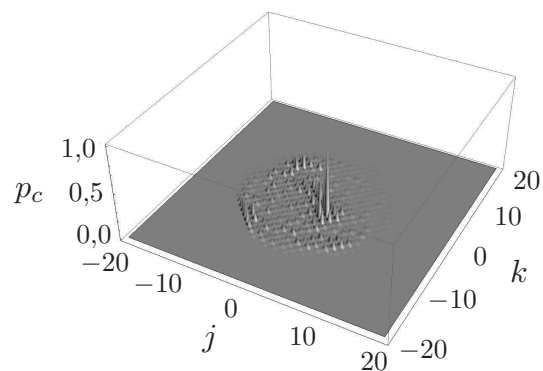
(a)



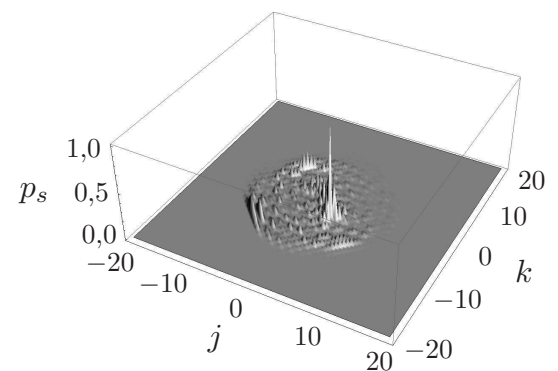
(c)



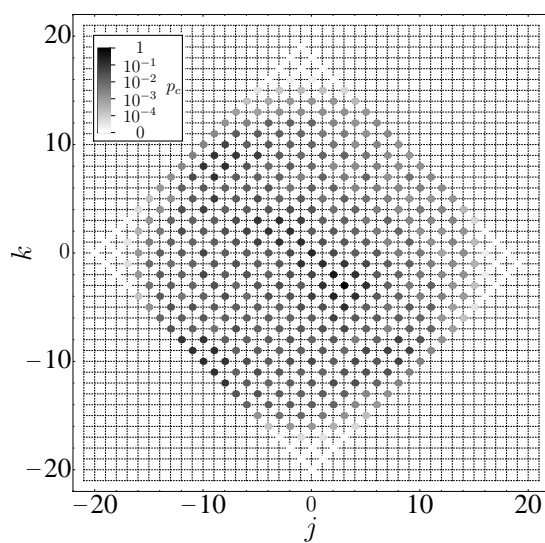
(b)



(d)



(e)



(f)

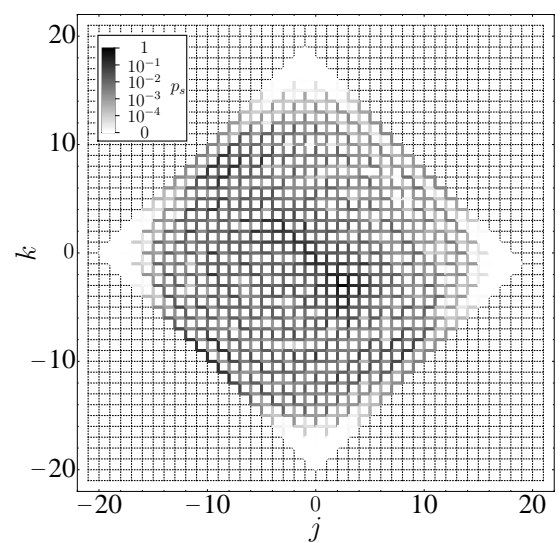


Figura 5.7: Idem a Fig. (5.4), mas para o coeficientes dados pela matriz da transformada discreta de Fourier (DFT), Eq. (5.17).

Os coeficientes dos operadores evolução temporal dado pelas matrizes de Hadamard acoplada, Eq. (5.15), de Grover, Eq. (5.16) e da Transformada Discreta de Fourier, Eq. (5.17), levam a probabilidades iguais da partícula se deslocar em todas as direções. No entanto, devido a diferenças de fases que eles impõem a caminhos em direções diferentes os padrões das distribuição de probabilidades são distintos, veja as Fig. (5.5)-(5.7). E analisando a Fig. (5.4) observamos que o sistema se comporta como duas caminhadas unidimensionais independentes, como nos exemplos da seção (3.5), uma vez que para esse exemplo a matriz de Hadamard desacopla C_{H_2} não acopla as direções e_x e e_y .

Analisando as Figs. (5.4)-(5.7), observamos que, mesmo sendo as duas formulações para as caminhadas quânticas completamente equivalentes por transformações unitárias, elas levam a padrões de distribuições de probabilidade diferentes, pois estamos utilizando representações contrastantes como discutido no caso unidimensional. Isso pode ser visto ao comparar os gráficos (a) e (c), que representam respectivamente as distribuições de probabilidades obtidas diretamente da evolução do sistema nos modelos de moeda e de espalhamento. Entretanto sempre é possível recuperar a distribuição de probabilidades de um modelo através da evolução do outro, através dos projetores cruzados $\bar{P}_{s|c}$ e $\bar{P}_{c|s}$, Eqs. (5.19), veja as distribuições de probabilidades (b) e (d) nas Fig. (5.4)-(5.7). Comparando gráficos (a) com (b) e (c) com (d) observamos que eles são idênticos, o que comprova a equivalência dos modelos.

Para o caso da rede linear, durante a evolução do sistema, as componentes da função de onda ligadas aos vértices j par não interferem com as componentes associadas aos vértices j ímpar durante uma mesma etapa de tempo. De maneira análoga, para a rede quadrada, as componentes da função de onda associadas aos sítios com $(j+k)$ par não interferem com as componentes ligadas a $(j+k)$ ímpar, isso pode ser verificado inspecionando as Eqs. (5.6) e (5.9). Observe que a ação dos operadores evolução temporal no dois modelos em um estado com $(j+k)$ par na etapa de tempo n leva a uma superposição de estado com $(j+k)$ ímpar na etapa de tempo $n+1$ e vice-versa,

$$U_{c,s}|\sigma_m, (j, k)_{j+k=\text{par}}\rangle = \sum_{n=1}^4 A_{n,m}|\sigma_n, (j_n, k_n)_{j_n+k_n=\text{ímpar}}\rangle, \quad (5.20)$$

$$U_{c,s}|\sigma_m, (j, k)_{j+k=\text{ímpar}}\rangle = \sum_{n=1}^4 A_{n,m}|\sigma_n, (j_n, k_n)_{j_n+k_n=\text{par}}\rangle. \quad (5.21)$$

Logo, se o estado inicial do sistema é uma superposição de estados com $j+k$ par, por exemplo o estado dado pela Eq. (5.18), durante a evolução da função de onda, ela exibirá somente superposição de estados com $j+k$ par nas etapas de tempo com n par, e $j+k$

ímpar nos passos de tempo com n ímpar. Associando esse fato a maneira que as funções de onda se propagam pela rede, sobre os vértices para o modelo de moeda, e pelas arestas para o modelo de espalhamento, observamos que, para os exemplos desta seção, após 20 passos de tempo, no modelo de moeda, existem apenas probabilidades de encontrar a partícula apenas no sítios com $j + k$ par. Isso pode ser visto nas Figs. (5.4e)-(5.7e), que apresentam a planificação das distribuições de probabilidades dadas para o modelo de moeda.

A dispersão nas posições da partícula pode ser determinada por

$$\Delta r = \sqrt{\sum_{j,k} p_c^{(j,k)} (j^2 + k^2) - \left(\sum_{j,k} p_c^{(j,k)} j\right)^2 - \left(\sum_{j,k} p_c^{(j,k)} k\right)^2} \quad (5.22)$$

onde $p_c^{(j,k)}$ é a probabilidade de encontrar a partícula no vértice (j, k) . Na Fig. (5.8) temos disposta as dispersões em função das etapas de tempo para evolução do sistema utilizando as matrizes das Eqs. (5.14)-(5.17). Observamos assim como no caso das caminhadas na rede linear a dispersão tem um comportamento $\Delta r \sim n$ contrastando com o caso clássico, onde $\Delta r \sim \sqrt{n}$.

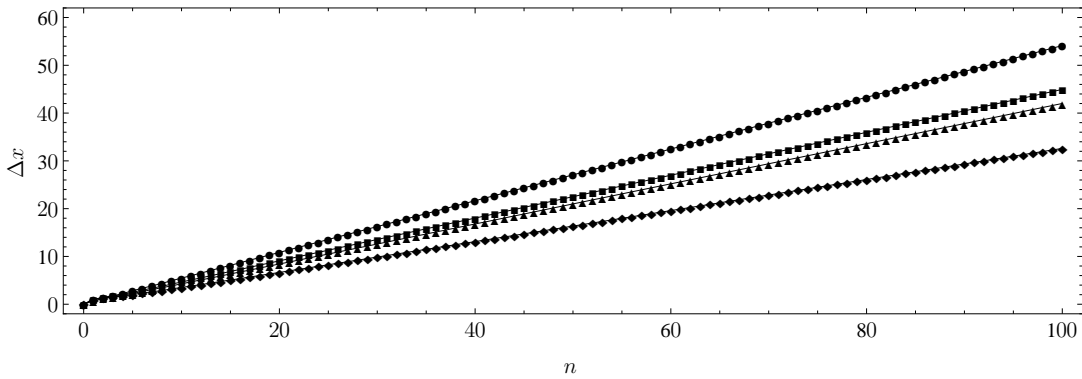


Figura 5.8: Dispersão nas posições em função das etapas de tempo, para a evolução do sistema com as matrizes de Hadamard desacoplada (círculos), de Hadamard acoplada (quadrados), de Grover (losangos) e DFT (triângulos).

Caminhadas Quânticas Discretas na Rede Hexagonal

Neste capítulo vamos definir caminhadas quânticas na rede hexagonal, cuja estrutura topológica e nomenclatura é mostrada na Fig. (6.1a). Vamos associar os vértices ao par ordenado (j, k) , relacionados às direções e_x e e_y . Também vamos assumir que a distância entre dois vértices adjacentes é igual a um. Cada vértice possui três ligações sendo que existem dois conjuntos de vértices que não são equivalentes em relação as direções das arestas a eles conectadas. Assim, sem perda de generalidade, vamos adotar a seguinte convenção de nomenclatura: se k é par, os vértices (j, k_{par}) são aqueles que possuem arestas para as direções norte, sudoeste e sudeste; já se k é ímpar, os vértices (j, k_{impar}) têm arestas para o sul, nordeste e noroeste; Figs. (6.1b) e (6.1c).

Cada vértice faz três ligações com seus vizinhos, assim, tanto no modelo de moeda quanto no de espalhamento, são necessários três valores para o número quântico σ_m para descrever a direção de propagação da partícula em cada passo de tempo. Desta forma, vamos usar dois conjuntos distintos de valores para σ_m , $\Phi_1 = \{-1, 0, +1\}$ e $\Phi_2 = \{0, 1, 2\}$, o que leva a duas formulações distintas, mas equivalentes, para cada versão (moeda e espalhamento) das caminhadas quânticas na rede hexagonal. Ao longo do capítulo, veremos que tais formulações privilegiam a descrição de alguns tipos de trajetórias tendenciosas que a partícula pode fazer ao longo da rede.

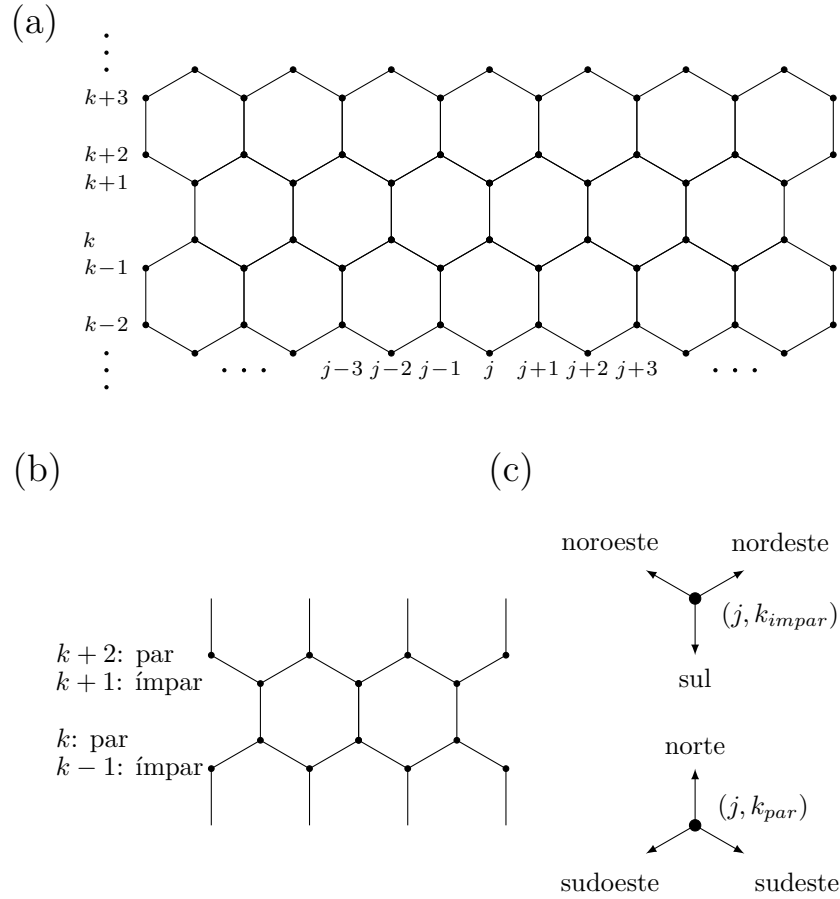


Figura 6.1: Definições da rede hexagonal.

6.1 Estados de Base

Os estados de base para as caminhadas quânticas em redes regulares bidimensionais são descritos por três números quânticos, $|\sigma_n, (j, k)\rangle$, onde σ_n está associado com a direção e sentido de propagação da partícula e o par ordenado (j, k) são os rótulos dos vértices da rede. Para definir os estados de base do sistema, precisamos criar uma convenção que associe os elementos dos conjuntos Φ_1 e Φ_2 com a direção e sentido de propagação da partícula.

Considere os valores do conjunto $\Phi_1 = \{-1, 0, +1\}$. Eles indicam a direção e o sentido da propagação que vai do vértice (j_1, k_1) para um vértice adjacente (j_2, k_2) , com

$$\sigma_1 = -1, \quad \sigma_2 = 0, \quad \sigma_3 = +1, \quad (6.1)$$

tal que:

- se $\sigma_1 = -1$, $j_2 = j_1 - 1$;

- se $\sigma_2 = 0$, $j_2 = j_1$;
- se $\sigma_3 = +1$, $j_2 = j_1 + 1$.

Na Fig. (6.2) temos as associações de σ_n com a direção e o sentido entre dois vértices adjacentes tanto para o modelo de moeda quanto de espalhamento. Observe que ao mudar a paridade de k , as direções e sentidos associados a σ_n se alteram. Isto ocorre pois sítios com k par e k ímpar não são equivalentes, como discutido na seção 2.2.2, para o caso da rede hexagonal.

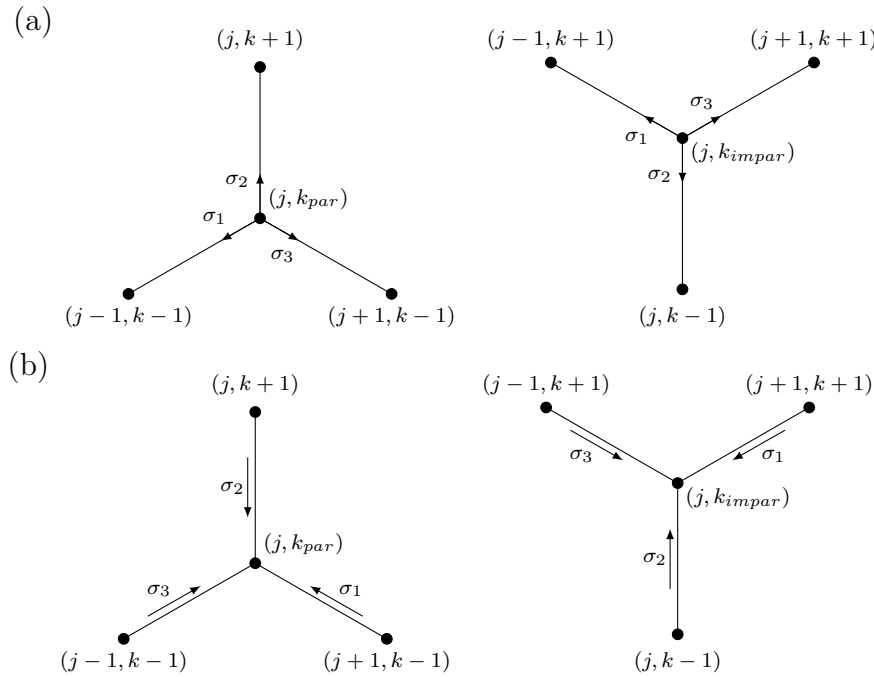


Figura 6.2: Associação entre $\sigma_1 = -1$, $\sigma_2 = 0$ e $\sigma_3 = +1$ com a direção e o sentido entre dois vértices adjacentes; em (a) para o modelo de moeda e em (b) para o modelo de espalhamento.

Também podemos usar os valores dos elementos do conjunto Φ_2 como a forma de nomear o número quântico σ_n . Neste caso, a formulação matemática do problema é um pouco diferente. Note que os valores do conjunto $\Phi_2 = \{0, 1, 2\}$ são os únicos resultados possíveis para o resto da divisão de qualquer número inteiro por três. Assim considerando a seguinte notação $[x]_N \equiv x \pmod N$, onde $[x]_N$ é o resto da divisão de x por N , definimos as funções $\sigma_n(j)$ como funções tal que

$$\sigma_1(j) = \sigma_1 = [j - 1]_3, \quad \sigma_2(j) = \sigma_2 = [j]_3, \quad \sigma_3(j) = \sigma_3 = [j + 1]_3, \quad (6.2)$$

que estão associados com a direção e o sentido entre dois vértices adjacentes de acordo com a Fig. (6.3).

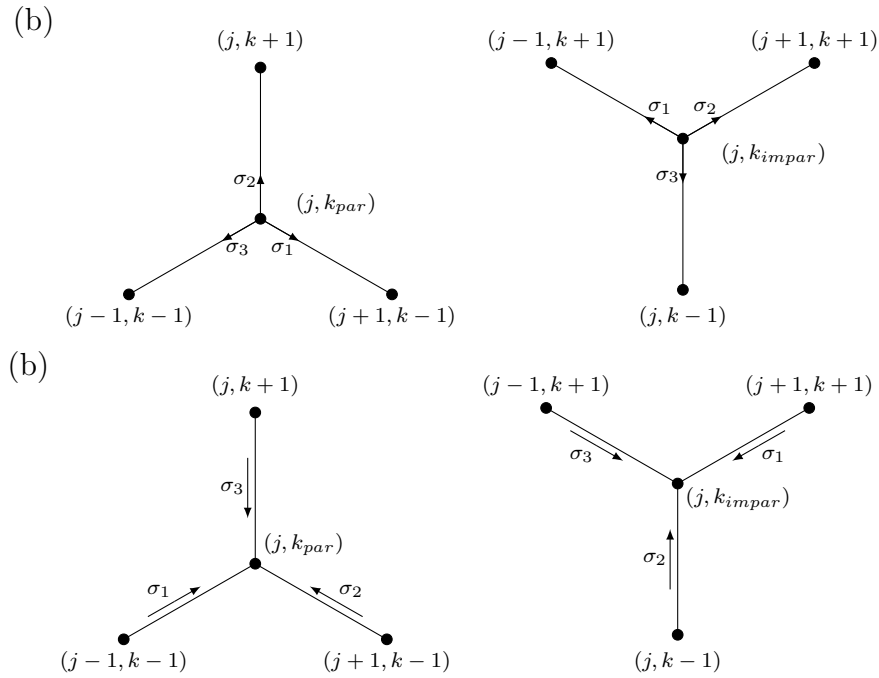


Figura 6.3: Associação das direções com as funções σ_n dada pela Eq. (6.2); em (a) para as caminhadas no modelo de moeda; e em (b) para o modelo de espalhamento.

A escolha dos conjuntos Φ_1 ou Φ_2 , para representar σ_n , tem implicações na maneira como os valores desses elementos estão associados às direções específicas da rede. Enquanto valores dos elementos de Φ_1 estão associados a direções fixas de propagação da partícula ao longo da rede, dependendo de k_{par} ou k_{impar} , o mesmo não ocorre com os valores dos elementos de Φ_2 , uma vez que eles dependem do índice j . Isso é ilustrado na Figs. (6.4) e (6.5). Logo a escolha dos conjuntos Φ_1 ou Φ_2 para representar os números quânticos σ_n pode simplificar a descrição de caminhadas com a evoluções do sistema com certas características específicas. Isso pode ser visualizado considerando a evolução de uma sequência de passos que resulte em estados com mesmo valores para os número quântico σ ,

$$|\sigma, (j_0, k_0)\rangle \xrightarrow{U} |\sigma, (j_1, k_1)\rangle \xrightarrow{U} |\sigma, (j_2, k_2)\rangle \dots \xrightarrow{U} |\sigma, (j_{N-1}, k_{N-1})\rangle \xrightarrow{U} |\sigma, (j_N, k_N)\rangle, \quad (6.3)$$

que resulta em uma evolução do tipo “balística” se $\sigma = \pm 1$ e representa uma partícula confinada entre dois vértices se $\sigma = 0$, quando o conjunto adotado é Φ_1 , Eq. (6.1). Por outro lado, tal trajetória descreve um “loop”, no sentido horário, em um anel da rede se os valores de σ_n forem dados por Φ_2 , Eq. (6.2), que neste caso, após seis passos de tempo a partícula retorna para seu estado inicial.

6.2 Construção do Modelo de Moeda

Lembrando que neste modelo o operador evolução temporal U_c é dado em termos dos operadores de translação condicional S e moeda $C^{(j,k)}$, onde

$$U_c = S \times (C^{(j,k)} \otimes \hat{\mathbf{1}}_p),$$

$$U_c^\dagger = (C^{(j,k)} \otimes \hat{\mathbf{1}}_p)^\dagger \times S^\dagger,$$

vamos definir S e $C^{(j,k)}$ em termos dos elementos dos dois conjuntos de valores para σ_n .

6.2.1 U_c em Termos dos Elementos de Φ_1

A ação do operador translação sobre um estado de base é dada por

$$S|\sigma, (j, k)\rangle = |\sigma, (f(j, \sigma), g(k, \sigma))\rangle, \quad (6.4)$$

$$S^\dagger|\sigma, (j, k)\rangle = |\sigma, (f(j, -\sigma), g(k, -\sigma))\rangle, \quad (6.5)$$

onde

$$f(j, \sigma) = j + \sigma, \quad (6.6)$$

$$g(k, \sigma) = k + (-1)^k (1 - 2|\sigma|). \quad (6.7)$$

A construção acima resulta em $SS^\dagger = S^\dagger S = \hat{\mathbf{1}}_{CM}$, implicando na unitariedade de U_c , uma vez que o operador moeda $C^{(j,k)}$ é dado por

$$C^{(j,k)} = \sum_{\sigma=-1}^1 \sum_{\sigma'=-1}^1 c_{\sigma, \sigma'}^{(j,k)} |\sigma\rangle_c \langle \sigma'|. \quad (6.8)$$

que também pode ser expresso em termos de uma matriz 3×3 ,

$$C^{(j,k)} = \begin{pmatrix} c_{-1,-1}^{(j,k)} & c_{-1,0}^{(j,k)} & c_{-1,+1}^{(j,k)} \\ c_{0,-1}^{(j,k)} & c_{0,0}^{(j,k)} & c_{0,+1}^{(j,k)} \\ c_{+1,-1}^{(j,k)} & c_{+1,0}^{(j,k)} & c_{+1,+1}^{(j,k)} \end{pmatrix}, \quad (6.9)$$

e seus coeficientes obedecem as relações da Eq. (4.17)

$$\sum_{\sigma=-1}^1 c_{\sigma, \sigma'}^{(j,k)*} c_{\sigma, \sigma''}^{(j,k)} = \sum_{\sigma=-1}^1 c_{\sigma', \sigma}^{(j,k)*} c_{\sigma'', \sigma}^{(j,k)} = \delta_{\sigma' \sigma''}. \quad (6.10)$$

Combinando as Eqs. (6.4) e (6.8), a ação de U_c em um estado de base é

$$U_c |\sigma, (j, k)\rangle = \sum_{\sigma'=-1}^1 c_{\sigma', \sigma}^{(j, k)} |\sigma', (f(j, \sigma'), g(k, \sigma'))\rangle, \quad (6.11a)$$

$$U_c^\dagger |\sigma, (j, k)\rangle = \sum_{\sigma'=-1}^1 c_{\sigma, \sigma'}^{(f(j, -\sigma), g(k, -\sigma))^*} |\sigma', (f(j, -\sigma), g(k, -\sigma))\rangle. \quad (6.11b)$$

A probabilidade de encontrar a partícula no sítio (j, k) em uma etapa de tempo n , é dada por

$$p^{(j, k)}(n) = \langle \psi(n) | \mathcal{P}_c^{(j, k)} | \psi(n) \rangle, \quad (6.12)$$

e o operador projetor definido por

$$\mathcal{P}_c^{(j, k)} = \sum_{\sigma=-1}^1 |\sigma, (j, k)\rangle \langle \sigma, (j, k)|. \quad (6.13)$$

6.2.2 U_c em Termos dos Elementos de Φ_2

A ação do operador translação S é descrita por

$$S |\sigma, (j, k)\rangle = |\sigma, (f(j, k, \sigma), g(j, k, \sigma))\rangle, \quad (6.14)$$

$$S^\dagger |\sigma, (j, k)\rangle = |\sigma, (f(j, k; \phi(k, \sigma)), g(j, k, \phi(k, \sigma)))\rangle, \quad (6.15)$$

onde

$$f(j, k, \sigma) = j + (-1)^{\sigma - [j + [k]_2]_3} \operatorname{sgn}[\sigma - [j + [k]_2]_3], \quad (6.16)$$

$$g(j, k, \sigma) = k + (-1)^k (1 - 2 \operatorname{sgn}[\sigma - [j + [k]_2]_3]), \quad (6.17)$$

$$\phi(k, \sigma) = [\sigma - (-1)^k]_3, \quad (6.18)$$

com $\operatorname{sgn}[x] = x/|x|$, se $x \neq 0$, e $\operatorname{sgn}[0] = 0$. Por construção, $SS^\dagger = S^\dagger S = \hat{\mathbf{1}}_{CM}$, implicando na unitariedade de U_c . O operador moeda, $C^{(j, k)}$ é dado por

$$C^{(j, k)} = \sum_{\sigma=0}^2 \sum_{\sigma'=0}^2 c_{\sigma, \sigma'}^{(j, k)} |\sigma\rangle_c \langle \sigma'|, \quad (6.19)$$

que pode ser expresso em termos de uma matrix 3×3 ,

$$C^{(j, k)} = \begin{pmatrix} c_{0,0}^{(j, k)} & c_{0,1}^{(j, k)} & c_{0,2}^{(j, k)} \\ c_{1,0}^{(j, k)} & c_{1,1}^{(j, k)} & c_{1,2}^{(j, k)} \\ c_{2,0}^{(j, k)} & c_{2,1}^{(j, k)} & c_{2,2}^{(j, k)} \end{pmatrix}, \quad (6.20)$$

com seus coeficientes obedecendo as seguintes relações

$$\sum_{\sigma=0}^2 c_{\sigma,\sigma'}^{(j,k)*} c_{\sigma,\sigma''}^{(j,k)} = \sum_{\sigma=0}^2 c_{\sigma',\sigma}^{(j,k)*} c_{\sigma'',\sigma}^{(j,k)} = \delta_{\sigma'\sigma''}. \quad (6.21)$$

Assim, das Eqs. (6.15) e (6.19), a ação de U_c em um estado de base é

$$U_c |\sigma, (j, k)\rangle = \sum_{\sigma'=0}^2 c_{\sigma',\sigma}^{(j,k)} |\sigma', (f(j, \sigma'), g(k, \sigma'))\rangle. \quad (6.22a)$$

$$U_c^\dagger |\sigma, (j, k)\rangle = \sum_{\sigma'=0}^2 c_{\sigma,\sigma'}^{(f(j,k,\phi(k,\sigma)),g(j,k,\phi(k,\sigma)))^*} |\sigma', (f(j, k, \phi(k, \sigma)), g(j, k, \phi(k, \sigma)))\rangle. \quad (6.22b)$$

Finalmente a probabilidade de encontrar a partícula no sítio (j, k) em uma etapa de tempo n , é dada por

$$p^{(j,k)}(n) = \langle \psi(n) | \mathcal{P}_c^{(j,k)} | \psi(n) \rangle, \quad (6.23)$$

onde operador projetor correspondente é

$$\mathcal{P}_c^{(j,k)} = \sum_{\sigma=0}^2 |\sigma, (j, k)\rangle \langle \sigma, (j, k)|. \quad (6.24)$$

6.3 Modelo de Espalhamento

O operador que implementa a evolução em cada etapa de tempo é dado por

$$U_s = R + T, \quad (6.25)$$

onde R e T são os operadores responsáveis pelos processos de reflexão e transmissão em um dado vértice.

6.3.1 U_s em Termos dos Elementos de Φ_1

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

$$U_s |\sigma, (j, k)\rangle = \sum_{\sigma'=-1}^1 \Gamma_{\sigma',\sigma}^{(j,k)} |\sigma', (f(j, \sigma'), g(k, \sigma'))\rangle, \quad (6.26a)$$

$$U_s^\dagger |\sigma, (j, k)\rangle = \sum_{\sigma'=-1}^1 \Gamma_{\sigma,\sigma'}^{(f(j,\sigma'),g(k,\sigma'))^*} |\sigma', (f(j, \sigma'), g(k, \sigma'))\rangle, \quad (6.26b)$$

onde as funções f e g são dadas respectivamente pelas Eqs. (6.6) e (6.7).

Os coeficientes $\Gamma_{\sigma',\sigma}^{(j,k)}$, são denominados coeficientes de reflexão e transmissão da rede. Para cada sítio (j, k) temos nove coeficientes, sendo três de reflexão e seis de transmissão,

- se $\sigma' = -\sigma$, $\Gamma_{\sigma',\sigma}^{(j,k)} = r_{\sigma',\sigma}^{(j,k)}$ representa um coeficiente de reflexão;
- se $\sigma' \neq -\sigma$, $\Gamma_{\sigma',\sigma}^{(j,k)} = t_{\sigma',\sigma}^{(j,k)}$ representa um coeficiente de transmissão;

logo,

$$R|\sigma, (j, k)\rangle = r_{-\sigma,\sigma}^{(j,k)} |-\sigma, (f(j, -\sigma), g(k, -\sigma))\rangle \quad (6.27a)$$

$$R^\dagger|\sigma, (j, k)\rangle = r_{\sigma,-\sigma}^{(f(j,\sigma),g(k,\sigma))^*} |-\sigma, (f(j, \sigma), g(k, \sigma))\rangle \quad (6.27b)$$

$$T|\sigma, (j, k)\rangle = \sum_{\sigma' \neq -\sigma} t_{\sigma',\sigma}^{(j,k)} |\sigma', (f(j, \sigma'), g(k, \sigma'))\rangle \quad (6.27c)$$

$$T^\dagger|\sigma, (j, k)\rangle = \sum_{\sigma' \neq -\sigma} t_{\sigma,\sigma'}^{(f(j,\sigma),g(k,\sigma))^*} |\sigma', (f(j, \sigma), g(k, \sigma))\rangle \quad (6.27d)$$

onde aplicamos as relações das Eqs. (6.25) e (6.26).

Os coeficientes Γ 's, de um dado sítio (j, k) , podem ser arranjados em uma matriz unitária

$$\Gamma^{(j,k)} = \begin{pmatrix} \Gamma_{-1,-1}^{(j,k)} & \Gamma_{-1,0}^{(j,k)} & \Gamma_{-1,+1}^{(j,k)} \\ \Gamma_{0,-1}^{(j,k)} & \Gamma_{0,0}^{(j,k)} & \Gamma_{0,+1}^{(j,k)} \\ \Gamma_{+1,-1}^{(j,k)} & \Gamma_{+1,0}^{(j,k)} & \Gamma_{+1,+1}^{(j,k)} \end{pmatrix}, \quad (6.28)$$

e devem obedecer as relações da Eq. (4.32),

$$\sum_{\sigma=-1}^1 \Gamma_{\sigma,\sigma'}^{(j,k)*} \Gamma_{\sigma,\sigma''}^{(j,k)} = \sum_{\sigma=-1}^1 \Gamma_{\sigma',\sigma}^{(j,k)*} \Gamma_{\sigma'',\sigma}^{(j,k)} = \delta_{\sigma'\sigma''}. \quad (6.29)$$

Finalmente, a probabilidade de encontrar a partícula em uma dada aresta que chega no vértice (j, k) pela direção σ , é dada pelo valor médio do operador projetor definido por

$$\mathcal{P}_s^{(\sigma,j,k)} = |\sigma, (j, k)\rangle \langle \sigma, (j, k)| + |-\sigma, (f(j, -\sigma), g(k, -\sigma))\rangle \langle -\sigma, (f(j, -\sigma), g(k, -\sigma))|. \quad (6.30)$$

6.3.2 U_s em Termos dos Elementos de Φ_2

Definimos a ação do operador U_s em um estado de base por

$$U_s|\sigma, (j, k)\rangle = \sum_{\sigma'=0}^2 \Gamma_{\phi(k,\sigma'),\sigma}^{(j,k)} |\phi(k, \sigma'), (f(j, k, \phi(k, \sigma')), g(j, k, \phi(k, \sigma')))\rangle, \quad (6.31a)$$

$$U_s^\dagger |\sigma, (j, k)\rangle = \sum_{\sigma'=0}^2 \Gamma_{\sigma, \sigma'}^{(f(j, k, \phi(k, \sigma)), g(j, k, \phi(k, \sigma)))^*} |\sigma', (f(j, k, \phi(k, \sigma)), g(j, k, \phi(k, \sigma)))\rangle. \quad (6.31b)$$

onde as funções f , g e ϕ são dadas, respectivamente, pelas Eqs. (6.16), (6.17) e (6.18).

Lembrando que em cada aresta temos dois estados, um saindo e outro chegando em um mesmo vértice, uma consequência dessa formulação, no modelo de espalhamento, para as caminhadas quânticas na rede hexagonal, é que podemos relacionar o valor do números quânticos σ_{in} , que representa o estado entrando em um vértice (j, k) , com σ_{out} associado ao estado saindo de (j, k) através função $\phi(k, \sigma)$, Eq. (6.18), tal que

$$\sigma_{out} = \phi(k, \sigma_{in}). \quad (6.32)$$

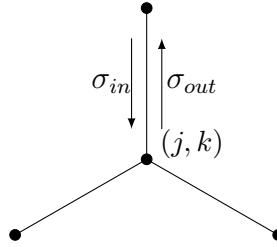


Figura 6.6: Exemplo de dois estados chegando e saindo de um vértice por uma mesma aresta. Os valores de σ_{in} e σ_{out} estão relacionados pela Eq. (6.32).

Levando em conta a ação do operador evolução U_s nos estados de base, as ações dos operadores de transmissão e reflexão são

$$T|\sigma, (j, k)\rangle = \sum_{\sigma' \neq \sigma} t_{\phi(k, \sigma'), \sigma}^{(j, k)} |\phi(k, \sigma'), (f(j, k, \phi(k, \sigma')), g(j, k, \phi(k, \sigma')))\rangle, \quad (6.33)$$

$$R|\sigma, (j, k)\rangle = r_{\phi(k, \sigma), \sigma}^{(j, k)} |\phi(k, \sigma), (f(j, k, \phi(k, \sigma)), g(j, k, \phi(k, \sigma)))\rangle, \quad (6.34)$$

$$T^\dagger |\sigma, (j, k)\rangle = \sum_{\sigma' \neq \sigma} t_{\sigma, \sigma'}^{(f(j, k, \phi(k, \sigma)), g(j, k, \phi(k, \sigma)))^*} |\sigma', (f(j, k, \phi(k, \sigma)), g(j, k, \phi(k, \sigma)))\rangle \quad (6.35)$$

$$R^\dagger |\sigma, (j, k)\rangle = r_{\sigma, \sigma}^{(f(j, k, \phi(k, \sigma)), g(j, k, \phi(k, \sigma)))^*} |\sigma, (f(j, k, \phi(k, \sigma)), g(j, k, \phi(k, \sigma)))\rangle \quad (6.36)$$

onde

- $\Gamma_{\phi(k, \sigma'), \sigma}^{(j, k)} = t_{\phi(k, \sigma'), \sigma}^{(j, k)}$, representa um coeficiente de transmissão se $\sigma' \neq \sigma$;
- $\Gamma_{\phi(k, \sigma), \sigma} = r_{\phi(k, \sigma), \sigma}$, representa um coeficiente de reflexão.

Os coeficientes de reflexão e transmissão podem ser arranjados em uma matriz unitária

$$\Gamma^{(j,k)} = \begin{pmatrix} \Gamma_{0,0}^{(j,k)} & \Gamma_{0,1}^{(j,k)} & \Gamma_{0,2}^{(j,k)} \\ \Gamma_{1,0}^{(j,k)} & \Gamma_{1,1}^{(j,k)} & \Gamma_{1,2}^{(j,k)} \\ \Gamma_{2,0}^{(j,k)} & \Gamma_{2,1}^{(j,k)} & \Gamma_{2,2}^{(j,k)} \end{pmatrix}, \quad (6.37)$$

cujos os elementos devem obedecer a

$$\sum_{\sigma=0}^2 \Gamma_{\sigma,\sigma'}^{(j,k)*} \Gamma_{\sigma,\sigma''}^{(j,k)} = \sum_{\sigma=0}^2 \Gamma_{\sigma',\sigma}^{(j,k)*} \Gamma_{\sigma'',\sigma}^{(j,k)} = \delta_{\sigma'\sigma''}. \quad (6.38)$$

O operador projetor é dado por

$$\mathcal{P}_s^{(\sigma,j,k)} = |\sigma, (j, k)\rangle \langle \sigma, (j, k)| + |\phi(k, \sigma), (f, g)\rangle \langle \phi(k, \sigma), (f, g)| \quad (6.39)$$

com

$$f = f(j, k, \phi(k, \sigma)),$$

$$g = g(j, k, \phi(k, \sigma)).$$

Explorando as Caminhadas Quânticas na Rede Hexagonal

Neste capítulo exemplificaremos às caminhadas quânticas na rede hexagonal usando as formulações desenvolvidas no capítulo 6. De forma mais específica, analisaremos o comportamento da dispersão na posição das caminhadas e exploraremos diferentes conjuntos de coeficientes, que descrevem os operadores de evolução temporal em cada modelo, que levam a caminhadas que apresentam simetrias e com “trajetórias tendenciosas”.

7.1 Exemplos de Evoluções das Caminhadas

Uma consequência da equivalência entre os modelos de moeda e de espalhamento é a relação entre os coeficientes que descrevem os operadores evolução temporal, que para as caminhadas em redes regulares, é dada por $c_{\sigma,\sigma'}^{(j,k)} = \Gamma_{\sigma,\sigma'}^{(j,k)}$, isso implica na igualdade entre as matrizes moeda e de espalhamento, $C^{(j,k)} = \Gamma^{(j,k)}$. Para ilustrar a dinâmica das caminhadas quânticas na rede hexagonal, evoluímos o sistema para cinco casos, utilizando matrizes moedas e suas correspondentes de espalhamento. Escolhemos as seguintes matrizes:

(a) imparcial típica 3×3 ,

$$C_{imp_3} = \Gamma_{imp_3} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -1 & \exp[-\pi i/3] & \exp[-\pi i/3] \\ \exp[-\pi i/3] & -1 & \exp[-\pi i/3] \\ \exp[-\pi i/3] & \exp[-\pi i/3] & -1 \end{pmatrix}; \quad (7.1)$$

(b) Transformada Discreta de Fourier (DFT) 3×3 ,

$$C_{DFT_3} = \Gamma_{DFT_3} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} \exp[2\pi i/3] & 1 & \exp[-2\pi i/3] \\ 1 & 1 & 1 \\ \exp[-2\pi i/3] & 1 & \exp[2\pi i/3] \end{pmatrix}; \quad (7.2)$$

(c) tendenciosa 3×3 ,

$$C_{ten_3} = \Gamma_{ten_3} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 1 - \sqrt{3} & 1 + \sqrt{3} \\ 1 + \sqrt{3} & 1 & 1 - \sqrt{3} \\ 1 - \sqrt{3} & 1 + \sqrt{3} & 1 \end{pmatrix}; \quad (7.3)$$

(d) Transformada Discreta de Hartley (DHT) 3×3 [61],

$$C_{DHT_3} = \Gamma_{DHT_3} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -1 + \sqrt{3} & 2 & -1 - \sqrt{3} \\ 2 & 2 & 2 \\ -1 - \sqrt{3} & 2 & -1 + \sqrt{3} \end{pmatrix}; \quad (7.4)$$

(e) Grover 3×3 ,

$$C_{G_3} = \Gamma_{G_3} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \end{pmatrix}. \quad (7.5)$$

Os dois primeiros casos, Eqs. (7.1) e (7.2), são matrizes imparciais (e complexas), uma vez que seus coeficientes têm o mesmo módulo quadrado, $|c_{\sigma,\sigma'}|^2 = 1/3$. Isso resulta em igual probabilidade de deslocamento da partícula em todas as direções, contudo, elas introduzem diferenças de fases distintas dependendo do caminho que a partícula se desloca.

A terceira matriz, Eq. (7.3), é fortemente tendenciosa, em deslocar a partícula em uma dada direção a cada passo de tempo, por causa das diferenças entre os módulos dos seus elementos, uma vez que cada coeficiente em uma linha representa a amplitude de probabilidades da partícula se deslocar em uma direção. Por exemplo, considere os três coeficientes da primeira linha da Eq. (7.3),

$$a_1 = \frac{1}{3}, \quad a_2 = \frac{1 - \sqrt{3}}{3}, \quad a_3 = \frac{1 + \sqrt{3}}{3},$$

assim, $|a_1|^2 = 1/9 \approx 0,11$, $|a_2|^2 = 2(2 - \sqrt{3})/9 \approx 0,06$, $|a_3|^2 = 2(2 + \sqrt{3})/9 \approx 0,83$. Logo a direção de propagação da partícula associada ao coeficiente a_3 será privilegiada.

A matriz da transformada discreta de Hartley [61], embora não seja usualmente considerada em problemas de caminhadas quânticas, é um interessante exemplo devido às suas aplicações em processamento de sinais [62]. A última, versão 3×3 da matriz de Grover, é comumente usada em caminhadas quânticas, e tem aplicações na construção de portas lógicas quânticas [50].

Outro ponto a se destacar são os processos de interferência, assim como nas redes linear e quadrada, durante a evolução do sistema, eles só ocorrem entre componentes da função de onda associadas a estados com (j, k_{par}) ou (j, k_{impar}) , e nunca entre estados com (j, k_{par}) e (j, k_{impar}) . Isso pode ser verificado inspecionando as Eqs. (6.11a), (6.22a), (6.26a) e (6.31a), que podem ser resumidas em

$$U_{c,s}|\sigma_m, (j, k_{par})\rangle = \sum_{n=1}^3 A_{n,m}|\sigma_n, (j_n, k_{n_{impar}})\rangle, \quad (7.6)$$

$$U_{c,s}|\sigma_m, (j, k_{impar})\rangle = \sum_{n=1}^3 A_{n,m}|\sigma_n, (j_n, k_{n_{par}})\rangle. \quad (7.7)$$

Assim, se o estado inicial do sistema é uma superposição de estados com (j, k_{par}) , por exemplo os estado dados pelas Eqs. (7.13) e (7.17), durante a evolução do sistema, a função de onda ela exibirá somente superposição de estados com (j, k_{par}) nas etapas de tempo com n par, e (j, k_{impar}) nos passos de tempo com n ímpar. Este fato fica evidenciado quando olhamos a distribuição de probabilidades para o modelo de moeda, o que pode ser visto nas Figs. (7.3e)-(7.7e) e Figs. (7.9e)-(7.13e), que apresentam a planificação das distribuições de probabilidades relativas para os exemplos de caminhadas no modelo de moeda para os estados iniciais das Eqs. (7.13) e (7.17), respectivamente.

7.1.1 Caminhadas Usando a Formulação com Φ_1

Para evoluir as caminhadas usando a formulação com $\sigma_n = \{-1, 0, +1\}$, por conveniência, trocaremos as colunas 1 e 3 na matriz dos coeficientes $\Gamma^{(j,k)}$ da Eq. (6.28), de maneira que os coeficientes de reflexão fiquem dispostos na diagonal principal, portanto

$$C^{(j,k)} = \Gamma^{(j,k)} = \begin{pmatrix} \Gamma_{-1,+1} & \Gamma_{-1,0} & \Gamma_{-1,-1} \\ \Gamma_{0,+1} & \Gamma_{0,0} & \Gamma_{0,-1} \\ \Gamma_{+1,+1} & \Gamma_{+1,0} & \Gamma_{+1,-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{-1,+1} & t_{-1,0} & t_{-1,-1} \\ t_{0,+1} & r_{0,0} & t_{0,-1} \\ t_{+1,+1} & t_{+1,0} & r_{+1,-1} \end{pmatrix}. \quad (7.8)$$

Analisando as Eqs. (7.1)-(7.5), observamos que as distribuições dos elementos dessas matrizes tem as seguintes formas:

- imparcial, Eq. (7.1), e Grover, Eq. (7.5),

$$\Gamma = \begin{pmatrix} a & b & b \\ b & a & b \\ b & b & a \end{pmatrix}; \quad (7.9)$$

- DFT, Eq. (7.2), e DHT, Eq. (7.4),

$$\Gamma = \begin{pmatrix} a & b & c \\ b & b & b \\ c & b & a \end{pmatrix}; \quad (7.10)$$

- tendenciosa, Eq. (7.3)

$$\Gamma = \begin{pmatrix} a & b & c \\ c & a & b \\ b & c & a \end{pmatrix}. \quad (7.11)$$

Comparando as Eqs. (7.9)-(7.11) com a Eq. (7.8), e levando em conta a distribuição dos coeficientes de reflexão e transmissão em torno de um dado vértice, Fig. (7.1a), vemos que a distribuição dos coeficientes ao longo da rede, para as matrizes imparcial, Eq. (7.1), e de Grover, Eq. (7.5), exibem simetrias de rotação em 120° e axial em torno do eixo e_y , Fig. (7.1b); para as matrizes DFT, Eq. (7.2), e DHT, Eq. (7.4), temos uma simetria axial ao longo do eixo e_y , Fig. (7.1c); e para a matriz tendenciosa, Eq. (7.3), temos uma simetria de rotação em 120° , Fig. (7.1d).

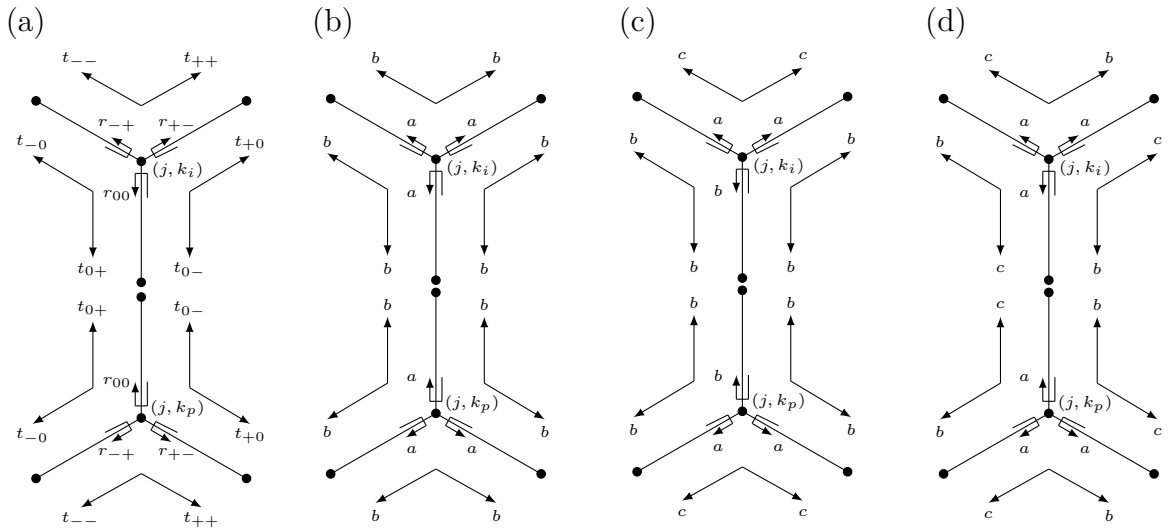


Figura 7.1: Em (a) temos a distribuição dos coeficientes de reflexão e transmissão nos vértices. Já a disposição dos coeficientes para a matrizes imparcial e de Grover é dado em (b), DFT e DHT em (c) e tendenciosa em (d).

Assumindo que as matrizes de moeda e de espalhamento, $C^{(j,k)} = \Gamma^{(j,k)}$, sejam dadas pelas Eqs. (7.1)-(7.5) e que os estados iniciais do sistema são

$$|\psi(0)\rangle_{sm} = |0, (0, 0)\rangle_{sm}, \quad (7.12)$$

$$|\psi(0)\rangle_{cm} = E|\psi(0)\rangle_{cm} = |0, (0, 0)\rangle_{cm}, \quad (7.13)$$

evoluímos os modelos de moeda e de espalhamento, tal que, $|\psi(n)\rangle_{cm,sm} = U_{c,s}^n |\psi(0)\rangle_{cm,sm}$.

As distribuições de probabilidades normalizadas, p_c e p_s , de encontrar a partícula respectivamente nos vértices e nas arestas, estão apresentadas nas Figs. (7.3)-(7.7), as quais estão organizadas de acordo com as Eqs. (7.1)-(7.5). Além disso, os gráficos (a), (b), (c) e (d) nessas figuras foram obtidos, respectivamente, a partir de

$$p_c(20) = {}_{cm}\langle\psi(20)|\mathcal{P}_c|\psi(20)\rangle_{cm}, \quad (7.14a)$$

$$p_c(20) = {}_{sm}\langle\psi(20)|\bar{\mathcal{P}}_{s|c}|\psi(20)\rangle_{sm}, \quad (7.14b)$$

$$p_s(20) = {}_{sm}\langle\psi(20)|\mathcal{P}_s|\psi(20)\rangle_{sm}, \quad (7.14c)$$

$$p_s(20) = {}_{cm}\langle\psi(20)|\bar{\mathcal{P}}_{c|s}|\psi(20)\rangle_{cm}, \quad (7.14d)$$

onde os projetores diretos, \mathcal{P}_c e \mathcal{P}_s , são dados pelas Eqs. (6.13) e (6.30). Os projetores cruzados, $\bar{\mathcal{P}}_{s|c}$ e $\bar{\mathcal{P}}_{c|s}$, estão respectivamente relacionados com \mathcal{P}_c e \mathcal{P}_s pela Eq. (4.50).

As distribuições de probabilidades, dadas pelas Eqs. (7.14) e plotadas nas Figs. (7.3)-(7.7), foram obtidas em (a) do modelo de moeda, em (b) do mapeamento do modelo de espalhamento para o de moeda, (c) do modelo de espalhamento e em (d) do mapeamento do modelo de moeda para o de espalhamento. Observe que as distribuições de probabilidade em (a) e (b), e (c) e (d) são idênticas devido à equivalência entre os modelos.

As matrizes das Eqs. (7.1) e (7.2) são matrizes imparciais do ponto de vista da probabilidade da partícula ser transladada para um vértice adjacente à sua posição atual, pois para qualquer direção tal probabilidade é 1/3. No entanto, ao observar os padrões das distribuições de probabilidades para as caminhadas com essas matrizes, Figs. (7.3) e (7.4), vemos que eles não são simétricos em todas as direções. Esta quebra de simetria se deve à introdução de diferenças de fases que dependem das direções de propagação da partícula.

A matriz da Eq. (7.3) tem três coeficientes dominantes, que ao comparamos as Eqs. (7.3) e (7.8), são dados por $|t_{+1,0}|^2 = |t_{0,+1}|^2 = |t_{-1,-1}|^2 \approx 0,836$, Fig (7.2a-b). Isso faz a função de onda se espalhar em torno de uma trajetória preferencial, que dependendo

do estado inicial do sistema, Fig (7.2c). Observando a Fig. (7.6), que representa a distribuição de probabilidades para a evolução de uma caminhada utilizando a matriz tendenciosa, Eq. (7.3), e considerando o estado inicial do sistema, Eq. (7.13), vemos que a partícula tende a seguir a trajetória (i) da Fig (7.2c).

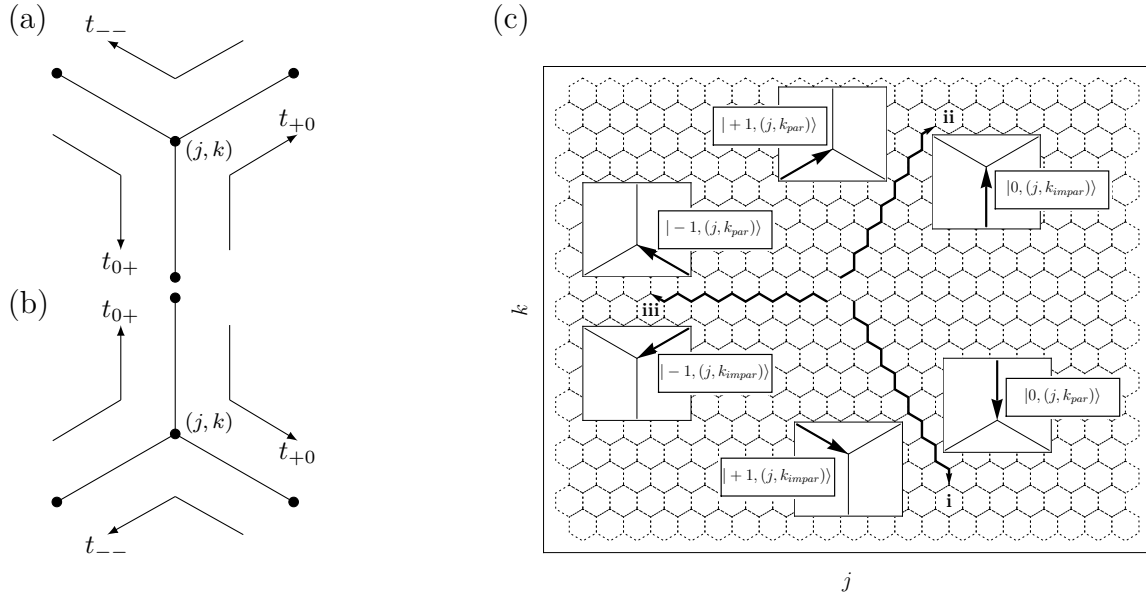


Figura 7.2: Coeficientes dominantes associados a matriz tendenciosa, Eq. (7.3) em um vértice, com k ímpar em (a) e k par em (b), para a formulação das caminhadas quânticas, no modelo de espalhamento, utilizando o conjunto de valores para σ_n dados pelos elementos de $\Phi_1 = \{-1, 0, +1\}$. Em (c) temos as trajetórias mais prováveis da partícula quando o estado inicial do sistema é: (i) $|0, (j, k_{par})\rangle$ ou $|+1, (j, k_{impar})\rangle$; (ii) $|0, (j, k_{impar})\rangle$ ou $|+1, (j, k_{par})\rangle$; (iii) $|-1, (j, k_{par})\rangle$ ou $|-1, (j, k_{impar})\rangle$; os estados iniciais, no modelo de espalhamento, para cada trajetória estão representados nas figuras internas.

A distribuição de probabilidades para a caminhada utilizando a matriz de Grover tem um comportamento semelhante a caminhada com a matriz imparcial, Eq. (7.1). No entanto ela se espalha mais rapidamente que no primeiro caso. Isso pode ser explicado levando em conta que, para a matriz de Grover a probabilidade de transmissão é maior que a de reflexão, enquanto que, para a matriz imparcial, Eq. (7.1), as probabilidades de reflexão e transmissão são iguais. Mostraremos na seção (7.3.1) que essas duas matrizes fazem parte de uma mesma família de matrizes, o que explica o comportamento semelhante nas distribuições de probabilidades.

Por último, observamos que as distribuições de probabilidades para as caminhadas utilizando as matrizes imparciais, Eq. (7.1), da Transformada Discreta de Fourier (DFT) 3×3 , Eq. (7.2), da Transformada Discreta de Hartley (DHT) 3×3 , Eq. (7.4) e de Grover, Eq. (7.5), exibem simetria axial ao longo do eixo y . Isto sempre ocorre quando o estado inicial do sistema é simétrico em relação ao eixo y e as matrizes de espalhamento e moeda exibem a propriedade $\Gamma_{\alpha,\beta} = \Gamma_{-\alpha,-\beta}$.

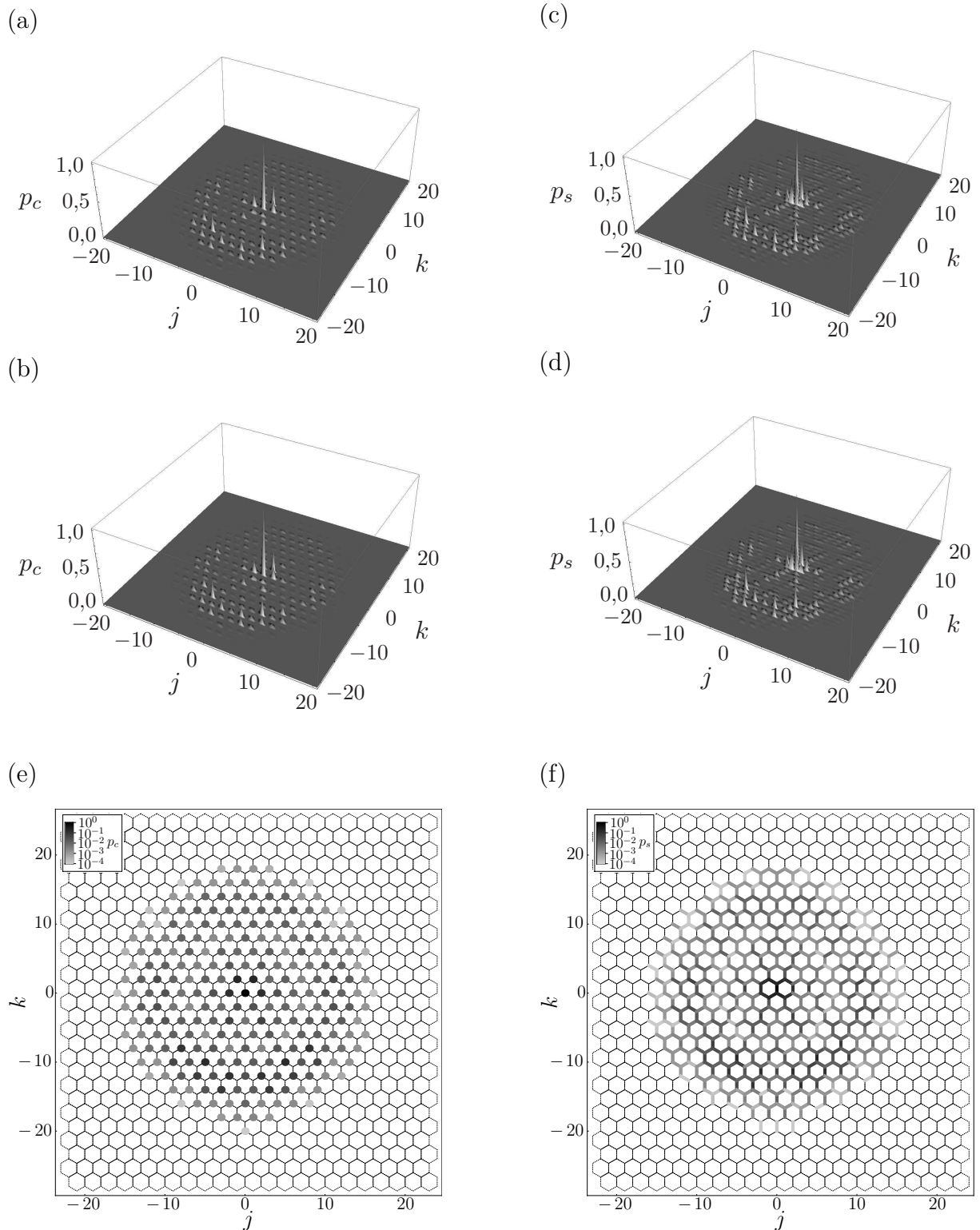
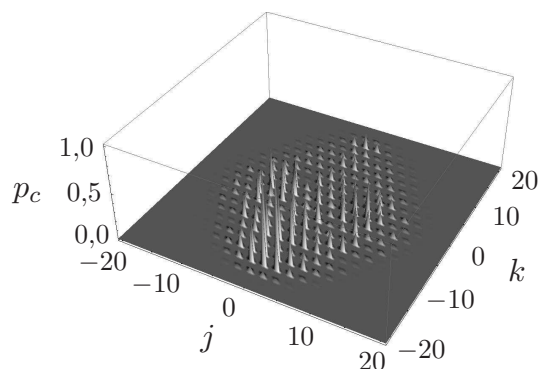
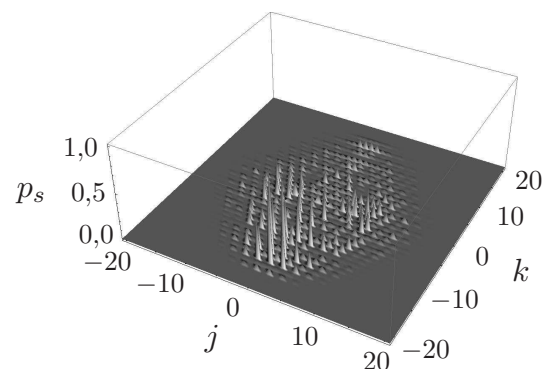


Figura 7.3: Distribuição de probabilidades normalizadas de encontrar a partícula nos vértices, p_c e nas arestas, p_s , para uma caminhada quântica na rede hexagonal após 20 passos de tempo, onde $C^{(j,k)} = \Gamma^{(j,k)}$ são dadas pela matriz imparcial 3×3 , Eq. (7.1) e o estado inicial dado pela Eq. (7.13). Os gráficos (a), (b), (c) e (d) foram obtidos respectivamente através dos projetores \mathcal{P}_c , $\bar{\mathcal{P}}_{s|c}$, \mathcal{P}_s e $\bar{\mathcal{P}}_{c|s}$, de acordo com as Eqs. (7.14). Nos gráficos (e) e (f) temos, respectivamente, as planificações das distribuições de probabilidades para o modelo de moeda e de espalhamento.

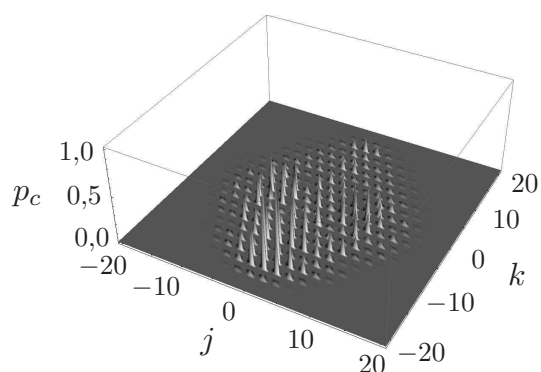
(a)



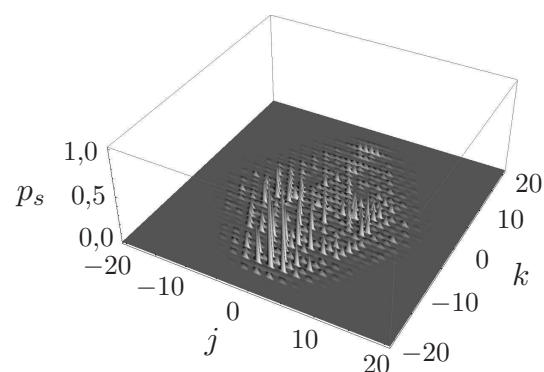
(c)



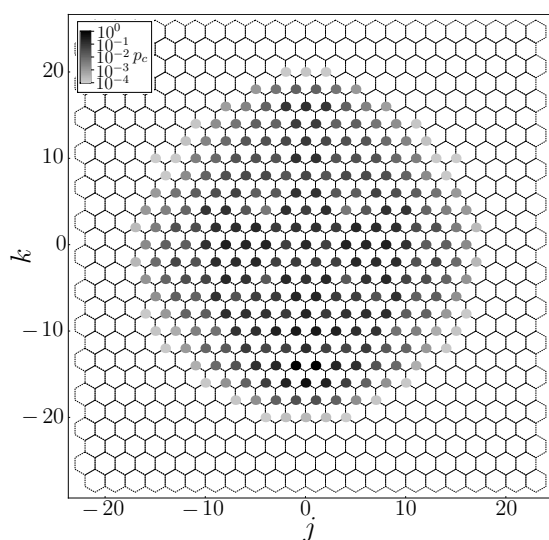
(b)



(d)



(e)



(f)

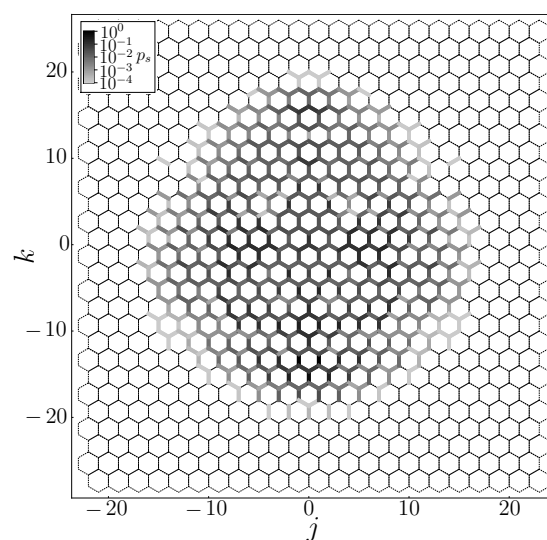


Figura 7.4: O mesmo que na Fig. (7.3), mas para os coeficientes dos operador evolução temporal $U_{c,s}$ dados pelos elementos da matriz DFT 3×3 , Eq. (7.2).

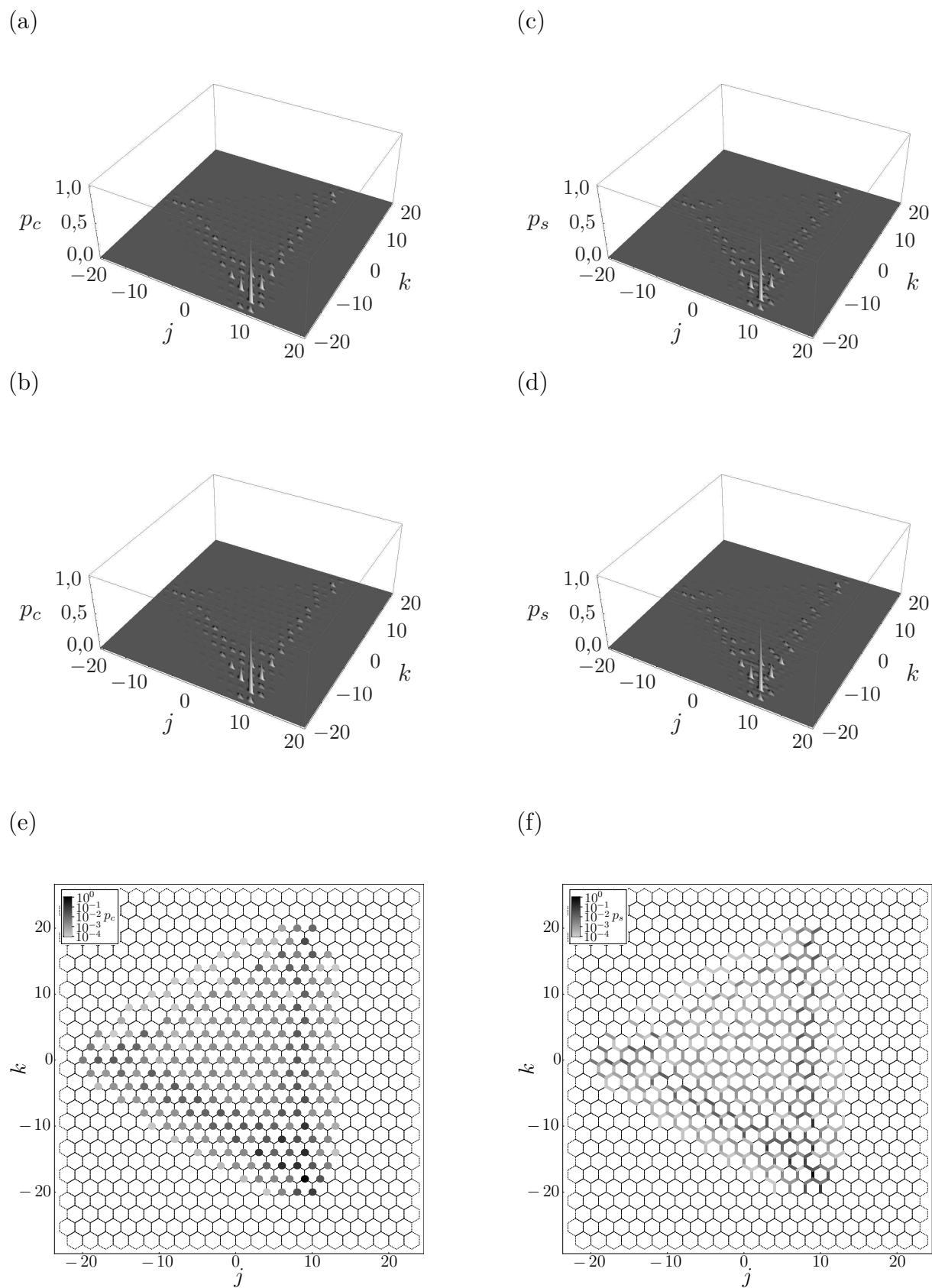
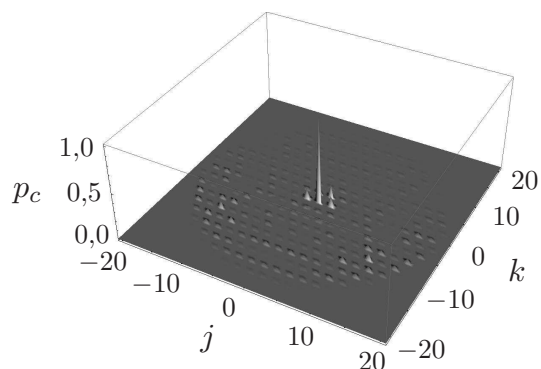
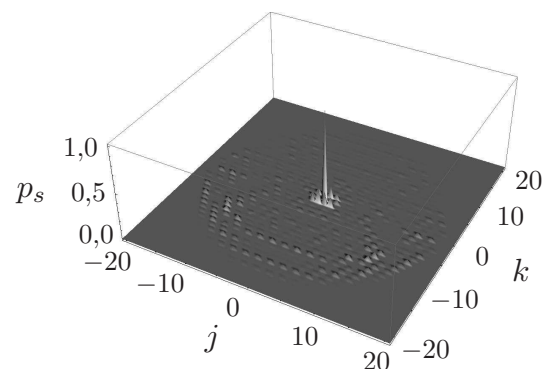


Figura 7.5: O mesmo que na Fig. (7.3), mas para os coeficientes dos operador evolução temporal $U_{c,s}$ dados pelos elementos da matriz tendenciosa 3×3 , Eq. (7.3).

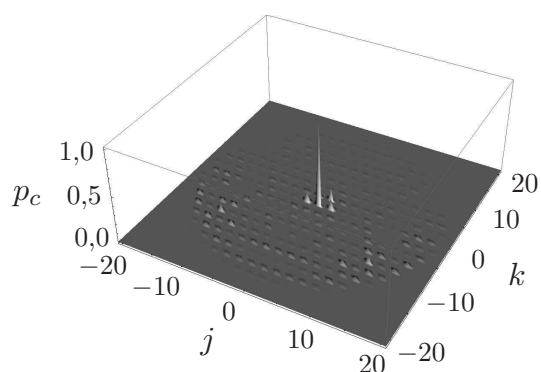
(a)



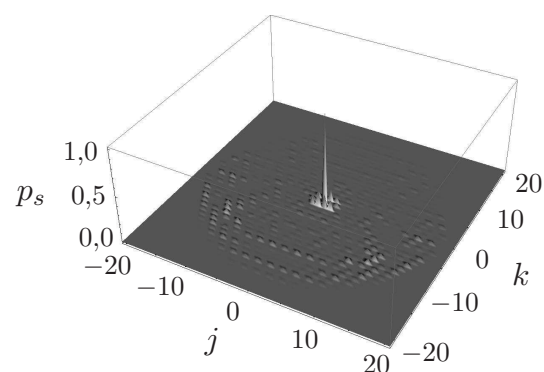
(c)



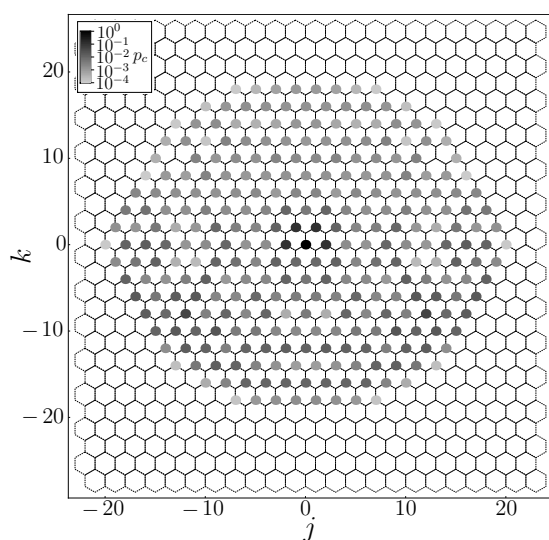
(b)



(d)



(e)



(f)

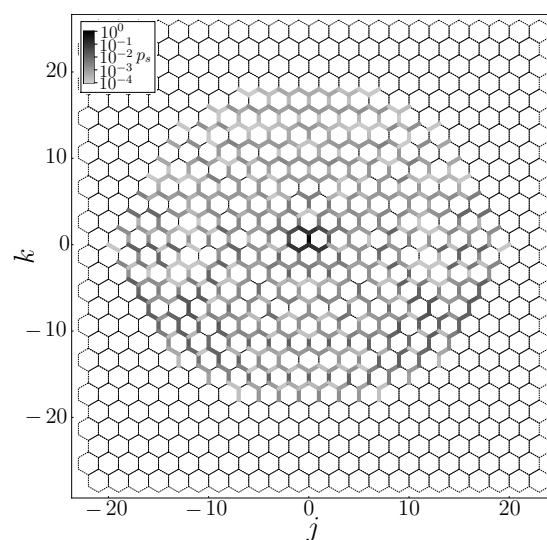
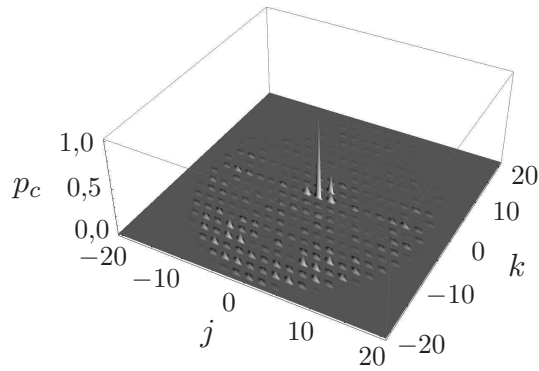
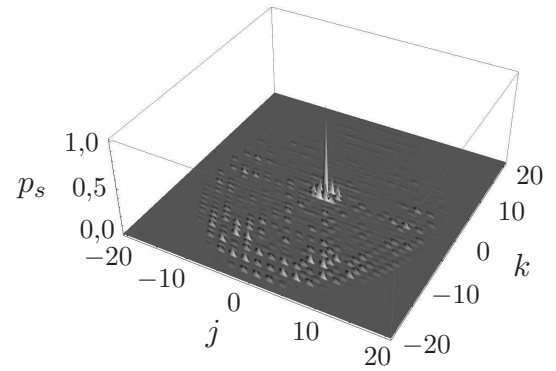


Figura 7.6: O mesmo que na Fig. (7.3), mas para os coeficientes dos operador evolução temporal $U_{c,s}$ dados pelos elementos da matriz DHT 3×3 , Eq. (7.4).

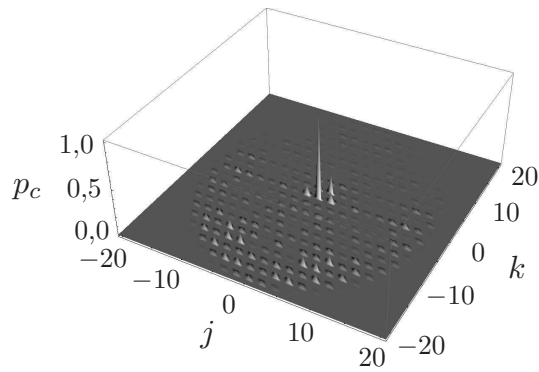
(a)



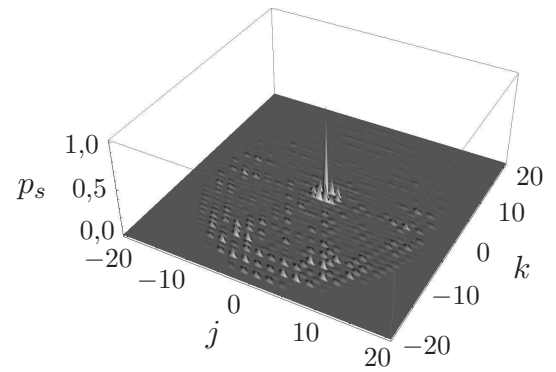
(c)



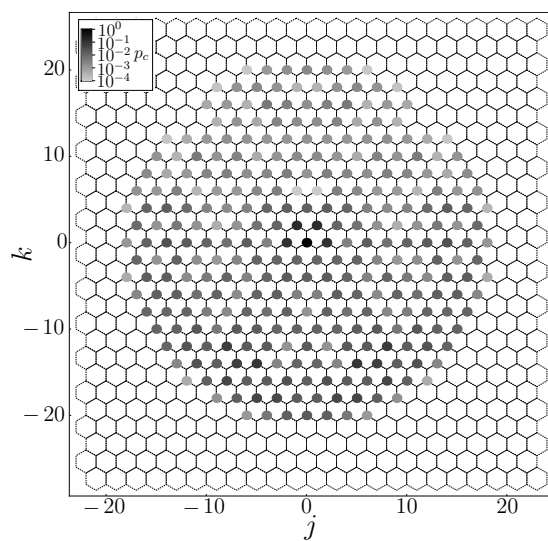
(b)



(d)



(e)



(f)

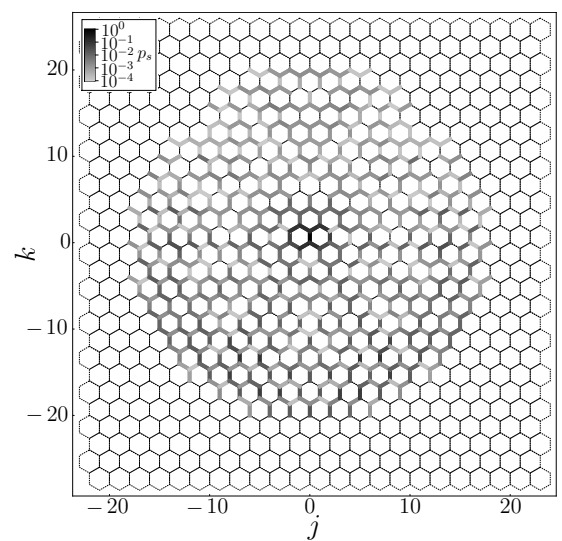


Figura 7.7: O mesmo que na Fig. (7.3), mas para os coeficientes dos operador evolução temporal $U_{c,s}$ dados pelos elementos da matriz de Grover 3×3 , Eq. (7.5).

7.1.2 Caminhadas Usando a Formulação com Φ_2

Para comparar as duas formulações das caminhadas quânticas na rede hexagonal, desenvolvidas nas seções (6.2) e (6.3), evoluímos o sistema usando a formulação com $\sigma_n = \{0, 1, 2\}$, com as condições iniciais correspondentes à Eq. (7.13), e as matrizes moeda e de espalhamento

$$C^{(j,k)} = \Gamma^{(j,k)} = \begin{pmatrix} c_{0,0} & c_{0,1} & c_{0,2} \\ c_{1,0} & c_{1,1} & c_{1,2} \\ c_{2,0} & c_{2,1} & c_{2,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Gamma_{0,0} & \Gamma_{0,1} & \Gamma_{0,2} \\ \Gamma_{1,0} & \Gamma_{1,1} & \Gamma_{1,2} \\ \Gamma_{2,0} & \Gamma_{2,1} & \Gamma_{2,2} \end{pmatrix}, \quad (7.15)$$

dadas pelas matrizes das Eqs. (7.1)-(7.5). Considerando o estado inicial dado na Eq. (7.13), seu correspondente nesta formulação é

$$|\psi(0)\rangle_{sm} = |1, (0, 0)\rangle_{sm}, \quad (7.16)$$

$$|\psi(0)\rangle_{cm} = E|\psi(0)\rangle_{cm} = |1, (0, 0)\rangle_{cm}. \quad (7.17)$$

Nas Figs. (7.9)-(7.13) temos as distribuições de probabilidades normalizadas, após 20 passos de tempo, para a evolução do sistema utilizando as matrizes de moeda e de espalhamento dadas pelas Eqs. (7.1)-(7.5), com os gráficos (a), (b), (c) e (d), em cada figura, determinados por

$$p_c(20) = {}_{cm}\langle\psi(20)|\mathcal{P}_c|\psi(20)\rangle_{cm} \quad (7.18a)$$

$$p_c(20) = {}_{sm}\langle\psi(20)|\bar{\mathcal{P}}_{s|c}|\psi(20)\rangle_{sm} \quad (7.18b)$$

$$p_s(20) = {}_{sm}\langle\psi(20)|\mathcal{P}_s|\psi(20)\rangle_{sm} \quad (7.18c)$$

$$p_s(20) = {}_{cm}\langle\psi(20)|\bar{\mathcal{P}}_{c|s}|\psi(20)\rangle_{cm}, \quad (7.18d)$$

onde \mathcal{P}_c e \mathcal{P}_s são dados pelas Eqs. (6.24) e (6.39), com $\bar{\mathcal{P}}_{s|c}$ e $\bar{\mathcal{P}}_{c|s}$ estão relacionados com \mathcal{P}_c e \mathcal{P}_s pela Eq. (4.50), e $|\psi(n)\rangle_{cm,sm} = U_{c,s}^n|\psi(0)\rangle_{cm,sm}$.

Ao comparar as Figs. (7.9)-(7.13) com suas correspondentes Figs. (7.3)-(7.7), com exceção das caminhadas para com a matriz imparcial, Eq. (7.1), observamos que os padrões das distribuições de probabilidades mudam. Para as caminhadas com a matrizes DFT, Eq. (7.2), DHT, Eq. (7.4) e de Grover, Eq. (7.5), há uma quebra da simetria axial, e para a caminhada com a matriz tendenciosa, Eq. (7.3), a distribuição de probabilidades deixa de se propagar para uma única direção preferencial, como anteriormente.

A alteração dos padrões de distribuição de probabilidades se deve a maneira como as direções e sentidos entre os vértices adjacentes estão relacionados com os valores dos números quânticos σ para cada abordagem. Enquanto que para a formulação usando o conjunto Φ_1 essa relação se mantém fixa, para vértices equivalentes, o mesmo não ocorre com a abordagem usando os elementos de Φ_2 , o que pode ser visto nas Figs. (6.4) e (6.5). Assim, como os coeficientes de transmissão e reflexão estão diretamente relacionados com os números quânticos σ , a mudança na regra que associa os valores de σ com as direções na rede implica na mudança da distribuição desses coeficientes ao longo da rede, mudando a maneira que a função de onda evolui no tempo, o que explica a diferença entre as Figs. (7.9)-(7.13) com suas correspondentes das Figs. (7.3)-(7.7).

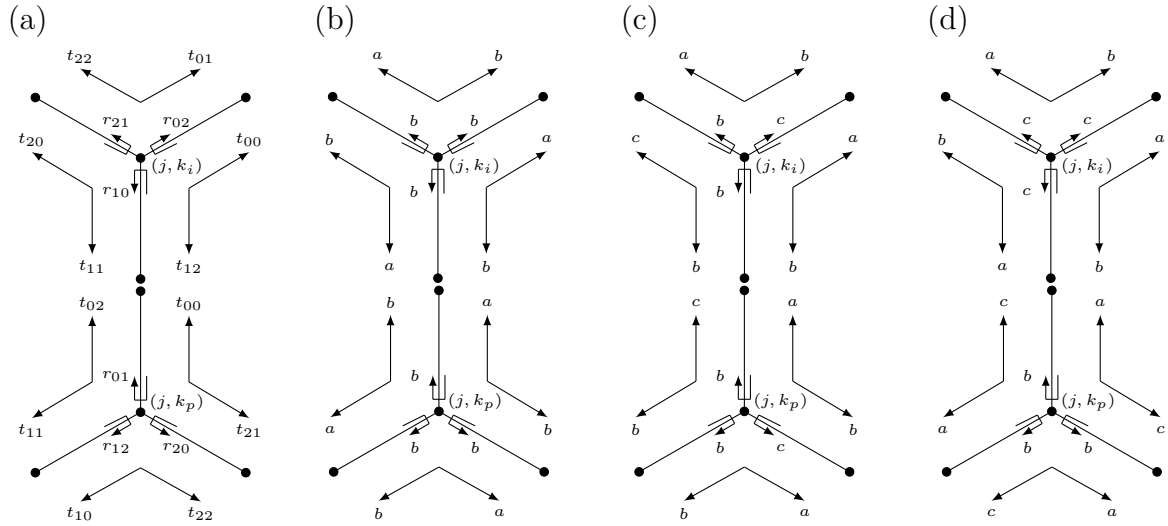


Figura 7.8: (a) Distribuição dos coeficientes de reflexão e transmissão nos vértices, para um sítio com $\sigma_2(j) = [j]_3 = 0$. Já a disposição dos coeficientes para a matrizes imparcial e de Grover é dado em (b), DFT e DHT em (c) e tendenciosa em (d).

Na Fig. (7.8) temos a distribuição do coeficientes dados pelas matrizes genéricas das Eq. (7.9)-(7.11), levando em conta a disposição das matrizes de moeda e de espalhamento dada pela Eq. (7.15). Ao compararmos as Figs. (7.1) e (7.8), observamos que as disposição dos elementos das matrizes de moeda e suas correspondente de espalhamento são completamente diferentes para as formulações das caminhadas com o conjunto de valores de σ_n dados por Φ_1 e Φ_2 .

Mostraremos na seção (7.3) que dependendo da escolha dos coeficientes que descrevem o operador evolução $U_{c,s}$, a primeira formulação, utilizando $\Phi_1 = \{-1, 0, 1\}$, privilegia a descrição de caminhadas com uma trajetória tendenciosa do tipo “balística”, enquanto a segunda, com $\Phi_2 = \{0, 1, 2\}$, é melhor para a descrição de caminhadas com “loops” em um anel da rede.

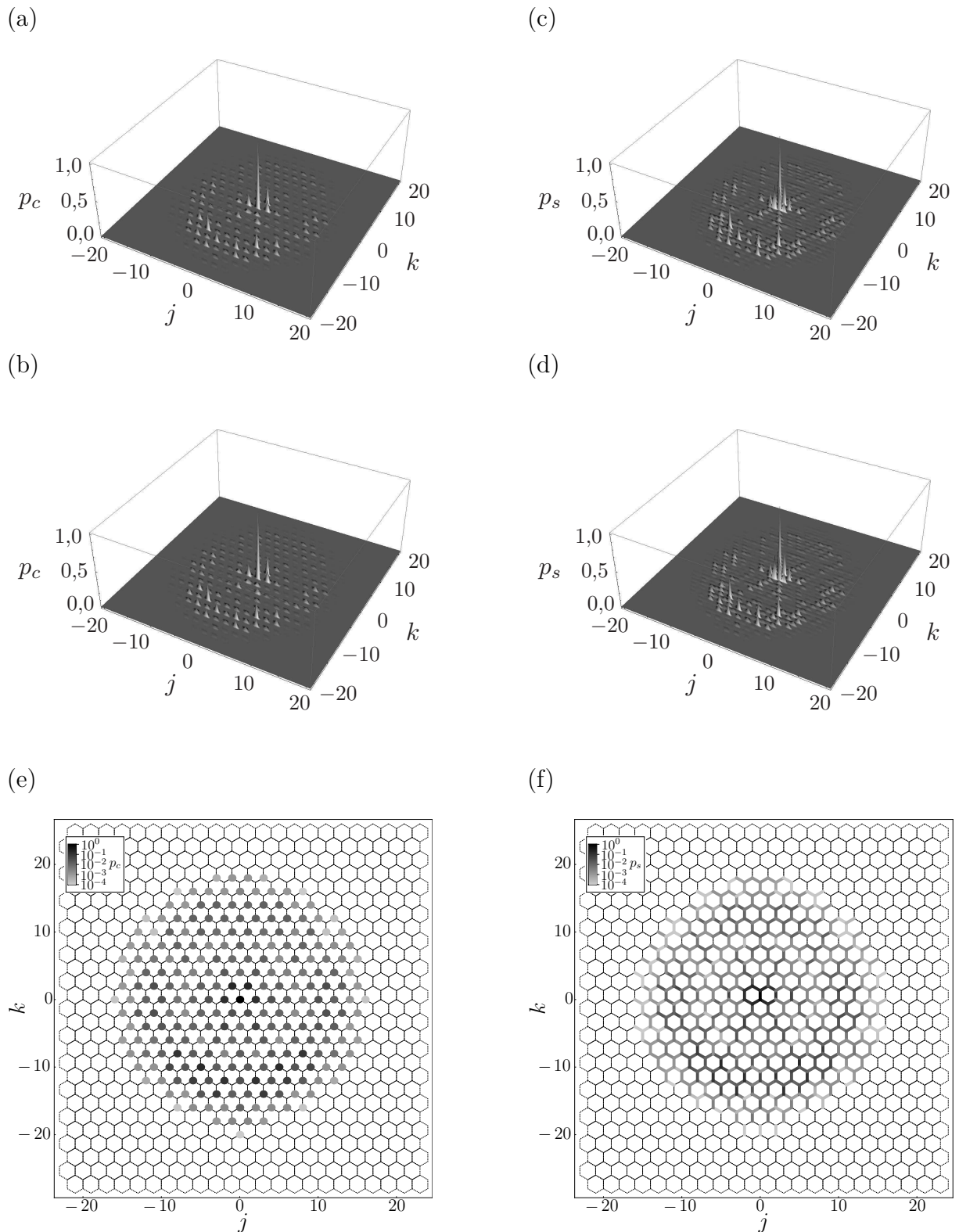


Figura 7.9: Distribuições de probabilidades normalizadas de encontrar a partícula nos vértice, p_c , e na arestas, p_s , após 20 passos de tempo, onde $C^{(j,k)} = \Gamma^{(j,k)}$ dadas pela matriz imparcial 3×3 , Eq. (7.1) e o estado inicial dado pela Eq. (7.17). Os resultados em (a), (b), (c) e (d), foram determinados de acordo com as Eqs. (7.18). Nos gráficos (e) e (f) temos, respectivamente, as planificações das distribuições de probabilidades para o modelo de moeda e de espalhamento.

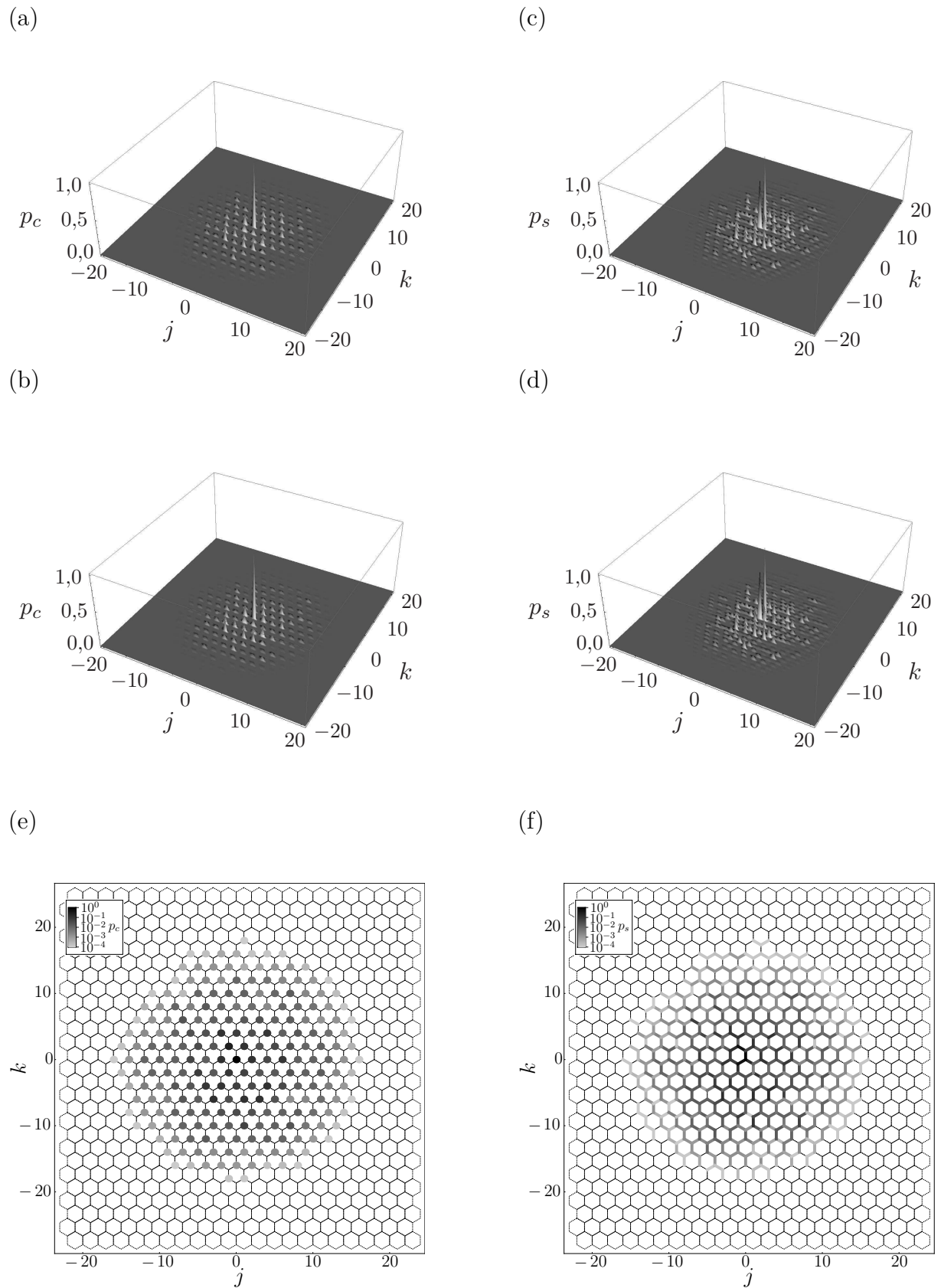
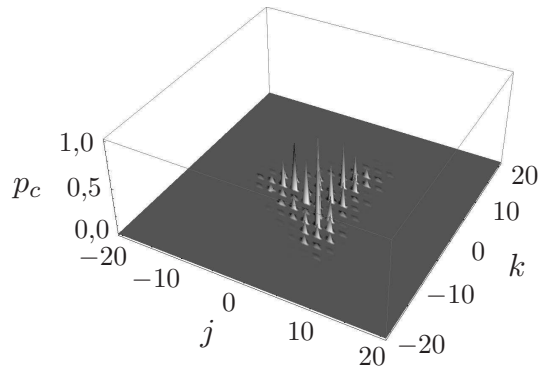
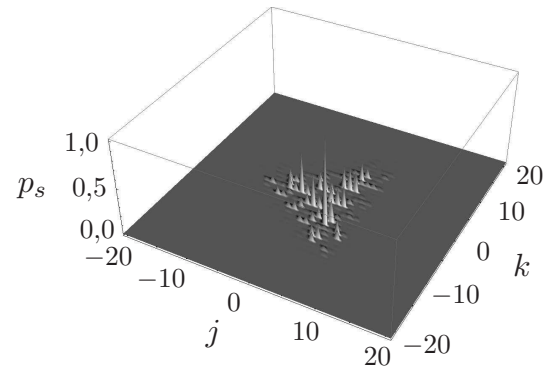


Figura 7.10: O mesmo que na Fig. (7.9), mas para os coeficientes que descrevem o operador evolução temporal U_s, c dados pelos elementos da matriz DFT 3×3 , Eq. (7.2).

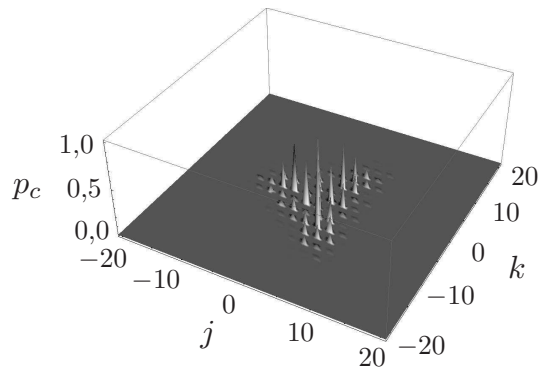
(a)



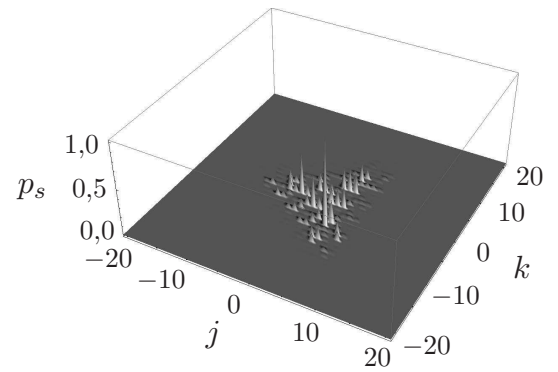
(c)



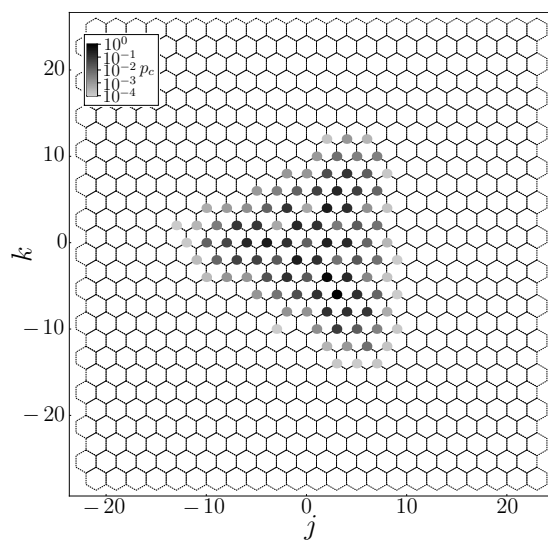
(b)



(d)



(e)



(f)

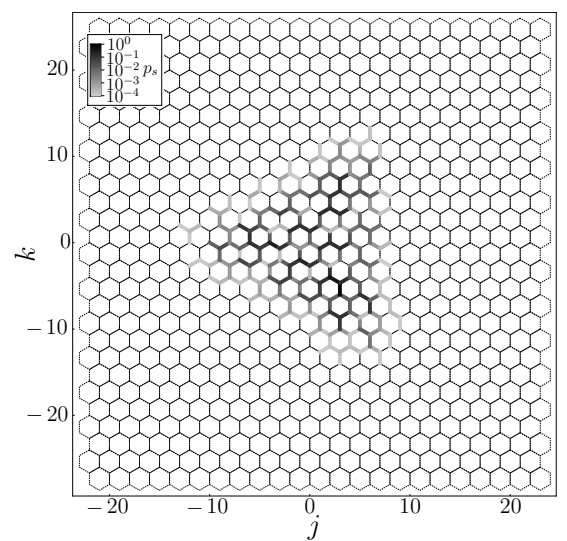
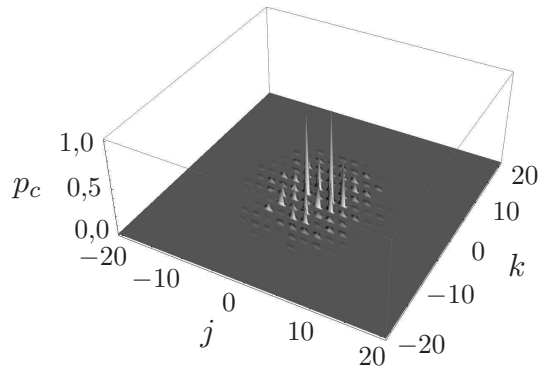
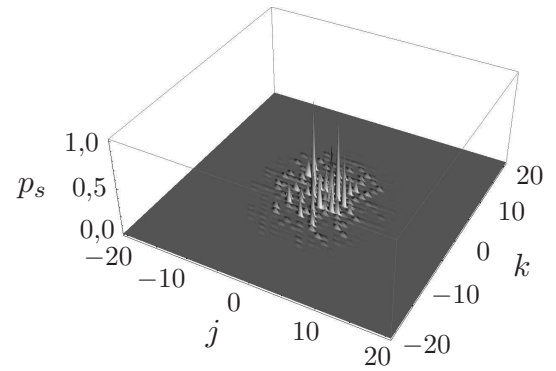


Figura 7.11: O mesmo que na Fig. (7.9), mas para os coeficientes que descrevem o operador evolução temporal U_s, c dados pelos elementos da matriz tendenciosa 3×3 , Eq. (7.3).

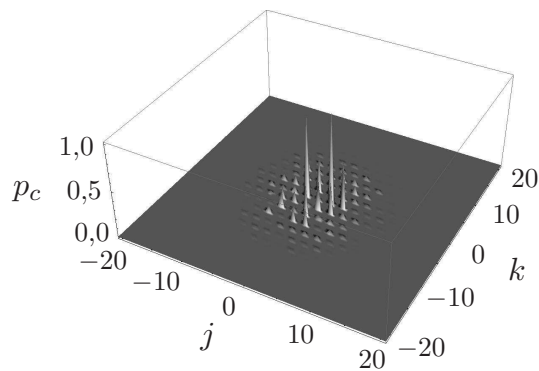
(a)



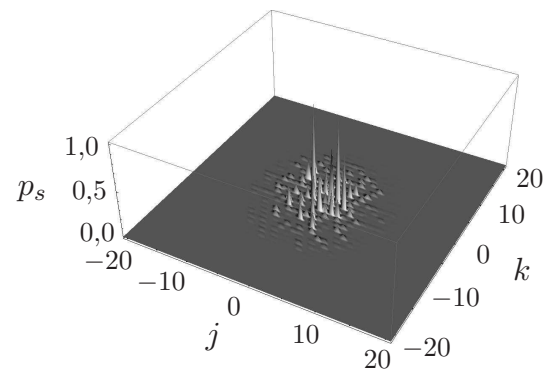
(c)



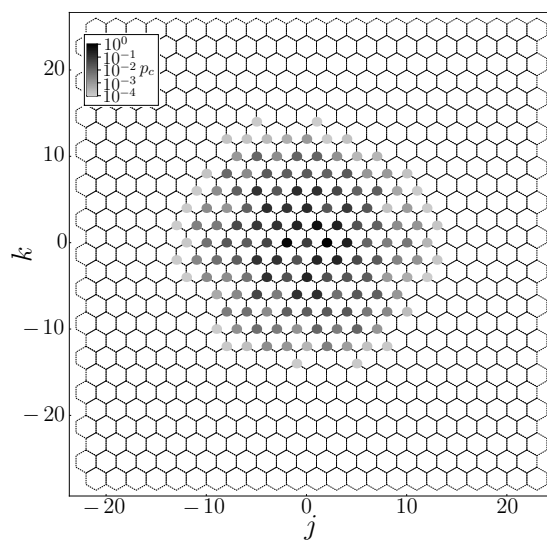
(b)



(d)



(e)



(f)

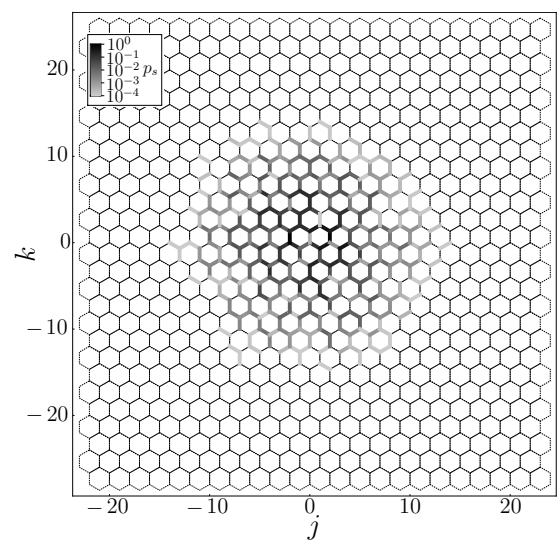


Figura 7.12: O mesmo que na Fig. (7.9), mas para os coeficientes que descrevem o operador evolução temporal U_s, c dados pelos elementos da matriz DHT 3×3 , Eq. (7.4).

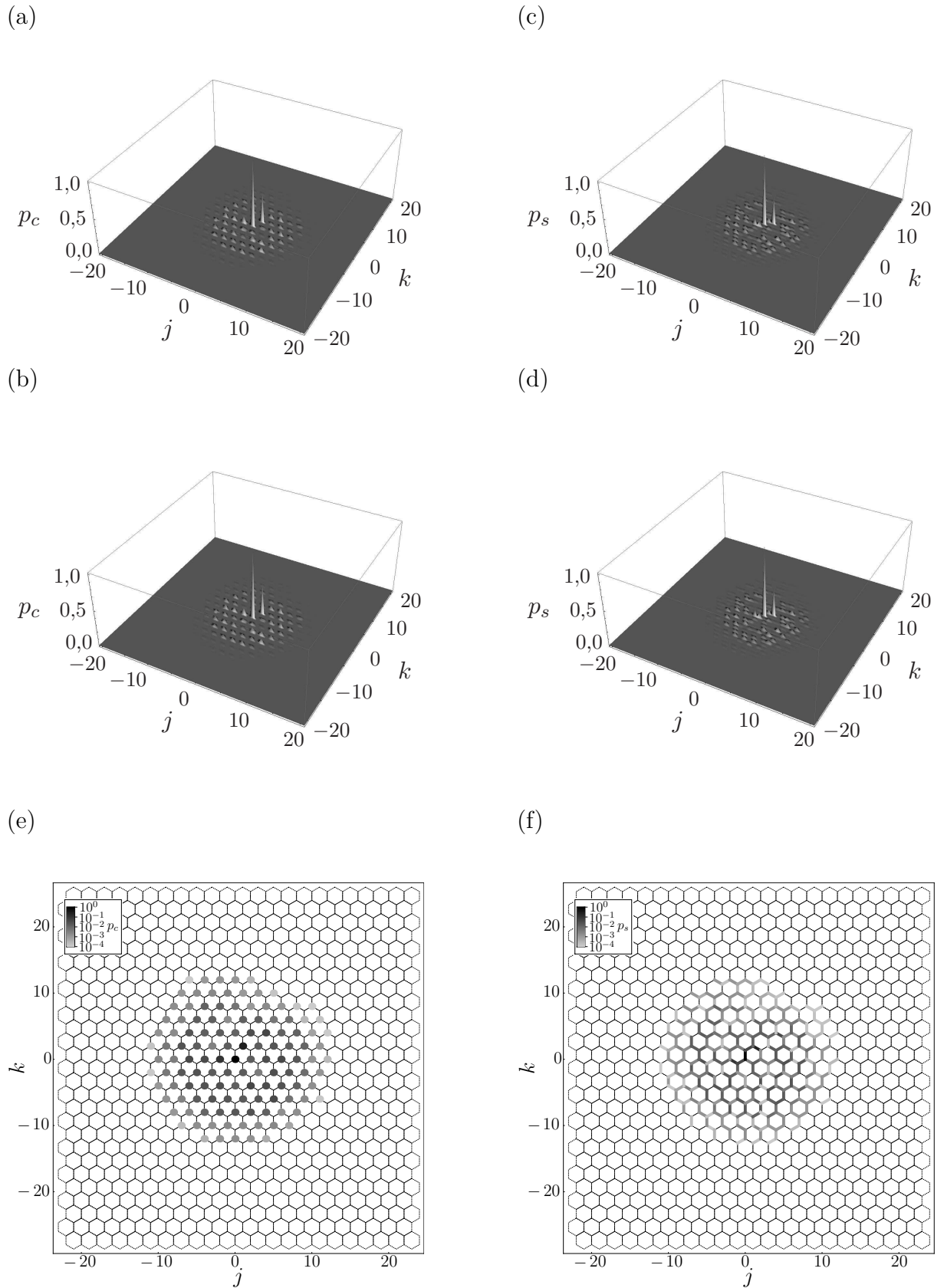


Figura 7.13: O mesmo que na Fig. (7.9), mas para os coeficientes que descrevem o operador evolução temporal U_s, c dados pelos elementos da matriz Grover 3×3 , Eq. (7.5).

Na introdução do capítulo 6 mencionamos que as formulações das caminhadas com σ_n dados pelos elementos dos conjuntos Φ_1 e Φ_2 são equivalentes. Levando em conta a equivalência unitária entre os modelos de moeda e de espalhamento, onde $c_{\sigma,\sigma'}^{(j,k)} = \Gamma_{\sigma,\sigma'}^{(j,k)}$, as formulações discutidas nas seções (6.2) e (6.3) levam aos mesmos resultados, se:

k é par,

$$\begin{aligned} \Gamma_{\phi_1,\sigma_1}^{(j,k)} &= \Gamma_{+1,-1}^{(j,k)}, & \Gamma_{\phi_1,\sigma_2}^{(j,k)} &= \Gamma_{+1,0}^{(j,k)}, & \Gamma_{\phi_1,\sigma_3}^{(j,k)} &= \Gamma_{+1,+1}^{(j,k)}, \\ \Gamma_{\phi_2,\sigma_1}^{(j,k)} &= \Gamma_{0,-1}^{(j,k)}, & \Gamma_{\phi_2,\sigma_2}^{(j,k)} &= \Gamma_{0,0}^{(j,k)}, & \Gamma_{\phi_2,\sigma_3}^{(j,k)} &= \Gamma_{0,+1}^{(j,k)}, \\ \Gamma_{\phi_3,\sigma_1}^{(j,k)} &= \Gamma_{-1,-1}^{(j,k)}, & \Gamma_{\phi_3,\sigma_2}^{(j,k)} &= \Gamma_{-1,0}^{(j,k)}, & \Gamma_{\phi_3,\sigma_3}^{(j,k)} &= \Gamma_{-1,+1}^{(j,k)}; \end{aligned} \quad (7.19a)$$

k é ímpar,

$$\begin{aligned} \Gamma_{\phi_1,\sigma_1}^{(j,k)} &= \Gamma_{0,0}^{(j,k)}, & \Gamma_{\phi_1,\sigma_2}^{(j,k)} &= \Gamma_{0,+1}^{(j,k)}, & \Gamma_{\phi_1,\sigma_3}^{(j,k)} &= \Gamma_{0,-1}^{(j,k)}, \\ \Gamma_{\phi_2,\sigma_1}^{(j,k)} &= \Gamma_{-1,0}^{(j,k)}, & \Gamma_{\phi_2,\sigma_2}^{(j,k)} &= \Gamma_{-1,+1}^{(j,k)}, & \Gamma_{\phi_2,\sigma_3}^{(j,k)} &= \Gamma_{-1,-1}^{(j,k)}, \\ \Gamma_{\phi_3,\sigma_1}^{(j,k)} &= \Gamma_{+1,0}^{(j,k)}, & \Gamma_{\phi_3,\sigma_2}^{(j,k)} &= \Gamma_{+1,+1}^{(j,k)}, & \Gamma_{\phi_3,\sigma_3}^{(j,k)} &= \Gamma_{+1,-1}^{(j,k)}. \end{aligned} \quad (7.19b)$$

onde, os coeficientes dos lados direitos, das igualdades na Eq. (7.19), correspondem aos utilizados na formulação com σ_n dados pelos elementos dos conjuntos Φ_1 , e os dos lados esquerdos aos da formulação com σ_n dados pelos elementos de Φ_2 . Além disso, σ_1 , σ_2 e σ_3 são dados pela Eq. (6.2), e

$$\phi_1 = \phi(k, \sigma_1), \quad \phi_2 = \phi(k, \sigma_2), \quad \phi_3 = \phi(k, \sigma_3). \quad (7.20)$$

com a função $\phi(k, \sigma_n)$ dada pela Eq. (6.18). Portanto, como os resultados das Figs. (7.3)-(7.7) não correspondem aos padrões das Figs. (7.9)-(7.13), isso significa que o conjunto de simulações realizados anteriormente, para caminhadas na rede hexagonal, não satisfazem as relações da Eq. (7.19).

7.2 Dispersão na Posição

Finalmente analisamos o comportamento da dispersão na posição da partícula, Δr . Considerando a equivalência entre os modelos de moeda e de espalhamento, assim como nos casos das redes linear e quadrada, determinamos dispersão apenas para o modelo moeda. Assim, assumindo que o estado $|\sigma, (j, k)\rangle_{cm}$ estão associados a posição dos sítio (j, k) , temos

$$\Delta r = \sqrt{\sum_{j,k} p_c(j, k) (x_{j,k}^2 + y_{j,k}^2) - \left(\sum_{j,k} p_c(j, k) x_{j,k} \right)^2 - \left(\sum_{j,k} p_c(j, k) y_{j,k} \right)^2}, \quad (7.21)$$

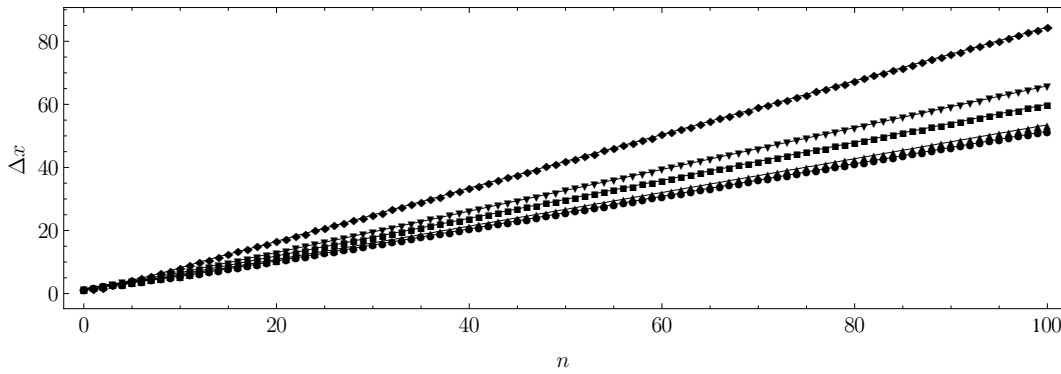
onde $x_{j,k}$ e $y_{j,k}$ são as coordenadas no plano cartesiano do vértice (j,k) . Levando em consideração que na definição das caminhadas quânticas na rede hexagonal assumimos que a distância entre dois vértices adjacentes é unitária, as expressões que determinam as coordenadas $x_{j,k}$ e $y_{j,k}$ das posições dos vértices, Eq. (2.27), se reduzem a

$$x_{j,k} = \frac{j\sqrt{3}}{2}, \quad (7.22a)$$

$$y_{j,k} = \frac{1}{4} \left(3k + \frac{9 + (-1)^{k+1}}{2} \right). \quad (7.22b)$$

Nas Figs. (7.14) temos os gráficos da dispersão na posição em função das etapas de tempo

(a)



(b)

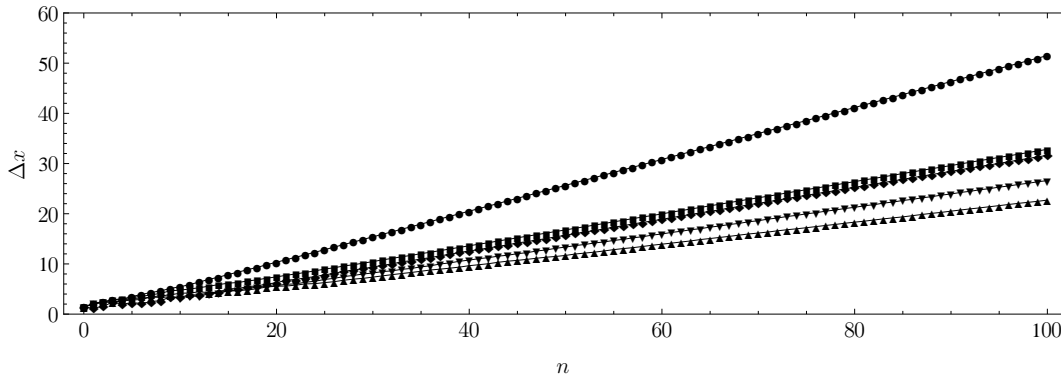


Figura 7.14: Dispersão na posição em função das etapas de tempo. (a) caminhadas com σ_n dado por Φ_1 ; (b) caminhadas com σ_n dado por Φ_2 ; para as matrizes imparcial (círculos), DFT (quadrados), tendenciosa (losangos), DHT (triângulos para cima) e Grover (triângulos para baixo) dadas pelas Eqs. (7.1)-(7.5).

para o modelo de moedas dos exemplos de caminhas da seção anterior. Observamos que as caminhadas quânticas na rede hexagonal, assim como na rede linear e quadrada, se dispersam quadraticamente mais rápidas do que as clássicas uma vez que $\Delta r \sim n$ para o caso quântico e $\Delta r = \sqrt{n}$ para o clássico.

Ao comparar a dispersão das caminhadas realizadas nas seções anteriores, observamos que elas tendem a se dispersar menos na formulação com os valores de σ_n dados pelos

elementos do conjunto Φ_2 , do que na formulação com σ_n dado pelos componentes do conjunto Φ_1 . Isto está de acordo com as distribuições de probabilidades das Figs. (7.9)-(7.13), que são mais concentradas do que suas correspondentes das Figs. (7.3)-(7.7).

Como discutido na seção (7.1), os coeficientes $c_{\sigma,\sigma'} = \Gamma_{\sigma,\sigma'}$, estão associados ao valores que os números quânticos σ_n podem assumir. Assim, para a formulação com σ_n dados pelos elementos de $\Phi_2 = \{0, 1, 2\}$, a distribuição desses coeficientes se alteram ao longo da rede, uma vez que as direções ligadas aos valores de σ_n , para essa formulação mudam de um vértice para outro, Fig. (6.5). Esta “dinâmica” dos coeficientes acarreta em uma maior concentração da função de onda para as caminhadas na formulação utilizando o conjunto de valores de Φ_2 , para σ_n , em relação às caminhadas com σ_n dados pelos elementos de Φ_1 nos exemplos discutidos.

7.3 Caminhadas Tendenciosas e Simétricas

Um importante resultado, demonstrado em [27], discutido na seção (4.3) e exemplificado para as redes lineares, quadrada e hexagonal, é a equivalência entre as caminhadas quânticas nos modelos de moeda e de espalhamento. Levando em conta que o modelo de espalhamento é a princípio mais fácil de ser implementando experimentalmente em relação ao modelo de moeda, pois podemos associá-lo a um problema concreto de espalhamento, analisaremos exemplos de caminhadas nesta formulação, onde a distribuição de probabilidades de encontrar a partícula, ao longo da rede, respeita algum tipo de simetria, desloca-se para uma determinada direção preferencial, e segue algum tipo de “trajetória” durante a evolução do sistema.

Para realizar as caminhadas quânticas na rede hexagonal, devemos atribuir para um conjunto de nove coeficientes $\Gamma_{\sigma',\sigma}$ em cada vértice. Tais coeficientes regem a evolução temporal do sistema descrevendo os processos de reflexão e transmissão que a partícula sofre a cada passo de tempo. Podemos organiza-los em matrizes de ordem 3, que são responsáveis em descrever o operador evolução temporal, U_s . Além disso, para manter a condição de unitariedade de U_s , tais matrizes devem ser unitárias. Por esses motivos, também analisaremos algumas famílias de matrizes de ordem 3 unitárias.

7.3.1 Matrizes Unitárias de Ordem 3

Considere a matriz dada pela Eq. (7.23), vamos chamar o conjunto de coeficientes dessa matriz de *família ab*. Assim temos,

$$\Gamma_{ab} = \begin{pmatrix} a & be^{i\pi\theta} & be^{i\pi\theta} \\ be^{i\pi\theta} & a & be^{i\pi\theta} \\ be^{i\pi\theta} & be^{i\pi\theta} & a \end{pmatrix}, \quad (7.23)$$

onde, a , b , θ são parâmetros reais. Levando em conta que, para representar os coeficientes de reflexão e transmissão, essa matriz deve ser unitária, seus elementos devem satisfazer o seguinte sistema de equações,

$$\begin{cases} a^2 + 2b^2 = 1 \\ b(b + 2a \cos(\pi\theta)) = 0. \end{cases} \quad (7.24)$$

Resolvendo o sistema da Eq. (7.24), obtemos a solução

$$a = -\frac{1}{\sqrt{5 + 4 \cos(2\pi\theta)}}, \quad (7.25a)$$

$$b = \frac{2 \cos(\pi\theta)}{\sqrt{5 + 4 \cos(2\pi\theta)}}. \quad (7.25b)$$

Na Fig. (7.15) temos o gráfico de $|a|^2$ e $|b|^2$ em função da fase relativa θ . As matrizes imparcial, Eq. (7.1), e de Grover, Eq. (7.5), são dois casos particulares da família ab , com respectivos valores de $\theta = 1/3$ e $\theta = 0$. Além disso, se considerarmos que os elementos da diagonal principal representam os coeficientes de reflexão, a matriz de Grover então possui os maiores valores para os coeficientes de transmissão, o que implica em uma maior velocidade de dispersão da função de onda para essa família de matrizes.

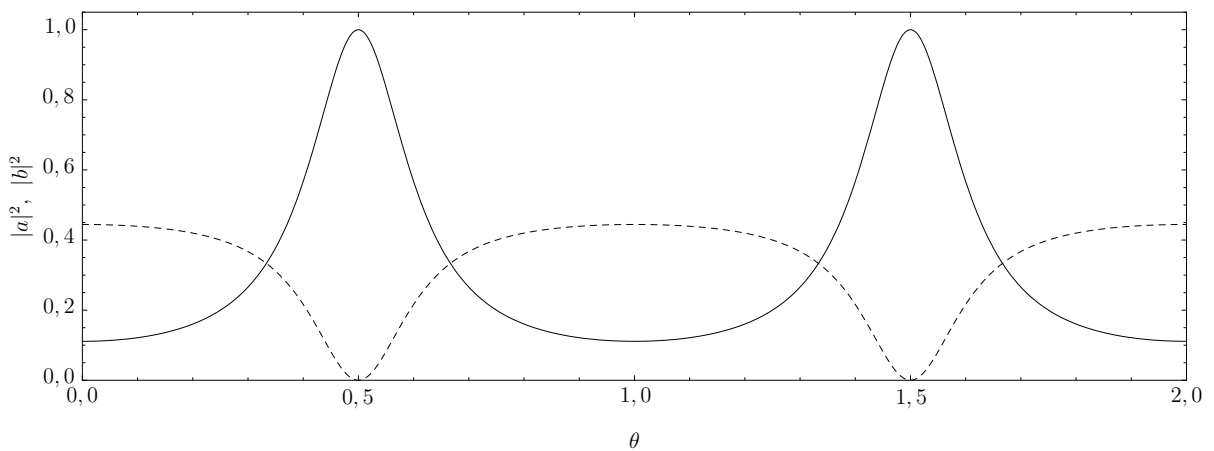


Figura 7.15: A linha contínua representa $|a|^2$ e a tracejada $|b|^2$.

Vamos considerar a matriz família abc , Γ_{abc} , dada por

$$\Gamma_{abc} = \begin{pmatrix} a & b & c \\ c & a & b \\ b & c & a \end{pmatrix}, \quad (7.26)$$

onde os parâmetros a , b e c são reais. Impondo a condição de unitariedade da matriz Γ_{abc} , nós obtemos o seguinte sistema de equações

$$\begin{cases} a^2 + b^2 + c^2 = 1 \\ ab + ac + bc = 0. \end{cases} \quad (7.27)$$

cuja solução é dada em termos do parâmetro a ,

$$b = \frac{1 - a - \sqrt{1 + 2a - 3a^2}}{2} \quad (7.28a)$$

$$c = \frac{1 - a + \sqrt{1 + 2a - 3a^2}}{2}, \quad (7.28b)$$

Analisando as Eqs. (7.28) observamos que essa solução é aceitável apenas para

$$-1/3 \leq a \leq 1,$$

uma vez que fora desse intervalo $|a|^2 + |b|^2 + |c|^2 > 1$.

Na Fig. (7.16) temos os gráficos de $|a|^2$, $|b|^2$ e $|c|^2$ em função de a . Além disso, a matriz da Eq. (7.3) é um caso partícula da família abc com $a = 1/3$.

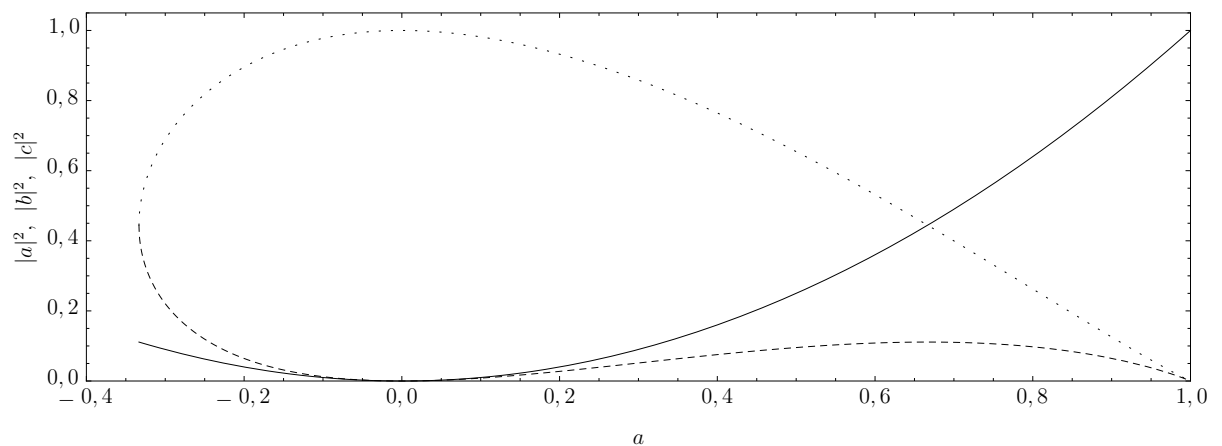


Figura 7.16: A linha contínua representa $|a|^2$, a tracejada $|b|^2$ e a pontilhada $|c|^2$.

Considere a matriz família $abcdg$, Γ_{abcdg} , com os parâmetros a , b , c , d e g , reais, tal que

$$\Gamma_{abcdg} = \begin{pmatrix} a & c & b \\ d & g & d \\ b & c & a \end{pmatrix}. \quad (7.29)$$

Impondo a condição de unitariedade da matriz Γ_{abcdg} , nós obtemos o seguinte sistema de equações

$$\begin{cases} a^2 + b^2 + c^2 = 1 \\ (a + b)c + dg = 0 \\ 2ab + d^2 = 0 \\ 2c^2 + g^2 = 1, \end{cases} \quad (7.30)$$

que possui a seguinte solução em termos do parâmetro g ,

$$a = \frac{g-1}{2}, \quad (7.31a)$$

$$b = \frac{g+1}{2}, \quad (7.31b)$$

$$c = \sqrt{\frac{1-g^2}{2}}, \quad (7.31c)$$

$$d = -\sqrt{\frac{1-g^2}{2}}, \quad (7.31d)$$

que é válida para

$$-1 \leq g \leq 1,$$

uma vez que para $|g| > 1$, temos $a^2 + b^2 + c^2 > 1$ e $2c^2 + g^2 > 1$, o que não satisfaz a Eq. (7.30). Na Fig. (7.17) temos os graficos de $|a|^2$, $|b|^2$, $|c|^2$, $|d|^2$ e $|g|^2$ em função do parâmetro g .

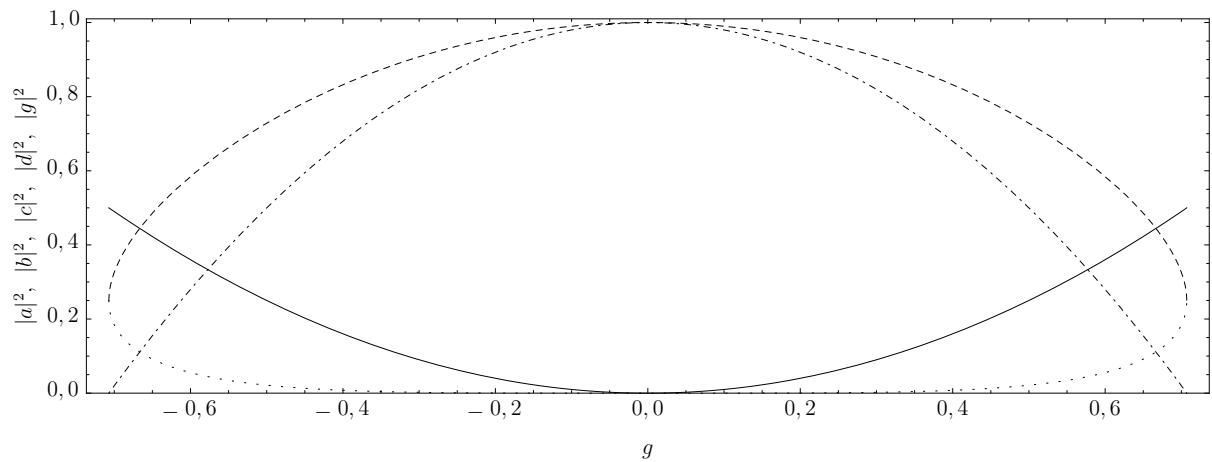


Figura 7.17: A linha tracejada representa $|a|^2$, a tracejada e pontilhada $|b|^2$, a pontilhada $|c|^2$ e $|d|^2$, e a contínua $|g|^2$.

7.3.2 Caminhadas com “Trajetórias” Tendenciosas

Definimos uma “trajetória” em caminhadas quânticas como sendo o caminho mais provável que uma partícula pode executar durante a evolução temporal do sistema, ou seja, o trajeto seguido pela probabilidade máxima de encontrar a partícula em uma aresta, e assumindo que tal valor seja uma fração considerável da probabilidade total.

Trajeto do Tipo Balística

Uma partícula executa uma trajetória do tipo balística, quando o caminho mais provável é dado por um dos seis trajetos descritos na Fig. (7.18). Analisando as formulações das caminhadas quânticas na rede hexagonal, desenvolvidas no capítulo 6, observamos que a descrição com os valores dos números quânticos σ_n , dados por $\Phi_1 = \{-1, 1, +1\}$, é mais adequada para a implementação das caminhadas com trajetórias balísticas, uma vez que as direções associadas a valores de σ_n são as mesmas em vértices equivalentes. Assim, a ordem de distribuição dos coeficientes, $\Gamma_{\sigma',\sigma}$, que descrevem a evolução do sistema, não dependem se alteram ao longo da rede.

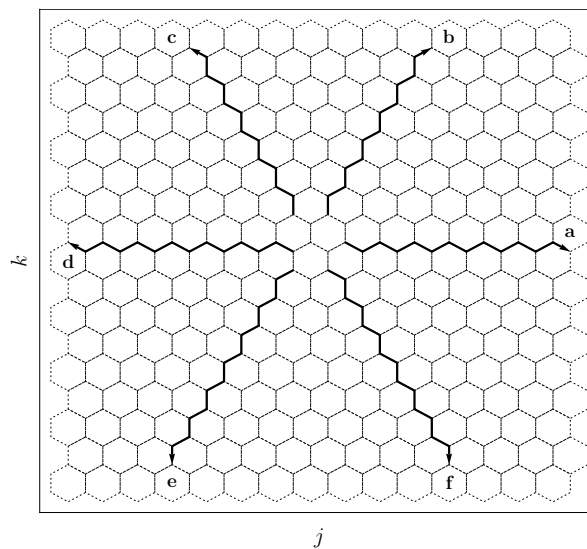


Figura 7.18: As seis trajetórias balísticas que a partícula pode executar durante uma caminhada quântica na rede hexagonal.

Para a trajetória mais provável da partícula ser um dos trajetos dados na Fig. (7.18), devemos ter um domínio dos seguintes coeficientes de transmissão para os caminhos: (i) (a, c, e), t_{++} , t_{--} e $t_{0,-}$, Fig. (7.19a); (ii) (b, d, f), t_{--} , t_{+0} e $t_{0,+}$, Fig. (7.19b). Logo, os valores dos seus módulos quadrados devem ser maior em relação aos valores dos outros coeficientes. Além disso, devemos escolher o estado inicial de maneira adequada para cada

trajeto da Fig. (7.18), Tab. (7.1). Em particular nas trajetórias (a, d), da Fig. (7.18), o sistema tende a evoluir para estados que possuem o número quântico $\sigma = \pm 1$ de acordo com a sequência

$$\dots | \pm 1, (j \pm 1, k - 1) \rangle \xrightarrow{U} | \pm 1, (j, k) \rangle \xrightarrow{U} | \pm 1, (j \mp 1, k - 1) \rangle \dots \quad (7.32)$$

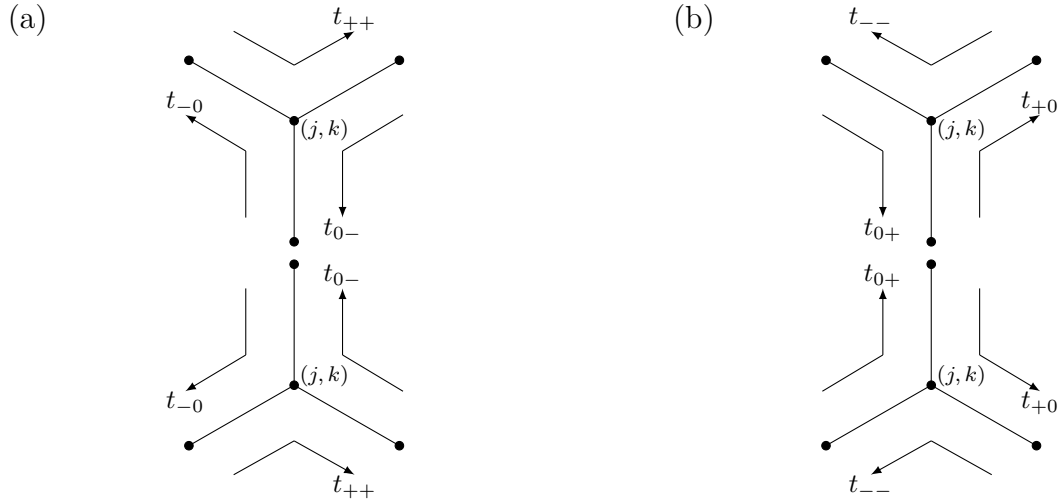


Figura 7.19: Coeficientes dominantes para a realização de caminhadas com trajetórias balísticas. Em (a) para os trajetos (a, c, e), e em (b) para (b, d, f), da Fig. (7.18).

Trajeto	Estado Inicial
a	$ + 1, (j, k_{impar}) \rangle$ ou $ + 1, (j, k_{par}) \rangle$
b	$ 0, (j, k_{impar}) \rangle$ ou $ + 1, (j, k_{par}) \rangle$
c	$ 0, (j, k_{impar}) \rangle$ ou $ - 1, (j, k_{par}) \rangle$
d	$ - 1, (j, k_{impar}) \rangle$ ou $ - 1, (j, k_{par}) \rangle$
e	$ 0, (j, k_{par}) \rangle$ ou $ - 1, (j, k_{impar}) \rangle$
f	$ 0, (j, k_{par}) \rangle$ ou $ + 1, (j, k_{impar}) \rangle$

Tabela 7.1: Estados iniciais adequados as trajetórias balísticas dadas na Fig. (7.18). Na Fig. (7.20) temos a representação geométrica desses estados.

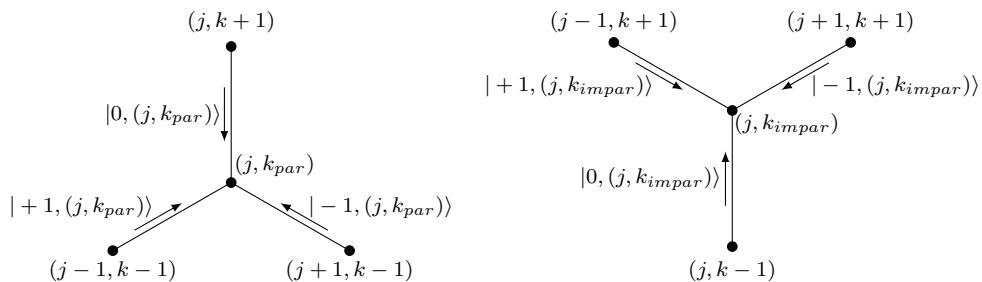


Figura 7.20: Representação geométrica dos estados da Tab. (7.1).

Para conseguirmos um conjunto de coeficientes de reflexão e transmissão que forneçam a condição para a realização de uma caminhada balística, Fig. (7.18), vamos associá-los aos elementos da matriz dada pela família abc , Eq. (7.26), tal que:

- para as trajetórias (a, c, e),

$$t_{++} = t_{-0} = t_{0,-} = c, \quad (7.33a)$$

$$t_{--} = t_{+0} = t_{0,+} = b, \quad (7.33b)$$

$$r_{-+} = r_{00} = r_{+,-} = a; \quad (7.33c)$$

- para as trajetórias (b, d, f),

$$t_{++} = t_{-0} = t_{0,-} = b, \quad (7.34a)$$

$$t_{--} = t_{+0} = t_{0,+} = c, \quad (7.34b)$$

$$r_{-+} = r_{00} = r_{+,-} = a. \quad (7.34c)$$

Essa escolha é válida para $-0,2 \leq a \leq 0,2$, onde $|c|^2$ é dominante, uma vez que nesse intervalo de valores de a temos

$$|c|^2 \rightarrow 1, \quad |a|^2 \rightarrow 0, \quad |b|^2 \rightarrow 0, \quad (7.35)$$

veja o gráfico da Fig. (7.16). Logo as matrizes que descrevem o operador evolução U_s para as trajetórias (a, c, e) da Fig. (7.18), é

$$\Gamma^{(j,k)} = \begin{pmatrix} r_{-1,+1}^{(j,k)} & t_{-1,0}^{(j,k)} & t_{-1,-1}^{(j,k)} \\ t_{0,+1}^{(j,k)} & r_{0,0}^{(j,k)} & t_{0,-1}^{(j,k)} \\ t_{+1,+1}^{(j,k)} & t_{+1,0}^{(j,k)} & r_{+1,-1}^{(j,k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b & c \\ c & a & b \\ b & c & a \end{pmatrix}, \quad (7.36)$$

e para os caminhos (b, d, f), é

$$\Gamma^{(j,k)} = \begin{pmatrix} r_{-1,+1}^{(j,k)} & t_{-1,0}^{(j,k)} & t_{-1,-1}^{(j,k)} \\ t_{0,+1}^{(j,k)} & r_{0,0}^{(j,k)} & t_{0,-1}^{(j,k)} \\ t_{+1,+1}^{(j,k)} & t_{+1,0}^{(j,k)} & r_{+1,-1}^{(j,k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & c & b \\ b & a & c \\ c & b & a \end{pmatrix}, \quad (7.37)$$

com a matriz da Eq. (7.36) correspondendo a da Eq. (7.16), e a da Eq. (7.37) resultando da permuta da segunda pela terceira linha, e da troca da segunda pela terceira coluna, na

Eq. (7.16). Esses processos de mudanças de linhas e colunas podem ser realizados, uma vez que eles não alteram a propriedade de unitariedade da matriz.

Exemplificamos essa caminhada, escolhendo os seguintes valores para o parâmetro a :

$$a = 0,00 \Rightarrow |a|^2 = 0,00, \quad |b|^2 = 0,00, \quad |c|^2 = 1,00; \quad (7.38a)$$

$$a = 0,10 \Rightarrow |a|^2 \approx 0,01, \quad |b|^2 \approx 0,01, \quad |c|^2 \approx 0,98; \quad (7.38b)$$

$$a = 0,20 \Rightarrow |a|^2 \approx 0,04, \quad |b|^2 \approx 0,03, \quad |c|^2 \approx 0,93; \quad (7.38c)$$

com $|b|^2$ e $|c|^2$ calculados a partir da Eq. (7.28). Evoluímos o sistema, para os conjuntos de coeficientes dados pela Eq. (7.38), e com o estado inicial

$$|\psi_0\rangle = | + 1, (1, -1)\rangle. \quad (7.39)$$

Nas Figs. (7.21-7.23) temos as distribuições de probabilidades relativas, p_s , de encontrar a partícula nas aresta, em diversas etapas de tempo. Observamos que a distribuição de probabilidades tende a se deslocar de maneira concentrada seguindo uma trajetória do tipo balística.

A combinação dos coeficientes, Eq. (7.38), com o estado inicial, Eq. (7.39), leva a partícula a descrever a trajetória (a) da Fig. (7.18), se deslocando no sentido crescente do eixo e_x . Para o primeiro caso, Fig. (7.21), temos uma probabilidade igual a um da partícula ser transmitida para a direção preferencial, implicando em uma evolução livre do sistema. Já para os outros dois exemplos, Figs. (7.22) e (7.23), existe uma pequena probabilidade da partícula ser refletida ou de ser transmitida para a direção não preferencial, o que leva a baixíssimas possibilidades de encontrar o sistema fora da trajetória (a) da Fig. (7.18).

Além da distribuição de probabilidades ao longo da rede, analisamos o comportamento do valor máximo das probabilidades, p_{max} em função do tempo. Na Fig. (7.24), vemos que para o caso de $a = 0,00$, p_{max} se mantém constante. À medida que aumentamos o valor do parâmetro a , p_{max} tende a diminuir, uma vez que a partícula encontra pequenos valores de probabilidades de ser refletida ou transmitida para a direção não preferencial, mesmo assim, ela continua sendo uma fração considerável da probabilidade total para as etapas de tempo $n \leq 20$.

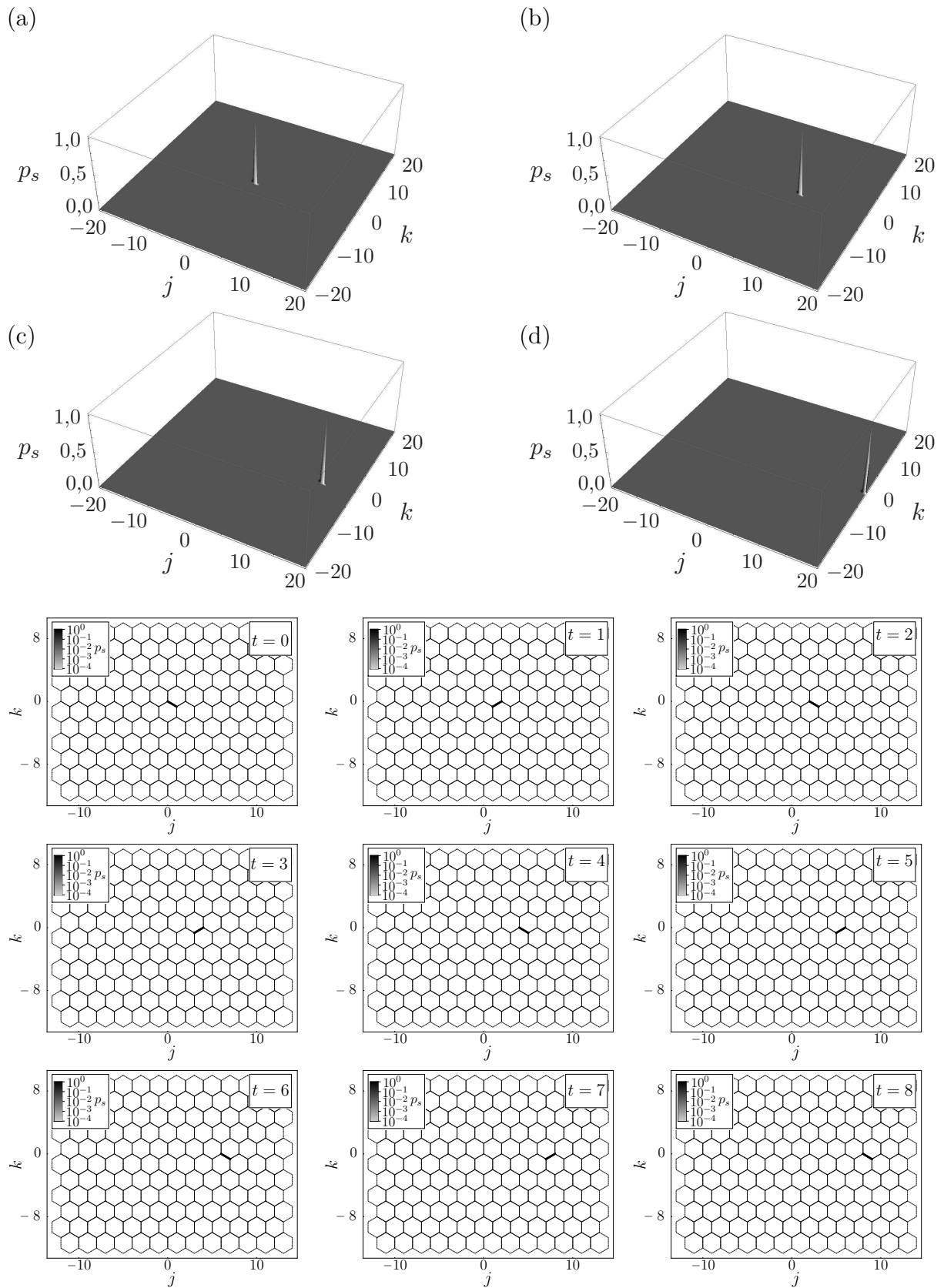


Figura 7.21: Distribuição de probabilidades relativas para as etapas de tempo: (a) $n = 0$, (b) $n = 7$, (c) $n = 14$ e (d) $n = 20$; nas figuras planificadas, abaixo, para as oito primeiras etapas de tempo; com os coeficientes $t_{\sigma,\sigma'}$ e $r_{\sigma,\sigma'}$ dados pela Eq. (7.33), o valor do parâmetro a dado pela Eq. (7.38a), e o estado inicial dado pela Eq. (7.39).

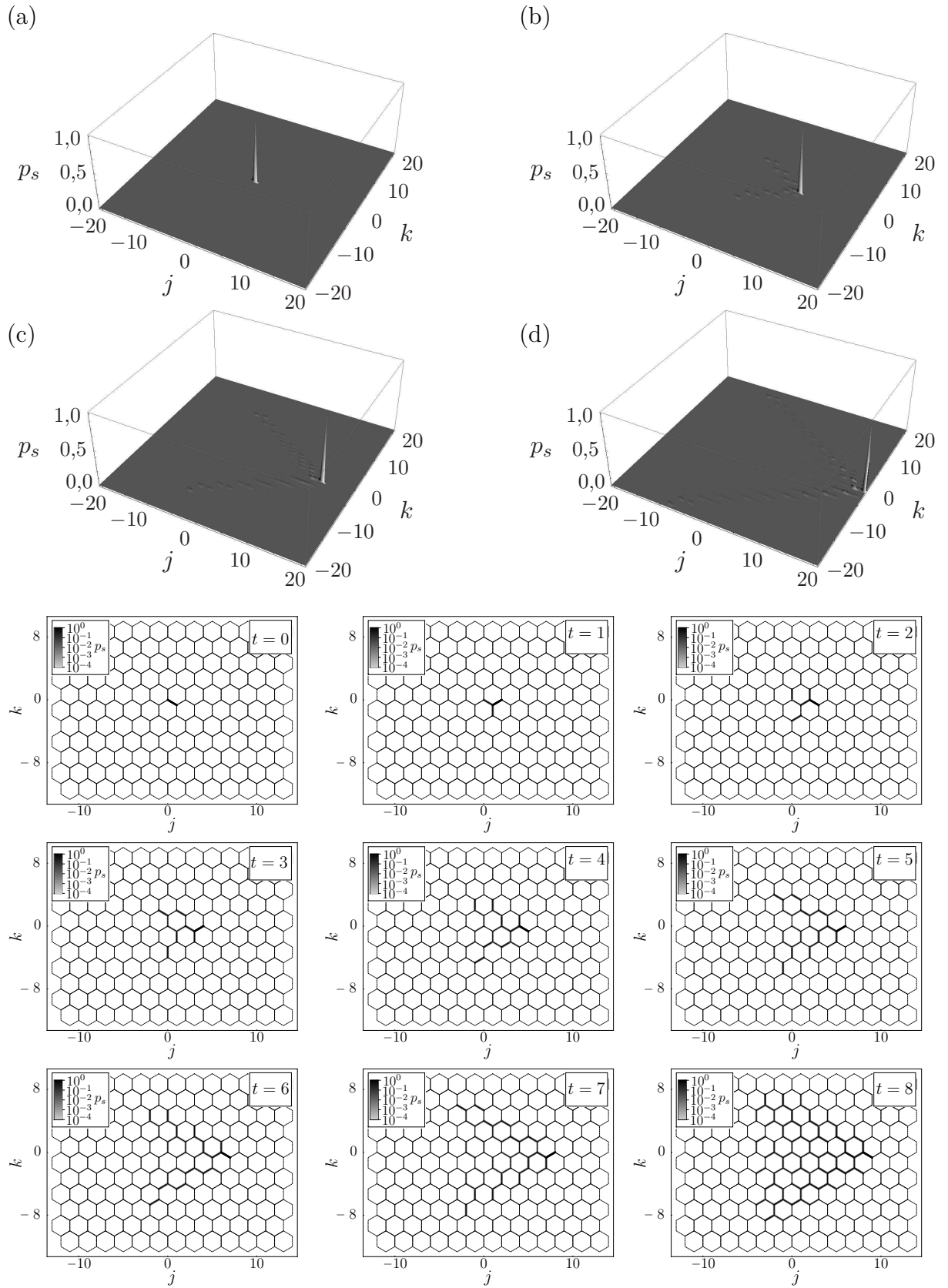


Figura 7.22: O mesmo que na Fig. (7.21), mas com o valor do parâmetro a dado pela Eq. (7.38b).

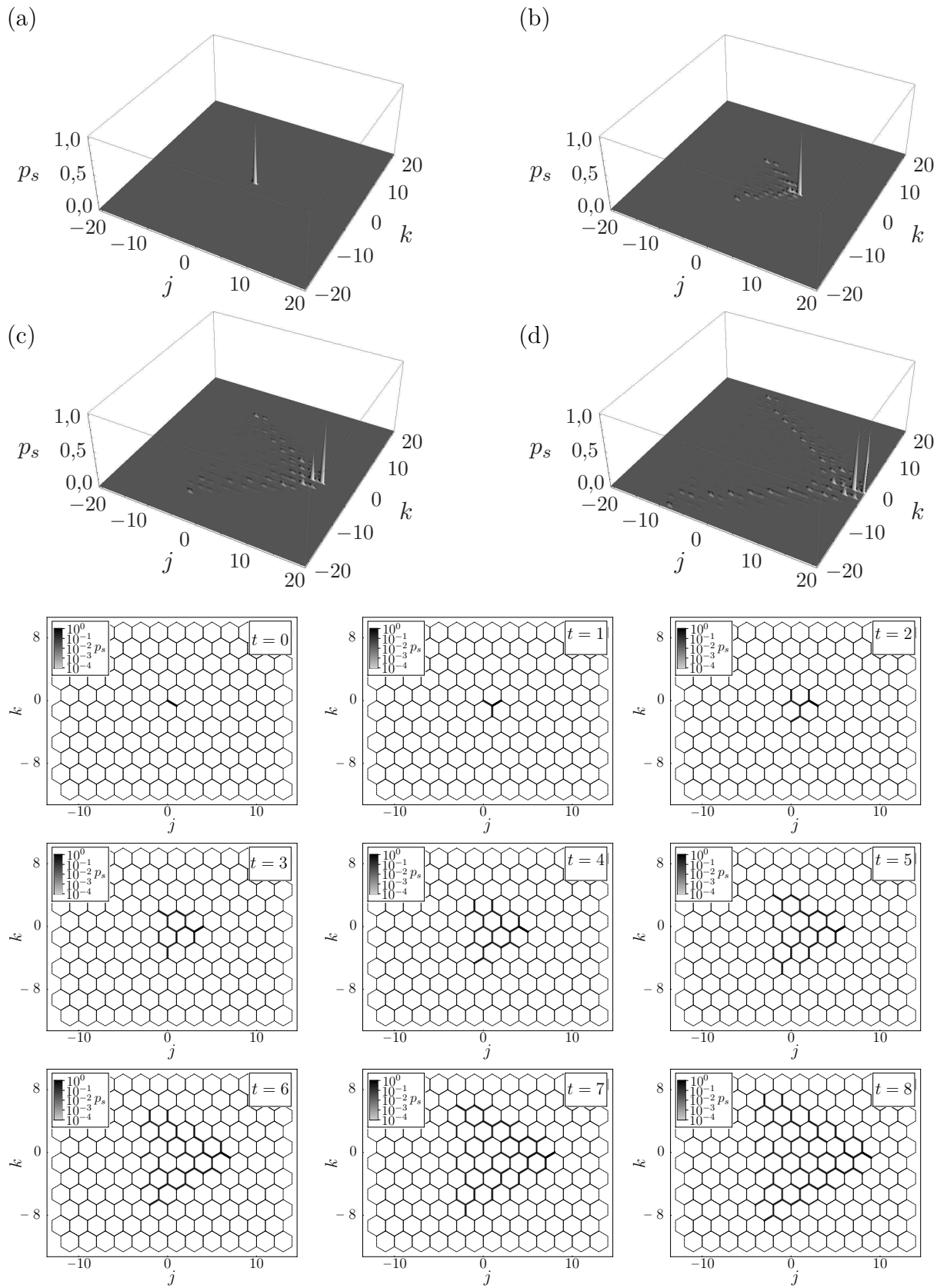


Figura 7.23: O mesmo que na Fig. (7.21), mas com o valor do parâmetro a dado pela Eq. (7.38c).

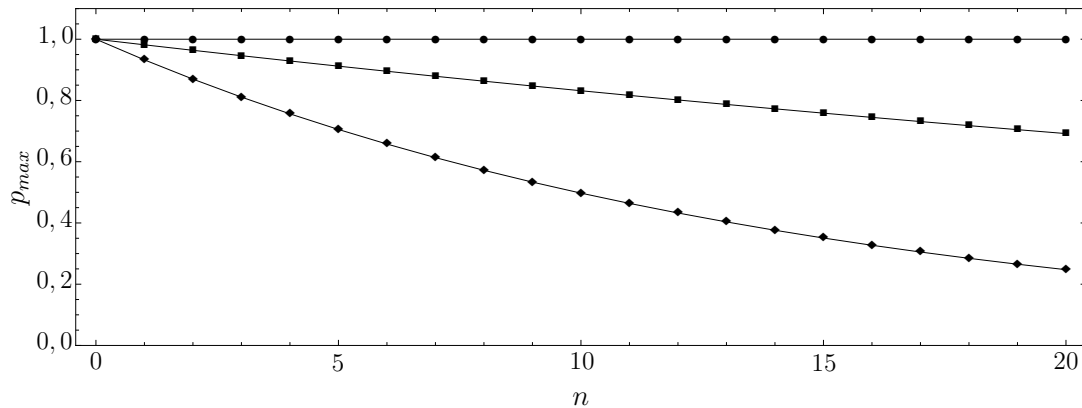


Figura 7.24: Probabilidade máxima, p_{max} em função das etapas de tempo, n , para caminhadas com os coeficientes de reflexão e transmissão dados pelos parâmetros a , b e c , e o estado inicial dado pela Eq. (7.39). Com os valores do parâmetro a dados por: círculos, pela Eq. (7.38a); quadrados, pela Eq. (7.38b); e losangos, pela Eq. (7.38c).

Caminhada em “Loop”

Uma caminhada interessante é aquela em que a partícula tende a descrever um “loop” em um anel da rede. Da associação dos valores dos números quânticos σ_n com as direções de propagação da partícula, para as caminhadas utilizando o conjunto de valores $\Phi_2 = \{0, 1, 2\}$, Figs. (6.5) e (7.25), vemos que uma caminhada dada pela sequência de estados com mesmo σ , em cada etapa de tempo, Eq. (6.3), leva a partícula a circular um anel no sentido horário.

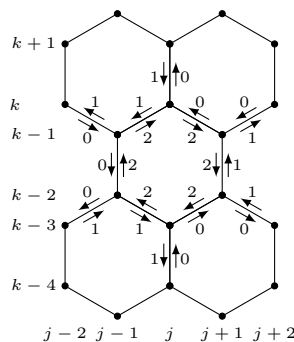


Figura 7.25: Associação dos valores dos números quânticos σ_n e as direções de propagação da partícula ao longo da rede para a formulação utilizando os elementos de Φ_2 . Aqui $\sigma_2(j) = [j]_3 = 0$, veja a Eq. (6.2).

Analisando a Fig. (7.25), concluímos que para realizar uma caminhada com uma trajetória em “loop”, utilizando a formulação com os valores de σ_n dados pelos elementos de $\Phi_2 = \{0, 1, 2\}$, os coeficientes de transmissão

$$\Gamma_{\sigma,\sigma} = t_{\sigma,\sigma} \tag{7.40}$$

devem ser dominantes. Isso pode ser obtido considerando os elementos da matriz da família abc , Eq. (7.26), onde $|a|^2 \rightarrow 0$, $|b|^2 \rightarrow 0$ e $|c|^2 \rightarrow 1$, no intervalo $-0,2 \leq a \leq 0,2$, Fig. (7.16). Portanto, a matriz que representa as amplitudes de transmissão e reflexão é dada por

$$\Gamma^{(j,k)} = \begin{pmatrix} \Gamma_{0,0}^{(j,k)} & \Gamma_{0,1}^{(j,k)} & \Gamma_{0,2}^{(j,k)} \\ \Gamma_{1,0}^{(j,k)} & \Gamma_{1,1}^{(j,k)} & \Gamma_{1,2}^{(j,k)} \\ \Gamma_{2,0}^{(j,k)} & \Gamma_{2,1}^{(j,k)} & \Gamma_{2,2}^{(j,k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c & b & a \\ a & c & b \\ b & a & c \end{pmatrix}, \quad (7.41)$$

onde obtivemos o segundo membro da igualdade na Eq. (7.41) trocando a primeira pela segunda linha e em seguida permutando a segunda pela terceira coluna da Eq. (7.26). Os elementos a , b e c estão relacionados pela Eq. (7.28).

Nas Figs. (7.26-7.28) temos as distribuições de probabilidades relativas para três caminhadas para os valores do parâmetro a dados pela Eq. (7.38), e estado inicial dado por $|\psi_0\rangle = |0, (0, 0)\rangle$.

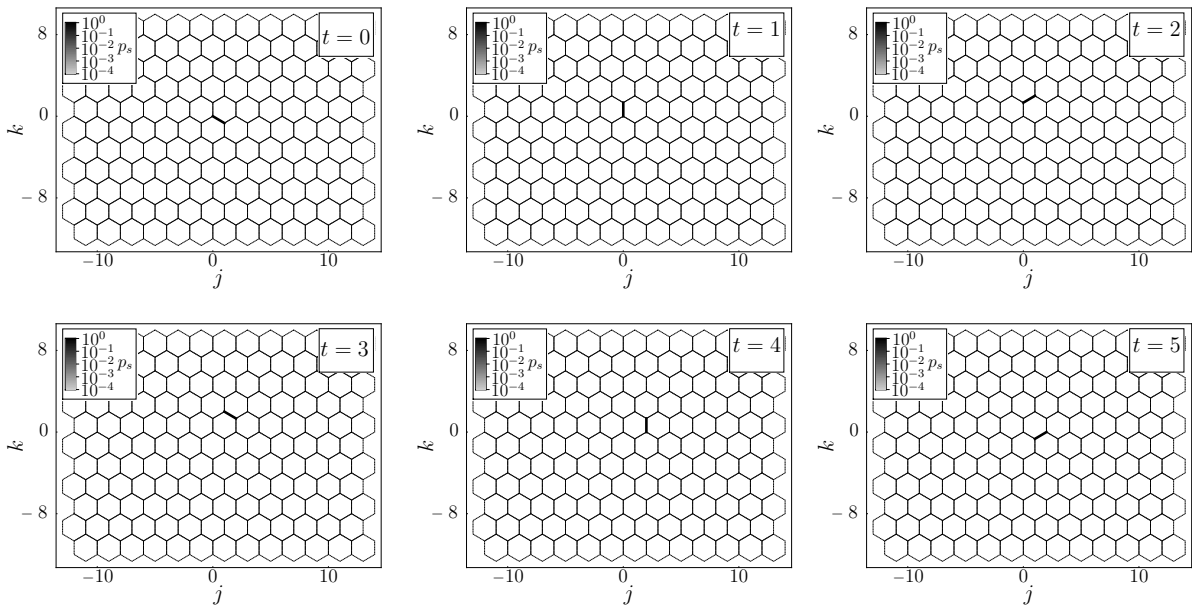


Figura 7.26: Distribuição de probabilidades relativas para os cinco primeiros passos de tempo, para uma caminhada tendenciosa em “loop”, com os coeficientes de reflexão e transmissão dados pela Eq. (7.41), com o parâmetro a dado pela Eq.(7.38a).

Observamos que para o primeiro caso, Fig. (7.26), onde $a = 0,00$, a partícula fica confinada em um anel da rede, uma vez que, das Eqs. (7.40) e (7.41),

$$|r_{\sigma,\sigma'}|^2 = |t_{\sigma,\sigma'}|^2 = 0,00,$$

$$|t_{\sigma,\sigma}|^2 = 1,00,$$

ou seja, ela sempre encontra probabilidade um de ser transmitida para uma arestas a sua direita (sentido horário). A medida que o valor do parâmetro a vai aumentando, as probabilidades da partícula sair do anel deixa de ser zero, no entanto para o intervalo onde $-0,2 \leq a \leq 0,2$, ela possui uma maior probabilidade de ser encontrada no anel que contém a aresta do estado inicial, Figs. (7.27-7.28).

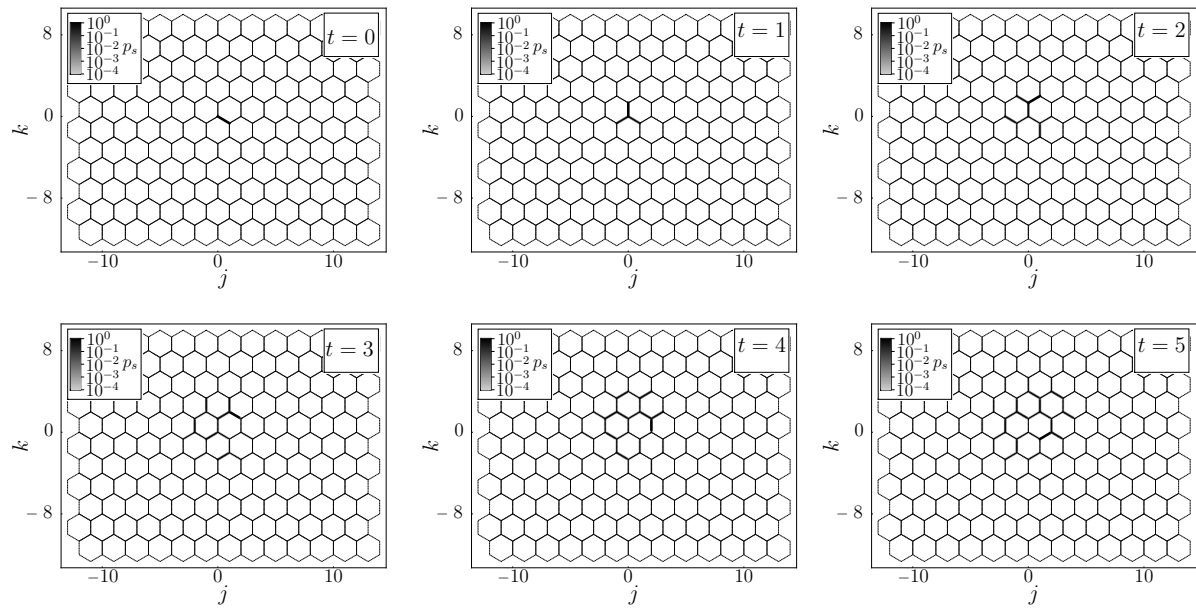


Figura 7.27: O mesmo que na Fig. (7.26), mas com o valor do parâmetro a dado pela Eq. (7.38b).

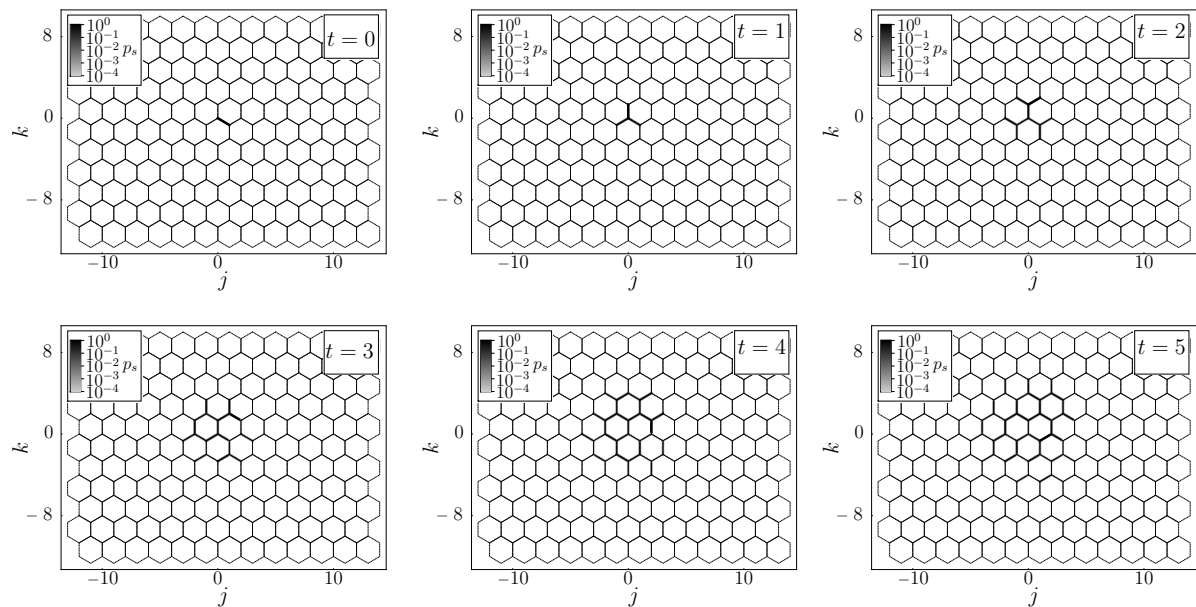


Figura 7.28: O mesmo que na Fig. (7.26), mas com o valor do parâmetro a dado pela Eq. (7.38c).

Podemos, também, descrever uma caminhada com trajetória em “loop”, utilizando a formulação com os valores de σ_n dados por $\Phi_1 = \{-1, 0, +1\}$. Assim, ao incidir sobre um vértice, a partícula pode ser transmitida para uma aresta ligada a pela sua direita (sentido horário), para uma aresta ligada pela sua esquerda (sentido anti-horário), ou pode retornar no sentido oposto de sua propagação na própria aresta que se encontrava devido a um processo de reflexão. Desta forma, vamos assumir que, do ponto de vista da partícula, os coeficientes de reflexão e transmissão tem sempre os mesmos valores para um dado sentido de propagação, ou seja, ela sempre vai encontrar a mesma probabilidade de ir para direita, para esquerda ou de retornar independente da aresta que se encontre.

A Fig. (7.29) mostra os coeficientes de transmissão, para direita (sentido horário) e esquerda (sentido anti-horário). Dependendo da paridade da coordenada k de cada sítio devemos ter:

- se k é par

$$t_{0,0}^{(j,k)} = t_{-1,+1}^{(j,k)} = t_{+1,-1}^{(j,k)} = r, \quad (7.42a)$$

$$t_{+1,+1}^{(j,k)} = t_{-1,0}^{(j,k)} = t_{0,-1}^{(j,k)} = t_H, \quad (7.42b)$$

$$t_{-1,-1}^{(j,k)} = t_{+1,0}^{(j,k)} = t_{0,+1}^{(j,k)} = t_A; \quad (7.42c)$$

- se k é ímpar

$$t_{0,0}^{(j,k)} = t_{-1,+1}^{(j,k)} = t_{+1,-1}^{(j,k)} = r, \quad (7.43a)$$

$$t_{+1,+1}^{(j,k)} = t_{-1,0}^{(j,k)} = t_{0,-1}^{(j,k)} = t_A, \quad (7.43b)$$

$$t_{-1,-1}^{(j,k)} = t_{+1,0}^{(j,k)} = t_{0,+1}^{(j,k)} = t_H. \quad (7.43c)$$

onde t_H , t_A e r são, respectivamente, as amplitudes de transmissão no sentido horário, anti-horário e de reflexão. Por tanto, para uma caminhada com uma trajetória em “loop” no sentido horário, devemos ter um conjunto de coeficientes de reflexão e transmissão onde t_H seja dominante, da mesma maneira para a trajetória “loop” no sentido anti-horário, t_A deve ser dominante.

Para exemplificar as caminhadas com trajetórias em “loop”, utilizando a formulação com os valores de σ_n dados pelos elementos de Φ_1 , vamos considerar a matriz da família abc , Eq. (7.26), uma vez que $|c|^2$ é dominante, como discutido anteriormente. Logo a

matriz de espalhamento, $\Gamma^{(j,k)}$, para k par, é dada por

$$\Gamma^{(j,k)} = \begin{pmatrix} r_{-1,+1}^{(j,k)} & t_{-1,0}^{(j,k)} & t_{-1,-1}^{(j,k)} \\ t_{0,+1}^{(j,k)} & r_{0,0}^{(j,k)} & t_{0,-1}^{(j,k)} \\ t_{+1,+1}^{(j,k)} & t_{+1,0}^{(j,k)} & r_{+1,-1}^{(j,k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & t_H & t_A \\ t_A & r & t_H \\ t_H & t_A & r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & c & b \\ b & a & c \\ c & b & a \end{pmatrix}, \quad (7.44)$$

e para k ímpar, dada por

$$\Gamma^{(j,k)} = \begin{pmatrix} r_{-1,+1}^{(j,k)} & t_{-1,0}^{(j,k)} & t_{-1,-1}^{(j,k)} \\ t_{0,+1}^{(j,k)} & r_{0,0}^{(j,k)} & t_{0,-1}^{(j,k)} \\ t_{+1,+1}^{(j,k)} & t_{+1,0}^{(j,k)} & r_{+1,-1}^{(j,k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & t_A & t_H \\ t_H & r & t_A \\ t_A & t_H & r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b & c \\ c & a & b \\ b & c & a \end{pmatrix}, \quad (7.45)$$

com a matriz da abc para k ímpar obtida através da permuta da segunda pela terceira linha, e a troca da segunda pela terceira coluna, na Eq. (7.16), e considerando a relação entre os elementos a , b e c , dadas pela Eq. (7.28).

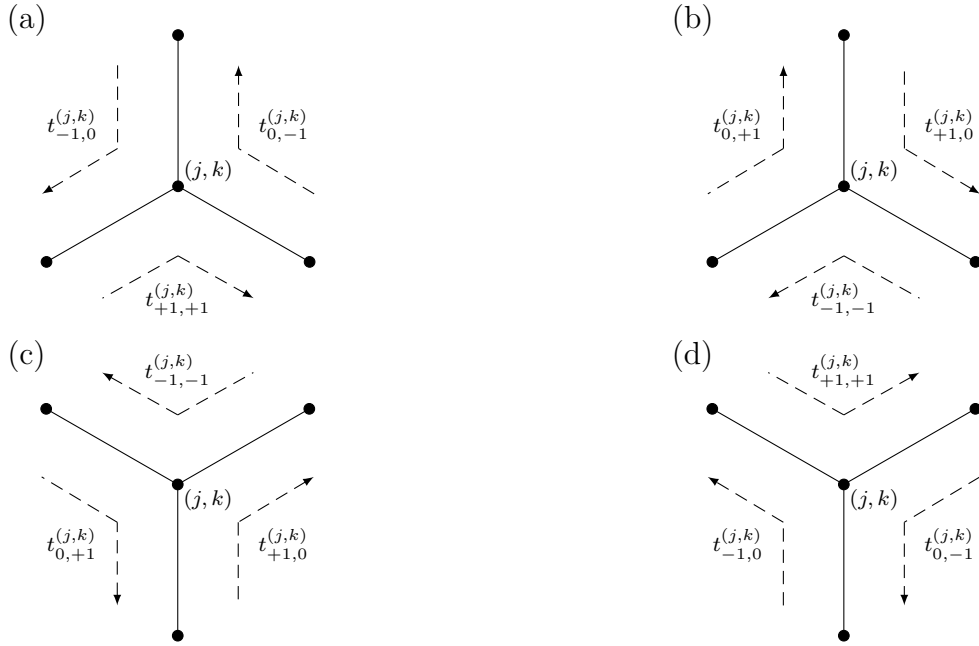


Figura 7.29: Os coeficientes de transmissão para o sentido horário (direita no referencial da partícula), (a) para k par e (c) para k ímpar. Os coeficientes de transmissão para o sentido anti-horário (esquerda no referencial da partícula), (b) para k par e (c) k ímpar.

Escolhendo os valores para o parâmetro a dados pela Eq. (7.38), e considerando o estado inicial dado por

$$|\psi_0\rangle = |0, (0, 0)\rangle,$$

evoluímos o sistema em 20 passos de tempo. As distribuição de probabilidades relativas são apresentadas nas Fig. (7.30) e (7.32), onde observamos que a distribuição de

probabilidades tende a colocar a partícula em “loop” no anel que contém o estado inicial.

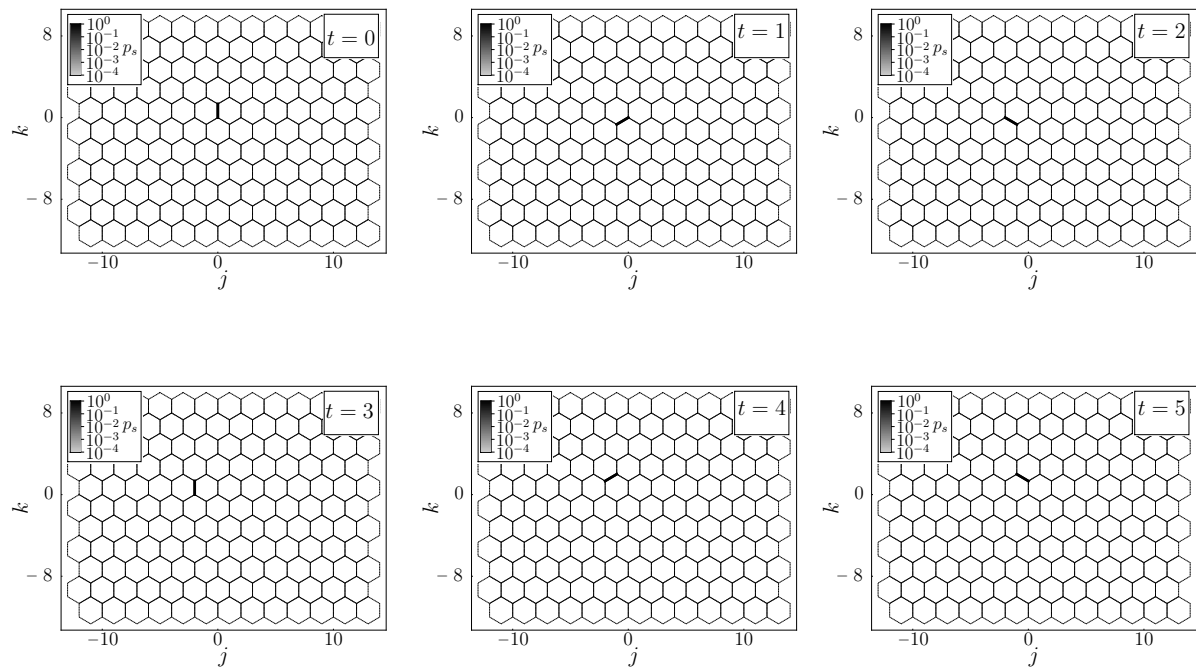


Figura 7.30: Distribuição de probabilidades relativas para os cinco primeiros passos de tempo, para uma caminhada tendenciosa em “loop”, com os coeficientes de reflexão e transmissão dados pelas Eqs. (7.44) e (7.45), com o parâmetro a dado pela Eq.(7.38a).

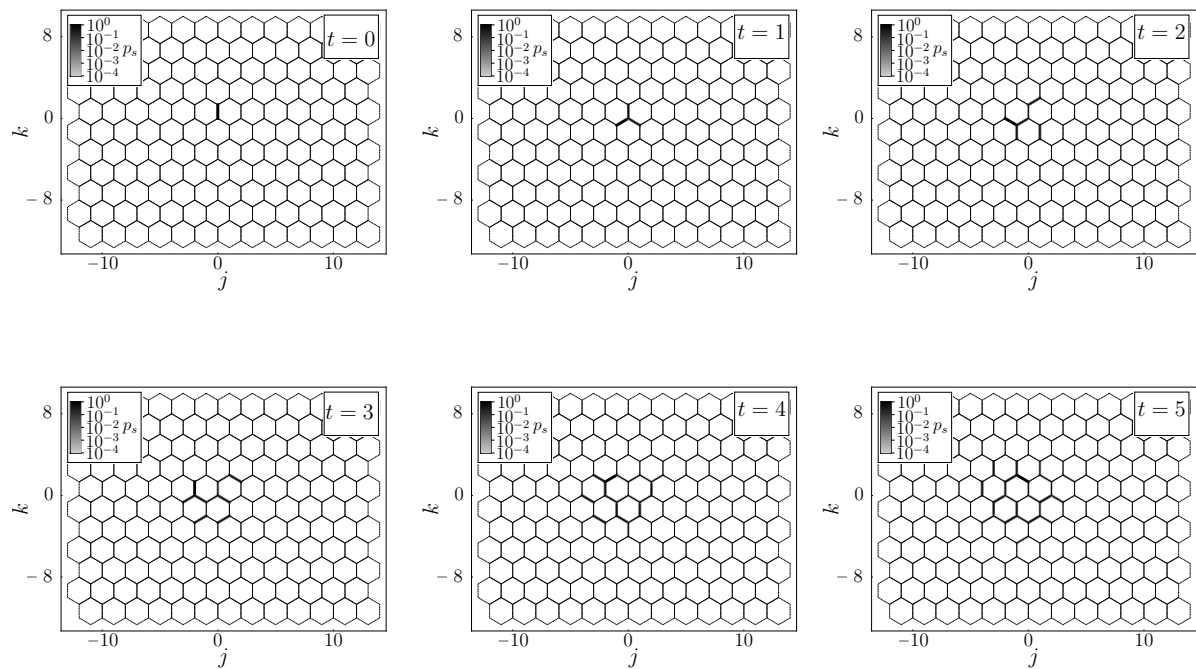


Figura 7.31: O mesmo que na Fig. (7.30), mas com o valor do parâmetro a dado pela Eq. (7.38b).

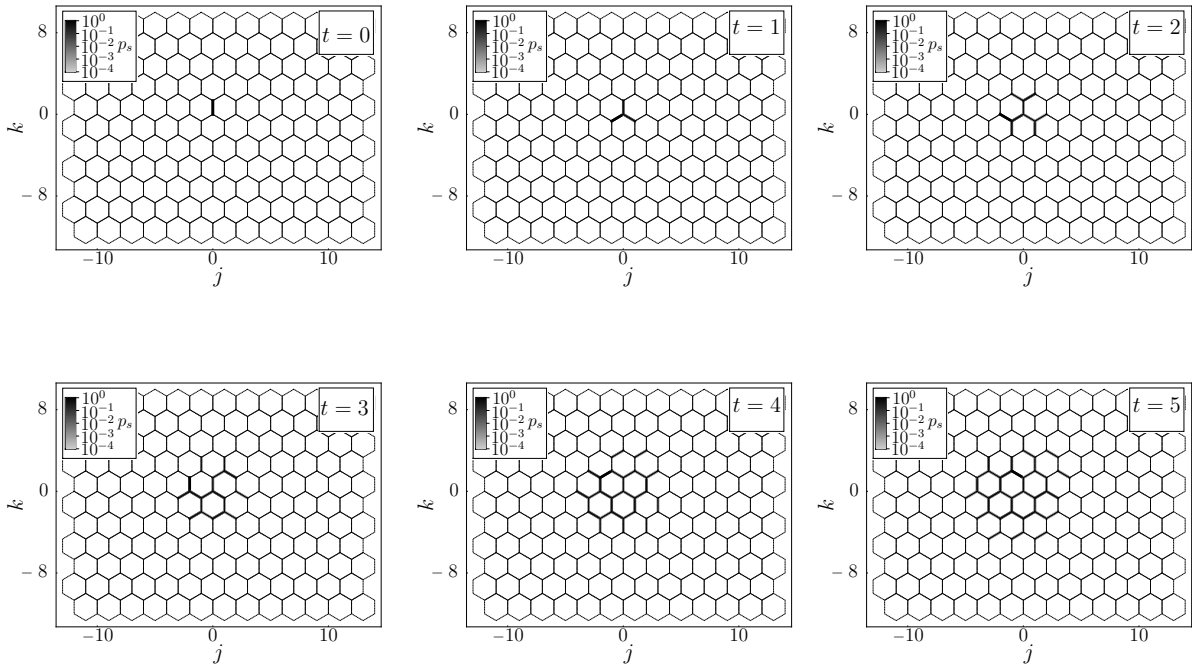


Figura 7.32: O mesmo que na Fig. (7.30), mas com o valor do parâmetro a dado pela Eq. (7.38c).

7.3.3 Caminhada com Simetrias

Outros tipos de caminhadas de interessante, são aquelas que apresenta algum tipo de simetria para a sua distribuição de probabilidades. Discutimos na seção (7.1) caminhadas com simetrias axial e de rotação em 120° , para a formulação com os valores dos números quânticos σ_n dados por $\Phi_1 = \{-1, 0, +1\}$. Vamos nesta seção discutir novos exemplos para a evolução das caminhadas que possuem essas simetrias.

Simetria Axial

Para obtermos uma caminhada quânticas, com simetria axial ao longo do eixo e_y , devemos ter as seguintes relações

$$t_{\sigma, \sigma'}^{(j, k)} = t_{-\sigma, -\sigma'}^{(j, k)}, \quad (7.46a)$$

$$r_{-1, +1}^{(j, k)} = r_{+1, -1}^{(j, k)}. \quad (7.46b)$$

Além das relações para os coeficientes, Eq. (7.46), o sistema deve estar em um estado inicial simétrico em relação ao eixo e_y .

Levando em conta a Eq. (7.46), e a matriz da família $abcdg$, Eq. (7.29), assumiremos

que

$$\Gamma^{(j,k)} = \begin{pmatrix} r_{-1,+1}^{(j,k)} & t_{-1,0}^{(j,k)} & t_{-1,-1}^{(j,k)} \\ t_{0,+1}^{(j,k)} & r_{0,0}^{(j,k)} & t_{0,-1}^{(j,k)} \\ t_{+1,+1}^{(j,k)} & t_{+1,0}^{(j,k)} & r_{+1,-1}^{(j,k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & c & b \\ d & g & d \\ b & c & a \end{pmatrix}, \quad (7.47)$$

logo

$$r_{-1,+1}^{(j,k)} = r_{+1,-1}^{(j,k)} = a, \quad (7.48a)$$

$$t_{-1,-1}^{(j,k)} = t_{+1,+1}^{(j,k)} = b, \quad (7.48b)$$

$$t_{-1,0}^{(j,k)} = t_{+1,0}^{(j,k)} = c, \quad (7.48c)$$

$$t_{0,+1}^{(j,k)} = t_{0,-1}^{(j,k)} = d, \quad (7.48d)$$

$$r_{0,0}^{(j,k)} = g, \quad (7.48e)$$

onde os elementos a , b , c , d e g estão relacionando pela Eq. (7.31).

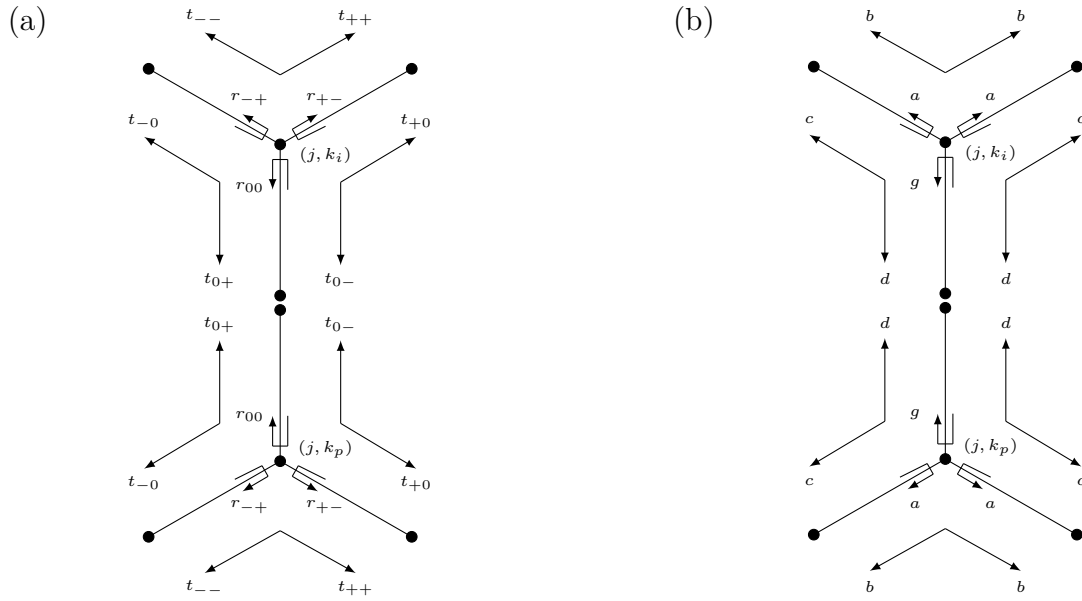


Figura 7.33: Em (a), distribuição dos coeficientes de reflexão e transmissão na rede hexagonal; (b) distribuição dos elementos da matriz família $abcdg$ para que os coeficientes de reflexão e transmissão ter simetria axial ao longo da direção e_y .

Para ilustrar caminhadas com simetria axial, utilizando a família $abcdg$ para representar os coeficientes de reflexão e transmissão, vamos escolher o seguinte valor para o parâmetro g :

$$g = 0.80 \Rightarrow |a|^2 \approx 0,01, \quad |b|^2 \approx 0,81, \quad |c|^2 \approx 0,18, \quad |d|^2 \approx 0,18, \quad |g|^2 \approx 0,64; \quad (7.49)$$

e vamos admitir estados iniciais simétrico ao eixo e_y , dados por

$$|\psi_0\rangle = |0, (0, 0)\rangle \quad (7.50)$$

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{\sigma=-1}^1 |\sigma, (0, 0)\rangle. \quad (7.51)$$

Na Fig. (7.34) temos as distribuições de probabilidades relativas com simetria axial, após 20 etapas de tempo e com o estados iniciais dados pelas Eqs. (7.50) e (7.51). Como esperado, observamos que as distribuições de probabilidades tem simetria axial em torno do eixo y , como era esperado. A distribuição de probabilidades para a caminhada com $|\psi_0\rangle$ dado pela Eq. (7.51) é mais rico que o caso com $|\psi_0\rangle$ dado pela Eq. (7.50), pois ele é composto pela superposição de três estados, o que acarreta em uma maior processos de interferência.

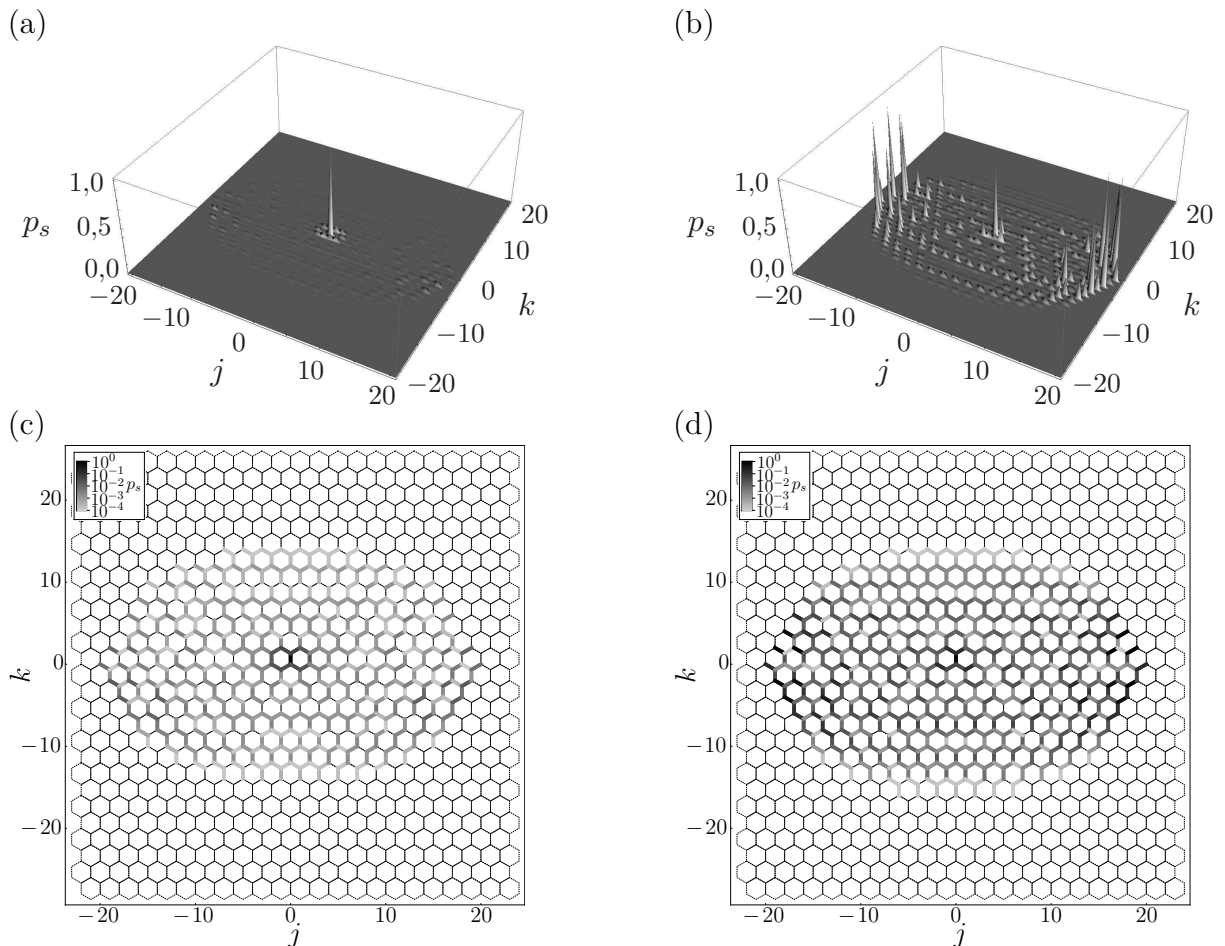


Figura 7.34: Distribuições de probabilidades relativas para caminhadas com simetria axial após 20 passos de tempo, para os coeficientes de reflexão e transmissão dados pelo elementos da matriz família $abcdg$ de acordo com a Eq. (7.48), com o valor do parâmetro g dado pela Eq. (7.49); em (a) para o estado inicial da Eq. (7.50), e em (b) para o estado inicial da Eq. (7.51). Nos gráficos (c) e (d), temos respectivamente as planificações das distribuição de probabilidades dadas em (a) e (b).

Simetria de Rotação

Para caminhadas com simetria de rotação em 120° , os coeficientes de reflexão e transmissão, Fig. (7.35), deve satisfazer as seguintes relações,

$$t_{+1,+1} = t_{-1,0} = t_{0,-1}, \quad (7.52a)$$

$$t_{-1,-1} = t_{+1,0} = t_{0,+1}, \quad (7.52b)$$

$$r_{-1,+1} = r_{0,0} = r_{+1,-1}. \quad (7.52c)$$

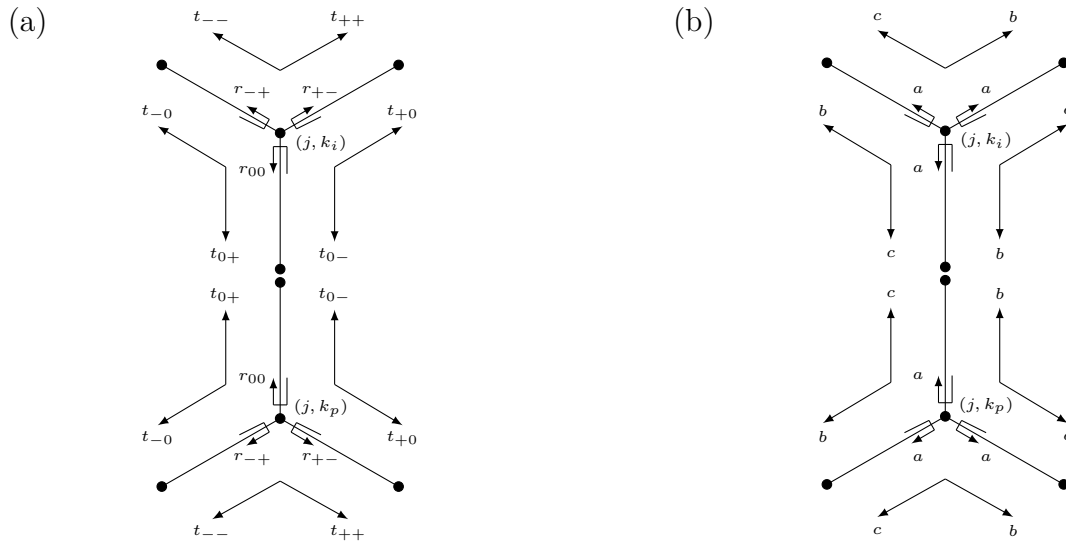


Figura 7.35: Distribuição dos coeficientes de reflexão e transmissão para uma caminhada ter simetria de rotação em 120° .

Combinando a matriz da família abc com a matriz de espalhamento, $\Gamma^{(j,k)}$, temos

$$\Gamma^{(j,k)} = \begin{pmatrix} r_{-1,+1}^{(j,k)} & t_{-1,0}^{(j,k)} & t_{-1,-1}^{(j,k)} \\ t_{0,+1}^{(j,k)} & r_{0,0}^{(j,k)} & t_{0,-1}^{(j,k)} \\ t_{+1,+1}^{(j,k)} & t_{+1,0}^{(j,k)} & r_{+1,-1}^{(j,k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b & c \\ c & a & b \\ b & c & a \end{pmatrix}, \quad (7.53)$$

logo

$$t_{+1,+1} = t_{-1,0} = t_{0,-1} = b, \quad (7.54a)$$

$$t_{-1,-1} = t_{+1,0} = t_{0,+1} = c, \quad (7.54b)$$

$$r_{-1,+1} = r_{0,0} = r_{+1,-1} = a, \quad (7.54c)$$

onde os elementos a , b e c estão relacionados pela Eq. (7.28).

Nas Fig. (7.36) temos as distribuição de probabilidades, após 20 passos de tempo,

para uma caminhada com os coeficientes de reflexão e transmissão dados pela Eq. (7.54), com valor do parâmetro a dado por

$$a = 2/3 \Rightarrow |a|^2 \approx 0,66, \quad |b|^2 \approx 0,11, \quad |c|^2 \approx 0,66, \quad (7.55)$$

e o estado inicial do sistema por

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{\sigma=-1}^1 |\sigma, (0,0)\rangle. \quad (7.56)$$

Analisando a Fig. (7.36) vemos que o sistema exibe uma simetria de rotação em 120° , uma vez que as distribuição de probabilidades ao longo dos eixos e_1 , e_2 e e_3 , que estão à 120° um em relação ao outro, são idênticas.

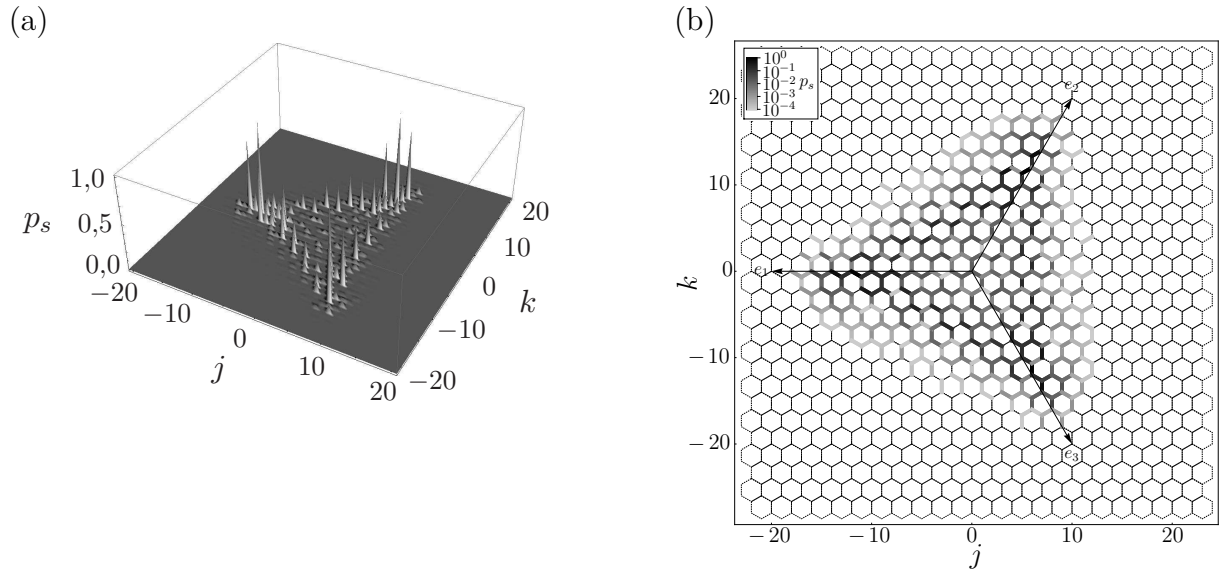


Figura 7.36: Distribuições de probabilidades relativas para caminhadas com simetria de rotação em 120° , após 20 passos de tempo, para os coeficientes de reflexão e transmissão dados pelo elementos da matriz família abc de acordo com a Eq. (7.54), com o valor do parâmetro a dado pela Eq. (7.55).

Caminhadas com Transmissão Imparciais

O caso mais simples de um conjunto de coeficientes $\Gamma_{\sigma'\sigma}$ é aquele independente dos vértices da rede e dado por

$$r_{\sigma'\sigma} = a, \quad (7.57a)$$

$$t_{\sigma'\sigma} = b. \quad (7.57b)$$

Nesta situação sempre temos os mesmo valores para os coeficientes de transmissão independente da direção adotada. O mesmo ocorre para as amplitudes de reflexão. Considerado a formulação com os valores de σ_n dados por $\Phi_1 = \{-1, 0, +1\}$, e assumindo que a matriz de espalhamento, Eq (7.8) é dada pela família ab . Eq. (7.23), temos

$$\Gamma^{(j,k)} = \begin{pmatrix} r_{-1,+1} & t_{-1,0} & t_{-1,-1} \\ t_{0,+1} & r_{0,0} & t_{0,-1} \\ t_{+1,+1} & t_{+1,0} & r_{+1,-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b & b \\ b & a & b \\ b & b & a \end{pmatrix}. \quad (7.58)$$

Observe que para esse caso, a caminhada exhibe simetria axial ao longo do eixo e_y e de rotação em 120° .

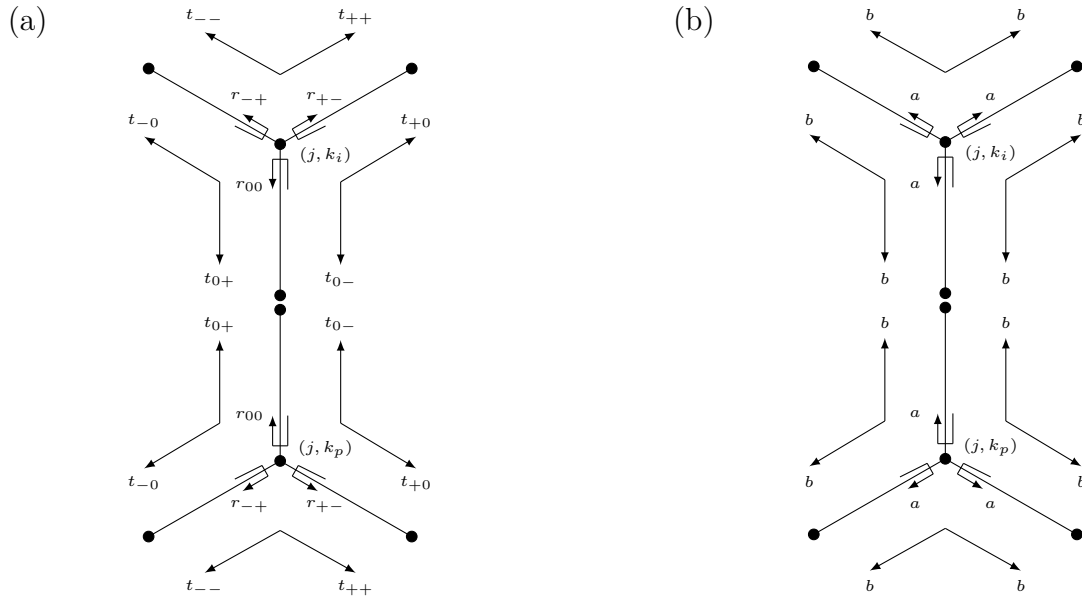


Figura 7.37: Distribuição dos coeficientes de reflexão e transmissão para uma caminhada com coeficientes de transmissão imparciais.

Na Tab. (7.2) temos alguns casos especiais para os valores dos coeficientes de reflexão e transmissão. Veja que: (i) $\theta = 0$ temos um máximo nas probabilidades de transmissão e um mínimo para a reflexão; (ii) $\theta = 1/3$ as temos as mesma probabilidades da partícula ser refletida ou transmitida; (iii) $\theta = 0,38$ a soma das probabilidades de transmissões é igual a de reflexão; e (iv) $\theta = 1/2$ a probabilidade de reflexão é máxima e igual a um e a de transmissão é nula.

Evoluímos o sistema para os coeficientes de reflexão e transmissão considerando a relação da Eq. (7.57), com os valores para o parâmetro θ dados na Tab. (7.2), e o estado inicial do sistema dado por

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{\sigma=-1}^1 |\sigma, (0, 0)\rangle. \quad (7.59)$$

$\theta = 0$	$ r_{\sigma'\sigma} ^2 = 1/9$	$ t_{\sigma'\sigma} ^2 = 4/9$
$\theta = 1/3$	$ r_{\sigma'\sigma} ^2 = 1/3$	$ t_{\sigma'\sigma} ^2 = 1/3$
$\theta = 0,38$	$ r_{\sigma'\sigma} ^2 \approx 1/2$	$ t_{\sigma'\sigma} ^2 \approx 1/4$
$\theta = 1/2$	$ r_{\sigma'\sigma} ^2 = 1$	$ t_{\sigma'\sigma} ^2 = 0$

Tabela 7.2: Valores das probabilidades de transmissão e reflexão para alguns casos particulares de θ , onde $r_{\sigma'\sigma}$ e $t_{\sigma'\sigma}$ são dados, respectivamente, pelos elementos a e b da família ab , Eq. (7.25).

Nas Figs. (7.38) e (7.39) temos as distribuições de probabilidades normalizadas, assumindo, respectivamente, os valores de θ da Tab. (7.2). Observamos que de fato as distribuições de probabilidade exibem simetrias axial ao longo do eixo e_y e de rotação em 120° . Além disso observamos que a medida que as probabilidade de transmissão vão diminuindo, a distribuição de probabilidades tende a ficar concentrada em torno da origem.

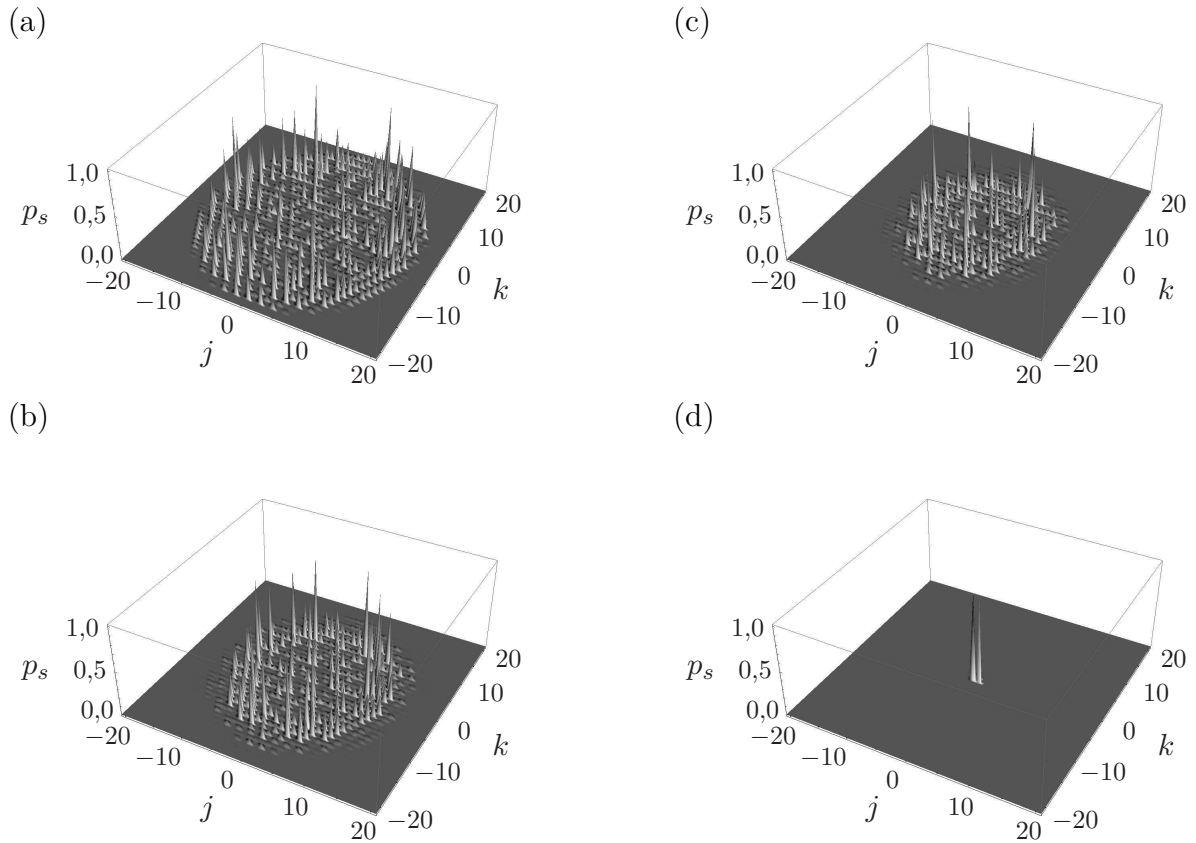


Figura 7.38: Distribuição de probabilidades normalizadas de encontrar a partícula nas arestas, p_s , para caminhada quântica na rede hexagonal com coeficientes de transmissões imparciais, após 20 passos de tempo. Em (a) $\theta = 0$, (b) $\theta = 1/3$, (c) $\theta = 0,38$ e (d) $\theta = 1/2$.

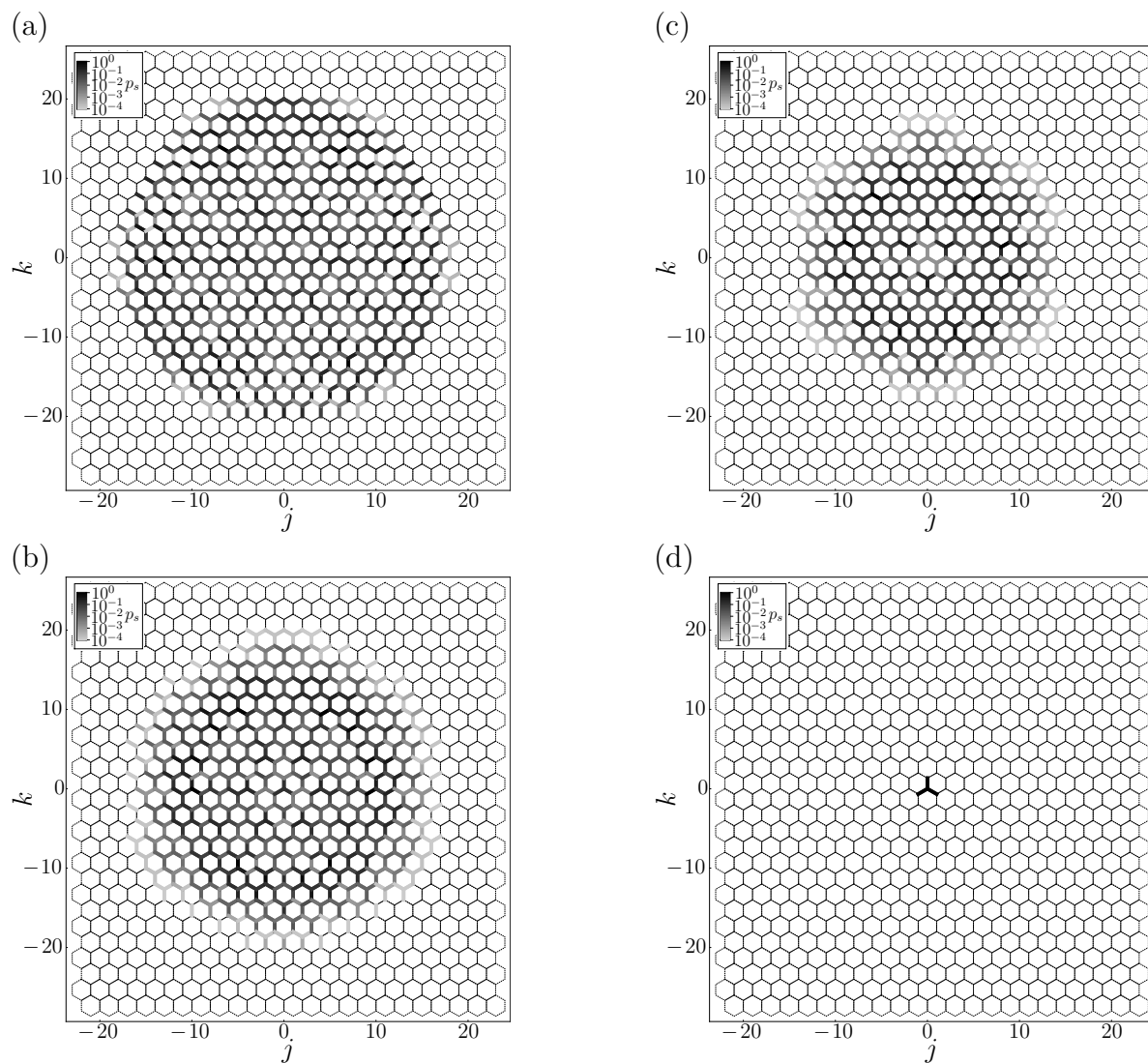


Figura 7.39: Planificação das distribuições de probabilidades dadas na Fig. (7.38).

Conclusão

Existem dois modelos distintos de caminhadas quânticas em tempo discreto, o de moeda e o de espalhamento, que podem ser empregados em grafos com topologias arbitrárias. Além disso, como mostrado em [27] eles são unitariamente equivalentes. Neste trabalho um dos principais objetivos foi o desenvolvimento desses modelos de caminhadas quânticas para redes com topologias regulares, considerando as redes quadrada e hexagonal.

Tal estudo propiciou a comparação de diferentes aspectos associados à construção dos modelos de espalhamento e de moeda. Especificamente, apresentamos um desenvolvimento para tais modelos em rede regulares, e aplicamos essa metodologia na construção das caminhadas quânticas nas redes linear, quadrada e hexagonal. Todos os exemplos estudados mostraram que o mapeamento entre os modelos de moeda e de espalhamento, dado pela Eq. (4.43), resulta na equivalência unitária entre os mesmos. Também ilustramos as particularidades dos padrões de distribuições de probabilidade ao longo das estruturas das redes, que resulta da evolução temporal para as duas formulações das caminhadas quânticas.

Iniciamos o estudo das caminhadas quânticas com o caso mais simples, na rede linear, com o objetivo de compreender melhor os detalhes de tal sistema. Esse estudo serviu de base na análise das caminhadas em redes mais complexas. No capítulo 4 apresentamos o desenvolvimento das caminhadas para grafos com topologias arbitrárias e discutimos a equivalência unitária entre os modelos de moeda e de espalhamento. Além disso, particularizamos o caso geral para caminhas em redes regulares.

O desenvolvimento e a implementação das caminhadas quânticas na rede quadrada foi realizado no capítulo 5, onde calculamos quatro exemplos numéricos da evolução do sistema: para as matrizes de Hadamard desacoplada e acoplada, de Grover e da Trans-

formada Discreta de Fourier, tanto no modelo de espalhamento quanto no modelo de moeda.

Finalmente, no capítulo 6 desenvolvemos as duas abordagens para atacar as caminhadas em ambos modelos (de espalhamento e moeda) na rede hexagonal. A primeira abordagem é muito semelhante à versão unidimensional no que diz respeito aos rótulos dos estados de base associados à direção de propagação da partícula. A segunda metodologia abordada é matematicamente mais complexa que a primeira. O grande diferencial entre elas é a maneira que elas tratam as associações entre os números quânticos que descrevem a direção de propagação da partícula e os vértices da rede. Na primeira, as direções equivalentes, em todos os vértices, estão associadas a um mesmo número quântico, diferentemente da segunda, em que as direções e os números quânticos associados a elas dependem diretamente dos vértices da rede.

O fato das duas abordagens tratarem o número quântico associado a direção de propagação da partícula traz diferenças na maneira que o sistema evolui no tempo. Este fato está exemplificado no capítulo 7, onde evoluímos as caminhadas nos modelos de moeda e de espalhamento para tais abordagens, considerando as matrizes moedas (e suas correspondentes de espalhamento), de Hadamard, de Grover, da transformada discreta de Fourier, a da transformada discreta de Hartley e algumas outras. Uma vez que mostramos que os modelos de espalhamento e de moeda são equivalentes, passamos apenas a tratar do modelo de espalhamento, que é fisicamente mais simples. Assim discutimos quais as condições que os coeficientes de transmissão e reflexão deveriam ter para que a partícula tendesse a descrever certos tipos de trajetórias tendenciosas e caminhadas simétricas.

Este trabalho é apenas o início de uma análise detalhada de semelhanças e diferenças das versões moeda e espalhamento de caminhadas quânticas em redes regulares. Obviamente que diferentes direções de estudo podem ser tomadas para os resultados obtidos aqui. A seguir listamos algumas possibilidades para futuras análises:

- o estudo das caminhadas quânticas em redes regulares com defeitos (buracos, ou vértices com mais ligações);
- o estudo das caminhadas quânticas em redes regulares com fronteiras;
- caminhadas quânticas com o sistema formado por mais de uma partícula para o caso de férmions e bósons;
- estudo da influência de um ambiente externo quando o sistema não estiver isolado;

- análise das propriedades de transporte de materiais, por exemplo no grafeno utilizando as caminhadas quânticas na rede hexagonal.

Referências Bibliográficas

- [1] Y. Aharonov, L. Davidovich e N. Zagury. Quantum Random Walks. *Physical Review A* **48**, 1687–1690 (1993). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.48.1687>.
- [2] D. A. Meyer. From Quantum Cellular Automata To Quantum Lattice Gases. *Journal of Statistical Physics* **85**, 551–574 (1996). URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF02199356>.
- [3] J. Watrous. Quantum Simulations of Classical Random Walks and Undirected Graph Connectivity. *Journal of Computer and System Sciences* **62**, 376 – 391 (2001). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002200000091732X>.
- [4] J. Kempe. Quantum Random Walks - an Introductory Overview. *Contemporary Physics* **44**, 307–327 (2003).
- [5] S. E. Venegas-Andraca. Quantum Walks: a Comprehensive Review. *Quantum Information Processing* **11**, 1015–1106 (2012). URL <http://dx.doi.org/10.1007/s11128-012-0432-5>.
- [6] N. Shenvi, J. Kempe e W. K. B. Quantum Random-Walk Search Algorithm. *Physical Review A* **67**, 052307 (2003). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.67.052307>.
- [7] A. M. Childs e J. Goldstone. Spatial Search by Quantum Walk. *Physical Review A* **70**, 022314 (2004). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.70.022314>.
- [8] A. Gábris, T. Kiss e I. Jex. Scattering Quantum Random-Walk Search With Errors. *Physical Review A* **76**, 062315 (2007). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.76.062315>.

- [9] I. Karafyllidis e D. C. Lagoudas. Microtubules as Mechanical Force Sensors. *Biosystems* **88**, 137–146 (2007). URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.biosystems.2006.05.003>.
- [10] M. Mohseni, P. Rebentrost, S. Lloyd e A. Aspuru-Guzik. Environment-Assisted Quantum Walks in Photosynthetic Energy Transfer. *J. Chem. Phys.* **129**, 174106 (2008). URL <http://dx.doi.org/10.1063/1.3002335>.
- [11] P. Rebentrost, M. Mohseni, I. Kassal, S. Lloyd e A. Aspuru-Guzik. Environment-Assisted Quantum Transport. *New Journal of Physics* **11**, 3, 033003 (2009). URL <http://stacks.iop.org/1367-2630/11/i=3/a=033003>.
- [12] C. M. Chandrashekar. Disordered-Quantum-Walk-Induced Localization of a Bose-Einstein Condensate. *Phys. Rev. A* **83**, 022320 (2011). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.83.022320>.
- [13] C. Ampadu. Brun-Type Formalism for Decoherence in Two-Dimensional Quantum Walks. *Communications in Theoretical Physics* **57**, 41 (2012). URL <http://stacks.iop.org/0253-6102/57/i=1/a=08>.
- [14] 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*, STOC' 01, páginas 37–49 (ACM, New York, NY, USA, 2001). URL <http://doi.acm.org/10.1145/380752.380757>.
- [15] 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*, STOC' 01, páginas 50–59 (ACM, New York, NY, USA, 2001). URL <http://doi.acm.org/10.1145/380752.380758>.
- [16] N. B. Lovett, S. Cooper, M. Everitt, M. Trevers e V. Kendon. Universal Quantum Computation Using the Discrete-Time Quantum Walk. *Phys. Rev. A* **81**, 042330 (2010). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.81.042330>.
- [17] A. Ambainis. Quantum Random Walks - New Method for Designing Quantum Algorithms. Em *SOFSEM 2008: Theory and Practice of Computer Science, 34th Conference on Current Trends in Theory and Practice of Computer Science*, volume 4910 de *Lecture Notes in Computer Science*, páginas 1–4 (Springer, 2008). URL http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-77566-9_1.

- [18] W. Dür, R. Raussendorf, V. M. Kendon e H.-J. Briegel. Quantum Walks in Optical Lattices. *Phys. Rev. A* **66**, 052319 (2002). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.66.052319>.
- [19] K. A. van Hoogdalem e M. Blaauboer. Implementation of the Quantum-Walk Step Operator in Lateral Quantum Dots. *Phys. Rev. B* **80**, 125309 (2009). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.125309>.
- [20] A. Schreiber, K. N. Cassemiro, V. . Potocek, A. Gábris, P. J. Mosley, E. Andersson, I. Jex e C. Silberhorn. Photons Walking the Line: A Quantum Walk with Adjustable Coin Operations. *Phys. Rev. Lett.* **104**, 050502 (2010). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.104.050502>.
- [21] C. A. Ryan, M. Laforest, J. C. Boileau e R. Laflamme. Experimental Implementation of a Discrete-Time Quantum Random Walk on an NMR Quantum-Information Processor. *Phys. Rev. A* **72**, 062317 (2005). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.72.062317>.
- [22] E. Farhi e S. Gutmann. Quantum Computation and Decision Trees. *Phys. Rev. A* **58**, 915–928 (1998). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.58.915>.
- [23] B. Tregenna, W. Flanagan, R. Maile e V. Kendon. Controlling Discrete Quantum Walks: Coins and Initial States. *New J. of Physics* **5**, 83 (2003). URL <http://stacks.iop.org/1367-2630/5/i=1/a=383>.
- [24] M. Hillery, J. Bergou e E. Feldman. Quantum Walks Based on an Interferometric Analogy. *Phys. Rev. A* **68**, 032314 (2003). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.68.032314>.
- [25] E. Feldman e M. Hillery. Scattering Theory and Discrete-Time Quantum Walks. *Physics Letters A* **324**, 277 – 281 (2004). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960104003275>.
- [26] E. Feldman e M. Hillery. Modifying quantum walks: a scattering theory approach. *Journal. of Physics A: Mathematical and Theoretical* **40**, 11343 (2007). URL <http://stacks.iop.org/1751-8121/40/i=37/a=011>.
- [27] F. M. Andrade e M. G. E. da Luz. Equivalence Between Discrete Quantum Walk Models in Arbitrary Topologies. *Phys. Rev. A* **80**, 052301 (2009). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.80.052301>.

- [28] D. West. *Introduction to graph theory* (Prentice Hall, 2001). URL <http://books.google.com.br/books?id=TuvuAAAAMAAJ>.
- [29] V. Voloshin. *Introduction to Graph Theory* (Nova Science Pub Incorporated, 2009). URL <http://books.google.com.br/books?id=Mmp7PAAACAAJ>.
- [30] R. Wilson. *Introduction to graph theory* (Longman, 1996). URL <http://books.google.com.br/books?id=tSolaQAAlAAJ>.
- [31] G. Lawler. *Introduction to Stochastic Processes, Second Edition*. Chapman and Hall/CRC Probability Series (CRC PressINC, 2006). URL <http://books.google.com.br/books?id=LATJdzBlajUC>.
- [32] F. Spitzer. *Principles of Random Walk*. Graduate Texts in Mathematics Series (Springer London, Limited, 2001). URL <http://books.google.com.br/books?id=HI09jpb5o6cC>.
- [33] T. Tomé e M. Oliveira. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade* (EDUSP, 2001). URL <http://books.google.com.br/books?id=0QIwCr9e0d8C>.
- [34] G. Lawler e V. Limic. *Random Walk: A Modern Introduction*. Cambridge Studies in Advanced Mathematics (Cambridge University Press, 2010). URL <http://books.google.com.br/books?id=UBQdwAZDeOEC>.
- [35] L. Lovász. Random walks on graphs: A survey. Em *Combinatorics, Paul Erdős is Eighty*, volume 2, página 353–398 (János Bolyai Mathematical Society, Budapest, 1996).
- [36] R. Burioni e D. Cassi. Random walks on graphs: ideas, techniques and results. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **38**, 8, R45 (2005). URL <http://stacks.iop.org/0305-4470/38/i=8/a=R01>.
- [37] R. Dorf. *The Electrical Engineering Handbook: Circuits, Signals, and Speech and Image Processing*. The Electrical Engineering Handbook Third Edition Series (CRC PressINC, 2006). URL <http://books.google.com.br/books?id=j29FAAAAYAAJ>.
- [38] N. Biggs, E. Lloyd e R. Wilson. *Graph Theory 1736-1936* (Clarendon Press, 1976). URL <http://books.google.com.br/books?id=XqYTkOsXmpoC>.
- [39] G. Berkolaiko. *Quantum Graphs and Their Applications: Proceedings of an AMS-IMS-SIAM Joint Summer Research Conference on Quantum Graphs and*

- Their Applications, June 19-23, 2005, Snowbird, Utah*. Contemporary mathematics - American Mathematical Society (Amer Mathematical Society, 2006). URL <http://books.google.com.br/books?id=xcEprh0YBqYC>.
- [40] G. Alexanderson. About the cover: Euler and Königsberg's Bridges: A historical view. *Bull. Amer. Math. Soc.* **43**, 567 – 573 (2006). URL <http://dx.doi.org/10.1090/S0273-0979-06-01130-X>.
- [41] B. Grunbaum e G. C. Shephard. Tilings by Regular Polygons. *Mathematics Magazine* **50**, 227–247 (1977). URL <http://www.jstor.org/stable/2689529>.
- [42] 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). URL <http://www.genetics.org/content/135/4/1209.short>.
- [43] W. J. C. Orr. Statistical treatment of polymer solutions at infinite dilution. *Trans. Faraday Soc.* **43**, 12–27 (1947). URL <http://dx.doi.org/10.1039/TF9474300012>.
- [44] J. E. Hearst. Statistical mechanics of chain molecules. *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Letters* **8**, 4, 305–306 (1970). URL <http://dx.doi.org/10.1002/pol.1970.110080419>.
- [45] R. Mantegna e H. Stanley. *Introduction to Econophysics: Correlations and Complexity in Finance*. Introduction to Econophysics: Correlations and Complexity in Finance (Cambridge University Press, 1999). URL <http://books.google.com.br/books?id=SzgXWCS7Nr8C>.
- [46] A. Einstein e R. Fürth. *Investigations on the Theory of the Brownian Movement*. Dover Books on Physics (Dover Publications, 1956). URL http://books.google.com.br/books?id=AOIVupH_hboC.
- [47] C. Gardiner. *Handbook of Stochastic Methods: For Physics, Chemistry, and the Natural Sciences*. Springer Series in Synergetics (Springer-Verlag, 2004). URL <http://books.google.com.br/books?id=wLm7QgAACAAJ>.
- [48] N. Ashcroft e N. Mermin. *Solid state physics*. Science: Physics (Saunders College, 1976). URL <http://books.google.com.br/books?id=FRZRAAAAMAAJ>.
- [49] F. M. de Andrade. *Métodos de Função de Green na Análise de Grafos Quânticos e Caminhos Aleatórios Quânticos* (2009). URL http://200.17.203.155/index.php?codigo_sophia=265563.

- [50] M. Nielsen e I. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition* (Cambridge University Press, 2010). URL <http://books.google.com.br/books?id=-s4DEy7o-a0C>.
- [51] E. Bach, S. Coppersmith, M. P. Goldschen, R. Joynt e J. Watrous. One-Dimensional Quantum Walks with Absorbing Boundaries. *Journal of Computer and System Sciences* **69**, 562 – 592 (2004). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022000004000376>.
- [52] 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**, 156 (2005). URL <http://stacks.iop.org/1367-2630/7/i=1/a=156>.
- [53] C. M. Chandrashekar, R. Srikanth e R. Laflamme. Optimizing the discrete time quantum walk using a SU(2) coin. *Phys. Rev. A* **77**, 032326 (2008). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.77.032326>.
- [54] K. Chadan, P. Sabatier e R. Newton. *Inverse Problems in Quantum Scattering Theory*. Theoretical and Mathematical Physics Series (Springer London, Limited, 2011). URL <http://books.google.com.br/books?id=te1rMQEACAAJ>.
- [55] M. G. E. da Luz, E. J. Heller e B. K. Cheng. Exact Form of Green Functions for Segmented Potentials. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **31**, 2975 (1998). URL <http://stacks.iop.org/0305-4470/31/i=13/a=007>.
- [56] A. G. M. Schmidt, B. K. Cheng e M. G. E. da Luz. Green functions for generalized point interactions in one dimension: A scattering approach. *Phys. Rev. A* **66**, 062712 (2002). doi: 10.1103/PhysRevA.66.062712. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.66.062712>.
- [57] A. G. M. Schmidt, B. K. Cheng e M. G. E. da Luz. Green function approach for general quantum graphs. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **36**, L545 (2003). URL <http://stacks.iop.org/0305-4470/36/i=42/a=L01>.
- [58] F. M. Zanetti, J. Kuhn, G. J. Delben, B. K. Cheng e M. G. E. da Luz. Classifying the general family of 1D point interactions: a scattering approach. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **39**, 2493 (2006). URL <http://stacks.iop.org/0305-4470/39/i=10/a=016>.
- [59] F. M. Andrade e M. G. E. da Luz. Superdiffusivity of Quantum Walks: A Feynman Sum-Over-Paths Description. *Phys. Rev. A* **86**, 042309 (2012). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.86.042309>.

-
- [60] T. D. Mackay, S. D. Bartlett, L. T. Stephenson e B. C. Sanders. Quantum walks in higher dimensions. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **35**, 2745 (2002). URL <http://stacks.iop.org/0305-4470/35/i=12/a=304>.
- [61] O. K. Ersoy. A Comparative Review of Real and Complex Fourier-Related Transforms. *Proceedings of the IEEE* **82**, 429 – 447 (1994). doi: [10.1109/5.272147](https://doi.org/10.1109/5.272147).
- [62] 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](https://doi.org/10.1109/78.969521).