

Laboratório Nacional de Computação Científica  
Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional

**Simulação de Caminhos Quânticos em redes  
bidimensionais**

Por

**Amanda Castro Oliveira**

PETRÓPOLIS, RJ - BRASIL

JUNHO DE 2007

**SIMULAÇÃO DE CAMINHOS QUÂNTICOS EM REDES  
BIDIMENSIONAIS**

**Amanda Castro Oliveira**

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO LABORATÓRIO NACIONAL  
DE COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA COMO PARTE DOS REQUISITOS NECES-  
SÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM MODELAGEM  
COMPUTACIONAL

Aprovada por:

---

Prof. Renato Portugal, D.Sc  
(Presidente)

---

Prof. Raul Jose Donangelo, Ph.D

---

Prof. Marcelo Dutra Fragoso, Ph.D

---

Prof. Laurent Emmanuel Dardenne, D.Sc.

---

Prof. Gonzalo Abal, Ph.D

---

Prof. Carlile Campos Lavor, D.Sc.

PETRÓPOLIS, RJ - BRASIL  
JUNHO DE 2007

Oliveira, Amanda Castro

048s        Simulação de caminhos quânticos em redes bidimensionais / Amanda Castro Oliveira. Petrópolis, RJ. : Laboratório Nacional de Computação Científica, 2007.

XX, 133 p. : il.; 29 cm

Orientadore(s): Renato Portugal e Raul Jose Donangelo

Tese (D.Sc.) – Laboratório Nacional de Computação Científica, 2007.

1. Computação Quântica. 2. Algoritmos quânticos. 3. Simulação. I. Portugal, Renato. II. LNCC/MCT. III. Título.

CDD 004.1

**e.pí.gra.fe**

Nunca desista dos seus sonhos.

## **Dedicatória**

Aos meus amados pais José e Elizabeth.

Ao meu querido Marcelo.

# Agradecimentos

Ao prof. Renato Portugal pela incansável paciência, carinho, respeito, confiança e pelo grande empenho e valiosa orientação para que este trabalho fosse realizado. Ao prof. Raul Donangelo pela acolhida, respeito, confiança e pelas importantes orientações fundamentais para o trabalho. Ao prof. Marcelo Fragoso pelas excelentes discussões sobre processos estocásticos e pelo cordial acompanhamento. A todos os professores do LNCC que muito contribuíram para a minha formação e que tornaram possível a realização desse trabalho. Ao meu querido amigo Prof. Jean Faber por ter me apresentado ao LNCC e por toda nossa caminhada juntos em busca da realização de nossos ideais. À CPG-LNCC pelo apoio técnico e burocrático em especial às queridas Ana Paula e Ana Néri por todo carinho e atenção. Aos colegas do curso que tanto me ajudaram a destrinchar as listas, os programas e tantas outras dificuldades sempre com muito carinho e respeito. Ao LNCC pela confiança em meu trabalho e por toda a estrutura oferecida. Às queridas Cris, Ana Riodoce, Ana Wyse e Santina pela grande amizade cultivada em todos esses anos. Ao Franklin pelo companheirismo e ajuda crucial nessa fase final do trabalho. Aos meus pais pela confiança incondicional e por sempre fazerem o impossível para que nós pudéssemos estudar. Aos meus irmãos Fábio e Flávia pelo grande carinho e o apoio em momentos difíceis. A minha avó pelo apoio. A minha amada sobrinha Maria Antônia que chegou no meio do caminho e coloriu nossas vidas. Ao meu querido Marcelo pela lealdade, amor e respeito. Por sonhar esse sonho junto comigo além de me agüentar na alegria e na tristeza. A Deus por tudo. A FAPERJ pelo apoio financeiro.

Resumo da Tese apresentada ao LNCC/MCT como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

## SIMULAÇÃO DE CAMINHOS QUÂNTICOS EM REDES BIDIMENSIONAIS

Amanda Castro Oliveira

Junho , 2007

**Orientador:** Renato Portugal, D.Sc

**Co-orientador:** Raul Jose Donangelo, Ph.D

Caminhos aleatórios clássicos são essenciais para a Física, a Matemática, a Ciência da Computação e muitas outras áreas. Há uma grande expectativa que a sua versão quântica seja ainda mais poderosa, uma vez que o caminhante quântico se espalha quadraticamente mais rápido que o seu análogo clássico. Neste trabalho, estudamos o comportamento do caminhante quântico em uma e duas dimensões, além de generalizarmos o formalismo de ligações interrompidas para duas ou mais dimensões. Em uma dimensão, analisamos o comportamento do caminhante quântico, que além das duas possibilidades de deslocamento usuais, direita e esquerda, também permanece na posição atual. Em duas dimensões, apresentamos um estudo detalhado do comportamento do caminhante no plano e quando há descoerência gerada pela quebra aleatória das ligações para as posições vizinhas com uma certa probabilidade para cada uma das direções. Quando essa probabilidade de quebra é diferente nas duas direções encontramos um resultado não trivial que representa uma transição do caso 2-D descoerente para o caso 1-D coerente. Também utilizamos o formalismo de ligações interrompidas para modelar o comportamento de um caminhante quântico que passa por uma e por duas fendas. Realizamos simulações com as principais moedas e observamos conclusivamente os padrões de interferência e difração.

Abstract of Thesis presented to LNCC/MCT as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Sciences (D.Sc.)

## SIMULATION OF QUANTUM WALKS IN TWO-DIMENSIONAL LATTICES

Amanda Castro Oliveira

June, 2007

**Advisor:** Renato Portugal, D.Sc

**Co-advisor:** Raul Jose Donangelo, Ph.D

Classic random walks are essential to physics, to mathematics, to computer science and to many others areas. It has a great expectation that its quantum version will be still more powerful. Until now the existing results are hopeful since that the quantum walker, due to quantum coherence effects, spreads quadratically faster than the classical one. In this work we study the quantum walker's behavior in one and two dimensions besides generalizing the broken-link formalism for two or more dimensions. In one dimension we analyze the behavior of the quantum walker that beyond the two usual possibilities of displacement, right and left, also remains in the current position. In two dimensional case we study the behavior of the quantum walker for many different lattices. We present a detailed study of the behavior of the quantum walker in the plan when it has decoherence generated by the random breaking of the links to the neighboring positions with a certain constant probability for each one of the directions, when this probability of breaking the links is different in the two directions we find a nontrivial result that represents a transition from a decoherent 2-D walk to a coherent 1-D walk. Also we use the broken-link's formalism to model the behavior of a quantum walker passing through one and two slits. We performed simulations using the main types of coins and we observed conclusively the interference and diffraction patterns.

# Sumário

<b>1</b>	Introdução	1
<b>2</b>	Caminhos Quânticos Unidimensionais	11
2.1	O Caminho Aleatório Quântico . . . . .	11
2.2	O Modelo Discreto . . . . .	15
2.2.1	O caminho de Hadamard . . . . .	20
2.3	O Caminho Quântico com 3 Possibilidades . . . . .	29
2.4	Descoerência em Caminhos Quânticos . . . . .	40
2.4.1	Ligações Interrompidas . . . . .	42
<b>3</b>	Caminhos Quânticos Bidimensionais	56
3.1	Caminho Quântico 2-D . . . . .	56
3.2	Ligações Interrompidas . . . . .	65
3.2.1	Caminhos Quânticos em Caixas . . . . .	68
3.2.2	Descoerência Unitária . . . . .	80
3.3	Caminhos Quânticos e Fendas . . . . .	97
3.3.1	Caminhos Quânticos passando por uma Fenda . . . . .	97
3.3.2	Caminhos Quânticos passando por Fenda Dupla . . . . .	105
<b>4</b>	Conclusões e Perspectivas	114

Referências Bibliográficas

119

Apêndice

A Caminhos Aleatórios Clássicos

128

# Lista de Figuras

## Figura

- 2.1 Distribuição de probabilidade do caminho quântico de Hadamard após 100 passos e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle$ . . . . . 23
- 2.2 Distribuição de probabilidade do caminho quântico de Hadamard após 100 passos e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle$ . . . . . 25
- 2.3 Distribuição de probabilidade do caminho quântico de Hadamard após 100 passos e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i|1\rangle) \otimes |0\rangle$ . . . . . 25
- 2.4 Distribuição de probabilidade do caminho quântico de Hadamard após 100 passos e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = (\sqrt{0.85}|0\rangle - \sqrt{0.15}|1\rangle) \otimes |0\rangle$ . 26
- 2.5 Desvio padrão em função do número de passos, escala log-log, para o caminho quântico 1-D usando a moeda de Hadamard com estado inicial simétrico Figura 2.3, assimétrico Figura 2.1 e o desvio do caminho clássico. . . . . 28
- 2.6 Distribuição de probabilidade do caso 1-D moeda de Hadamard e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i|1\rangle) \otimes |0\rangle$ , versus o caso clássico após 100 passos. . . . . 28
- 2.7 Distribuição de probabilidade do caso 1-D com 3 estados após 100 passos, moeda de Fourier e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1\rangle + i|1\rangle) \otimes |0\rangle$ . 30
- 2.8 Distribuição de probabilidade do caso 1-D com 3 estados após 100 passos, moeda de Grover e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1\rangle + i|1\rangle) \otimes |0\rangle$ . 32

2.9	Distribuição de probabilidade do caso 1-D com 3 estados após 100 passos, moeda de Fourier e estado inicial $ \psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}( -1\rangle +  0\rangle +  1\rangle) \otimes  0\rangle$ . . . . .	32
2.10	Distribuição de probabilidade do caso 1-D com 3 estados após 100 passos, moeda de Grover e estado inicial $ \psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}( -1\rangle +  0\rangle +  1\rangle) \otimes  0\rangle$ . . . . .	34
2.11	Distribuição de probabilidade do caso 1-D com 3 estados após 1000 passos, moeda de Fourier e estado inicial $ \psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}( -1\rangle + i 1\rangle) \otimes  0\rangle$ . . . . .	34
2.12	Distribuição de probabilidade do caso 1-D com 3 estados após 1000 passos, moeda de Grover e estado inicial $ \psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}( -1\rangle + i 1\rangle) \otimes  0\rangle$ . . . . .	35
2.13	Distribuição de probabilidade do caso 1-D com 3 estados após 1000 passos, moeda de Fourier e estado inicial $ \psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}( -1\rangle +  0\rangle +  1\rangle) \otimes  0\rangle$ . . . . .	35
2.14	Distribuição de probabilidade do caso 1-D com 3 estados após 1000 passos, moeda de Grover e estado inicial $ \psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}( -1\rangle +  0\rangle +  1\rangle) \otimes  0\rangle$ . . . . .	36
2.15	Distribuição de probabilidade do caso 1-D após 1000 passos, moeda de Hadamard e estado inicial $ \psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}( -1\rangle + i 1\rangle) \otimes  0\rangle$ . . . . .	36
2.16	Desvio padrão em função do número de passos, escala log-log, para o caminho quântico 1-D com 3 possibilidades usando as moedas de Fourier e Grover com os estados iniciais, 1 = $ \psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}( -1\rangle + i 1\rangle) \otimes  0\rangle$ e 2 = $ \psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}( -1\rangle +  0\rangle +  1\rangle) \otimes  0\rangle$ , versus o desvio do caminho clássico. . . . .	37
2.17	Todos os casos possíveis de ligações interrompidas para uma dada posição $x$ e os valores correspondentes da ligação $\mathcal{L}(j, x)$ . . . . .	44
2.18	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 1-D após 50 passos, moeda de Hadamard e estado inicial[2.33] no caso em que $p = 0.01$ linha tracejada e para $p = 0$ . . . . .	47

2.19	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 1-D após 100 passos, moeda de Hadamard e estado inicial[2.33] no caso em que $p = 0.01$ linha tracejada e para $p = 0$ . . . . .	49
2.20	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 1-D após 1000 passos, moeda de Hadamard e estado inicial[2.33] no caso em que $p = 0.01$ , linha tracejada, e para $p = 0$ . . . . .	49
2.21	Evolução temporal da variância $\sigma^2$ para $p = 0.01$ , linha tracejada, versus o caso para $p = 0$ . Na figura inferior a apresentamos a evolução em escala log-log. . . . .	51
2.22	Evolução temporal da variância $\sigma^2$ para o caminho de Hadamard simétrico com ligações interrompidas com as seguintes probabilidades $p = 0.0$ , $p = 0.01$ , $p = 0.03$ , $p = 0.10$ , $p = 0.20$ , $p = 0.40$ e o caso clássico em escala log-log. . . . .	54
2.23	Coeficiente de difusão em função de $\frac{1-p}{p}$ , figura à esquerda, e em função de $p$ . Os triângulos são os dados da simulação e a linha corresponde a curva interpolada da Equação (2.51). Figura extraída de Romanelli et al. (2005). . . . .	54
3.1	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Hadamard após 100 iterações com estado inicial (3.14). . . . .	60
3.2	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Fourier após 100 iterações com estado inicial (3.16). . . . .	61
3.3	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Fourier após 100 iterações com estado inicial (3.14). . . . .	61
3.4	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Fourier após 100 iterações com estado inicial (3.18). . . . .	63
3.5	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Grover após 100 iterações com estado inicial(3.14) . . . . .	63

3.6	Desvio padrão em função do número de passos, escala log-log, para o caminho quântico 2-D usando as três moedas, Hadamard, Fourier e Grover versus o caminho clássico usando várias condições iniciais.	64
3.7	As quatro ligações para a posição $ x, y\rangle$ . . . . .	68
3.8	Evolução temporal do desvio padrão para o caminho de Hadamard para as redes quadradas com $M = 10$ , $M = 20$ , $M = 40$ , e $M = 80$ e estado inicial (3.14). . . . .	70
3.9	Evolução temporal do desvio padrão para o caminho de Fourier para as redes quadradas com $M = 10$ , $M = 20$ , $M = 40$ , e $M = 80$ e estado inicial (3.16). . . . .	70
3.10	Evolução temporal do desvio padrão para o caminho de Grover para as redes quadradas com $M = 10$ , $M = 20$ , $M = 40$ , e $M = 80$ e estado inicial (3.18). . . . .	71
3.11	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Grover após 100 iterações com estado inicial (3.18) e bordas quadradas em $M = 80$ . . . . .	71
3.12	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Grover após 140 iterações com estado inicial (3.18) e bordas quadradas em $M = 80$ . . . . .	72
3.13	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Grover após 180 iterações com estado inicial (3.18) e bordas quadradas em $M = 80$ . . . . .	72
3.14	Evolução temporal do desvio padrão para o caminho de Hadamard para as redes losangulares com $M = 10$ , $M = 20$ , $M = 40$ , e $M = 80$ e estado inicial (3.14). . . . .	74
3.15	Evolução temporal do desvio padrão para o caminho de Fourier para as redes losangulares com $M = 10$ , $M = 20$ , $M = 40$ , e $M = 80$ e estado inicial (3.16). . . . .	74

3.16	Evolução temporal do desvio padrão para o caminho de Grover para as redes losangulares com $M = 10$ , $M = 20$ , $M = 40$ , e $M = 80$ e estado inicial (3.18). . . . .	75
3.17	$D_{mt} \times t$ para o caminho quântico com moeda de Grover em uma rede quadrada com $M = 10$ , $M = 20$ , $M = 40$ , e $M = 80$ . . . . .	77
3.18	$D_{mt} \times t$ para o caminho quântico com moeda de Hadamard em uma rede quadrada com $M = 10$ , $M = 20$ e $M = 40$ . . . . .	77
3.19	$D_{mt} \times t$ para o caminho quântico com moeda de Fourier em uma rede quadrada com $M = 10$ , $M = 20$ e $M = 40$ . . . . .	79
3.20	$D_{mt} \times t$ para o caminho quântico com moeda de Grover em uma rede quadrada com o primeiro quadrante inacessível com $M = 10$ , $M = 20$ , $M = 40$ , e $M = 80$ . . . . .	79
3.21	Mixing time $\tau_{mix}$ em função de $M$ para as moedas de Hadamard, Fourier e Grover. . . . .	81
3.22	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Grover após 100 iterações com estado inicial (3.18) com probabilidade de quebra $p = 0.01$ . o comportamento clássico começa a prevalecer sobre o comportamento quântico para $T \approx 1/p$ . . . . .	82
3.23	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Hadamard após 100 iterações com estado inicial (3.14) com probabilidade de quebra $p = 0.01$ . O comportamento clássico começa a prevalecer sobre o comportamento quântico para $T \approx 1/p$ . . . . .	83
3.24	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Fourier após 100 iterações com estado inicial (3.16) com probabilidade de quebra $p = 0.01$ . O comportamento clássico começa a prevalecer sobre o comportamento quântico para $T \approx 1/p$ . . . . .	84

3.25	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Grover após 100 iterações com estado inicial (3.18) com probabilidade de quebra $p = 0.1$ . O comportamento clássico já se manifestou pois $T \gg 1/p$ . . . . .	85
3.26	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Hadamard após 100 iterações com estado inicial (3.14) com probabilidade de quebra $p = 0.1$ . O comportamento clássico já se manifestou pois $T \gg 1/p$ . . . . .	86
3.27	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Fourier após 100 iterações com estado inicial (3.16) com probabilidade de quebra $p = 0.1$ . o comportamento clássico já se manifestou pois $T \gg 1/p$ . . . . .	86
3.28	Evolução temporal do desvio padrão para o caminho de Grover com ligações interrompidas com estado inicial (3.18), nos casos em que $p = 0.01$ , 0.1, 0.25 e 0.5 . Nas linhas contínuas temos o caso quântico e o caso clássico sem ligações interrompidas. . . . .	88
3.29	Coefficiente de difusão $D$ para caminhantes quânticos em uma rede quadrada com ligações rompidas com probabilidade $p$ para as moedas de Hadamard, Fourier e Grover. (a) $D$ em função de $p$ . (b) $D$ em função de $(1 - p)/p$ . . . . .	89
3.30	Coefficiente de difusão em função de $p_1$ para $p_0 = 0$ (sem ligações interrompidas nas linhas paralelas da diagonal principal). O valor mínimo do coeficiente de difusão (máxima descoerência), é alcançado para todos os casos para um valor de $p_1 < 1$ . . . . .	90
3.31	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Grover após 100 iterações com estado inicial (3.18) com probabilidade de quebra assimétrica $p_0 = 0$ e $p_1 = 0.99$ . O alto valor de $p_1$ força o caminhante a ficar muito próximo da diagonal principal .	90

3.32	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Hadamard após 100 iterações com estado inicial (3.14) com probabilidade de quebra assimétrica $p_0 = 0$ e $p_1 = 0.99$ . O alto valor de $p_1$ força o caminhante a ficar muito próximo da diagonal principal. Há também uma forte localização em torno da origem. . . . .	91
3.33	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Fourier após 100 iterações com estado inicial (3.16) com probabilidade de quebra assimétrica $p_0 = 0$ e $p_1 = 0.99$ . O alto valor de $p_1$ força o caminhante a ficar muito próximo da diagonal principal. Há também uma forte localização em torno da origem. . . . .	91
3.34	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Grover após 100 iterações com estado inicial (3.18) com probabilidade de quebra assimétrica $p_0 = 0$ e $p_1 = 0.35$ . O caminhante parcialmente se espalha mais ao longo da diagonal secundária, perdendo sua coerência mais rápido que o caso anterior. . . . .	93
3.35	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Hadamard após 100 iterações com estado inicial (3.14) com probabilidade de quebra assimétrica $p_0 = 0$ e $p_1 = 0.35$ . O caminhante parcialmente se espalha mais ao longo da diagonal secundária, perdendo sua coerência mais rápido que o caso anterior. . . . .	94
3.36	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Fourier após 100 iterações com estado inicial (3.16) com probabilidade de quebra assimétrica $p_0 = 0$ e $p_1 = 0.35$ . O caminhante parcialmente se espalha mais ao longo da diagonal secundária, perdendo sua coerência mais rápido que o caso anterior. . . . .	94
3.37	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 1-D com moeda de Grover após 100 iterações com estado inicial 3.18 usando o operador de translação (3.33). . . . .	95

3.38	Evolução temporal do desvio padrão para o caminho de Grover com ligações interrompidas nos casos em que $p_0 = 0$ e $p_1 = 0.35$ , $p_0 = 0$ e $p_1 = 0.99$ versus o desvio do caminho quântico 1-D com moeda de Grover após 100 iterações com estado inicial 3.18. . . . .	95
3.39	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 1-D com moeda de Hadamard após 100 iterações com estado inicial 3.14 e o operador de translação (3.33). . . . .	96
3.40	Distribuição de probabilidade do caminho quântico 1-D com moeda de Fourier após 100 iterações com estado inicial 3.16 e o operador de translação (3.33). . . . .	96
3.41	Esquema geral da simulação para uma partícula em uma rede quadrada com uma fenda. . . . .	98
3.42	Esquema de difração de fenda única com intensidade da onda difratada. . . . .	100
3.43	Esquema de interferência e difração numa fenda dupla. . . . .	101
3.44	Esquema de ocupação da rede bidimensional para o lugar da fenda. . . . .	102
3.45	Distribuição de probabilidade para o caminhante de Hadamard após passar por uma fenda de largura 5. . . . .	102
3.46	Acumulado da distribuição de probabilidade com a moeda de Hadamard. . . . .	104
3.47	A coordenada do primeiro mínimo ( $y'_{min}$ ) do caminho de Hadamard em função da largura da fenda. . . . .	104
3.48	Distribuição de probabilidade para a moeda de Hadamard após 100 passos após passar por duas fendas de largura 1. . . . .	106
3.49	Acumulado da distribuição de probabilidade com a moeda de Hadamard após 100 passos após passar por duas fendas de largura 1. . . . .	108
3.50	A coordenada do primeiro mínimo ( $y'_{min}$ ) do caminho de Hadamard em função da distância entre os centros das duas fendas. . . . .	108

3.51	Distribuição de probabilidade para a moeda de Grover após 120 passos após passar por duas fendas de largura 1. . . . .	109
3.52	Distribuição de probabilidade para a moeda de Fourier após 120 passos após passar por duas fendas de largura 1. . . . .	109
3.53	Acumulado da distribuição de probabilidade com a moeda de Grover após 120 passos após passar por duas fendas de largura 1. . . . .	110
3.54	Acumulado da distribuição de probabilidade com a moeda de Fourier após 120 passos após passar por duas fendas de largura 1. . . . .	112
A.1	Distribuição de probabilidade binomial do caminho aleatório clássico com $N = 20$ passos para $p = q = \frac{1}{2}$ de uma partícula partindo da origem. . . . .	133
A.2	Distribuição de probabilidade Gaussiana do caminho aleatório clássico após 1000 passos para $p = q = \frac{1}{2}$ de uma partícula partindo da origem. . . . .	133

# Lista de Tabelas

## Tabela

2.1	Esquema comparativo do caminho aleatório clássico versus sua versão quântica. . . . .	27
3.1	Esquema da translação do caminho quântico 2-D para uma partícula na posição $ x, y\rangle$ e com moeda $ j, k\rangle$ . . . . .	57
3.2	Valores para a taxa de espalhamento $a$ para as moedas de Hadamard, Fourier e Grover para condições iniciais distintas. . . . .	65
3.3	Valores de $p$ para os quais $D = 1$ para as moedas de Hadamard, Fourier e Grover com condições iniciais distintas. . . . .	87

# Capítulo 1

## Introdução

Desde muito tempo o homem busca entender, controlar, imitar e usufruir dos fenômenos da natureza. Com o nascimento da ciência moderna coube aos cientistas o trabalho de elaborar teorias e experimentos para a explicação de tais fenômenos. Com o passar dos séculos mais e mais fenômenos puderam ser compreendidos com um alto grau de precisão, permitindo-nos um maior domínio sobre estes, bem como a construção de diversas máquinas, dispositivos e aparelhos transformando, fundamentalmente, a vida na Terra. Nos dias de hoje a ciência moderna tem exercido uma profunda influência sobre quase todos os aspectos da sociedade humana. É impossível negar os inúmeros avanços que a ciência trouxe para o cotidiano do cidadão comum. Internet, ressonância magnética nuclear, antibióticos e muitos outros são exemplos de grandes modificações na vida da sociedade advindas com o desenvolvimento da ciência. Ao estudar o comportamento do caminhante<sup>1</sup> quântico, de certa forma, também procuramos entender, controlar e reproduzir suas propriedades, confiantes de que essa teoria pode ser aplicada em prol do progresso da ciência.

Da formalização da idéia intuitiva de dar vários passos sucessivos sendo cada um deles para uma direção escolhida de forma aleatória surgiu o modelo do caminhante aleatório clássico. Este modelo é usado para se tratar uma infinidade de sistemas muito mais complexos. Em 1827 o botânico inglês, Robert Brown, obser-

---

<sup>1</sup> Durante o texto, ora usarei o termo caminho ora usarei caminhante embora entenda que é a partícula que “percorre” o tal caminho. Na literatura também encontramos as duas formas.

vou que pequenas partículas em um fluido apresentavam um movimento do tipo errático que a cada instante estavam em uma determinada posição Uhlenbeck e Ornstein (1945); Uhlenbeck e Wang (1930). Talvez seja essa a primeira das muitas aplicações dos caminhos aleatórios clássicos para se descrever de forma simplificada muitos fenômenos físicos. Eles são usados para modelar o movimento aleatório de moléculas em líquidos e gases, onde há o comportamento difusivo. São eles o modelo mais simples para se estudar polímeros. São ainda aplicados como modelos de economia na chamada econofísica Stanley et al. (1996), em genética populacional e em neurociência são usados para se modelar alguns processos cerebrais Cressoni et al. (2007). São extensivamente aplicados em muitos campos da Matemática, como para calcular soluções das equações de Laplace além de várias construções em Análise e Combinatória. Em Psicologia modelam e explicam com precisão a relação entre o tempo necessário para se tomar uma decisão e a probabilidade de que certa decisão esteja correta, além de muitas outras aplicações nas mais diversas áreas.

Em Ciência da Computação os caminhos aleatórios são uma ferramenta fundamental devido ao seu uso no desenvolvimento de algoritmos estocásticos. Tanto em ciência da computação teórica quanto aplicada, os algoritmos estocásticos podem superar a performance de qualquer algoritmo determinístico construído para resolver certo tipo de problema Motwani e Raghavan (1995). O exemplo mais notável desse feito é que o melhor algoritmo para a solução do problema de satisfiabilidade 3-SAT, um problema fundamental em Ciência da Computação, usa técnicas baseadas em caminhos aleatórios Hofmeister et al. (2002). Eles também são usados quando se deseja amostrar sobre um conjunto de dados em um espaço de estados que é desconhecido ou muito grande. Como, por exemplo, para se pegar de forma aleatória uma página da internet em busca de negócios ilegais. Em ciência da computação este tipo de amostragem é conhecida como sendo o método Monte Carlo de cadeias de Markov, onde são feitas várias amostragens sobre um espaço de estados complicado a fim de se obter uma estimativa probabilística do tamanho

deste espaço. Como exemplo temos o algoritmo para a estimativa do volume de um corpo convexo Dyer et al. (1991) e ainda a aproximação do permanente de uma matriz grande de zeros e uns, que foi o primeiro grande problema resolvido por esse tipo de abordagem Jerrum et al. (2001).

Por todos esses exemplos vemos que os caminhos aleatórios clássicos são elementos fundamentais da ciência da computação. Como se já não bastassem tais aplicações como elementos motivadores, o recente desenvolvimento da teoria da computação e da informação quântica revelou que a exploração de sistemas inerentemente mecânico - quânticos com propósitos computacionais levam inúmeras vantagens sobre os sistemas puramente clássicos. Fatos esses que, nos últimos anos, tem aumentado o interesse pelo estudo desses tipos de dispositivos computacionais baseados na mecânica quântica Nielsen e Chuang (2000). Motivados pelos excelentes resultados em criptografia quântica Hughes et al. (1995); Gisin et al. (2002) e também pelo trabalho de Peter Shor, que em 1994, desenvolveu um algoritmo quântico eficiente para a fatoração de números inteiros grandes Shor (1997). Esta nova área de pesquisa vem descobrindo muitos novos efeitos que são bem diferentes de seus análogos clássicos tanto do ponto de vista físico quanto dos aspectos de ciência da computação e também da perspectiva da teoria de comunicação. Durante os últimos anos essas áreas têm ganhado uma melhor compreensão dos conceitos e noções umas das outras. A idéia de que a informação não pode ser separada do aparato físico que a carrega já se fixou entre elas e tem levado a muitas outras descobertas fascinantes. Por tudo isso, é razoável esperar que o estudo dos caminhantes quânticos seja um campo de pesquisa extremamente multidisciplinar e altamente promissor.

Em 1993, Y.Aharonov, L. Davidovich e N. Zagury usam pela primeira vez o termo caminho aleatório quântico. Este artigo já apresenta algumas novidades do comportamento quântico Aharonov et al. (1993). O modelo do caminhante quântico é o análogo quântico do caminho aleatório clássico e seu desenvolvimento foi motivado pela necessidade de se encontrar algoritmos quânticos que sejam mais

rápidos e ou eficientes que os algoritmos clássicos para o mesmo tipo de problema. A partir desse trabalho precursor, dois modelos de caminhos quânticos foram sugeridos: o modelo contínuo no tempo devido a Farhi e Gutmann (1998); e o modelo discreto no tempo, que inicialmente foi desenvolvido como sendo um autômato celular quântico por Meyer (1996a,c,b) e que, em 2001, ganhou um aspecto mais formal, passando a ser visto também como uma possível ferramenta computacional devido a Aharonov et al. (2001).

Há a esperança de que os caminhos quânticos se tornem os principais elementos no desenvolvimento dos algoritmos quânticos. Até o momento já se conhecem um bom número de vantagens proporcionadas pelo seu uso. Já foi provado por Ambainis et al. (2001) que o caminhante quântico na reta se espalha quadraticamente mais rápido que seu correspondente clássico. Também foi provado por Kempe (2003) que o tempo<sup>2</sup> que um caminhante quântico leva para percorrer o hipercubo de  $n$  dimensões é polinomial no número de passos enquanto que o análogo clássico leva um tempo exponencial, o que resultaria num ganho computacional de forma exponencial.

Entretanto, antes da tentativa de se criar algoritmos quânticos a partir do modelo do caminhante quântico, há que se primeiramente compreender suas propriedades e a sua dinâmica em estruturas mais simples. Já foram propostos inúmeros análogos quânticos para o caminhante aleatório clássico em redes discretas e também em grafos. Há modelos a tempo discreto com e sem a moeda quântica Aharonov et al. (2001); Watrous (2001) além do modelo contínuo no tempo Farhi e Gutmann (1998). Recentemente foi estabelecida por Strauch (2006) a relação entre estes dois tipos de modelos, a tempo discreto e a tempo contínuo. Para os casos em que eles são aplicados aos mesmos tipos de grafos foi mostrado por Moore e Russel (2001) que eles produzem o mesmo padrão de comportamento. Já se conhece a solução analítica aproximada válida para tempo longos para a evolução temporal do caminhante quântico na reta infinita, no ciclo e no hipercubo Ambainis et al.

---

<sup>2</sup> *Hitting time*

(2001); Aharonov et al. (2001); Moore e Russel (2001) e também alguns limites para o caso de grafos gerais Ambainis et al. (2001). Para o caso de duas ou mais dimensões há resultados numéricos Mackay et al. (2002); Tregenna et al. (2003), um resultado analítico para a moeda de Grover Inui et al. (2003) e há também a nossa contribuição para o caso de redes infinitas Oliveira et al. (2006) e redes finitas Oliveira et al..

Recentemente foram apresentados várias propostas de algoritmos usando o modelo de caminhantes quânticos como base Ambainis (2004). Childs et al. (2003); Childs e Goldstone (2004) provaram que um caminhante quântico contínuo no tempo pode percorrer um certo tipo de grafo exponencialmente mais rápido que qualquer algoritmo clássico. Enquanto Farhi et al. (2007) apresentaram um algoritmo baseado em um caminho quântico contínuo no tempo que para se resolver o problema da árvore binária *NAND*. Já Shenvi et al. (2003) provaram que um caminhante quântico discreto no tempo, com uma moeda quântica, pode ser tão eficiente quanto o algoritmo quântico de busca de Grover para se encontrar um certo item marcado em um banco de dados desordenado. Em Ambainis (2003a) temos uma proposta de algoritmo baseado em caminhantes quânticos para se determinar quantos elementos são distintos em um conjunto de  $N$  elementos desconhecidos. Para que se tenha implementado um algoritmo quântico baseado no modelo do caminhante quântico, em um computador quântico, não há a necessidade da implementação física do caminho quântico em si. Tanto o modelo contínuo quanto o discreto no tempo, podem ser implementados em um computador quântico através da utilização das portas quânticas apropriadas. Estes são resultados extremamente promissores, contudo ainda estamos muito distantes da diversidade de problemas resolvidos eficientemente pelo modelo clássico. Além de todos esses feitos o caminhante quântico é muito interessante por si só como um sistema físico cujas propriedades dinâmicas são extremamente ricas e interessantes. Como, por exemplo, o fato de que devido aos efeitos de coerência quântica, essa partícula se espalhar quadraticamente mais rápido que o seu análogo clássico.

Para terem utilidade, computadores quânticos devem operar sobre vários qbits, em geral, gerando estados emaranhados (entrelaçados) de muitas partículas. Indubitavelmente as correlações quânticas são uma das características que distinguem a Mecânica Quântica de uma descrição clássica. Entende-se por emaranhamento (entrelaçamento) o seguinte fato: se duas (ou mais) partículas estão emaranhadas (entrelaçadas), o estado de cada uma delas depende do estado da outra, ainda que elas estejam separadas espacialmente e sem qualquer tipo de interação. Qualquer medida de grandezas físicas associadas a cada uma dessas partículas estarão sempre correlacionadas entre si. De uma forma tal que as explicações da Física clássica, baseadas no realismo local, não são capazes de compreender. No caso do caminhante quântico na reta observamos que surge o emaranhamento entre os estados moeda e posição da partícula durante a evolução temporal do sistema .

O mundo microscópico da mecânica quântica parece-nos extremamente não intuitivo. Realmente em nosso dia a dia dificilmente veremos o mesmo gato vivo e morto de forma alternada. O mundo clássico que emerge tendo como pano de fundo o universo quântico microscópico é um tópico de intensos e calorosos debates. Desde a polêmica frase de Einstein “God does not play dice” até os dias atuais com Zurek (1991) em um dos trabalhos mais citados. Em geral assume-se que é a interação com um ambiente bem maior que induz a descoerência, que deixa o mundo clássico. O problema da como manter a coerência dos sistemas físicos é tido como sendo fundamental pois é devido à uma interação inevitável entre o sistema de estudo e o ambiente que os deixa emaranhados. Esta interação pode ser descrita por uma grande variedade de modelos que levam o sistema a um estado misto Nielsen e Chuang (2000).

Para que seja possível a realização de uma tarefa quântica é necessário controlar a evolução quântica coerente de conjuntos de vários qbits durante um tempo suficientemente grande para que tal tarefa seja finalizada com êxito. Tal fato não existe em um sistema isolado, sendo assim vemos que a descoerência deve ser incluída na descrição de um sistema quântico. A interação do sistema quântico com

o ambiente gera descoerência : tudo se passa como se o ambiente estivesse fazendo medidas sobre o sistema de interesse, levando à perda de indistinguibilidade e, portanto, das coerências quânticas. O processo de descoerência pelo qual um sistema quântico passa foi estudado no final do século passado por Zeh, Zurek, Paz e outros e atualmente está bem compreendido Zurek (2003). Em particular, ele nos provê uma elegante explicação do surgimento do mundo clássico, onde não observamos as superposições quânticas, a partir de uma dinâmica quântica subjacente.

Qualquer tentativa para se implementar experimentalmente sistemas quânticos esbarra na sensibilidade desses sistemas em relação aos ruídos Nielsen e Chuang (2000); Bernstein e Vazirani (1997); Preskill e à descoerência Zurek (2003). Uma das maneiras de se enfrentar os problemas que surgem devido à descoerência é usando-se os métodos de códigos de correção de erros Shor (1995); Shor e Calderbank (1996); Steane (1996b,a); Knill e Laflamme (1997) ou os métodos que trabalham em um subespaço sem descoerência Zanardi (1997); Lidar et al. (1998); Bacon et al. (1999); Kempe et al. (2001). Todavia nem sempre esses dois tipos de métodos já citados são eficientes uma vez que podem vir a aumentar e complicar muito um circuito. Sendo assim é necessário estudar os efeitos da descoerência nos vários algoritmos quânticos implementados nos circuitos quânticos habituais sem os códigos corretores Azuma (2002). O caminho aleatório quântico, por apresentar características muito distintas de seu análogo clássico, é muito apropriado para este tipo de estudo de descoerência. O efeito da descoerência em caminhos quânticos tem sido recentemente estudado por muitos autores Brun et al. (2003b); Kendon e Tregenna (2002a, 2003); Brun et al. (2003a); Kendon e Tregenna (2002b); Shapira et al.; Konno (2005b); Ribeiro et al. (2004); Mackay et al. (2002); Romanelli et al. (2005). Foi mostrado inclusive que sob certas condições um pouco de descoerência no sistema pode até ser benéfico para um determinado tipo de algoritmo Kendon e Tregenna (2003). Em linhas gerais pode-se dizer que o caminho quântico é altamente sensível aos fenômenos de descoerência, sejam estes advindos de processos unitários ou não, uma vez que mesmo para pequenas perturbações quando deixa-

mos o sistema evoluir por longos períodos de tempo o comportamento clássico do sistema sempre surge. E a variância do caminho deixa de crescer quadraticamente (comportamento balístico) com o número de passos e passa a crescer linearmente com o número de passos (comportamento difusivo) Brun et al. (2003a).

Atualmente existem diversas propostas de sistemas quânticos para se implementar experimentalmente o caminho quântico. Entre estas propostas existe a que usa eletrodinâmica quântica de cavidade (CQED) Sanders et al. (2003), outra que usa átomos aprisionados em redes ópticas W.Dür et al. (2002); Eckert et al. (2005), outra que é feita usando-se ressonância magnética nuclear (NMR) em substratos sólidos Berman et al. (2003); Du et al. (2003) e há as que usam fótons polarizados e óptica linear Zhao et al. (2002); Knill et al. (2001). Também foi mostrado que o caminho quântico pode ser simulado usando ondas clássicas ao invés de ondas de matéria Knight et al. (2003); Jeong et al. (2004). Há também uma proposta usando um computador quântico de armadilhas de íons Travaglione e Milburn (2002). Para que seja possível implementar o caminhante quântico, é necessário que tenhamos um processador quântico que trabalhe de forma coerente com alguns qbits por um tempo suficiente para que possamos evoluir o caminho por vários passos. Com a tecnologia atual, implementar essas iterações, ainda não é uma tarefa fácil, mas, até o momento, não há nenhum fato que as impossibilite. Das muitas propostas citadas para a implementação do caminho quântico, recentemente uma foi executada usando ressonância magnética nuclear em um processador de informação quântica (QIP) os autores conseguiram evoluir o caminho por até oito passos havendo total acordo com a teoria Ryan et al. (2005). Em sistemas de ressonância magnética nuclear no estado líquido Feldman et al. (1998); Pawstowski et al. (1996), já foram feitas muitas observações de ondas de spins Mádi et al. (1997). Há uma outra implementação completa usando-se excitações de lasers de um único elétron em um ponto quântico Manouchehri e Wang (2006). E finalmente Do et al. (2005) que implementaram experimentalmente a evolução do caminhante quântico usando técnicas de óptica linear.

Em setembro de 2002 a revista *Physics World* Crease (2002) divulgou o resultado de uma enquete realizada entre seus leitores sobre qual seria o mais belo experimento da física. O primeiro e o quinto experimento mais citados representam as diferentes circunstâncias do mesmo experimento, a saber, do experimento da dupla fenda de Young. Experimento esse que é um marco na história e também nos fundamentos da Física. Pois Sir Isaac Newton (1642-1727) defendia a hipótese de que a luz era constituída de corpúsculos. Os principais fenômenos óticos da época (reflexão e refração) podiam ser explicados com o uso da teoria corpuscular. Entretanto, este modelo corpuscular era combatido por Christiaan Huygens (1629-1695), que defendia a teoria ondulatória. No entanto, a autoridade científica de Newton fez prevalecer sua teoria por mais de um século. Por volta de 1801, uma bela experiência realizada por Thomas Young (1773-1829) resolveu a questão favoravelmente a Huygens. A experiência de Young provou que a luz era uma onda, porque os fenômenos da difração e da interferência, por ele descobertos, eram características exclusivamente ondulatórias P.Feynman et al. (1969); Halliday e Resnick (1991). Sem sombra de dúvidas, esses fatos são fortes argumentos que nos motivaram a investigar o comportamento dos caminhantes quânticos passando por uma ou duas fendas. Há interesse em saber como os caminhantes quânticos irão se comportar. Se terão comportamento similar ao da luz quando passarem por uma ou duas fendas ou não. Sendo assim investigamos, pela primeira vez na literatura, o comportamento de caminhantes quânticos ao passarem por uma ou duas fendas e observamos que eles, de fato, apresentam os fenômenos de interferência e difração.

Nosso trabalho insere-se no contexto de modelagem computacional uma vez que esta área trata basicamente da simulação de soluções para problemas científicos, analisando os fenômenos, desenvolvendo modelos matemáticos para sua descrição e compreensão, e elaborando códigos computacionais para obtenção de soluções para estes problemas. Aqui nós analisamos o modelo do caminho quântico em uma e duas dimensões sob diversos aspectos. Em todos os casos partimos das

equações de evolução para este modelo e avançamos em sua modelagem através da técnica de ligações interrompidas principalmente na parte de simulação computacional desses sistemas onde encontramos resultados novos Oliveira et al. (2006, 2007) . Nossos programas foram construídos em linguagem Fortran para simularmos numericamente a evolução temporal das diversas grandezas do sistema. Para facilitar a compreensão e visualização dos resultados geramos inúmeros gráficos usando o Gnuplot e algumas vezes para melhor observarmos a evolução temporal do caminhante quântico no plano criamos animações no Maple a partir dos dados gerados pela simulação numérica.

No capítulo 2 apresentamos o primeiro modelo de caminho aleatório quântico discreto no tempo, a formalização do caminho discreto em uma reta infinita de forma geral, depois particularizamos para o caminho de Hadamard. Apresentamos uma variação na reta onde consideramos que a partícula em cada passo também pode permanecer na posição que se encontra. E por último discutimos o comportamento dos caminhantes quânticos na presença de algum tipo de descoerência . No capítulo 3 apresentamos nossas contribuições originais para o desenvolvimento do formalismo geral para o tratamento de caminhos quânticos no plano e damos idéias de sua generalização para dimensões maiores. Usamos esse ferramental para analisar o caminho no plano infinito, e em outras geometrias. Analisamos detalhadamente o caso em que há descoerência do tipo de ligações interrompidas no plano. E finalmente analisamos, pela primeira vez na literatura, o comportamento do caminhante quântico passando por uma e por duas fendas. No apêndice A apresentamos uma pequena revisão da análise dos caminhos aleatórios clássicos até obtermos o comportamento de sua distribuição de probabilidade e de seu desvio padrão para podermos comparar com o caso quântico.

# Capítulo 2

## Caminhos Quânticos Unidimensionais

### 2.1 O Caminho Aleatório Quântico

Como motivação e para ilustrar vamos iniciar apresentando um exemplo de caminhos aleatórios quânticos. Este exemplo de 1993 é tido como sendo o trabalho precursor na área e é devido a três pesquisadores Y.Aharonov, L. Davidovich e N. Zagury: Aharonov et al. (1993). É neste trabalho que pela primeira vez é usado o termo “caminho aleatório quântico” como sendo a versão quântica para o caminho aleatório clássico.

Como foi visto, no caminho aleatório clássico sua descrição é definida em função das probabilidades de a partícula dar um passo de comprimento  $l$  para a direita ou para a esquerda. Já no caminho aleatório quântico a descrição é feita usando-se as amplitudes de probabilidades. Imagine uma partícula de spin  $1/2$  que tem seu movimento limitado em uma dimensão - uma reta, por exemplo. Esta partícula está no espaço de Hilbert  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_\infty$ , onde  $\mathcal{H}_2$  é o espaço da componente de spin e  $\mathcal{H}_\infty$  o espaço posição na reta infinita. A decisão de para qual direção, direita ou esquerda, a partícula vai se mover fica a cargo da sua componente de spin. A posição da partícula será descrita pelo pacote de onda  $|\psi_x\rangle$ . Dizemos que a função  $\langle x|\psi_{x_0}\rangle$  é um pacote de ondas centrado em  $x_0$ . Seja  $P$  o operador momento e  $S_z$  o operador da componente de spin  $z$  da partícula. O

operador unitário que promove translação de comprimento  $l$  é representado por

$$U_l = \exp\left(\frac{-iPl}{\hbar}\right), \quad (2.1)$$

tal que  $U_l|\psi_{x_0}\rangle = |\psi_{x_0+l}\rangle$ . E  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ .  $h \cong 6,620693 \times 10^{-34}$ J. s. Os autoestados do operador  $S_z$  serão denotados pelos vetores  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ . Onde, da notação usual de computação quântica,

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Tem-se, portanto, que  $S_z|0\rangle = \frac{\hbar}{2}|0\rangle$  e  $S_z|1\rangle = -\frac{\hbar}{2}|1\rangle$ . Uma partícula de spin 1/2 geralmente é descrita por um vetor (vetor de estado), do tipo

$$|\psi\rangle = (\alpha_+|0\rangle + \alpha_-|1\rangle) \otimes |\psi_x\rangle, \quad (2.3)$$

onde  $|\psi_x\rangle$  é a componente da posição da partícula,  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  são as suas componentes de spin  $z$  e  $\alpha_+, \alpha_-$  escalares tais que  $|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1$ . Esta última restrição garante que o o vetor de estado da partícula seja normalizado com norma um, isto é,  $\| |\psi\rangle \| \equiv \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} = 1$ . O produto tensorial representado por  $\otimes$  é o usual em Computação Quântica e evidencia a separação entre os dois graus de liberdade da partícula, posição e spin. Uma vez conhecida esta estrutura tensorial omitirei daqui em diante o símbolo  $\otimes$ , a fim de não carregar a notação.

O operador evolução temporal correspondente a uma translação de comprimento  $l$  do sistema todo é o operador unitário

$$U = \exp\left(\frac{-iS_zPl}{\hbar}\right). \quad (2.4)$$

Este operador  $U$  faz com que a partícula sofra uma translação condicionada à sua componente de spin. Por exemplo, se o estado da partícula é  $|0\rangle|\psi_{x_0}\rangle$  após aplicarmos  $U$  teremos o estado  $|0\rangle|\psi_{x_0+l}\rangle$ , ou seja, a partícula terá sido deslocada

$l$  para a direita. Enquanto, que se estiver no estado  $|1\rangle|\psi_{x_0}\rangle$  será deslocada  $l$  para a esquerda e seu estado será  $|1\rangle|\psi_{x_0-l}\rangle$ . Para observarmos comportamentos mais interessantes devemos explorar os casos em que a partícula esteja em um estado de superposição com suas componentes de spin.

$$|\psi_0\rangle = (\alpha_+|0\rangle + \alpha_-|1\rangle)|\psi_{x_0}\rangle. \quad (2.5)$$

Aplicando o operador  $U$ , induziremos também uma superposição das posições

$$U|\psi_0\rangle = \alpha_+|0\rangle|\psi_{x_0+l}\rangle + \alpha_-|1\rangle|\psi_{x_0-l}\rangle, \quad (2.6)$$

Podemos ver que essa dinâmica gera uma forte correlação entre os dois estados possíveis de spin e as direções. Se neste instante decidirmos medir o spin da partícula na base formada pelos autoestados de  $S_z$ , obteremos que a partícula está no estado  $|0\rangle|\psi_{x_0+l}\rangle$ , ou seja, localizada em torno da posição  $x_0 + l$  com probabilidade  $p_+ = |\alpha_+|^2$ . E no estado  $|1\rangle|\psi_{x_0-l}\rangle$  localizada em torno de  $x_0 - l$  com probabilidade  $p_- = |\alpha_-|^2$ . Logo após essa medida do spin, portanto com pleno conhecimento do novo estado da partícula, aplicamos novamente o operador  $U$  sobre este novo estado. Repetindo esse procedimento  $T$  vezes veremos que a partícula foi deslocada em média de uma quantidade  $\langle x \rangle = Tl(|\alpha_+|^2 - |\alpha_-|^2)$  e o seu desvio quadrático médio,  $\sigma$  será de  $\sigma = 2|\alpha_+||\alpha_-|\sqrt{Tl}$ . Estes resultados coincidem exatamente com os resultados obtidos pelo caminho aleatório clássico com uma moeda “viciada” cujas probabilidades de “cara” e “coroa” sejam  $|\alpha_+|^2$  e  $|\alpha_-|^2$  respectivamente. Sendo que no caso quântico o papel da moeda é feito pelo spin da partícula.

A fim de observarmos um comportamento mais interessante façamos a seguinte modificação. Vamos medir a componente de spin  $z$  de nossa partícula em uma outra base que não seja formada pelos autoestados desse operador. Seja esta

nova base representada por dois vetores ortogonais

$$|\theta, \phi, +\rangle = \cos(\theta/2)|0\rangle + \exp(i\phi) \sin(\theta/2)|1\rangle \quad (2.7)$$

e

$$|\theta, \phi, -\rangle = \sin(\theta/2)|0\rangle - \exp(i\phi) \cos(\theta/2)|1\rangle, \quad (2.8)$$

onde  $\phi = \arg\left(\frac{\alpha_-}{\alpha_+}\right)$ . Quando a medida do spin for  $\hbar/2$  o estado da partícula será  $|0\rangle|\psi_{x_0+l}\rangle$  e quando medirmos o estado de spin como sendo  $-\hbar/2$  teremos o seguinte estado para a partícula  $|1\rangle|\psi_{x_0-l}\rangle$ . Então, o estado da partícula imediatamente após a medida do spin ser  $\pm\hbar/2$ , na nova base, é dado por

$$|\psi'_{\pm}\rangle = \zeta_{\pm}^{1/2} [\alpha_{\pm} \exp(\mp iPl/\hbar) \pm \alpha_{\mp} \exp(\mp i\phi) \tan(\theta/2) \exp(\pm iPl/\hbar)] |\psi_{x_0}\rangle, \quad (2.9)$$

onde  $\zeta_{\pm}$  são as constantes de normalização. E aqui também, como em (2.6), observamos que a partícula está em um estado de superposição com as posições  $x_0 \pm l$ . Se a largura  $\Delta x$  do estado inicial  $|\psi_{x_0}\rangle$  é muito maior que o tamanho do passo  $l$ , podemos aproximar

$$\exp(\pm iPl/\hbar) |\psi_{x_0}\rangle \approx (1 \pm iPl/\hbar) |\psi_{x_0}\rangle. \quad (2.10)$$

Dessa forma podemos estabelecer que o estado da partícula após a medida é  $|\psi'_{\pm}\rangle = (1 \pm i\delta l_{\pm} P/\hbar) |\psi_{x_0}\rangle$ , onde

$$\delta l_{\pm} = \frac{\alpha_{\pm} \mp \alpha_{\mp} \exp(\mp i\phi) \tan(\theta/2)}{\alpha_{\pm} \pm \alpha_{\mp} \exp(\mp i\phi) \tan(\theta/2)} l, \quad (2.11)$$

com probabilidades

$$\begin{aligned} p_+ &= |\alpha_+ \cos(\theta/2) - \alpha_- \sin(\theta/2)|^2, \\ p_- &= |\alpha_+ \sin(\theta/2) + \alpha_- \cos(\theta/2)|^2. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Analogamente, podemos ver que se  $|\delta l_{\pm}|$  for muito menor que  $\Delta x$ , também podemos escrever  $|\psi'_{\pm}\rangle \approx \exp(i\delta l_{\pm}P/\hbar)|\psi_{x_0}\rangle = \psi_{x_0 \pm \delta l_{\pm}}$ . Examinando a Equação (2.11) observamos que com uma escolha conveniente de  $\tan(\theta/2)$  tanto  $\delta l_+$  como  $\delta l_-$  podem ser muito maiores que  $l$ , porém ainda muito menores que  $\Delta x$ , de modo que as aproximações permaneçam válidas. Isto é, para um pacote de ondas inicialmente largo é possível portanto ter um deslocamento  $|\delta l_+|$  muito menor que o pacote inicial, mas ainda assim muito maior que  $l$ . Se escolhermos, por exemplo,  $\tan(\theta/2) = |\phi|(1+\epsilon)$  com  $\frac{l}{\Delta x} \ll |\epsilon| \ll 1$ . Então  $\delta l_- \approx -2l/\epsilon$  onde,  $l \ll |\delta l_-| \ll \Delta x$ . Neste caso, a probabilidade de se detectar o sistema no estado  $|\theta, \phi, -\rangle$  tendo como estado inicial  $|\psi_{x_0}\rangle$  é  $p_- \approx |\alpha_+\alpha_-|^2\epsilon^2$ . Este é um evento raro, pois com os mesmos conjuntos de parâmetros obtemos  $\delta l_+ = (|\alpha_+|^2 - |\alpha_-|^2)l + O(l\epsilon)$  com probabilidade  $p_+ \approx 1 - |\alpha_+\alpha_-|^2\epsilon^2$ . Já para o deslocamento médio  $p_+\delta l_+ + p_-\delta l_-$  obtemos  $(|\alpha_+|^2 - |\alpha_-|^2)l$  como no caso sem rotação e similarmente o desvio padrão também não é alterado. Vimos aqui então que é possível, sob certas condições, aplicarmos um operador de translação de comprimento  $l$  em uma dada partícula e ainda assim, muito raramente, ela ir muito além da distância  $l$ , o que é algo totalmente impossível no caminho aleatório clássico.

Indubitavelmente este é um fato puramente devido ao mundo microscópico. A mecânica quântica nos permite observar eventos não observáveis classicamente, mesmo que estes sejam raros. Foi a partir deste modelo e de seus resultados que surgiram dois modelos de caminhos quânticos o modelo contínuo no tempo e o modelo discreto. Ambos podem ser vistos como uma generalização do fenômeno aqui apresentado. Nas próximas duas seções veremos a essência desses modelos, as suas semelhanças e disparidades, bem como os resultados que tanto os diferenciam de seus análogos clássicos.

## 2.2 O Modelo Discreto

Vamos agora definir formalmente a noção do caminho quântico discreto na reta. A idéia chave por detrás do caminho aleatório quântico é iterar o processo, in-

troduzido na secção anterior, sem realizar medidas intermediárias dos registradores da posição ou moeda.

Seja  $\mathcal{H}_\infty$  o espaço de Hilbert gerado pelas posições discretas da partícula na reta. Para uma reta cuja distância entre as posições consecutivas seja 1, o espaço posição será gerado por  $|x\rangle : x \in \mathbb{Z}$ . Estes estados farão o papel da função de onda  $|\psi_x\rangle$  apresentada na Secção 2.1 com o  $|x\rangle$  correspondendo a uma partícula localizada na posição  $x$ . Nosso modelo descreve a evolução de um sistema quântico de acordo com os postulados da mecânica quântica, com transformações unitárias sobre estados do espaço de Hilbert, e a noção de partícula é usada somente para guiar nossa intuição.

Em um passeio aleatório clássico em uma reta, iniciamos com a partícula na origem e a cada passo essa partícula se move pra direita com probabilidade  $p$  ou para a esquerda com probabilidade  $q$ , ou que permanece na posição atual com probabilidade  $1 - p - q$ . É natural imaginar que a versão quântica do passeio seja um processo quântico com os estados da base  $|x\rangle$ , tais que  $x \in \mathbb{Z}$ , e a cada passo, ocorra uma transformação unitária

$$|x\rangle \rightarrow a_-|x-1\rangle + a_0|x\rangle + a_+|x+1\rangle, \quad (2.13)$$

ou seja, move-se para a esquerda com uma amplitude de probabilidade  $|a_-|^2$  permanecendo no mesmo lugar com probabilidade  $|a_0|^2$  e movendo-se para a direita com probabilidade  $|a_+|^2$ . Além disso, nosso passeio quântico deveria se comportar da mesma forma em qualquer lugar, isto é,  $a_-$ ,  $a_0$  e  $a_+$  devem ser independentes de  $x$  como acontece no caso clássico. Entretanto, esta definição não funciona. Pois para que esta transformação  $U$  definida pela Equação (2.13) seja unitária Nielsen e Chuang (2000),

$$UU^\dagger = I = U^\dagger U \quad (2.14)$$

isto é, devemos ter sempre uma das seguintes condições satisfeita.

$$(1) |a_-| = 1, a_0 = a_+ = 0;$$

$$(2) |a_0| = 1, a_- = a_+ = 0;$$

$$(3) |a_+| = 1, a_0 = a_- = 0.$$

Vemos que essas são as três possibilidades triviais Ambainis (2003b), aquelas em que a cada passo movem a partícula para a esquerda, direita ou que a mesma permanece no mesmo lugar. Podemos contornar esta monotonia das possibilidades introduzindo um grau de liberdade adicional chamado de quiralidade ou de estado “moeda” ou simplesmente “moeda”.

Seja  $\mathcal{H}_2 = \{|0\rangle, |1\rangle\}$  o espaço de Hilbert gerado pelos estados da moeda, direita e esquerda, que representará o espaço de spin 1/2 da partícula. O nosso espaço de estados quântico total será o produto tensorial desses dois espaços, moeda e posição. Cada estado quântico,  $\{|j\rangle|x\rangle \in \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_\infty\}$ , representa uma partícula na posição  $x$  com a moeda na direção  $j$ .

Seja o estado unitário genérico de um caminho quântico discreto na reta, no instante de tempo  $t$ , definido por

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{j=0}^1 \sum_{x=-\infty}^{\infty} A_{j;x}(t) |j\rangle|x\rangle, \quad (2.15)$$

com

$$\sum_{j=0}^1 \sum_{x=-\infty}^{\infty} |A_{j;x}(t)|^2 = 1, \quad (2.16)$$

uma vez que os vetores de estado estão sempre com norma 1. A translação condicional do sistema pode ser descrita pelo seguinte operador unitário

$$S = \sum_{j,x} |j\rangle\langle j| \otimes |x + (-1)^j\rangle\langle x|. \quad (2.17)$$

Onde vemos que se  $j = 0$  a partícula se move para a direita, enquanto que se  $j = 1$  ela vai para a esquerda, com o estado da moeda permanecendo inalterado.

A primeira ação para se iniciar o caminho clássico é o lançamento da moeda, aqui em analogia, faremos uma rotação no espaço moeda. Essa rotação será

representada pelo operador unitário moeda genérico de ordem  $2 \times 2$ ,

$$C = \sum_{j,k=0}^1 C_{jk} |j\rangle \langle k|. \quad (2.18)$$

Como  $C$  é um operador unitário temos que  $\sum_{j=0}^1 |C_{jk}|^2 = 1$  e que  $C_{00}^* C_{01} + C_{10}^* C_{11} = 0$ . Esta rotação é uma operação muito arbitrária e a partir dela pode-se definir uma rica variedade de caminhos com certos comportamentos distintos apenas modificando-se a matriz  $C$ . A única exigência em relação ela é que a mesma gere um caminho não viciado. Por caminho não viciado entende-se aquele em que o caminhante não faz qualquer distinção entre as duas metades da reta dado sua posição inicial, ou seja, se após um único passo efetuarmos a medida da moeda encontraremos a distribuição de probabilidade clássica, isto é, com probabilidade  $1/2$  de estar um passo a direita ou a esquerda. Qualquer outro tipo de caminho viciado fará com que a partícula se mova em uma única direção com probabilidade 1 em todos os passos. O operador evolução para um passo do caminho é então dado por:

$$U = S \circ (C \otimes I), \quad (2.19)$$

onde  $S$  é o operador translação,  $I$  a matriz identidade que atua no espaço posição e  $C$  o operador moeda. De acordo com os postulados da mecânica quântica temos que

$$|\psi(t+1)\rangle = U|\psi(t)\rangle = U^{t+1}|\psi(0)\rangle, \quad (2.20)$$

onde  $|\psi(0)\rangle$  é estado no instante inicial. Aplicando o operador evolução  $U$  no estado (2.15) obtemos

$$A_{j;x}(t+1) = \sum_{k=0}^1 C_{jk} A_{k;x-(-1)^j}(t), \quad (2.21)$$

que é a expressão genérica, para qualquer operador moeda, para os coeficientes  $A_{j;x}$  do estado  $|\psi(t+1)\rangle$  de um passo para o caminho quântico na reta. Se quisermos que a partícula fique confinada a uma reta semi-infinita, uma reta finita, ou um

círculo basta que coloquemos as condições de contorno apropriadas para o espaço posição. Temos então uma expressão geral para a evolução temporal do caminho dada por:

$$|\psi(t+1)\rangle = \sum_{x=-\infty}^{\infty} \sum_{j=0}^1 \sum_{k=0}^1 C_{jk} A_{k; x-(-1)^j}(t) |j\rangle |x\rangle \quad (2.22)$$

Também obtivemos a expressão para  $U^\dagger$ , onde  $U^\dagger = (U^*)^T$ , ou seja a matriz transposta conjugada de  $U$ . Temos então  $U^\dagger = (C^\dagger \otimes I) \circ S^\dagger$  com

$$C^\dagger = \sum_{j,k=0}^1 C_{jk}^* |k\rangle \langle j| \quad (2.23)$$

e

$$S^\dagger = \sum_{j,x} |j\rangle \langle j| \otimes |x\rangle \langle x+(-1)^j|. \quad (2.24)$$

Como o operador evolução  $U$  é um operador unitário temos que  $UU^\dagger = U^\dagger U = 1$ , então temos que

$$U^\dagger U |\psi(t)\rangle = |\psi(t)\rangle.$$

Mas como

$$U |\psi(t)\rangle = |\psi(t+1)\rangle, \quad (2.25)$$

logo,

$$U^\dagger |\psi(t+1)\rangle = |\psi(t)\rangle.$$

Aplicando  $U^\dagger$  no estado (2.15) obtemos:

$$A_{j;x}(t-1) = \sum_{k=0}^1 C_{kj}^* A_{k; x+(-1)^k}(t). \quad (2.26)$$

Note que na expressão para a evolução dagger, Equação (2.26), além da modificação da componente da moeda o termo  $A_{k; x+(-1)^k}(t)$  também é modificado diferentemente do que ocorre na Equação (2.21). A distribuição de probabilidade para uma dada posição  $x$  da reta em um dado instante de tempo  $t$  é então dada

por

$$P_x(t) = \sum_{j=0}^1 |A_{j;x}(t)|^2. \quad (2.27)$$

A variância para uma distribuição de probabilidade é dada por

$$\sigma^2(t) = M_2(t) - M_1^2(t), \quad (2.28)$$

onde

$$\begin{aligned} M_1(t) &= \sum_x x P_x(t), \\ M_2(t) &= \sum_x x^2 P_x(t). \end{aligned} \quad (2.29)$$

### 2.2.1 O caminho de Hadamard

Na secção anterior tratamos o caminho quântico na reta de maneira geral considerando um operador de translação padrão e o operador moeda  $C$  genérico. Vamos agora particularizar para o estudo do caminho de Hadamard. Foi mostrado por Nayak e Vishwanath (2000) que para o caso em uma dimensão é suficiente estudar somente a evolução com a moeda de Hadamard pois ele apresenta todas as principais características do caminho quântico. Além disso, podemos obter a partir dele, com a condição inicial escolhida apropriadamente, as mesmas distribuições de probabilidade geradas pelas outras moedas. Seja

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.30)$$

Podemos ver que essa moeda é não viciada aplicando o operador evolução  $U$  uma única vez num estado inicial qualquer. Seja o estado inicial  $|\psi(0)\rangle = |0\rangle|0\rangle$ , ou

seja, uma partícula na origem com moeda 0. Temos, então

$$\begin{aligned}
U|\psi(0)\rangle &= (H \otimes I)|\psi(0)\rangle & (2.31) \\
S \circ (H \otimes I)|\psi(0)\rangle &= S \circ \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle\right) \\
S\left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle\right) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |-1\rangle).
\end{aligned}$$

Medindo a moeda na base padrão encontramos cada uma das duas possibilidades  $|0\rangle|1\rangle$  ou  $|1\rangle|-1\rangle$  com probabilidade  $1/2$ . Vemos que após essa medida as posições não estão mais correlacionadas. Se iterarmos o processo com uma medida da moeda após cada aplicação do operador  $U$  nós obteremos exatamente o caminho aleatório clássico na reta.

Obviamente se quisermos aproveitar as correlações quânticas não devemos ficar fazendo medidas intermediárias entre cada iteração. Então escolheremos um estado inicial  $|\psi(0)\rangle$ , aplicaremos  $t$  vezes o operador  $U$  e só depois faremos uma medida qualquer deixando assim que as correlações quânticas entre as diferentes posições interfiram entre si nos passos subsequentes. Essa interferência irá gerar um comportamento totalmente diferente para o caminho quântico. A distribuição de probabilidade limite deixará de ser a distribuição Gaussiana e o desvio padrão será totalmente balístico, isto é, a variância do caminho cresce quadraticamente com o número de passos, contrastando com o padrão difusivo do caminho clássico em que a variância cresce linearmente com o número de passos. Essas diferenças já começam a aparecer logo nos primeiros passos. Consideremos apenas três passos do caminho de Hadamard partindo do estado inicial  $|\psi(0)\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle$

$$\begin{aligned}
|\psi(0)\rangle &\xrightarrow{(H \otimes I)} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |0\rangle - |1\rangle \otimes |0\rangle)\right) \xrightarrow{(S)} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |1\rangle - |1\rangle \otimes |-1\rangle) \\
&\xrightarrow{U} \frac{1}{2}(|0\rangle \otimes |2\rangle - (|0\rangle - |1\rangle) \otimes |0\rangle + |1\rangle \otimes |-2\rangle) \\
&\xrightarrow{U} \frac{1}{2\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |3\rangle + |1\rangle \otimes |1\rangle + |0\rangle \otimes |-1\rangle \\
&\quad - 2|1\rangle \otimes |-1\rangle - |1\rangle \otimes |-3\rangle). & (2.32)
\end{aligned}$$

O resultado dos dois primeiros passos é muito parecido com o caminho clássico. Se após o segundo passo tivéssemos medido o estado, encontraríamos  $x = -2$  e  $x = 2$  com probabilidade  $1/4$  e  $x = 0$  com probabilidade  $1/2$ . Este é exatamente o resultado clássico. Já o terceiro passo é diferente e observamos que vamos para a esquerda com  $x = -1$  com probabilidade  $5/8$  enquanto que para a direita  $x = 1$  com probabilidade  $1/8$  enquanto no caso clássico ambas as posições seriam ocupadas com probabilidade  $3/8$ . Este já é um resultado devido à interferência quântica que torna-se ainda mais evidente à medida que consideramos mais iterações. Na figura 2.1 temos a distribuição de probabilidade após  $t = 100$  passos para o caminho de Hadamard na reta com estado inicial  $|\psi(0)\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle$ . Note que o padrão de interferência desse caminhante é extremamente mais complexo que a distribuição Gaussiana obtida no caso clássico. Podemos observar claramente uma distribuição com dois picos e um comportamento quase uniforme em torno da origem. As soluções para o caminho quântico sempre apresentam um padrão de paridade Ambainis et al. (2001). Se uma determinada posição tem probabilidade não nula num dado passo, as suas duas posições vizinhas tem probabilidade nula e vice versa. Sendo assim em todas as nossas figuras só consideraremos as posições que apresentam probabilidade diferente de zero.

Observa-se também que essa distribuição é assimétrica tendendo para a esquerda, embora a moeda de Hadamard não seja tendenciosa. Essa tendência aparece pois a amplitude de ir para a direita é  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  enquanto que a de ir para a esquerda é  $-\frac{1}{\sqrt{2}}$ . Intuitivamente percebemos que esse sinal irá acarretar em mais cancelamentos nos caminhos indo para a direita causando interferência destrutiva. Esta assimetria da distribuição é bem conhecida e pode ser contornada de pelos menos duas maneiras distintas. Se escolhermos como estado inicial  $|\psi(0)\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle$  e deixamos o caminho evoluir por alguns passos observamos que a distribuição da Figura 2.2 tende para a direita de maneira exatamente oposta à anterior. Para obtermos uma distribuição simétrica, podemos usar um estado inicial que seja a superposição dessas duas condições iniciais desde que elas não se interfiram, atu-

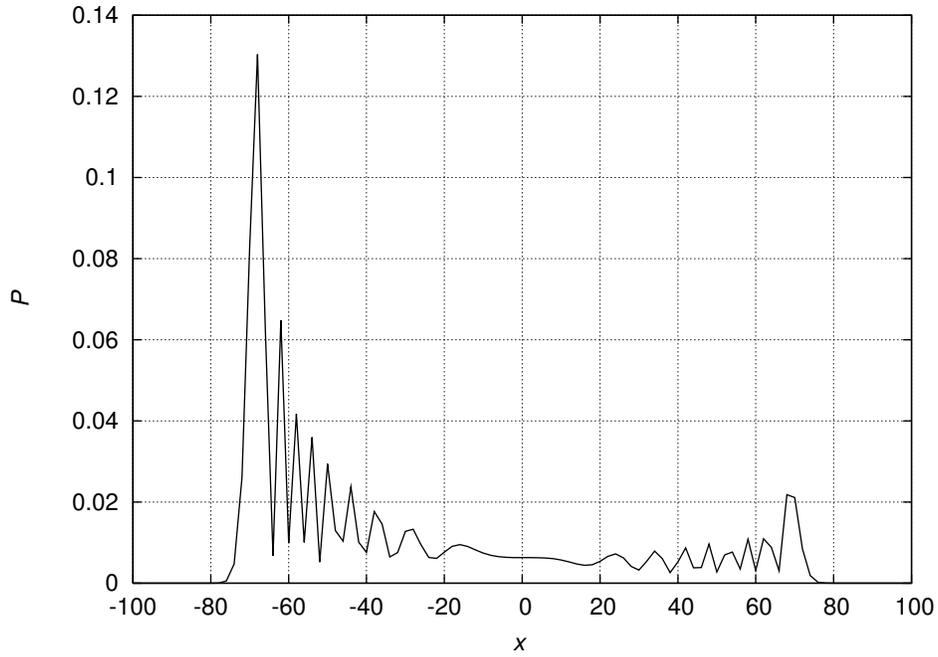


Figura 2.1: Distribuição de probabilidade do caminho quântico de Hadamard após 100 passos e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle$ , obtido através de simulação numérica. Essa distribuição é assimétrica tendendo para a esquerda. Devido à paridade da solução, somente os pontos pares são mostrados uma vez que nos ímpares a probabilidade é nula.

ando em, por exemplo espaços distintos. Na Figura 2.3 temos um estado inicial,

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i|1\rangle) \otimes |0\rangle, \quad (2.33)$$

que leva a uma distribuição simétrica. Como a moeda de Hadamard não introduz amplitudes complexas, a parte para a esquerda, puramente real, não interfere com a parte para a direita, puramente complexa, e obtemos assim uma distribuição de probabilidade totalmente simétrica. Em Tregenna et al. (2003) os autores apresentam o seguinte estado inicial

$$|\psi(0)\rangle = \left( \sqrt{0.85}|0\rangle - \sqrt{0.15}|1\rangle \right) \otimes |0\rangle \quad (2.34)$$

para a moeda de Hadamard que também apresenta uma boa simetria como vemos na Figura 2.4. Neste último caso a simetria da distribuição se dá pela interferência que ocorre entre as posições durante todo o percurso, enquanto que no primeiro caso, o que ocorre é a combinação das probabilidades das duas componentes que são ortogonais. Uma outra forma de obtermos uma distribuição de probabilidade simétrica, muito importante para fins de amostragem em bancos de dados, por exemplo, é nos valermos de outras moedas que sejam mais balanceadas, como por exemplo a moeda  $Y$  que trata as duas direções de maneira idêntica. Por exemplo, usando esta moeda  $Y$  com o estado inicial de superposição real  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle$  obtém-se uma figura exatamente idêntica à Figura 2.3.

$$Y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.35)$$

Podemos observar que todas as figuras apresentadas nesta secção apresentam um padrão extremamente complexo, ainda mais se comparadas à distribuição Gaussiana obtida pelo caminho clássico, que é centrada na origem e com decaimento exponencial à medida que nos afastamos dela. Este padrão de comportamento é sem dúvidas, a assinatura do mundo quântico. E algumas características

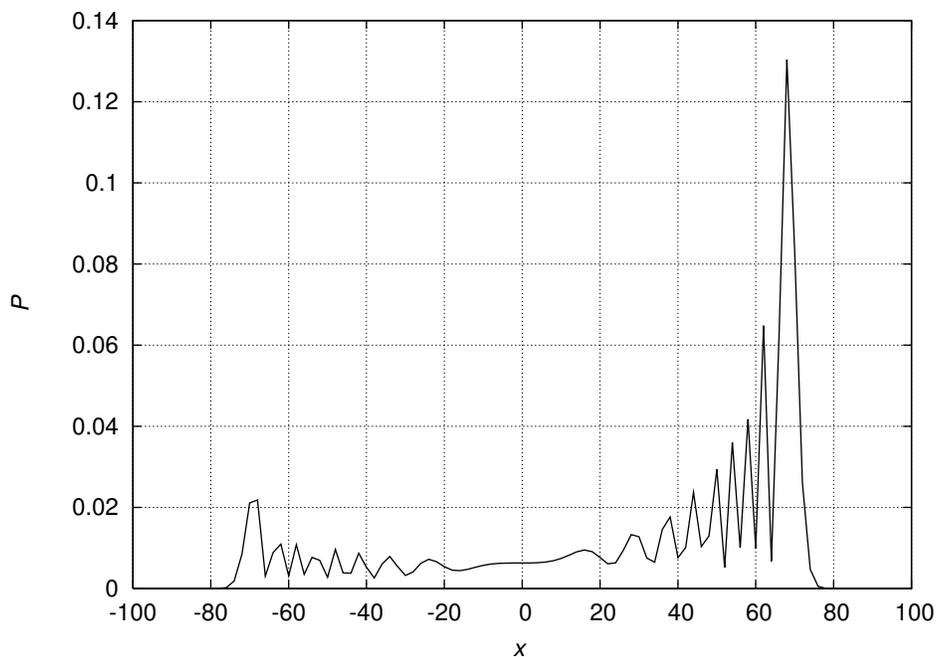


Figura 2.2: Distribuição de probabilidade do caminho quântico de Hadamard após 100 passos e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle$ , obtido através de simulação numérica. Essa distribuição é assimétrica tendendo para a direita. Devido à paridade da solução, somente os pontos pares são mostrados uma vez que nos ímpares a probabilidade é nula.

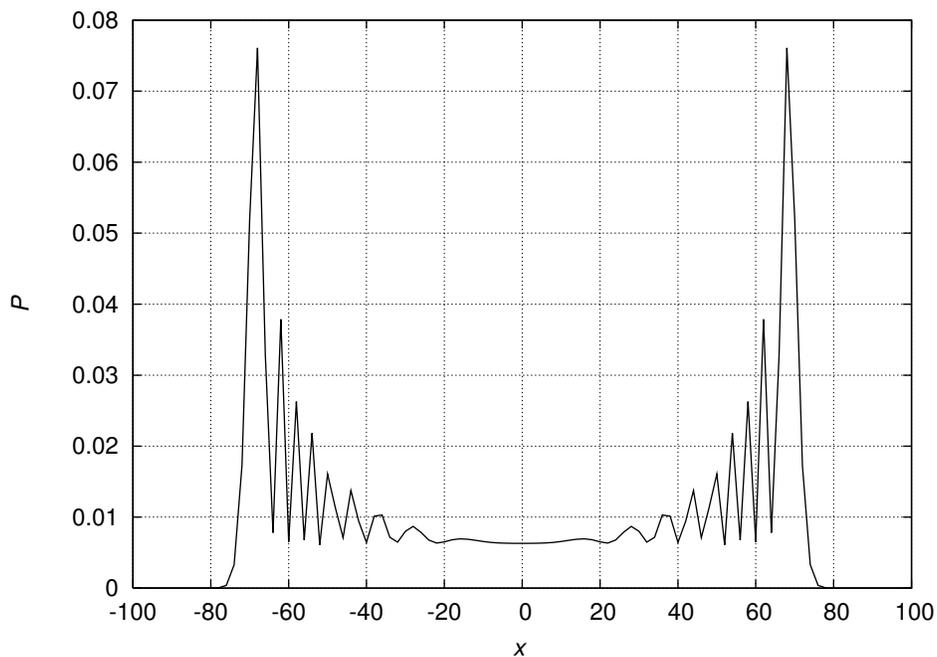


Figura 2.3: Distribuição de probabilidade do caminho quântico de Hadamard após 100 passos e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i|1\rangle) \otimes |0\rangle$ , obtido através de simulação numérica. Aqui observa-se uma distribuição simétrica. Devido à paridade da solução, somente os pontos pares são mostrados uma vez que nos ímpares a probabilidade é nula.

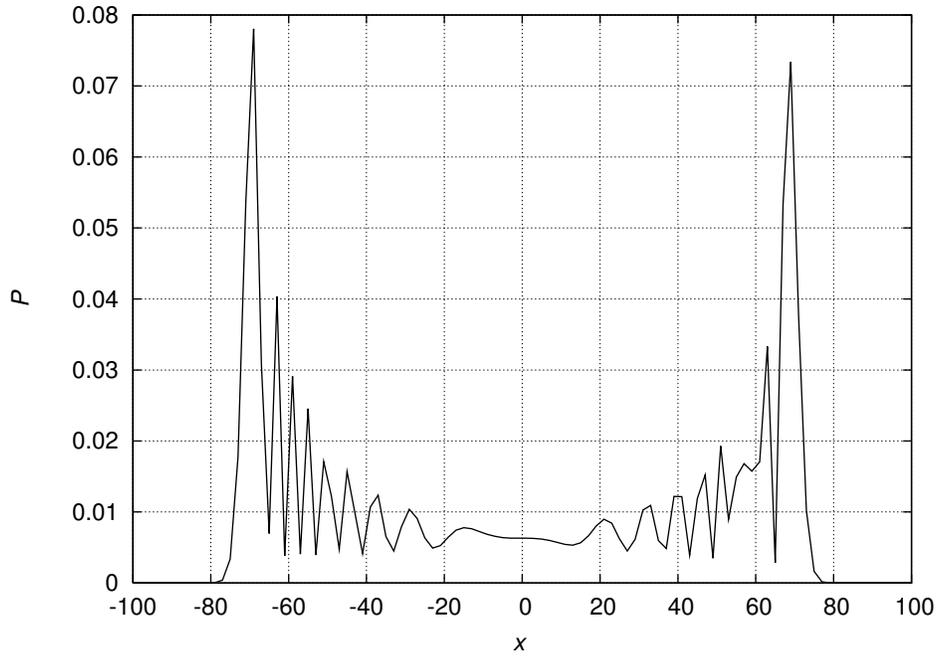


Figura 2.4: Distribuição de probabilidade do caminho quântico de Hadamard após 100 passos e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = (\sqrt{0.85}|0\rangle - \sqrt{0.15}|1\rangle) \otimes |0\rangle$ , obtido através de simulação numérica. Aqui observa-se uma distribuição praticamente simétrica. Devido à paridade da solução, somente os pontos pares são mostrados uma vez que nos ímpares a probabilidade é nula.

Caminho Clássico	Caminho Quântico
1. Inicie sua partícula na origem: $x = 0$	1. Inicie sua partícula na origem: $x = 0$
2. Lance a moeda	2. Lance a moeda quântica $C$
Cara	$C 0\rangle \otimes  x\rangle \longrightarrow \frac{( 0\rangle \otimes  x\rangle +  1\rangle \otimes  x\rangle)}{\sqrt{2}}$
Coroa	$C 1\rangle \otimes  x\rangle \longrightarrow \frac{( 0\rangle \otimes  x\rangle -  1\rangle \otimes  x\rangle)}{\sqrt{2}}$
3. Mova a partícula uma posição para esquerda ou direita de acordo com o resultado da moeda	3. Mova a partícula uma posição para esquerda ou direita de acordo com o resultado da moeda
Cara : $x \longrightarrow x + 1$	$S 0\rangle \otimes  x\rangle \longrightarrow  0\rangle \otimes  x + 1\rangle$
Coroa: $x \longrightarrow x - 1$	$S 1\rangle \otimes  x\rangle \longrightarrow  0\rangle \otimes  x - 1\rangle$
4. Repetir $t$ vezes os passos 2 e 3	4. Repetir $t$ vezes os passos 2 e 3
5. Medir a posição da partícula $-t \leq x \leq t$	5. Medir a posição da partícula $-t \leq x \leq t$
6. Repetir os passos de 1 a 5 muitas vezes	6. Repetir os passos de 1 a 5 muitas vezes
Distribuição de probabilidade binomial $\sigma = \sqrt{t}$	Distribuição de probabilidade intrincada $\sigma \approx t$

Tabela 2.1: Esquema comparativo do caminho aleatório clássico versus sua versão quântica.

podem ser notadas. A distribuição de probabilidade para o caminhante quântico se espalha no intervalo  $[\frac{-t}{\sqrt{2}}, \frac{t}{\sqrt{2}}]$  de maneira bem uniforme, ou seja, ele espalha-se linearmente com o tempo, quadraticamente mais rápido que o caminho aleatório clássico. Como foi visto, o caminho aleatório clássico possui variância  $\sigma^2 = t$  enquanto que o caminho quântico tem variância  $\sigma^2 \approx t^2$ .

Nesta secção apresentamos os principais resultados numéricos do caminho quântico de Hadamard na reta, que estão de acordo com a solução analítica assintótica aproximada obtida por Ambainis et al. (2001) e Nayak e Vishwanath (2000). Vimos que para o caminho quântico em uma dimensão é suficiente estudar a evolução com a moeda de Hadamard e que a partícula apresenta um comportamento balístico. Na Figura 2.6 comparamos o comportamento da distribuição de probabilidade clássica com a distribuição quântica com a moeda de Hadamard e observamos claramente que no caso clássico a partícula se concentra em torno da origem e espalha bem mais lentamente que o caso quântico com sua distribuição de probabilidade complexa. Outro fato que os diferencia é que para o caso clássico não viciado sempre temos uma distribuição de probabilidade simétrica enquanto que no caso quântico as distribuições de probabilidade não são necessariamente simétricas mostrando que os estados iniciais podem afetar bastante o comportamento do caso

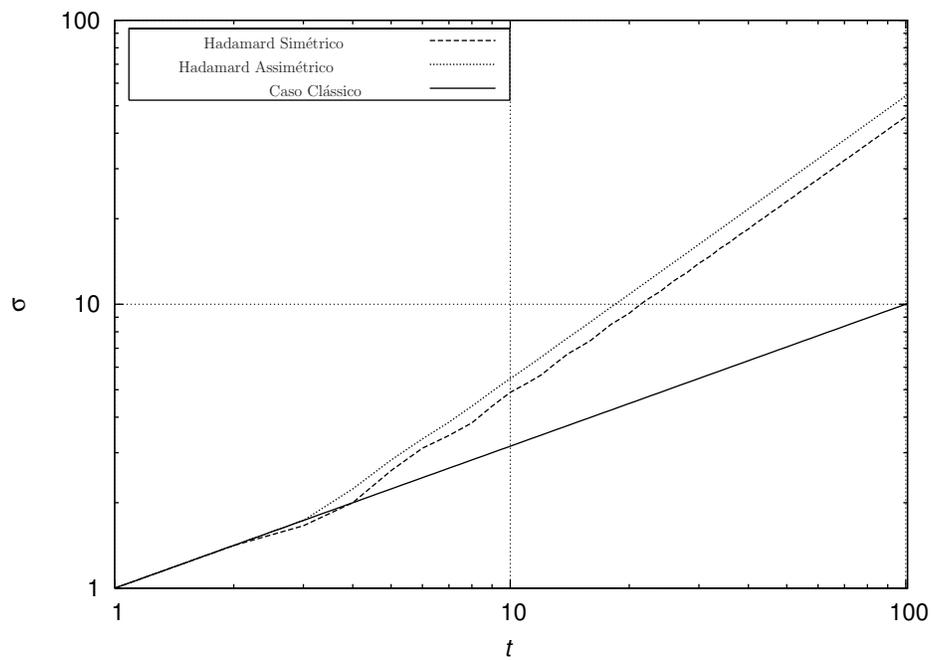


Figura 2.5: Desvio padrão em função do número de passos, escala log-log, para o caminho quântico 1-D usando a moeda de Hadamard com estado inicial simétrico Figura 2.3, assimétrico Figura 2.1 e o desvio do caminho clássico. Onde  $\sigma$  é o desvio padrão.

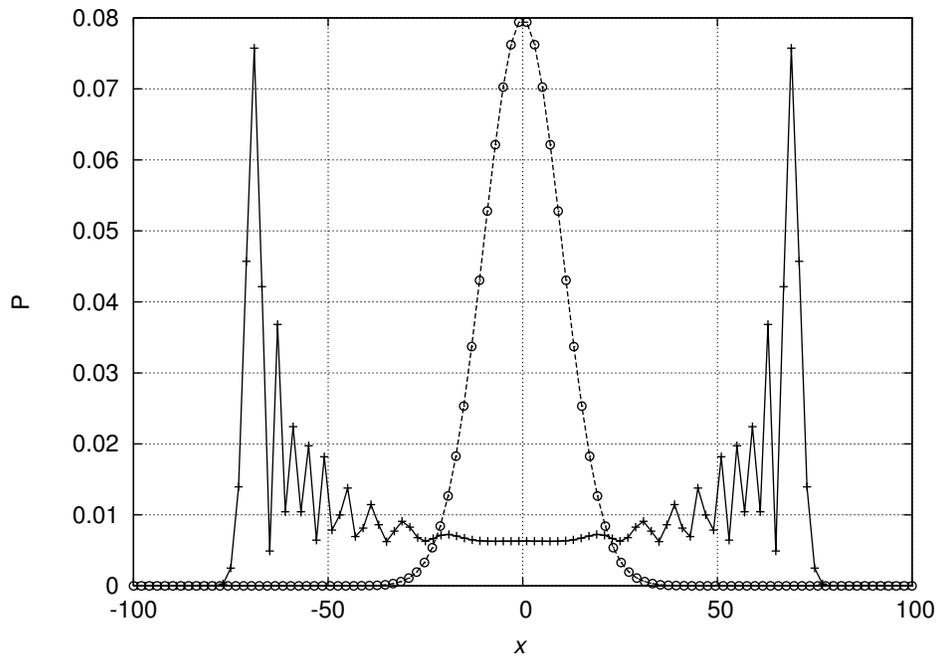


Figura 2.6: Distribuição de probabilidade do caso 1-D moeda de Hadamard e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i|1\rangle) \otimes |0\rangle$ , versus o caso clássico, distribuição binomial, após 100 passos.

quântico.

### 2.3 O Caminho Quântico com 3 Possibilidades

Nesta secção apresentamos o comportamento de um caminho quântico com três possibilidades, em que a partícula se move em superposição para a direita, para a esquerda e além disso pode permanecer na posição em que se encontra. Em Inui et al. (2005), os autores usaram uma moeda com três possibilidades: ficar na mesma posição, ir para a direita e ir para a esquerda. Eles calcularam a função de onda para uma partícula partindo da origem com um estado de moeda genérico e usaram como operador de rotação a moeda de Grover  $3 \times 3$ . os autores observaram que o aumento de um estado na moeda fez com que a probabilidade de se encontrar a partícula na origem nunca seja nula mesmo no caso de tempo infinito, exceto para alguns estados iniciais particulares. Já em Andraca et al. (2004) os autores usam uma moeda com estados iniciais emaranhados com dois qbits (quatro possibilidades), onde a translação para a direita e ou para esquerda só ocorre quando a moeda os estados da moeda são  $|00\rangle$  ou  $|11\rangle$  respectivamente, enquanto que para os outros estados  $|01\rangle$  ou  $|10\rangle$  a partícula não se move. Estes autores também concluíram que dessa forma é possível encontrar a partícula na origem com uma probabilidade considerável. Esta propriedade pode ser muito útil para futuras aplicações do caminho quântico, como por exemplo, na construção de algoritmos em que seja necessário amostrar sobre um conjunto de possíveis soluções de um problema Shenvi et al. (2003). Em nosso trabalho usamos o espaço moeda com três possibilidades com as moedas de Grover e Fourier e obtemos numericamente o comportamento da distribuição de probabilidade e do desvio padrão destes caminhos e comparamos com os resultados citados acima e também com o caso clássico.

Nosso correspondente físico é uma partícula de spin 1 que se move em uma reta. Seja  $\mathcal{H}_3 = \{|0\rangle, |1\rangle, |-1\rangle\}$  o espaço de Hilbert gerado pelos três estados da moeda: permanecer, direita e esquerda. E seja  $\mathcal{H}_\infty$  o espaço de Hilbert gerado

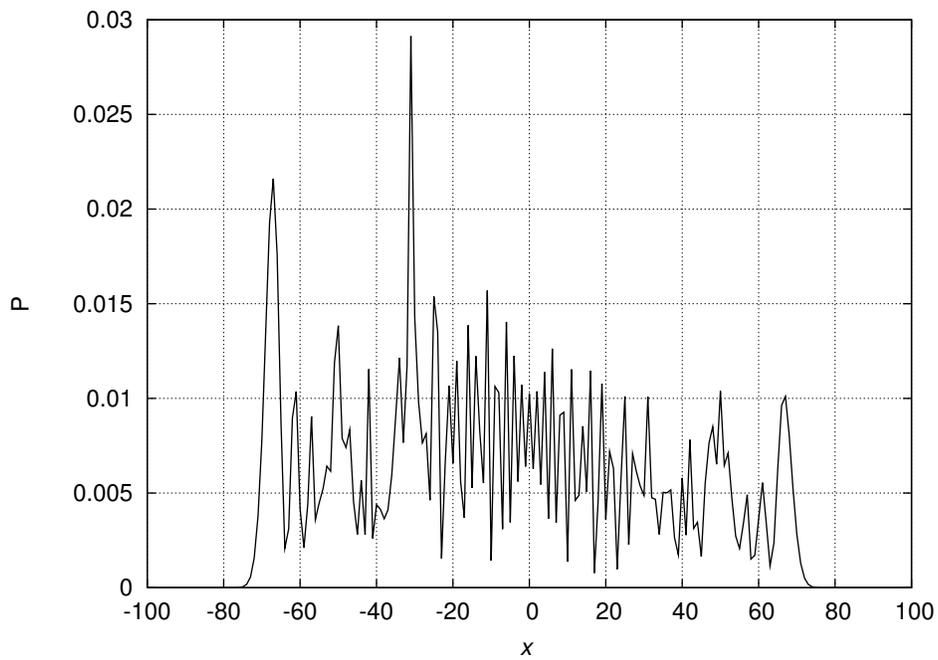


Figura 2.7: Distribuição de probabilidade do caso 1-D com 3 estados após 100 passos, moeda de Fourier e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1\rangle + i|1\rangle) \otimes |0\rangle$ .

pelas posições da partícula na reta. Para uma reta cujo espaçamento da rede seja 1 o espaço posição será gerado por  $|x\rangle : x \in \mathbb{Z}$ . O nosso sistema quântico total será o produto tensorial desses dois espaços, moeda e posição. Cada estado quântico  $|j\rangle|x\rangle \in \mathcal{H}_3 \otimes \mathcal{H}_\infty$  representa uma partícula na posição  $x$  com a moeda na direção  $j$ . O estado unitário genérico de um caminho quântico discreto na reta, no instante de tempo  $t$ , é definido por

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{j=-1}^1 \sum_{x=-\infty}^{\infty} A_{j;x}(t) |j\rangle|x\rangle, \quad (2.36)$$

com

$$\sum_{j=-1}^1 \sum_{x=-\infty}^{\infty} |A_{j;x}(t)|^2 = 1, \quad (2.37)$$

uma vez que os vetores de estado são tem norma um. A translação condicional do sistema pode ser descrita pelo operador unitário

$$S = \sum_{,x} |-1\rangle\langle -1| \otimes |x-1\rangle\langle x| + |0\rangle\langle 0| \otimes |x\rangle\langle x| + |1\rangle\langle 1| \otimes |x+1\rangle\langle x|, \quad (2.38)$$

onde vemos que se  $j = -1$  a partícula se move para a esquerda, se  $j = 0$  a partícula permanece na posição atual  $x$  e se  $j = 1$  ela vai para a direita, com o estado da moeda permanecendo inalterado. O operador moeda  $C$  é uma matriz de rotação unitária  $3 \times 3$ . Cada passo da evolução unitária é representado pelo operador  $U = S \circ (C \otimes I)$ . Vimos que o caminho de Hadamard em 1-D tem a peça fundamental para a compreensão do caminho quântico. Sua generalização para três possibilidades parece um caminho natural. A generalização da moeda de Hadamard com 3 possibilidades é a moeda de Fourier para  $d = 3$ . Assim como a moeda de Hadamard faz para o caso de uma base com dois estados, a moeda de Fourier também transforma qualquer um dos estados moeda em uma superposição balanceada de todos os estados da base. A moeda de Fourier para o caso da moeda

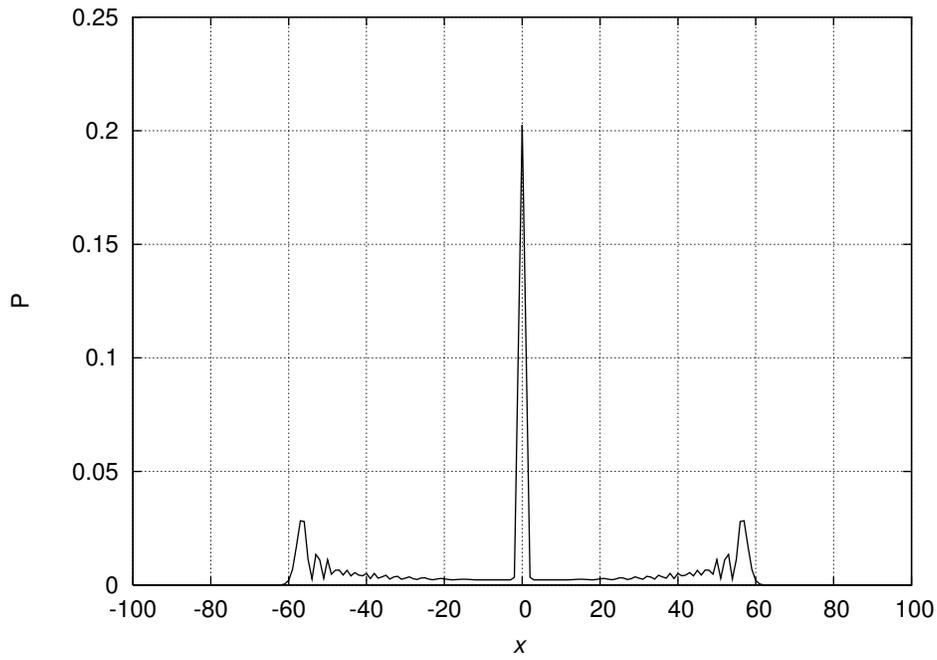


Figura 2.8: Distribuição de probabilidade do caso 1-D com 3 estados após 100 passos, moeda de Grover e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1\rangle + i|1\rangle) \otimes |0\rangle$ .

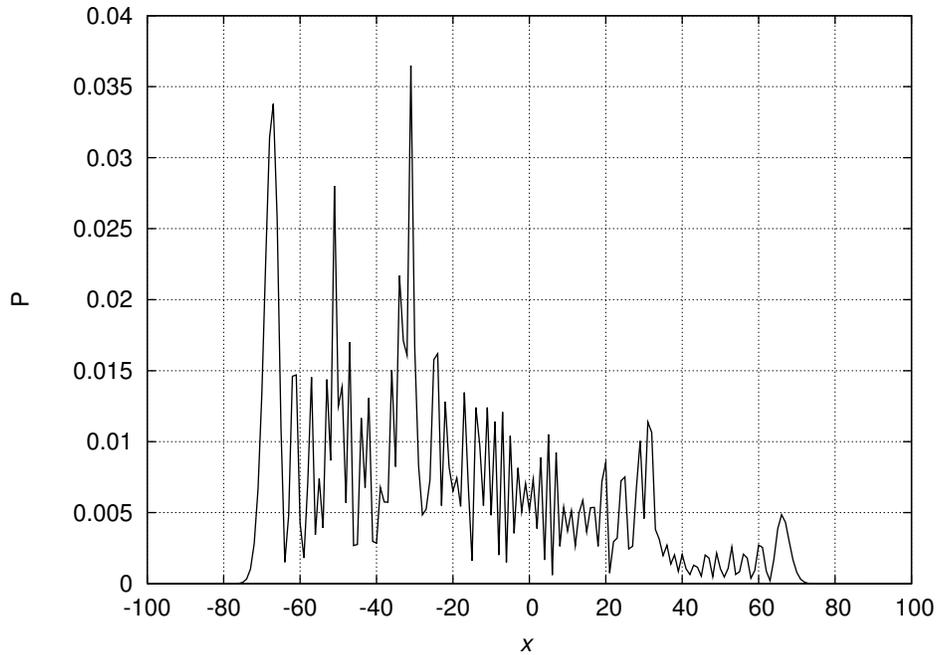


Figura 2.9: Distribuição de probabilidade do caso 1-D com 3 estados após 100 passos, moeda de Fourier e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|-1\rangle + |0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle$ .

com três possibilidades é dada por

$$F_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & e^{i\omega} & e^{-i\omega} \\ 1 & e^{-i\omega} & e^{i\omega} \end{pmatrix}, \quad (2.39)$$

onde  $e^{i\omega} = -\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2}$  e  $e^{-i\omega} = -\frac{1}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2}$  são as raízes cúbicas complexas da unidade. Outra moeda também usada é a de Grover para  $d = 3$ . Esta, no entanto, é uma moeda viciada, uma vez que os estados após sua aplicação deixam de ser equiprováveis. A moeda de Grover para o caso da moeda com três possibilidades é dada por

$$G_3 = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.40)$$

Através de simulação numérica analisamos o comportamento das duas moedas com três possibilidades mais usadas, a saber Fourier e Grover, usando duas condições iniciais distintas com superposição na componente da moeda e sempre partindo da origem: uma é a condição inicial que no caso 1-D com moeda de Hadamard leva a uma distribuição simétrica

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1\rangle + i|1\rangle) \otimes |0\rangle \quad (2.41)$$

e a outra condição inicial é uma superposição balanceada das três possibilidades

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|-1\rangle + |0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle. \quad (2.42)$$

Podemos observar que as duas moedas apresentam comportamento bem distinto: enquanto a moeda de Grover apresenta simetria e a forte localização na origem para ambas as condições iniciais, a moeda de Fourier apresenta uma grande assimetria e baixa probabilidade de se encontrar o caminhante na origem. Na Figura

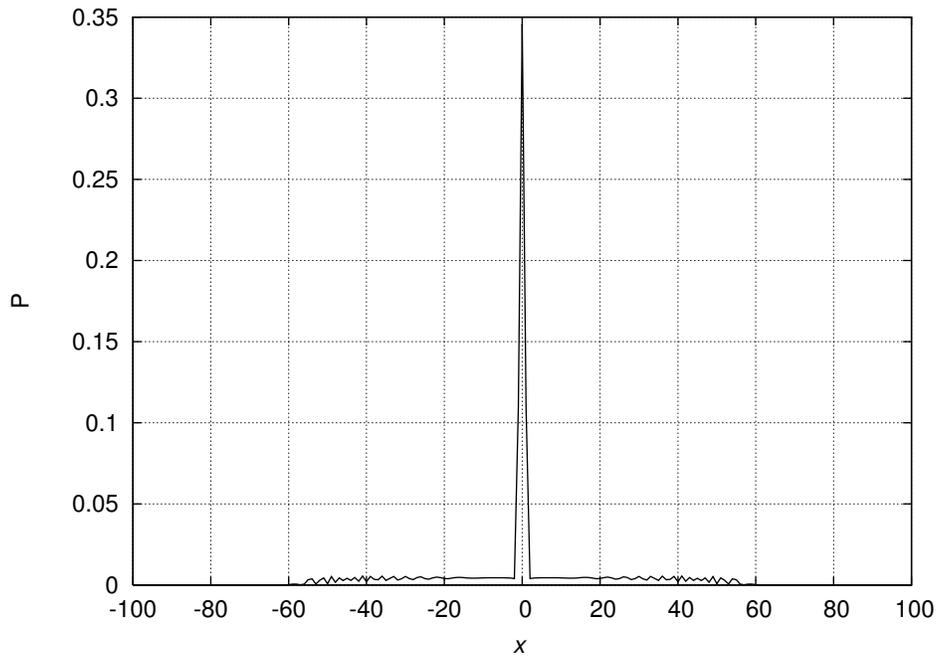


Figura 2.10: Distribuição de probabilidade do caso 1-D com 3 estados após 100 passos, moeda de Grover e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|-1\rangle + |0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle$ .

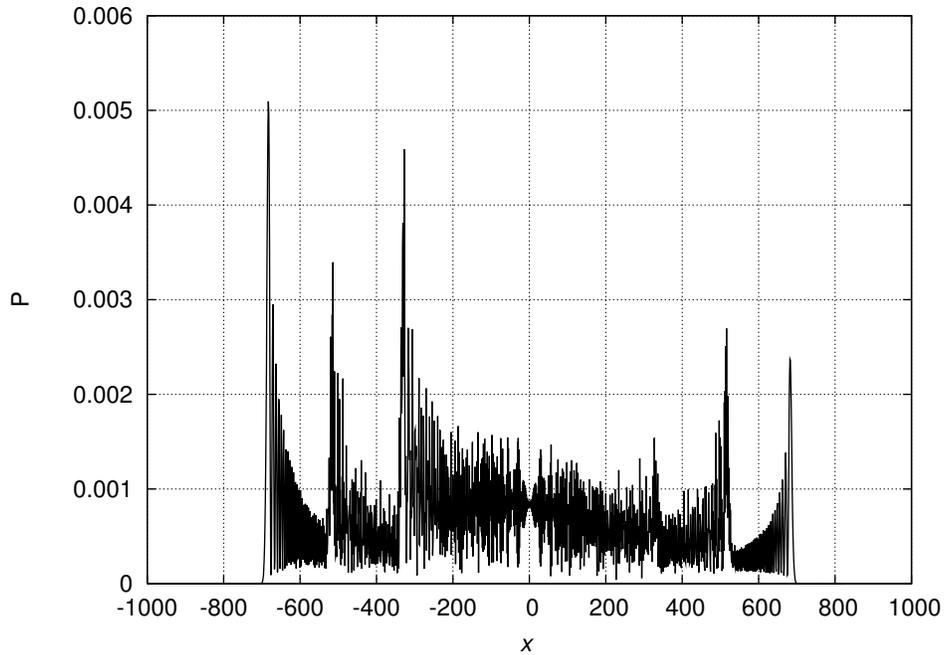


Figura 2.11: Distribuição de probabilidade do caso 1-D com 3 estados após 1000 passos, moeda de Fourier e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1\rangle + i|1\rangle) \otimes |0\rangle$ .

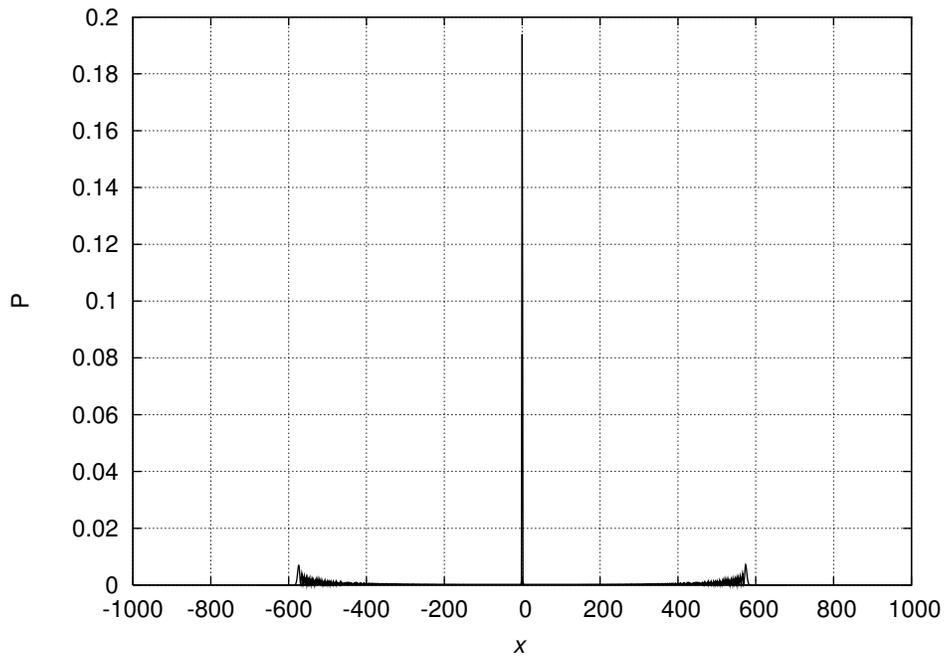


Figura 2.12: Distribuição de probabilidade do caso 1-D com 3 estados após 1000 passos, moeda de Grover e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1\rangle + i|1\rangle) \otimes |0\rangle$ .

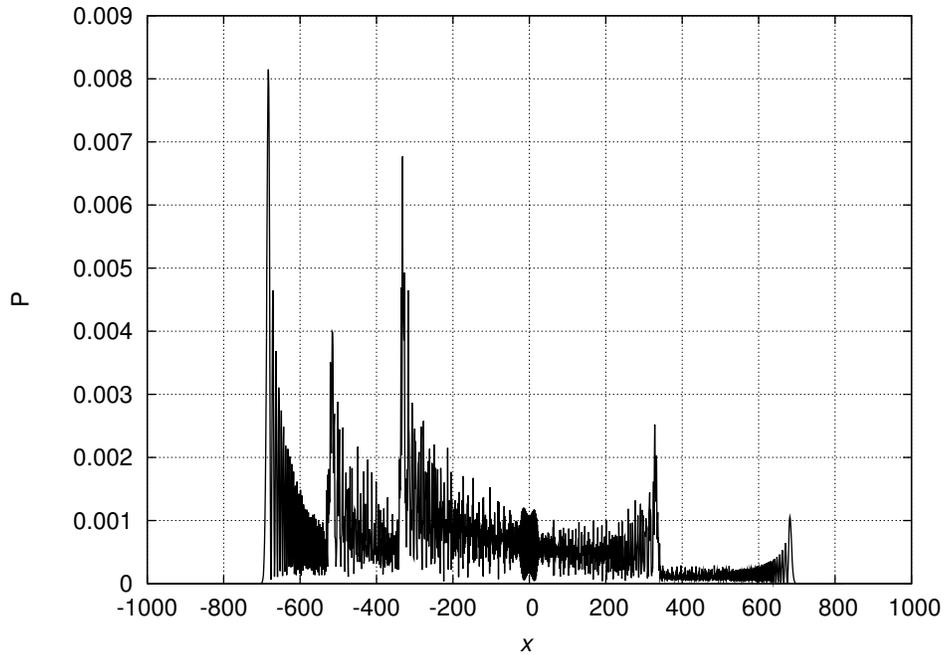


Figura 2.13: Distribuição de probabilidade do caso 1-D com 3 estados após 1000 passos, moeda de Fourier e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|-1\rangle + |0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle$ .

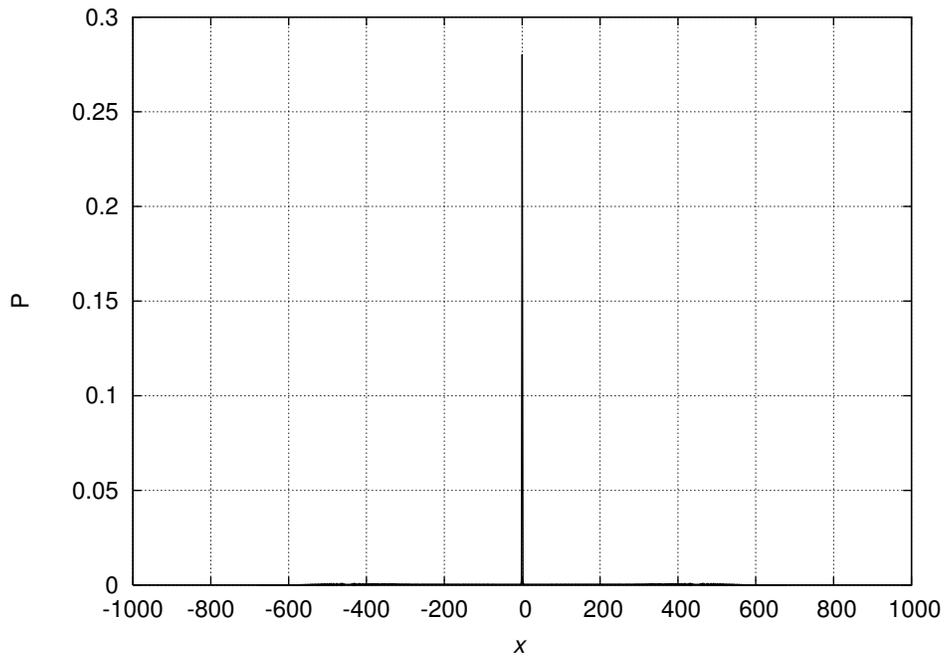


Figura 2.14: Distribuição de probabilidade do caso 1-D com 3 estados após 1000 passos, moeda de Grover e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|-1\rangle + |0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle$ .

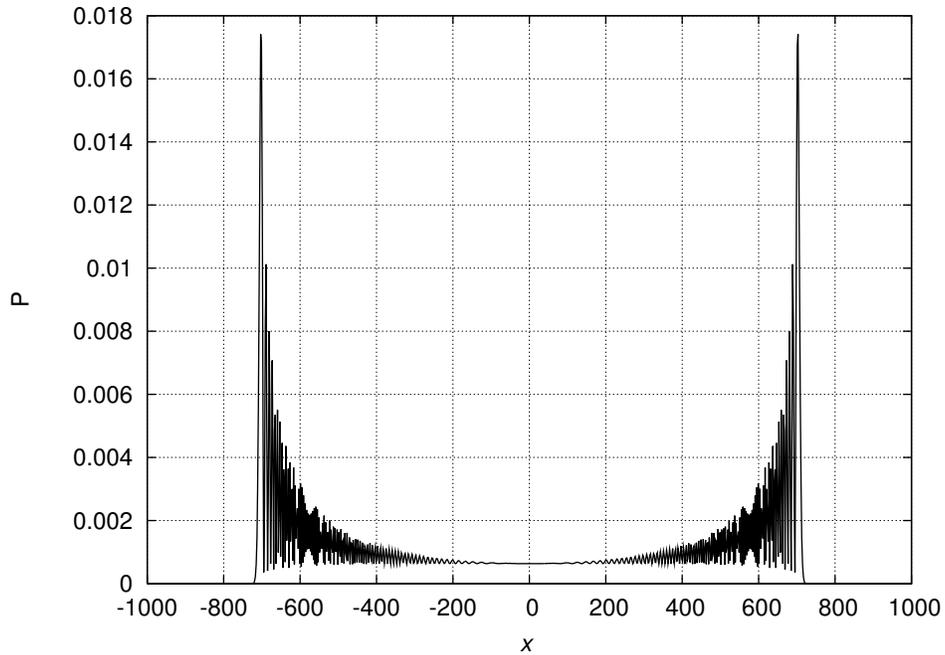


Figura 2.15: Distribuição de probabilidade do caso 1-D após 1000 passos, moeda de Hadamard e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1\rangle + i|1\rangle) \otimes |0\rangle$ .

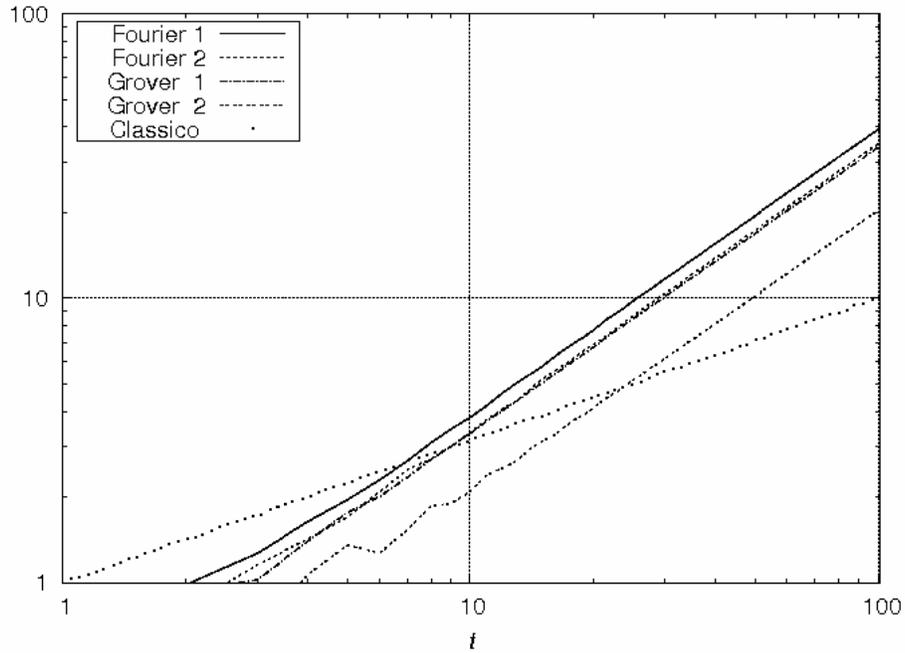


Figura 2.16: Desvio padrão em função do número de passos, escala log-log, para o caminho quântico 1-D com 3 possibilidades usando as moedas de Fourier e Grover com os estados iniciais,  $1 = |\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1\rangle + i|1\rangle) \otimes |0\rangle$  e  $2 = |\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|-1\rangle + |0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle$ , versus o desvio do caminho clássico.

2.7 temos a distribuição de probabilidade para a moeda de Fourier com a condição inicial dada pela equação (2.41) e na Figura 2.9 com a condição inicial (2.42) após 100 passos. A distribuição nesses dois casos é totalmente assimétrica. Vemos que a adição de uma componente extra quebra a simetria da distribuição, e faz com que a propriedade de localização na origem não seja mais verificada. Quando usamos a moeda de Grover na Figura 2.8 com estado inicial (2.41) e na Figura 2.10 com condição inicial (2.42) observamos um comportamento altamente simétrico e a propriedade de localização na origem em sua plenitude com  $P(0) \approx 0.2$  e  $P(0) \approx 0.35$  respectivamente. Embora essas duas características sejam semelhantes, observamos que na Figura 2.8 a distribuição apresenta três picos, dois nas extremidades e um na origem, sendo este cerca de 5 vezes maior que aqueles. Contudo, a Figura 2.10 apresenta praticamente uma distribuição uniforme em toda a reta com um único máximo na origem. O fato de que a probabilidade de se encontrar a partícula na origem é muito maior nesse tipo de moeda do que no caso clássico,  $P(0) \approx 0.0795$ , e também maior que o caso quântico com moeda de duas possibilidades,  $P(0) \approx 0.0063$ , pode significar uma vantagem adicional em aplicações que exijam localização como, por exemplo, nos algoritmos de busca de soluções exatas e aproximadas Andraca et al. (2004).

A fim de observarmos o comportamento desse sistema para tempos grandes e compararmos com o resultado analítico assintótico evoluímos o caminho até 1000 passos. Nas Figuras 2.11 e 2.13 temos o comportamento para a moeda de Fourier. Para as duas condições iniciais estudadas o comportamento é similar ao já apresentado para 100 passos, com uma distribuição de probabilidade assimétrica e bastante complexa que caracteriza as distribuições para o caminho quântico. Nas Figuras 2.12 e 2.14 usando a moeda de Grover para as mesmas condições iniciais temos os gráficos das distribuições de probabilidades, observamos que para tempos maiores o comportamento também apresenta as mesmas características que já se observa em 100 passos, apesar de termos uma suavização da distribuição com os três picos que se torna mais uniforme e portanto mais parecida com a outra dis-

tribuição. Também comparamos com a distribuição de Hadamard com a moeda de duas possibilidades, na Figura 2.15, e observamos que a maior característica da inclusão de mais uma possibilidade na moeda para o caminho quântico é o aparecimento da forte localização na origem. Há quase uma inversão nas distribuições de probabilidade: enquanto com a moeda de duas possibilidades temos os picos nas extremidades com  $P(0) \approx 0.0175$  no caso da moeda de três lados temos o único pico na origem com  $P(0) \geq 0.2$  para a moeda de Grover. Este comportamento para  $t = 1000$  está plenamente de acordo como resultado analítico obtido em Inui et al. (2005) que assegura a forte localização na origem como sendo a principal característica desse tipo de evolução com moeda de três possibilidades.

Na Figura 2.16 apresentamos o gráfico em escala log-log para o desvio padrão para as duas moedas de Fourier e Grover usando as duas condições iniciais distintas (2.41) e (2.42), e ainda comparamos com o desvio padrão clássico. A principal característica, para essas duas condições iniciais estudadas, é uma certa diminuição do desvio padrão. Fato que parece coerente uma vez que o grau de liberdade extra permite à partícula também ficar na posição em que ela se encontra diminuindo assim o seu espalhamento pela reta. para a condição inicial utilizada, a moeda de Fourier apresenta o maior desvio desvio padrão . Um outro fato diferenciador é que no caso do caminho de Hadamard o caso clássico e quântico coincidem até o terceiro passo entretanto no caminho com a moeda de três possibilidades não há mais essa coincidência e as evoluções são já começam bem distintas e no decorrer do caminho até chegam a coincidir em um dado ponto, mas de forma muito diferente do caso com duas possibilidades.

Podemos concluir que para as moedas e condições iniciais analisadas os caminhos quânticos com três possibilidades apresentam comportamento muito similar ao comportamento do caminhante de Hadamard com duas possibilidades. O comportamento da distribuição de probabilidade e do desvio padrão é altamente dependente da moeda e da condição inicial. A única diferença marcante que não é observada no caminho de Hadamard é que a partícula partindo da origem se

divide em três partes em superposição. Sendo que duas partes seguem para as extremidades da reta enquanto que a outra tende a permanecer na origem com grande probabilidade.

## 2.4 Descoerência em Caminhos Quânticos

Todo esforço para se implementar experimentalmente o caminho quântico sempre esbarrará no obstáculo da descoerência, devido aos ruídos ou às imperfeições do sistema físico que o contém, fazendo deste problema um tópico fundamental no estudo dos caminhos quânticos. Portanto o estudo da descoerência em caminho quânticos tem sido considerado por diversos autores e muitos resultados analíticos e numéricos tem sido estabelecidos. Em geral pode-se dizer que o caminhante quântico é bem sensível à descoerência e uma vez que ela se instala no processo fatalmente, mesmo que após muitos passos, o sistema deixará de ter o comportamento balístico da variância e terá o comportamento clássico difusivo.

A diferença crucial entre o caminho quântico e o caminho clássico é a coerência quântica presente somente no primeiro. Então uma transição do caso quântico para o caso clássico tem que de alguma forma acabar com essas coerências. Foi visto na secção 2.1 que se efetuarmos medidas intermediárias, da moeda ou da posição, entre cada passo o caminho se torna clássico.

Podemos sofisticar um pouco e imaginarmos um meio contínuo de intercalar entre não medir e ter o caso quântico e medir e ter o caso clássico e estudar a transição ao longo desse caminho. Podemos só medir alguma grandeza, posição ou moeda, com uma certa probabilidade  $p_{med}$  a cada passo, correspondendo ao caso puramente quântico quando  $p_{med} = 0$  e o caso clássico quando  $p_{med} = 1$ . Baseados nessa idéia Kendon e Tregenna Kendon e Tregenna (2003, 2002a,b) analisaram numericamente e analiticamente a transição do caso quântico para o clássico para o caminho na reta, no ciclo e no hipercubo com descoerência na moeda na posição ou em ambos. E analiticamente em Brun et al. (2003b,a); Konno (2005a); Romanelli et al. (2004), temos o estudo para o caminho na reta com descoerência no espaço moeda.

O principal resultado desses trabalhos é que o comportamento clássico se instala à medida que aumentamos a descoerência. Ao se olhar para o comportamento da variância do caminho temos um excelente indicador pois para o caso puramente quântico temos  $\sigma^2 \sim T^2$ , enquanto que no caso clássico temos  $\sigma^2 = T$ . Para o caso em que temos descoerência na moeda a variância do caminho foi calculada em função da probabilidade de medida  $p_{med}$  e foi encontrado que para valores bem pequenos de  $p$ ,  $p_{med} \simeq 0$ , e  $T \gg 1/p_{med}$  a variância já se torna linear. Para o caso de descoerência na moeda e ou na posição o resultado se confirma para  $p_{med} \gg \frac{1}{T}$ , onde  $T$  é o número de passos do caminho. O comportamento do sistema já se torna essencialmente clássico. O comportamento da variância vai mudando gradualmente de crescimento quadrático para o crescimento linear.

Apesar desses resultados, Kendon e Tregenna Kendon e Tregenna (2003) mostraram que um pouco de descoerência pode melhorar tanto a convergência do caminho para uma distribuição uniforme na reta bem como ter um *mixing time* mais rápido no caso do ciclo e até a ter um tempo de alcance<sup>1</sup> mais confiável para o caminho quântico no hipercubo. Para pequenos valores de  $p_{med} \ll \frac{1}{T}$ , sob certas condições, o caminho ainda pode ser considerado quântico e assim obtermos tais vantagens. Este é um resultado curioso pois torna o caminho quântico descorente melhor que o coerente.

Brun *et al.* Brun et al. (2003b,d) analisaram ainda um outro tipo de transição do caminho quântico para o clássico, escolhendo um novo espaço de Hilbert para a rotação da moeda a cada iteração. Isto faz com que as coerências na moeda desapareçam pois os estados da moeda não interferem entre si e portanto o seu comportamento torna-se clássico. Uma forma de ir do caso quântico para o clássico seria usar uma moeda diferente somente algumas vezes; um caminho que alterne entre duas moedas distintas ainda pode ser visto como quântico, já um caminho com três moedas diferentes se torna um pouco mais clássico, dessa forma um caminho em que o número de moedas distintas seja próximo do número de

---

<sup>1</sup> Hitting Time

passos seria clássico. Usando esse critério de troca de moedas o comportamento da variância se torna mais robusto pois ela permanece quadrática para muitas moedas distintas, tornando-se linear apenas no limite em que usa-se uma moeda diferente para cada passo.

Na tentativa de obter-se o caso clássico a partir do caso quântico Mackay et al. (2002) introduziram um fase extra na moeda, escolhida aleatoriamente no intervalo  $[0, 2\pi)$  a cada passo do caminho e observaram que a distribuição resultante tem o comportamento da variância comparável com o do caso clássico, mas que o caminho ainda exibe fortes efeitos de interferência. Entretanto, tomando a média sobre muitas tentativas a distribuição converge rapidamente para a distribuição clássica binomial. Nesta mesma linha Ribeiro *et al.* Ribeiro et al. (2004) experimentaram usar diferentes tipos de moedas aplicadas ao longo de três tipos de seqüências, periódicas, quase periódicas e aleatórias. Eles observaram que para seqüências periódicas usando duas moedas distintas o comportamento do caminho mesmo para tempos longos ainda é balístico embora apresente uma estrutura muito mais complexa. Para seqüências quase periódicas o comportamento mostrou ser sub-balístico, ou seja, intermediário entre o caso quântico e o caso clássico atingido quando as moedas eram escolhidas aleatoriamente. De forma analítica, N.Konno Konno (2005b) provou que essa transição do caminho quântico para o caminho clássico, através da introdução de flutuações aleatórias no operador de evolução Ribeiro et al. (2004); Shapira et al. do sistema, sempre ocorre.

Há ainda muito o que se compreender sobre descoerência em caminhos quânticos. Na próxima seção trataremos de um tipo particular de descoerência a chamada descoerência unitária devida a ligações interrompidas.

#### **2.4.1 Ligações Interrompidas**

Como vimos na seção anterior o problema da descoerência em caminhos quânticos vem sendo estudado de muitas formas e por muitos autores. Nesta seção trataremos de um tipo de descoerência um pouco diferente. A chamada

descoerência unitária por ligações interrompidas que consiste basicamente em um ruído unitário produzido pela quebra de maneira aleatória de uma das ligações que conecta as posições vizinhas em uma rede. No caso da partícula que se move em uma reta, a cada passo ela pode se mover para uma posição à sua direita e também pode se mover para uma posição a sua esquerda. Agora imagine que num dado instante, por exemplo, a ligação que leva essa partícula para a direita seja interrompida. Neste passo, então, a partícula não poderá se mover para a direita. Logo ela só irá avançar para a esquerda e a fim de que o processo se torne unitário a parte que ia neste instante para a direita permanece na posição atual. Como a evolução temporal de um caminho quântico consiste em se iterar várias vezes o processo rotação da moeda seguido da translação sem efetuarmos medidas intermediárias, é natural imaginar que esse processo de se romper as ligações seja repetido por muitas vezes e que a cada passo possa ter qualquer uma das ligações rompidas ou até mesmo as duas em um mesmo instante de maneira aleatória. Este tipo de descoerência pode ser muito relevante em realizações experimentais de computadores quânticos baseados em cadeias de spins  $1/2$  de Ising como abordado em Berman et al. (2003). Este modelo de descoerência foi inicialmente proposto e analisado por Romanelli *et al.* Romanelli et al. (2005).

Vamos agora analisar a evolução do caminho quântico no caso em que, no instante  $t$ , a posição  $x$  da reta pode ter uma ou ambas das suas ligações com as posições vizinhas rompidas.

Definimos então a função

$$\mathcal{L}(j; x) = \begin{cases} (-1)^j, & \text{se a ligação para a posição } x + (-1)^j \text{ está fechada,} \\ 0, & \text{se a ligação para a posição } x + (-1)^j \text{ está aberta,} \end{cases} \quad (2.43)$$

onde  $j$  pode ser 0, para a ligação à direita, ou 1, para a ligação à esquerda da posição  $x$ . Na Figura 2.17 apresentamos todos os quatro casos possíveis. Pela simetria da reta temos que se  $\mathcal{L}(j; x) = 0$  então  $\mathcal{L}(1 - j; x + (-1)^j) = 0$ , ou seja, se estamos na posição  $x$  e sua ligação para a posição a direita está quebrada

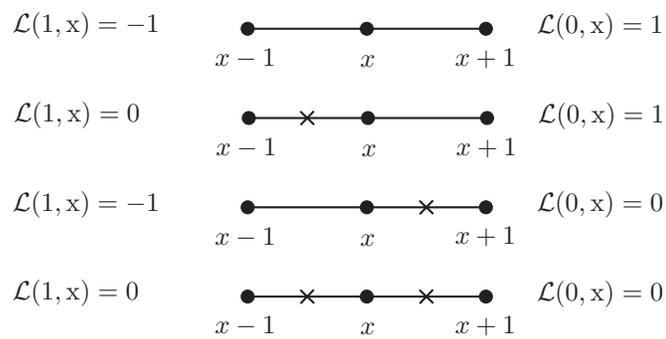


Figura 2.17: Todos os casos possíveis de ligações interrompidas para uma dada posição  $x$  e os valores correspondentes da ligação  $\mathcal{L}(j, x)$ . No primeiro caso não há ligações rompidas, no segundo a ligação para a direita foi rompida, no terceiro a ligação para a esquerda foi quebrada e por último, o caso em que ambas as ligações estão quebradas.

então a ligação para a esquerda da posição  $x + 1$  também está, uma vez que ambas representam a mesma ligação. Chamamos essa fato de continuidade das ligações. O operador translação  $S$  também precisa ser modificado para incluir a possível quebra das ligações sendo então dado por:

$$S = \sum_{j,k=0}^1 \sum_{x=-\infty}^{\infty} [(1 - \delta_{j,k}) - (-1)^k \mathcal{L}(1 - j; x + (-1)^j \delta_{j,k})] |j\rangle \langle k| \otimes |x + (-1)^j \delta_{j,k}\rangle \langle x| \quad (2.44)$$

Aplicando o operador evolução  $U = S \circ (C \otimes I)$  com o operador  $S$  acima obtemos a equação de evolução para o caso em que as ligações podem estar rompidas,

$$A_{1-j;x}(t+1) = \sum_{k=0}^1 C_{j+\mathcal{L}(j;x),k} A_{k;x+\mathcal{L}(j;x)}(t). \quad (2.45)$$

Não é difícil observar que se não temos ligações interrompidas a Equação (2.45) se reduz à Equação (2.21). Essa última equação é justificada pelo seguinte argumento: Suponha que a ligação para a direita da posição  $x$  esteja rompida, então a componente para a direção  $j = 1$  na equação de evolução (2.21) deve ser alterada. O argumento é similar para a outra direção. O fluxo de probabilidade da posição  $x$  para a posição  $x + 1$  deve ser desviado para a posição  $x$  uma vez que não há ligação com a direita. Para calcularmos esse fluxo nós focamos nossas atenções para a posição  $x + 1$ . Calculamos  $A_{0;x+1}(t+1)$ , que é a parte do fluxo que viria para a posição  $x + 1$  oriundo da posição  $x$ , em função de  $A_{j;x}(t)$  assumindo que as ligações não estão rompidas. Este resultado deve ser atribuído a  $A_{1;x}(t+1)$ , que é a componente da equação de evolução que precisa ser modificada devido ao rompimento da ligação. A fórmula para  $A_{0;x}(t+1)$  não se altera, uma vez que a ligação para a esquerda não foi interrompida. Portanto,  $x$  (em vez de  $x + 1$ ) deve aparecer em ambos os lados da equação para  $A_{1;x}(t+1)$ . Note também que existe uma mudança na linha do operador moeda pois  $A_{1;x}(t+1)$  usa a linha  $j = 0$  de  $C_{jk}$ . O argumento não se aplica para  $A_{1;x+1}(t+1)$  uma vez que ele recebe o fluxo da posição  $x + 2$ . O argumento acima mostra que os índices  $j$  e  $x - (-1)^j$  no lado direito da Equação (2.21) devem ser modificados e então temos a Equação (2.45).

Para obtermos a equação para o operador  $U^\dagger$  procedemos de maneira análoga ao caso sem ligações interrompidas obtendo as expressões para o operador moeda genérico  $C^\dagger$  e o operador

$$S^\dagger = \sum_{j,k=0}^1 \sum_{x=-\infty}^{\infty} [(1 - \delta_{j,k}) - (-1)^k \mathcal{L}(1 - j; x + (-1)^j \delta_{j,k})] |k\rangle \langle j| \otimes |x\rangle \langle x + (-1)^j \delta_{j,k}|. \quad (2.46)$$

e posteriormente aplicando o operador  $U^\dagger = (C^\dagger \otimes I)S^\dagger$  no estado geral para um caminhante na reta Equação (2.15). A expressão para a evolução “dagger” é dada por

$$\begin{aligned} |\psi(t-1)\rangle &= U^\dagger |\psi(t)\rangle \\ &= \sum_{j=0}^1 \sum_{x=-\infty}^{\infty} A_{j;x}(t-1) |j\rangle |x\rangle \\ &= \sum_{j,k=0}^1 \sum_{x=-\infty}^{\infty} C_{kj}^* A_{1-k-\mathcal{L}(k;x); x+\mathcal{L}(k;x)}(t). \end{aligned} \quad (2.47)$$

Note na Equação (2.48), que a componente da moeda além de ser transposta conjugada não mais depende da função  $\mathcal{L}(j; x)$  deixando a influência das ligações toda na parte da componente  $A$ .

A evolução temporal de um caminho quântico com a possibilidade de termos as ligações para as posições vizinhas rompidas consiste em se aplicar uma seqüência de operadores unitários  $U_k$ , que dependem da topologia aleatória da rede no passo  $k$ , no estado inicial  $|\psi(0)\rangle$ , ou seja,

$$|\psi(t)\rangle = U_t U_{t-1} \dots U_1 |\psi(0)\rangle. \quad (2.48)$$

Esta evolução é unitária pois a cada passo o operador  $U$  é unitário seja qual for a forma da reta neste instante, pois a Equação (2.45) garante a preservação da norma de  $|\psi(t)\rangle$  na presença de um número arbitrário de ligações interrompidas. Somente neste sentido este modelo de descoerência é similar ao caso de ruído unitário apresentado em Shapira et al..

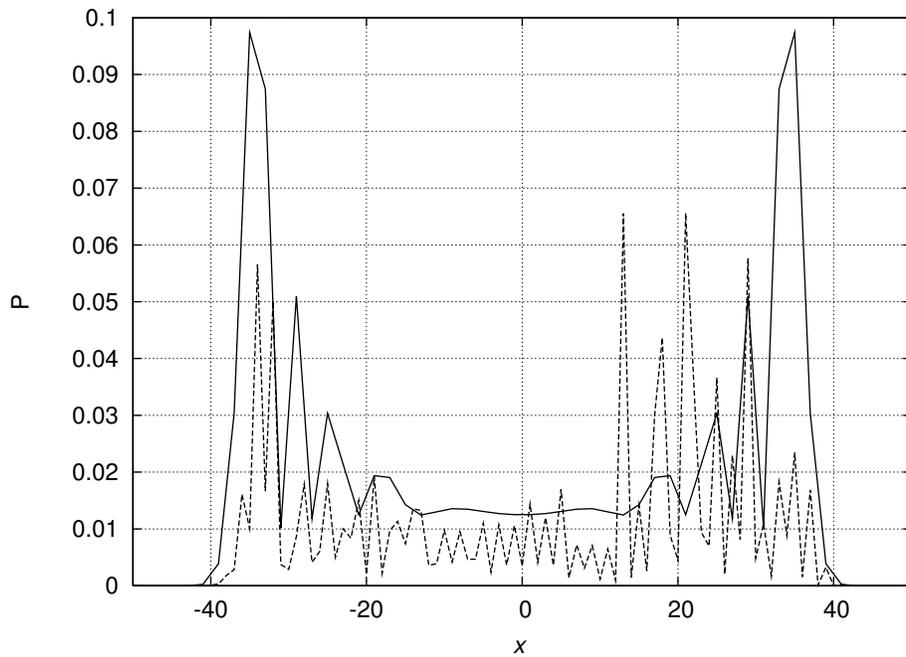


Figura 2.18: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 1-D após 50 passos, moeda de Hadamard e estado inicial[2.33] no caso em que  $p = 0.01$  linha tracejada e para  $p = 0$ .

Para a implementação do caminho quântico com ligações interrompidas usamos o seguinte algoritmo. Para cada iteração do caminho o estado de cada uma das ligações é definido através de um sorteio. Cada ligação têm probabilidade  $p$  de se romper em um dado passo, sendo  $p$  o único parâmetro desse modelo e o caminho de Hadamard é totalmente recuperado quando  $p = 0$ . Nesta análise há interesse no comportamento de duas grandezas físicas, a distribuição de probabilidade, (2.27), do caminhante pela reta em um dado instante de tempo e a evolução temporal da variância do caminho, (A.11). A condição inicial escolhida para a análise é aquela que leva a uma distribuição simétrica no caso do caminho de Hadamard coerente (2.33) e também apresenta a maior variância. Desta forma garantimos que estamos explorando o caminho da melhor maneira possível. Devido à presença de descoerência o comportamento das distribuições de probabilidade para  $p \neq 0$  é qualitativamente diferente do caminho de Hadamard unitário. Nas Figuras 2.18, 2.19 e 2.20 apresentamos o comportamento da distribuição de probabilidade do caminho descoerente com  $p = 0.01$  versus o caminho de Hadamard para três instantes distintos de tempo  $t = 50$ ,  $t = 100$  e  $t = 1000$  respectivamente. Na primeira figura, os efeitos da presença de descoerência já começam a aparecer. À medida que deixamos o caminho evoluir por mais tempo os efeitos das quebras das ligações tornam-se cada vez mais evidentes e podemos perceber que a distribuição muda gradativamente da forma típica do caminho de Hadamard coerentes para uma outra característica do caminho clássico. Portanto no limite para tempos grandes as distribuições de probabilidade para  $p \neq 0$  aproximam-se da forma da distribuição Gaussiana. Para um número fixo de passos, a largura da Gaussiana diminui à medida que aumenta-se o valor de  $p$ . Para valores de  $p$  maiores que  $1/2$  com a alta frequência de ligações interrompidas limita o espalhamento da função de onda em uma certa região em torno da origem.

Podemos então associar um tempo característico  $t_c$  à ocorrência da transição do comportamento quântico do caminho para o comportamento clássico. Como o único parâmetro do modelo de ligações interrompidas é a probabilidade  $p$  de

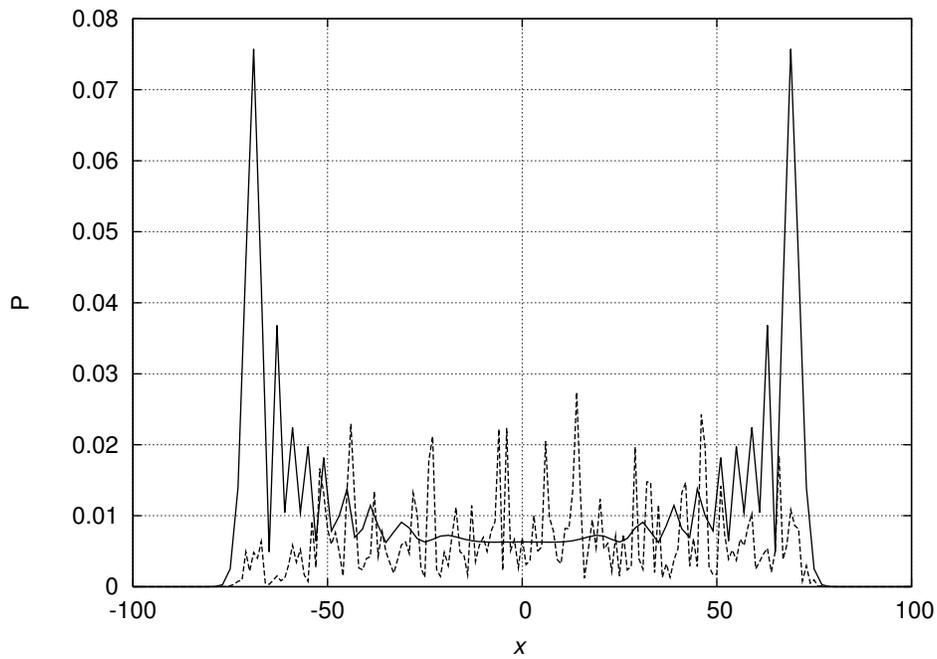


Figura 2.19: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 1-D após 100 passos, moeda de Hadamard e estado inicial[2.33] no caso em que  $p = 0.01$  linha tracejada e para  $p = 0$ .

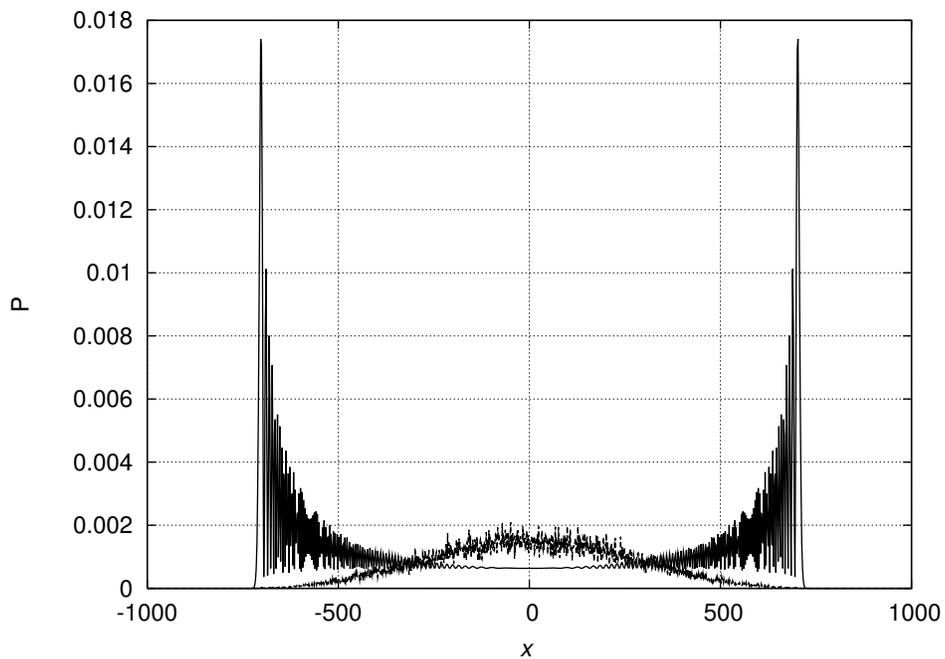


Figura 2.20: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 1-D após 1000 passos, moeda de Hadamard e estado inicial[2.33] no caso em que  $p = 0.01$ , linha tracejada, e para  $p = 0$ .

quebra das ligações temos que esse tempo característico  $t_c$  só pode depender de  $p$ . De fato, para poucos passos quando  $t \ll t_c$ , não há ocorrências perturbadoras para a função de onda, inicialmente localizada, e ela se espalha coerentemente em ambas as direções com velocidade  $1/\sqrt{2}$  abrangendo o intervalo  $\sqrt{2}t$  em  $t$  passos. O número médio de ligações interrompidas por passo aumenta como  $p\sqrt{2}t$ . Pois conforme o número de passos aumenta, a partícula vai se espalhando na reta e conseqüentemente aumentando as chances de termos mais ligações interrompidas. Quando esse número fica próximo de 1, as perturbações começam a se tornar relevantes. Este fato ocorre em um tempo de coerência

$$t_c = \frac{1}{p\sqrt{2}}. \quad (2.49)$$

Para tempos muito grandes, quando  $t \gg t_c$ , o perfil da distribuição de probabilidade assemelha-se ao da distribuição Gaussiana. Essa transição também é refletida na variância da distribuição como um todo. Para tempos curtos,  $t \ll t_c$ , a variância cresce da forma quadrática habitual, entretanto para  $p \neq 0$  a transição para o regime de crescimento linear da variância acontece. Na Figura 2.21 temos o comportamento da evolução temporal da variância  $\sigma^2$  do caminho quântico de Hadamard 1-D quando a probabilidade de quebra é  $p = 0.01$ , logo  $t_c \sim 70$ . Podemos observar ainda mais claramente que essa transição ocorre gradativamente no tempo no gráfico em escala log-log. O coeficiente de difusão para o caso de ligações interrompidas que a perturbação ocorre em cada passo é dado por

$$D_{bl} = \frac{1}{2} \lim_{t \rightarrow \infty} \partial \sigma^2 / \partial t. \quad (2.50)$$

Na Figura 2.22 temos o gráfico em escala log-log da variância para vários valores de  $p$  e também para o caso em que  $p = 0$  e para o caso clássico. A transição do comportamento quântico para clássico é bem evidente. A partir desses dados podemos estimar o coeficiente de difusão do caminho. Na Figura 2.23 apresentamos os resultados obtidos para o coeficiente de difusão para alguns valores de  $p$  e vemos

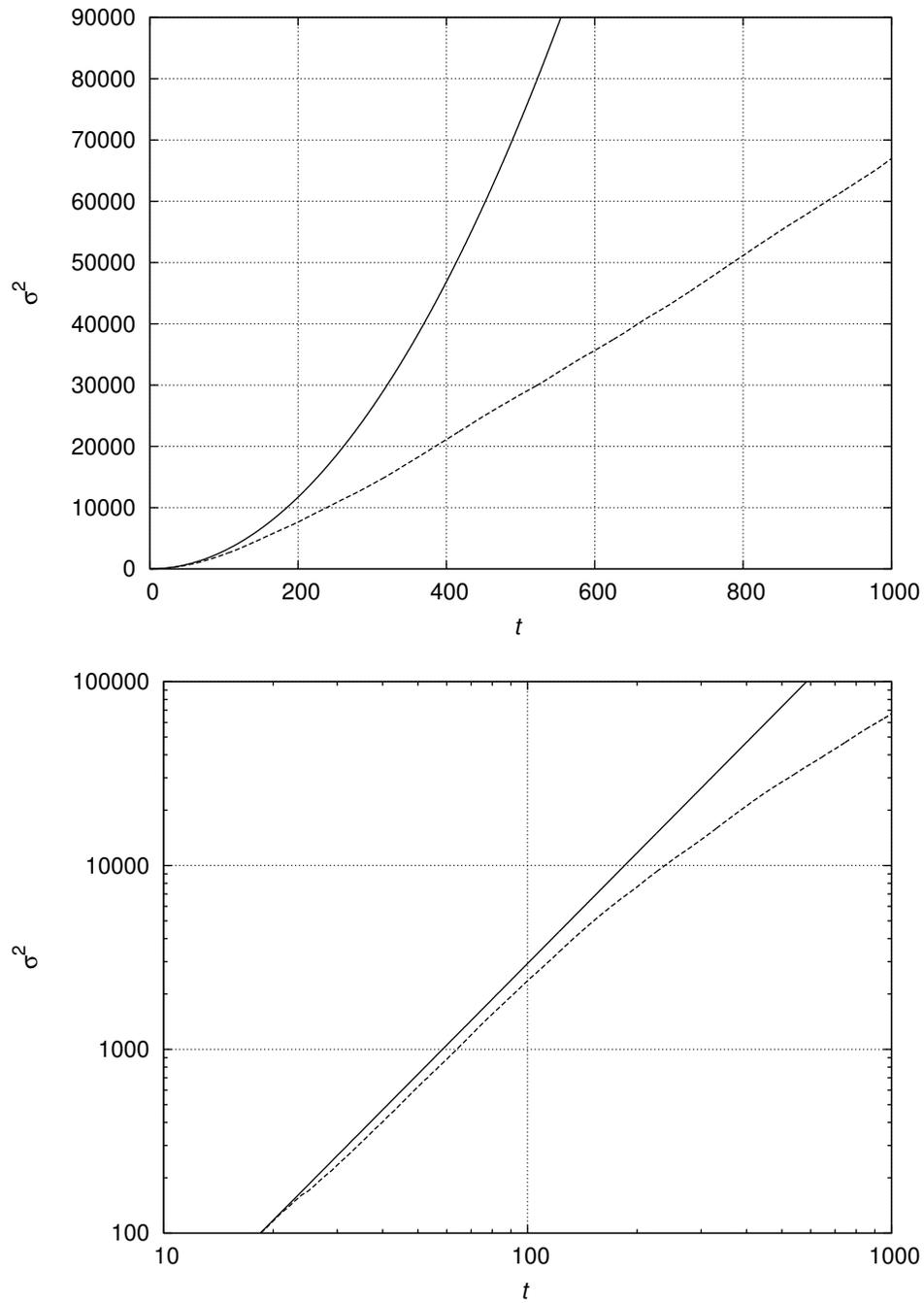


Figura 2.21: Evolução temporal da variância  $\sigma^2$  para  $p = 0.01$ , linha tracejada, versus o caso para  $p = 0$ . Na figura inferior a apresentamos a evolução em escala log-log.

que o coeficiente de difusão depende de  $p$  de maneira linear,

$$D_{bl} = K \frac{1-p}{p}. \quad (2.51)$$

Através de regressão linear obtemos que  $K \simeq 0.40$  então para  $p \simeq 0.44$  o coeficiente de difusão torna-se  $1/2$ , igual ao do caminho aleatório clássico. Para valores de  $p$  ainda maiores as ligações são quebradas com tanta frequência que o caminhante fica confinado em uma região em torno da origem, o que impede a difusão. Para valores pequenos de  $p$ , onde a frequência de quebra das ligações é baixa o coeficiente de difusão é maior que o caso clássico, indicando que as correlações quânticas persistem. Para caminhos quânticos com descoerência não unitária esse fato já havia sido observado por Brun *et al.* Brun et al. (2003c). Como a estimativa para o coeficiente  $K$  advém de resultados numéricos, onde o tempo é finito, ela não é exata devido as correlações residuais. E como consequência depende um pouco das condições iniciais.

O fato do coeficiente de difusão depender do inverso da probabilidade de quebra das ligações também aparece em outros tipo de caminhos quânticos descoerentes Brun et al. (2003c); Shapira et al.. Este tipo de dependência é atribuída à persistência das correlações quânticas. Para sabermos o verdadeiro papel das correlações quânticas no coeficiente de difusão e para investigarmos como acontece a difusão clássica em função de  $p$  consideremos a equação de evolução (2.45) no caminho de Hadamard, para cada um dos quatro casos possíveis em função da probabilidade dada pela Equação (2.27). Quando num dado passo  $t$  na posição  $x$  não há ligações rompidas temos

$$P_x(t+1) = \frac{1}{2}[P_{x+1}(t) + P_{x-1}(t)] + \beta_{x-1}(t) - \beta_{x+1}(t). \quad (2.52)$$

Já quando a ligação à esquerda da posição  $x$  foi rompida temos

$$P_x(t+1) = \frac{1}{2}[P_x(t) + P_{x-1}(t)] + \beta_x(t) + \beta_{x-1}(t). \quad (2.53)$$

Quando a a ligação à direita de  $x$  está rompida a equação torna-se

$$P_x(t+1) = \frac{1}{2}[P_{x+1}(t) + P_x(t)] - \beta_{x+1}(t) - \beta_x(t). \quad (2.54)$$

Quando a posição  $x$  está isolada, ou seja, com ambas as ligações rompidas temos

$$P_x(t+1) = P_x(t) \quad (2.55)$$

Nestas equações tomamos  $\beta_x \equiv \Re[A_{0;x}^*(t)A_{1;x}(t)]$ , onde  $\Re(z) = \frac{z+z^*}{2}$ . Os termos  $\beta_x(t)$  carregam todos os efeitos das coerências quânticas e são os responsáveis pelas diferenças essenciais entre os caminhos clássico e quântico. Se assumimos que as correlações quânticas podem ser desconsideradas a contribuição desses termos torna-se negligenciável e a descrição clássica domina a cena Romanelli et al. (2004, 2003). A cada passo e para cada posição só pode ocorrer uma entre as quatro equações (2.52), (2.53), (2.54), (2.55) acima, de acordo com a quantidade de ligações interrompidas por posição. Pode-se fazer uma descrição estatística desse modelo combinando todas as equações acima com os devidos pesos estatísticos. A probabilidade de que uma dada posição não tenha ligações quebradas, nem à esquerda nem à direita, é  $\wp_0 = (1-p)^2$ . Se temos somente uma ligação quebrada a probabilidade é  $\wp_1 = p(1-p)$ , e a probabilidade de que a posição estar isolada é  $\wp_2 = p^2$ . Essas probabilidades estão estatisticamente corretas uma vez que  $\wp_0 + 2\wp_1 + \wp_2 = 1$ . Desconsiderando os termos de interferência quântica, a equação de evolução para  $P_x(t)$  é

$$P_x(t+1) = pP_x(t) + \frac{1}{2}(1-p)[P_{x+1}(t) + P_{x-1}(t)]. \quad (2.56)$$

Esta equação descreve um processo genuinamente difusivo cujo coeficiente de difusão é

$$D_{cl} = \frac{1}{2}(1-p). \quad (2.57)$$

Esse coeficiente pode ser visto trocando as variáveis da Equação (2.56) por variáveis

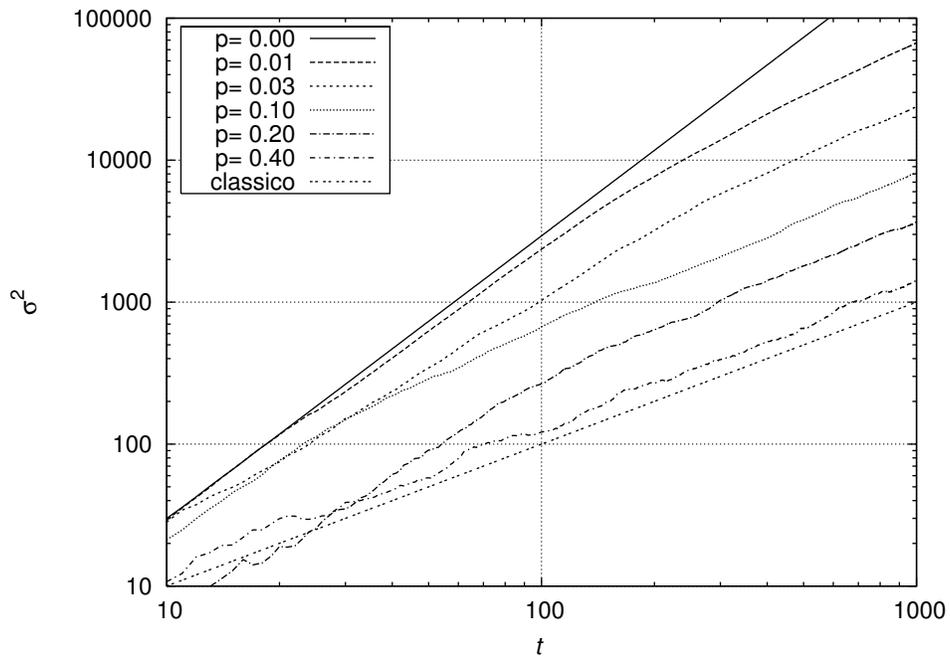


Figura 2.22: Evolução temporal da variância  $\sigma^2$  para o caminho de Hadamard simétrico com ligações interrompidas com as seguintes probabilidades  $p = 0.0$ ,  $p = 0.01$ ,  $p = 0.03$ ,  $p = 0.10$ ,  $p = 0.20$ ,  $p = 0.40$  e o caso clássico em escala log-log.

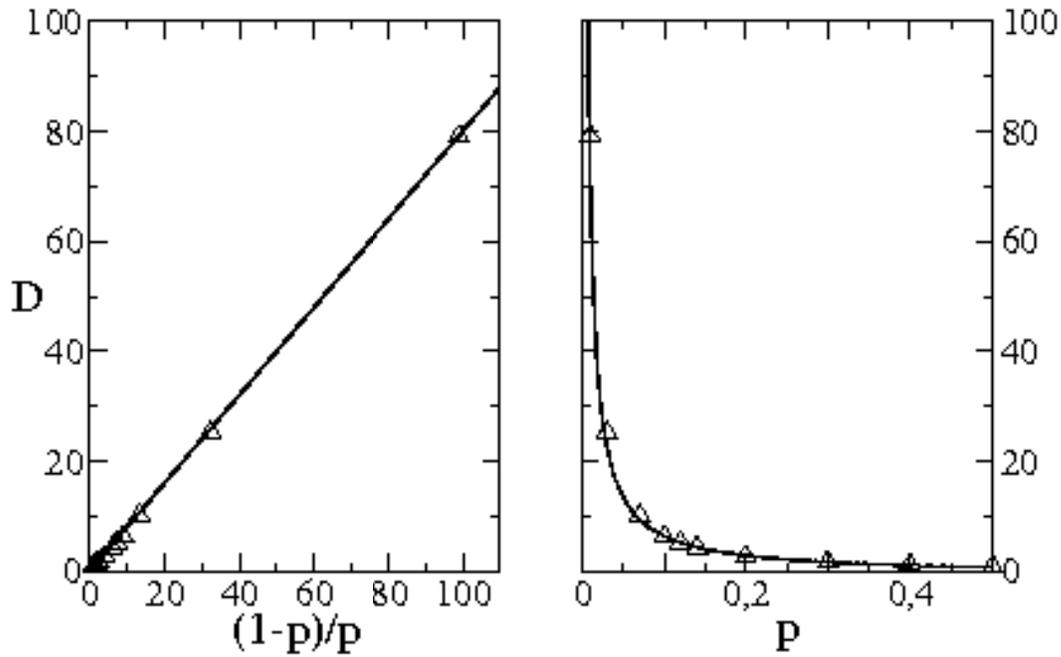


Figura 2.23: Coeficiente de difusão em função de  $\frac{1-p}{p}$ , figura à esquerda, e em função de  $p$ . Os triângulos são os dados da simulação e a linha corresponde a curva interpolada da Equação (2.51). Figura extraída de Romanelli et al. (2005).

de tempo e posição contínuas  $(t, x)$  assim obtemos a equação clássica de difusão,

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{1}{2}(1-p)\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}. \quad (2.58)$$

Assim vemos que a versão totalmente clássica do modelo com ligações interrompidas, que não apresenta correlações quânticas, apresenta um coeficiente de difusão  $1/2$  para  $p = 0$ . Ao se iniciar um caminho quântico com moeda de Hadamard vemos que o coeficiente de difusão vai diminuindo à medida que a frequência de rompimento das ligações aumenta. O coeficiente de difusão clássico não depende do fator  $\frac{(1-p)}{p}$  como ocorre no caso quântico com ligações interrompidas, devido às correlações quânticas persistentes. Logo o coeficiente de difusão quântico sempre é maior que o de seu análogo clássico,  $\frac{(1-p)}{p} \geq \frac{1}{2}(1-p)$ , devido à presença dessas correlações quânticas.

Em suma, quando se introduz descoerência no caminho quântico sob a forma da quebra aleatória das ligações entre as posições ocorre uma transição entre o regime coerente, em que a variância cresce quadraticamente com o tempo, para o regime difusivo em que a variância cresce linearmente com o tempo. Foi obtido numericamente que o caso coerente apresenta coeficiente de difusão  $\frac{(1-p)}{p}$  e os efeitos coerentes estão limitados a um número de passos  $t_c = \frac{1}{\sqrt{2}}$ , ambos dependendo do inverso da probabilidade de quebra das ligações  $p$ . E após esse tempo característico instala-se no sistema um regime difusivo e sua taxa de difusão é maior que a do caso clássico por um fator de  $1/p$  devido às correlações quânticas presentes entre eventos descoerentes consecutivos. Para pequenos valores de  $p$ , mesmo para tempos longos, a evolução do caminho quântico descoerente é ainda mais rápida que o seu análogo clássico. Em contrapartida, para altas taxas de descoerência o papel das coerências quânticas é minimizado e a difusão quântica aproxima-se da taxa de difusão clássica.

# Capítulo 3

## Caminhos Quânticos Bidimensionais

O objetivo deste capítulo é introduzir o formalismo para o tratamento do caminho quântico em duas dimensões, apresentar a generalização do formalismo de ligações interrompidas para o estudo de descoerência nesses caminhos bem como o estudo de outras topologias mais complexas usando esta técnica.

### 3.1 Caminho Quântico 2-D

O caminho quântico em 1-D vem sendo alvo de inúmeros estudos e inclusive sua solução exata assintótica aproximada é conhecida N.Konno (2002). Todavia as versões para dimensões maiores apresentam um comportamento bem mais complexo uma vez que existem pelo menos três tipos diferentes de moedas que geram resultados distintos independentemente da escolha das condições iniciais.

Expandindo o formalismo para o caminho quântico no plano, seja  $\mathcal{H}_\infty$  o espaço de Hilbert gerado pelas posições do plano acessíveis à partícula que se move ao longo das suas diagonais secundária e principal. Consideraremos uma rede quadrada, cujas posições são  $|x, y\rangle$ , com  $x, y \in \mathbf{Z}$  e  $x + y$  sendo um número par. O espaço moeda será  $\mathcal{H}_4$  constituído de dois q-bits  $\mathcal{H}_4 = \{|j, k\rangle, 0 \leq j, k \leq 1\}$  e  $\mathcal{H}_\infty = \{|x, y\rangle, -\infty \leq x, y \leq \infty\}$ . O estado genérico de um caminho quântico discreto 2-D é então definido por

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{j,k=0}^1 \sum_{x,y=-\infty}^{\infty} A_{j,k;x,y}(t) |j, k\rangle |x, y\rangle. \quad (3.1)$$

O operador evolução para um passo do caminho é  $U = S \circ (C \otimes I)$  onde

$$C = \sum_{j,k=0}^1 \sum_{j',k'=0}^1 C_{j,k;j',k'} |j, k\rangle \langle j', k'| \quad (3.2)$$

é o operador moeda,  $I$  é a matriz identidade que atua no espaço posição, e  $S$  é o operador translação, dado por

$$S = \sum_{j,k=0}^1 \sum_{x,y=-\infty}^{\infty} |j, k\rangle \langle j, k| \otimes |x + (-1)^j, y + (-1)^k\rangle \langle x, y|. \quad (3.3)$$

O caminhante se move ao longo de sua diagonal principal se o valor da moeda é  $|0, 0\rangle$  ou  $|1, 1\rangle$  e ao longo de sua diagonal secundária se a moeda é  $|0, 1\rangle$  ou  $|1, 0\rangle$  conforme podemos observar na Tabela 3.1. Aplicando o operador evolução  $U$  no

$ \phi\rangle =  j, k\rangle x, y\rangle$	$S \phi\rangle$
$ 0, 0\rangle x, y\rangle$	$ 0, 0\rangle x + 1, y + 1\rangle$
$ 0, 1\rangle x, y\rangle$	$ 0, 1\rangle x + 1, y - 1\rangle$
$ 1, 0\rangle x, y\rangle$	$ 1, 0\rangle x - 1, y + 1\rangle$
$ 1, 1\rangle x, y\rangle$	$ 1, 1\rangle x - 1, y - 1\rangle$

Tabela 3.1: Esquema da translação do caminho quântico 2-D para uma partícula na posição  $|x, y\rangle$  e com moeda  $|j, k\rangle$ .

estado geral (3.1) obtemos a expressão genérica para o caso 2-D

$$|\psi(t + 1)\rangle = \sum_{j,k=0}^1 \sum_{x,y=-\infty}^{\infty} A_{j,k;x,y}(t + 1) |j, k\rangle |x, y\rangle, \quad (3.4)$$

onde

$$A_{j,k;x,y}(t + 1) = \sum_{j',k'=0}^1 C_{j,k;j',k'} A_{j',k';x-(-1)^j,y-(-1)^k}(t). \quad (3.5)$$

A distribuição de probabilidade para uma dada posição  $x, y$  no plano em um dado instante de tempo  $t$  é então dada por

$$P_{x,y}(t) = \sum_{j,k=0}^1 |A_{j,k;x,y}(t)|^2. \quad (3.6)$$

A variância para uma distribuição de probabilidade é dada por

$$\sigma^2(t) = \sigma_x^2(t) + \sigma_y^2(t), \quad (3.7)$$

onde

$$\sigma_x^2(t) = M_{2,x}(t) - M_{1,x}^2(t), \quad (3.8)$$

$$M_{1,x}(t) = \sum_x x P_x(t) \quad e \quad M_{2,x}(t) = \sum_x x^2 P_x(t) \quad (3.9)$$

De maneira análoga ao caso unidimensional também obtivemos as expressões para a evolução  $U^\dagger$  para o caminho quântico no plano. Seja  $U^\dagger = (C^\dagger \otimes I) \circ S^\dagger$ , nesse caso

$$C^\dagger = \sum_{j,k=0}^1 \sum_{j',k'=0}^1 C_{j',k';j,k}^* |j',k'\rangle \langle j,k|, \quad (3.10)$$

e

$$S^\dagger = \sum_{j,k=0}^1 \sum_{x,y=-\infty}^{\infty} |j,k\rangle \langle j,k| \otimes |x,y\rangle \langle x+(-1)^j, y+(-1)^k|. \quad (3.11)$$

Logo, aplicando o operador  $U^\dagger$  em  $|\psi(t)\rangle$  tem-se

$$A_{j,k;x,y}(t-1) = \sum_{j',k'=0}^1 C_{j',k';j,k}^* A_{j',k';x+(-1)^{j'},y+(-1)^{k'}}(t). \quad (3.12)$$

O caminho quântico no plano foi inicialmente investigado numericamente por Mackay *et al.* Mackay et al. (2002). Eles sugeriram uma possível generalização para duas ou mais dimensões e concluíram que a escolha da moeda altera o fator que multiplica o desvio padrão, que é linear no tempo, e apresentaram algumas simetrias diferentes para diferentes moedas. Um pouco depois Tregenna *et al.* Tregenna et al. (2003) apresentaram um estudo mais sistemático dos efeitos das diferentes moedas não viciadas, combinados com os diferentes estados iniciais e observaram que desvio padrão depende tanto da moeda como também das condições iniciais escolhidas. Eles analisaram todas as moedas possíveis para o caminho no plano que são matrizes unitárias de dimensão  $4 \times 4$ . Considerando apenas moedas não viciadas cujas entradas na diagonal principal sejam  $1/2$  tem-se 640 matrizes unitá-

rias distintas, mas como ainda há um alto grau de redundância podemos agrupar os resultados que diferem entre si por rotação ou reflexão. Então das 640 moedas chega-se a apenas 10 tipos distintos. E as moedas de Hadamard, Grover e Fourier são os três tipos mais usados.

Uma generalização natural para o caminho quântico 2-D usando a moeda de Hadamard é escolher duas moedas de Hadamard, uma para atuar na direção vertical e outra para a direção horizontal. Observamos que este caminho simplesmente produz o padrão de comportamento do caminho de Hadamard em uma dimensão nas duas direções gerando uma distribuição de probabilidade simétrica como vemos na Figura 3.1, uma vez que a moeda de Hadamard não mistura as duas direções de maneira alguma. O desvio padrão é o mesmo para todas as escolhas dos estados iniciais que produzem uma distribuição simétrica, até mesmo aqueles maximamente emaranhados, e é somente  $\sqrt{2}$  vezes maior que o desvio padrão para a reta. Esse aumento é devido somente ao fato do tamanho do passo ter sido aumentado de  $\sqrt{2}$ . Na reta os passos são dados em uma só direção e têm comprimento unitário enquanto que na rede os passos são dados nas diagonais e tem comprimento  $\sqrt{2}$ . Na Figura 3.1 apresentamos a distribuição de probabilidade simétrica, 3-D e o gráfico de contornos, para a moeda de Hadamard ( $H_4 = H \otimes H$ )

$$H_4 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.13)$$

após 100 passos, tendo como estado inicial

$$|\psi_0(0)\rangle = \frac{1}{2}(|00\rangle + i|10\rangle + i|01\rangle - |11\rangle)|0,0\rangle. \quad (3.14)$$

Comportamentos mais interessantes surgem quando consideramos moedas

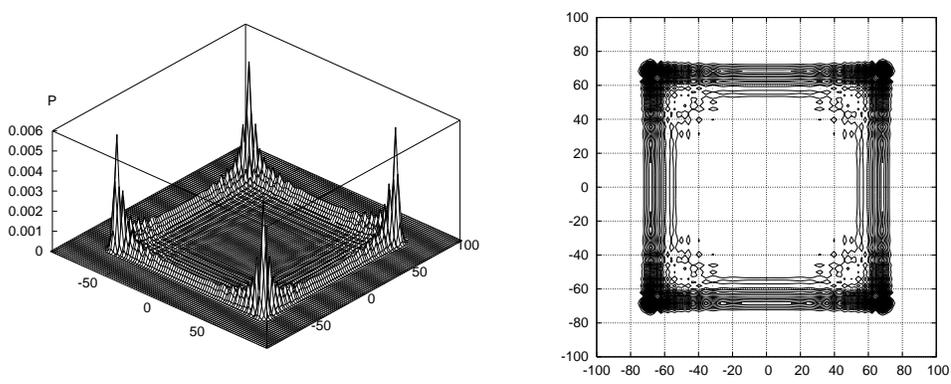


Figura 3.1: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Hadamard após 100 iterações com estado inicial (3.14).

não separáveis e que emaranham os q-bits, como as de Grover e Fourier. Além do gráfico da distribuição de probabilidade também apresentamos os gráficos de contornos que revelam detalhes que dificilmente seriam percebidos em outros gráficos. Na Figura 3.3 temos os gráficos da distribuição de probabilidade para a moeda de Fourier

$$F_4 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & i & -1 & -i \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -i & -1 & i \end{pmatrix}, \quad (3.15)$$

com a condição inicial simétrica (3.14) e vemos que isto não garante que a distribuição apresente simetria. Já na Figura 3.2 apresentamos os gráficos da distribuição de probabilidade para a moeda de Fourier usando o estado inicial

$$|\psi_1(0)\rangle = \frac{1}{2} \left( |00\rangle + \frac{1-i}{\sqrt{2}} |01\rangle + |10\rangle - \frac{1-i}{\sqrt{2}} |11\rangle \right) |0,0\rangle. \quad (3.16)$$

que garante o maior desvio padrão. Observamos que essa distribuição apresenta simetria no seguinte sentido: se tomarmos uma linha que passe pela origem, a distribuição é a mesma em ambas as direções. Isto é equivalente a dizer que a figura é invariante sob uma rotação de  $\pi$ .

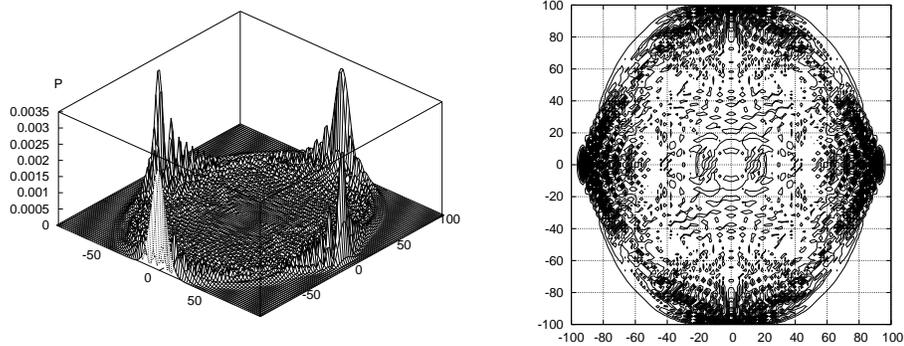


Figura 3.2: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Fourier após 100 iterações com estado inicial (3.16).

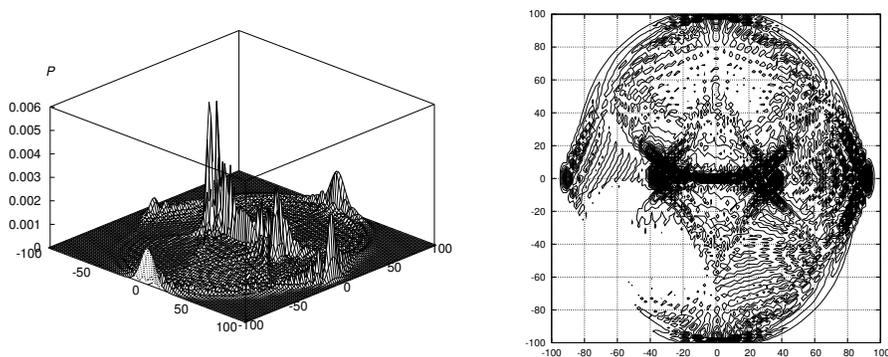


Figura 3.3: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Fourier após 100 iterações com estado inicial (3.14).

Quando consideramos a moeda de Grover

$$G = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

surtem comportamentos ainda mais curiosos. Na Figura 3.4 temos o comportamento da distribuição de probabilidade quando o estado inicial é

$$|\psi_2(0)\rangle = \frac{1}{2}(|00\rangle - |01\rangle - |10\rangle + |11\rangle)|0,0\rangle. \quad (3.18)$$

Seja  $a$  a grandeza que mede a taxa de espalhamento da distribuição de probabilidade no plano. Quando  $t \gg 1$  temos

$$a = \frac{\sigma^2}{t^2}. \quad (3.19)$$

O caminho é altamente simétrico, aparentemente invariante por uma rotação de  $\pi/2$ ; ele não apresenta ocupação em torno da origem pois tem uma área de aproximadamente  $1/3$  do seu raio praticamente vazia; além disso apresenta o maior desvio padrão  $\sigma$ . Já na Figura 3.5 exibimos o comportamento da distribuição de probabilidade com o estado inicial (3.14) simétrico, que apresenta o menor valor da taxa de espalhamento  $a$ . Esta distribuição possui uma simetria circular imperfeita com um pico central na região da origem e um tipo de anel, com baixíssima probabilidade, envolvendo quase toda a borda. As diferentes condições iniciais controlam quanto da distribuição está concentrado no pico central e quanto está no anel, levando à maior e menor taxa de espalhamento no plano.

Na Figura 3.6 apresentamos a evolução temporal do desvio padrão do caminho quântico 2-D para as três moedas consideradas com três condições iniciais distintas. Vemos que cada uma dessas condições iniciais leva a um maior desvio padrão para uma determinada moeda. O desvio padrão assume seu valor máximo

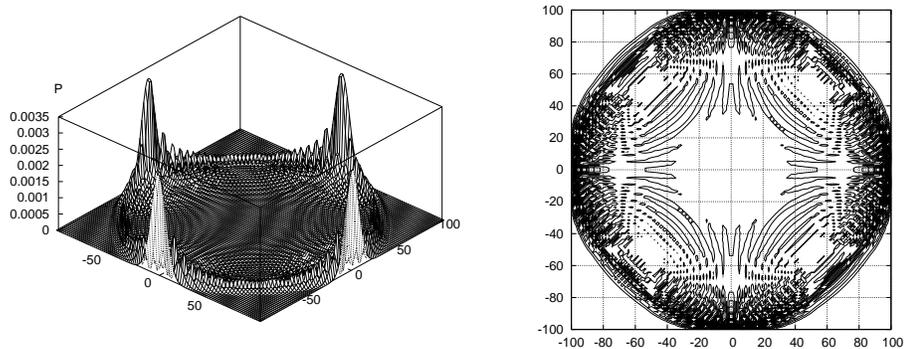


Figura 3.4: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Fourier após 100 iterações com estado inicial (3.18).

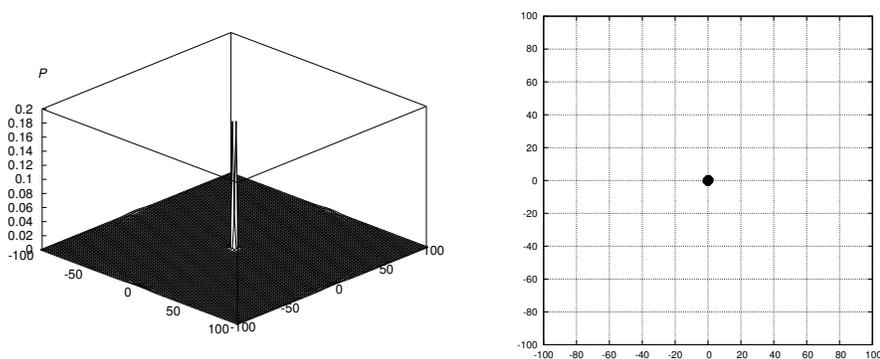


Figura 3.5: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Grover após 100 iterações com estado inicial(3.14)

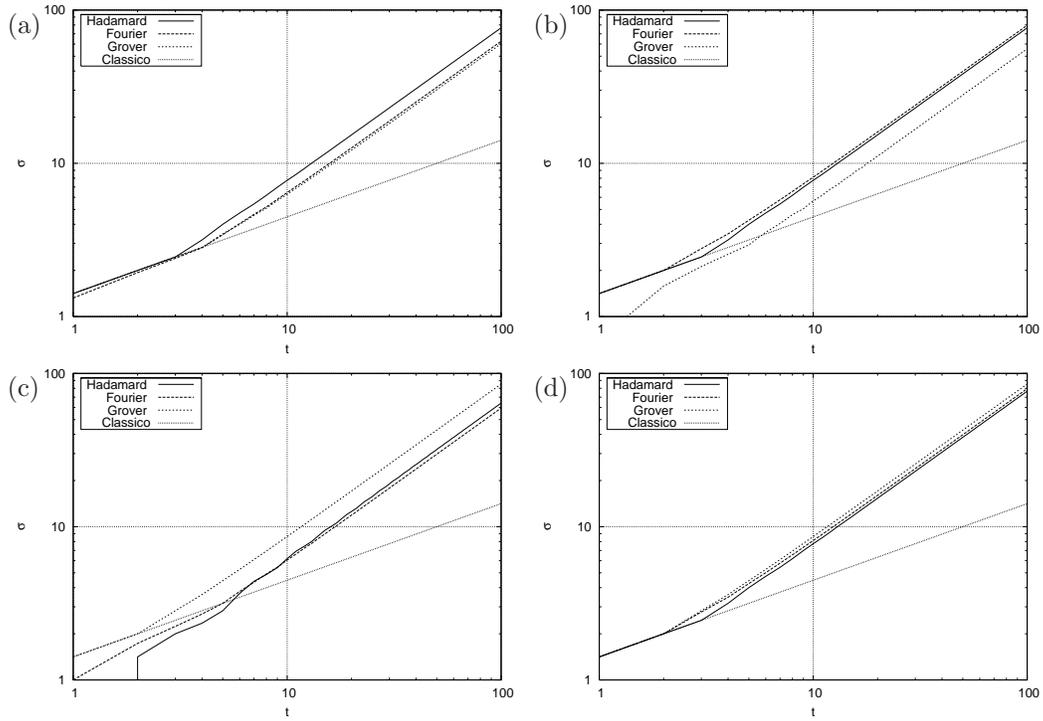


Figura 3.6: Desvio padrão em função do número de passos, escala log-log, para o caminho quântico 2-D usando as três moedas, Hadamard, Fourier e Grover versus o caminho clássico. Em (a) o estado inicial é dado por 3.14. Em (b) o estado inicial é dado por 3.16. Em (c) o estado inicial é dado por 3.18. Em (d) temos os casos em que o desvio padrão é máximo.

	$ \psi_0(0)\rangle$	$ \psi_1(0)\rangle$	$ \psi_2(0)\rangle$
Hadamard	0.5859	0.5859	0.4101
Fourier	0.3925	0.6324	0.3530
Grover	0.3638	0.3126	0.7272

Tabela 3.2: Valores para a taxa de espalhamento  $a$  para as moedas de Hadamard, Fourier e Grover para condições iniciais distintas.

e mínimo de acordo com a moeda e condição inicial escolhidas. A moeda de Grover é a que apresenta a maior variação do desvio padrão quando variamos a condição inicial. Enquanto, a moeda de Hadamard apresenta a menor variação do desvio padrão para as três condições iniciais analisadas. Da análise desses gráficos fica bem claro o quanto o caminho quântico é dependente da escolha tanto da moeda quanto da condição inicial.

Como pudemos observar o caminho quântico no plano é muito mais rico quando o comparamos com o caminho na reta. Enquanto todos os caminhos 1-D partindo da origem podem ser obtidos a partir do caminho de HadamardNayak e Vishwanath (2000); N.Konno (2002); Konno (2005a) o caso 2-D apresenta algumas moedas não equivalentes. De fato, as moedas de Hadamard, Grover e Fourier apresentam muitas particularidades, dentre elas, a variância  $\sigma^2$ , que possui um valor distinto para cada uma delas. Na Tabela 3.2 exibimos os valores da taxa de espalhamento  $a$  para as três moedas para diversos valores das condições iniciais. Vemos o quanto que desvio padrão varia de acordo com a condição inicial escolhida. Assim, podemos concluir que o desvio padrão do caminho quântico 2-D não só é afetado pelo emaranhamento das moedas, mas também pela escolha das condições iniciais.

### 3.2 Ligações Interrompidas

Nesta secção apresentaremos a generalização para duas ou mais dimensões do formalismo de ligações interrompidas apresentado na Seção (2.4.1). Este formalismo, bastante genérico, permite investigar a evolução de caminhantes quânticos em redes de formas arbitrárias através da quebra permanente das ligações apropri-

adas que definem os contornos dessas regiões. Permite ainda estudar a descoerência unitária por ligações interrompidas que é a quebra de forma aleatória das ligações entre as posições na rede.

Vamos agora analisar o caso em uma rede quadrada explicitando as quatro ligações para um caminhante que se encontra na posição  $|x, y\rangle$  como podemos ver na Figura 3.7. Para o caso de uma dimensão foi necessário definir apenas uma função extra para as ligações. No caso de duas dimensões são necessárias duas funções para definirmos as quatro ligações de cada posição. Sejam essas duas funções:

$$\mathcal{L}_1(j, k; x, y) = \begin{cases} (-1)^j, & \text{se a ligação para a posição } x + (-1)^j, y + (-1)^k \text{ está fechada,} \\ 0, & \text{se a ligação para a posição } x + (-1)^j, y + (-1)^k \text{ está aberta,} \end{cases} \quad (3.20)$$

e

$$\mathcal{L}_2(j, k; x, y) = \begin{cases} (-1)^k, & \text{se a ligação para a posição } x + (-1)^j, y + (-1)^k \text{ está fechada,} \\ 0, & \text{se a ligação para a posição } x + (-1)^j, y + (-1)^k \text{ está aberta,} \end{cases} \quad (3.21)$$

onde  $j, k \in \{0, 1\}$ . As quatro ligações podem estar abertas ou fechadas de acordo com a necessidade do problema. Se todas estiverem abertas para uma dada posição esta posição fica isolada. Aqui a continuidade das ligações exige que

$$\mathcal{L}_1(1 - j, 1 - k; x + (-1)^j, x + (-1)^k) = 0 \text{ se } \mathcal{L}_1(j, k; x, y) = 0, \quad (3.22)$$

e de forma análoga para a ligação  $\mathcal{L}_2$ . Usando o mesmo raciocínio que foi usado para o caso unidimensional, quando admitimos a possibilidade de quebra das ligações, podemos generalizar a Equação (3.5). Se a ligação da posição  $(x, y)$  para qualquer uma das quatro posições distintas estiver interrompida o fluxo de probabilidade que iria para esta posição inacessível deverá permanecer na posição  $(x, y)$  de forma que a probabilidade seja sempre conservada. O operador translação  $S$  torna-se

então

$$\begin{aligned}
S = & \sum_{j,k=0}^1 \sum_{j',k'=0}^1 \sum_{x,y=-\infty}^{\infty} \{[(1 - \delta_{j,j'}) - (-1)^{j'} \mathcal{L}_1(1 - j, 1 - k; x + (-1)^j \delta_{j,j'}, y + (-1)^k \delta_{k,k'})] \cdot \\
& [(1 - \delta_{k,k'}) - (-1)^{k'} \mathcal{L}_2(1 - j, 1 - k; x + (-1)^j \delta_{j,j'}, y + (-1)^k \delta_{k,k'})]\} |j, k\rangle \langle j', k'| \otimes \\
& |x + (-1)^j \delta_{j,j'}, y + (-1)^k \delta_{k,k'}\rangle \langle x, y|, \tag{3.23}
\end{aligned}$$

com  $j, k, j', k' \in \{0, 1\}$ . Então a generalização da Equação (2.45) para o caso da rede quadrada é dada por

$$\begin{aligned}
A_{1-j,1-k;x,x}(t+1) = & \sum_{j',k'=0}^1 C_{j+\mathcal{L}_1(j,k;x,y),k+\mathcal{L}_2(j,k;x,y);j',k'} \tag{3.24} \\
& A_{j',k';x+\mathcal{L}_1(j,k;x,y),y+\mathcal{L}_2(j,k;x,y)}(t).
\end{aligned}$$

Similarmente ao caso de uma dimensão com ligações interrompidas obtivemos a expressão para operador evolução  $U^\dagger$  e aplicando no estado geral (3.1) temos a expressão para a equação de evolução  $\dagger$

$$\begin{aligned}
A_{j,k;x,y}(t-1) = & \sum_{j',k'=0}^1 C_{j',k';j,k}^* \tag{3.25} \\
& A_{1-j'-\mathcal{L}_1(j',k';x,y),1-k'-\mathcal{L}_2(j',k';x,y);x+\mathcal{L}_1(j',k';x,y),y+\mathcal{L}_2(j',k';x,y)}(t).
\end{aligned}$$

Comparando a Equação (2.45) de evolução para o caso unidimensional com a Equação (3.25) obtida para o caso de duas dimensões podemos perceber que no último caso repetimos o procedimento feito em uma dimensão para cada uma das duas novas direções. Desta maneira vemos que esta equação de evolução é facilmente generalizável para dimensões maiores. A equação de evolução para o caminhante quântico em redes de  $n$  dimensões é uma generalização das equações (3.20), (3.21) e (3.25). Neste caso usaremos  $n$  funções de ligações definidas de forma análoga às equações (3.20) e (3.21), enquanto a Equação (3.25) deverá ser modificada adequadamente, adicionando-se cada função ligação ao seu índice correspondente. De posse dessas equações além de ser possível analisar a descoerência unitária com li-

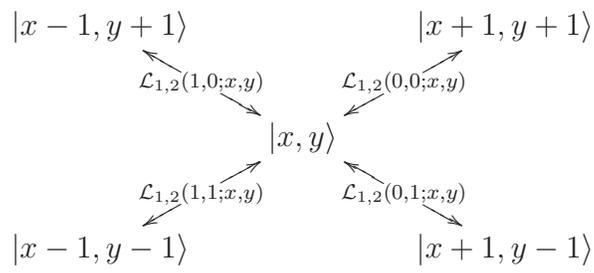


Figura 3.7: As quatro ligações para a posição  $|x, y\rangle$

gações interrompidas em redes de  $n$  dimensões também é possível investigar muitos outros tipos de caminhos sem descoerência nas mais diversas topologias simplesmente definindo adequadamente a quebra permanente das ligações.

### 3.2.1 Caminhos Quânticos em Caixas

Vamos agora restringir o caminhante a uma área finita da rede. Estes resultados fazem parte de nossas contribuições originais do trabalho Oliveira et al.. Um caminho quântico em uma rede quadrada está num espaço de Hilbert  $\mathcal{H}_4 \otimes \mathcal{H}_s$ , onde  $\mathcal{H}_4$  é o espaço moeda e  $\mathcal{H}_s$  é o espaço da rede. Portanto o caminhante está confinado em uma rede quadrada cujas posições acessíveis são  $\{|x, y\rangle, x, y \in \{-M, M\}\}$  tais que  $x + y$  seja par. Nós analisamos numericamente os efeitos das bordas no caminho quântico bidimensional para as moedas de Hadamard, Fourier e Grover para algumas redes quadradas. As Figuras 3.8, 3.9 e 3.10 mostram a evolução temporal do desvio padrão  $\sigma$  para as moedas de Hadamard, Fourier e Grover para alguns valores de  $M$  por 1000 passos. O desvio padrão cresce linearmente com o número de passos até que o caminhante encontre alguma das bordas. Neste instante temos o desvio padrão máximo. No passo seguinte a partícula é refletida e nos passos subseqüentes o desvio padrão vai diminuindo até a distribuição se concentrar na origem. Neste instante  $\sigma$  tem um mínimo local. No passo seguinte a distribuição começa novamente a se espalhar, mas agora com uma outra “condição inicial” até atingir novamente as bordas e este processo se repete indefinidamente. Este é um processo unitário e portanto é reversível. Além disso, em algum momento o cami-

nahte volta à mesma condição inicial de que partiu e o ciclo recomeça. A moeda de Hadamard apresenta o maior desvio padrão devido à sua distribuição de probabilidade ser do tipo quadrada. A moeda de Fourier é a que nestes casos apresenta o menor desvio padrão, já que a forma de sua distribuição de probabilidade faz com que as curvas do desvio padrão sejam rapidamente suavizadas. A moeda de Grover, que apresenta simetria circular para a distribuição de probabilidade, tem o desvio padrão intermediário e por isso suas curvas do desvio padrão apresentam o comportamento oscilatório mais bem comportado.

Na Figura 3.11 apresentamos a distribuição de probabilidade para a moeda de Grover após 100 passos, e vemos que a distribuição começa a ser refletida pelas bordas. Na Figura 3.12 temos a distribuição após 140 passos, e vemos que neste momento a distribuição já foi quase totalmente refletida. Na Figura 3.13 o desvio padrão é mínimo e a partícula pode ser encontrada próxima da origem com grande probabilidade. Em todos os três casos a distribuição de probabilidade assume um padrão bastante complexo que parece ser a assinatura do mundo quântico. Observamos alguns resultados diferentes daqueles obtidos para o caso da rede infinita apresentados na Secção 3. Convém lembrar que na rede infinita o desvio padrão para as moedas de Hadamard, Fourier e Grover são distintos quando o caminho parte da origem com os estados iniciais (3.14), (3.16) e (3.18) respectivamente, fornecendo as maiores taxas de crescimento para o desvio padrão como vemos na Tabela 3.2. Neste caso a moeda de Grover apresenta o maior desvio padrão entre as moedas consideradas Tregenna et al. (2003). Já no caso da rede quadrada finita observamos que todas as moedas apresentam o desvio padrão com comportamento oscilatório, devido às batidas nas bordas. Além disso a moeda de Hadamard apresenta a o maior desvio padrão, seguida pela moeda de Grover e por último pela moeda de Fourier que apresenta a menor taxa. Isto indica que as moedas reagem de formas diferentes de acordo com a forma da rede. Também analisamos o comportamento do caminhante em uma rede do tipo losango. Neste caso a partícula fica confinada a uma rede losangular no plano cujos vértices são

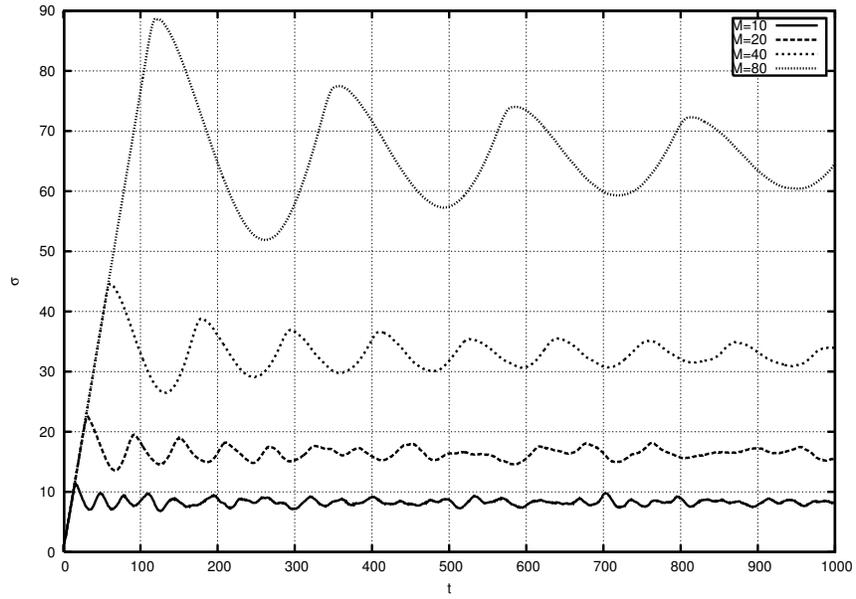


Figura 3.8: Evolução temporal do desvio padrão para o caminho de Hadamard para as redes quadradas com  $M = 10$ ,  $M = 20$ ,  $M = 40$ , e  $M = 80$  e estado inicial (3.14).

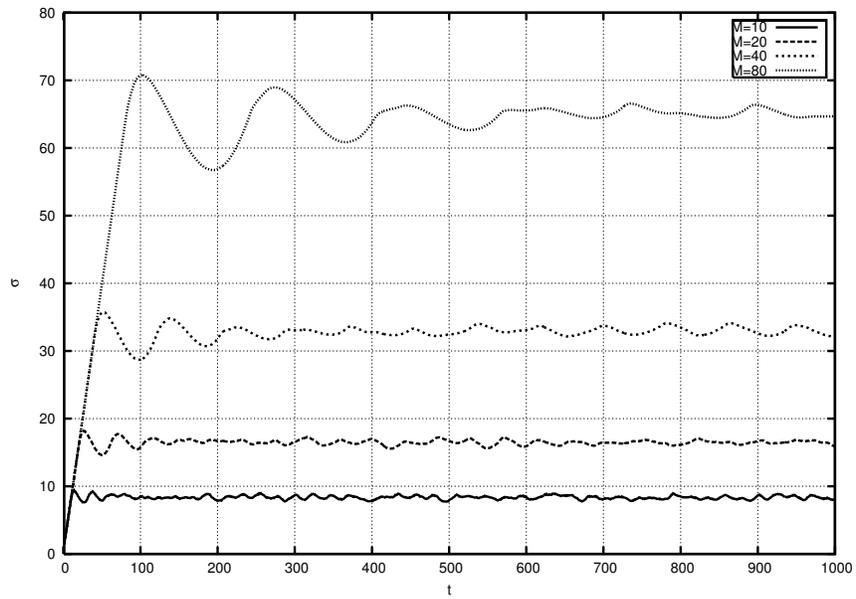


Figura 3.9: Evolução temporal do desvio padrão para o caminho de Fourier para as redes quadradas com  $M = 10$ ,  $M = 20$ ,  $M = 40$ , e  $M = 80$  e estado inicial (3.16).

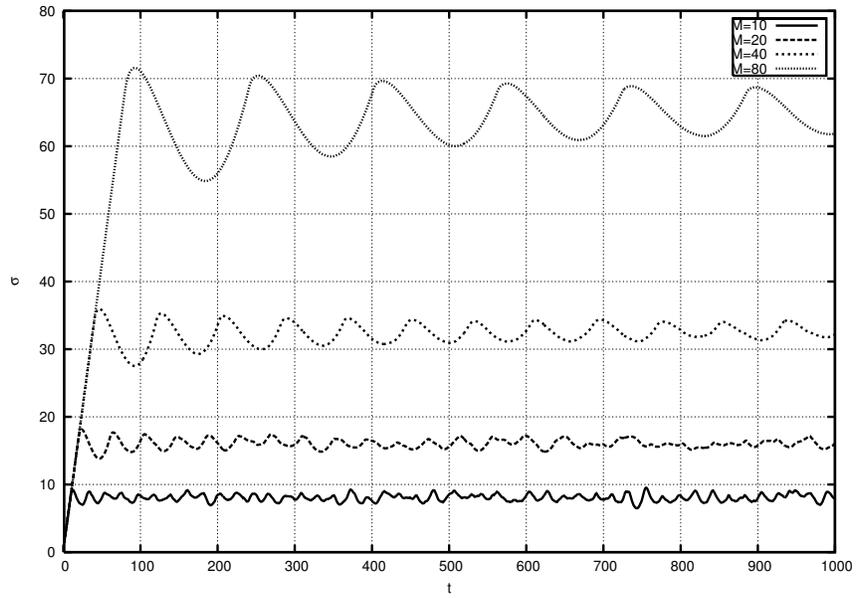


Figura 3.10: Evolução temporal do desvio padrão para o caminho de Grover para as redes quadradas com  $M = 10$ ,  $M = 20$ ,  $M = 40$ , e  $M = 80$  e estado inicial (3.18).

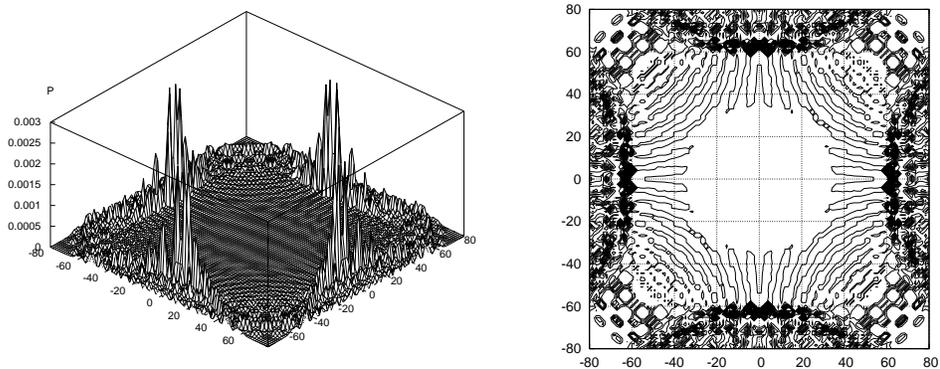


Figura 3.11: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Grover após 100 iterações com estado inicial (3.18) e bordas quadradas em  $M = 80$ .

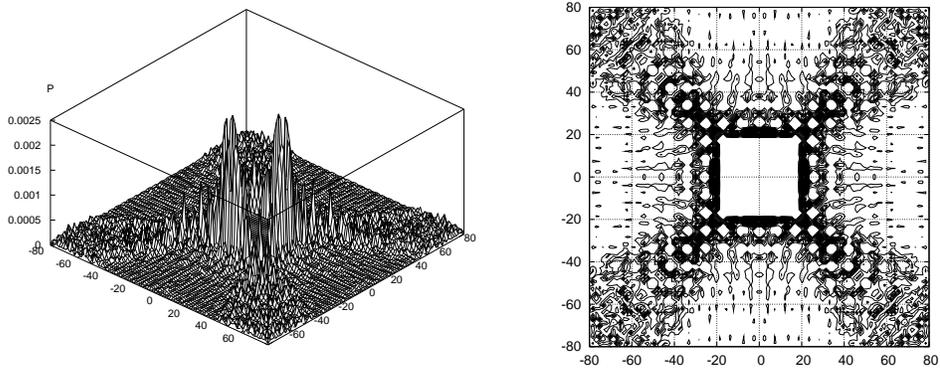


Figura 3.12: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Grover após 140 iterações com estado inicial (3.18) e bordas quadradas em  $M = 80$ .

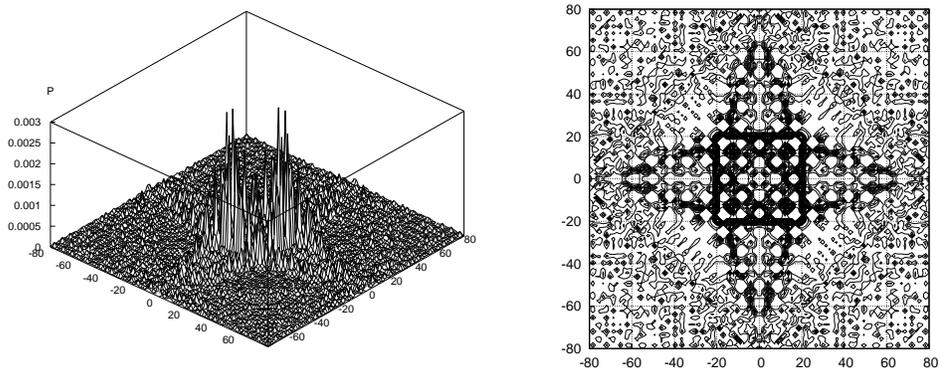


Figura 3.13: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Grover após 180 iterações com estado inicial (3.18) e bordas quadradas em  $M = 80$ .

$\{|M, 0\rangle, |-M, 0\rangle, |0, M\rangle, |0, -M\rangle\}$  tal que  $M$  seja inteiro. Nas Figuras 3.14, 3.15 e (3.16) exibimos a evolução do desvio padrão até 1000 passos para as moedas de Hadamard, Fourier e Grover em uma rede em forma de losango. Observamos que nesse tipo de rede as moedas de Grover e Fourier apresentam os maiores valores para o desvio padrão enquanto que a moeda de Hadamard perde muito espaço acessível e portanto seu desvio padrão diminui. Assim como no caso de redes quadradas, observamos que o desvio padrão oscila alcançando o seu valor máximo quando a distribuição encontra as bordas e o seu valor mínimo quando a distribuição tem grande probabilidade próximo da origem. Todos esses resultados indicam que as moedas reagem de formas diferentes de acordo com a forma da rede em que o caminhante se encontra.

Para o caso de caminhantes quânticos em caixas muitas das vezes estamos interessados no tempo que a distribuição de probabilidade leva para se aproximar por uma distância  $\epsilon$  da distribuição uniforme. Na literatura essa grandeza é chamada de *Mixing time* Kempe (2003); Aharonov et al. (2001). Ela costuma ser de muito interesse para as aplicações algorítmicas pois quão mais rápido uma distribuição de probabilidade se aproxima da distribuição uniforme mais freqüentemente se pode amostrar sobre essa distribuição e rapidamente se obtém uma boa estimativa da resposta procurada. Para o caso de um caminhante aleatório simples em um grafo não direcionado  $G(V, E)$  temos que a sua evolução é descrita por repetidas aplicações de uma matriz estocástica  $P$ , onde  $P_{u,v} = \frac{1}{d_u}$  se  $(u, v)$  é uma aresta no grafo  $G$  e  $d_u$  é o grau de  $u$ , e se  $(u, v)$  não é aresta desse grafo então  $P_{u,v} = 0$ . Se  $G$  é conectado e não bipartido, então a distribuição do caminho aleatório,  $D_t = P^t D_0$  converge para a distribuição estacionária  $\pi$  que é independente da distribuição inicial  $D_0$ . Para um grafo  $G$  que seja  $d$ -regular, ou seja, onde todos os vértices tenham o mesmo grau, a distribuição de probabilidade limite é uniforme em todos os nós do grafo.

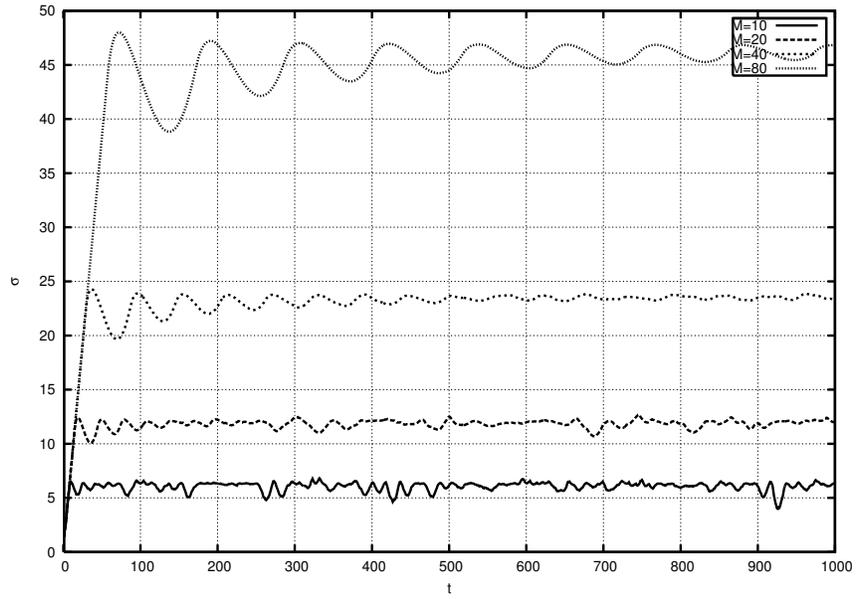


Figura 3.14: Evolução temporal do desvio padrão para o caminho de Hadamard para as redes losangulares com  $M = 10$ ,  $M = 20$ ,  $M = 40$ , e  $M = 80$  e estado inicial (3.14).

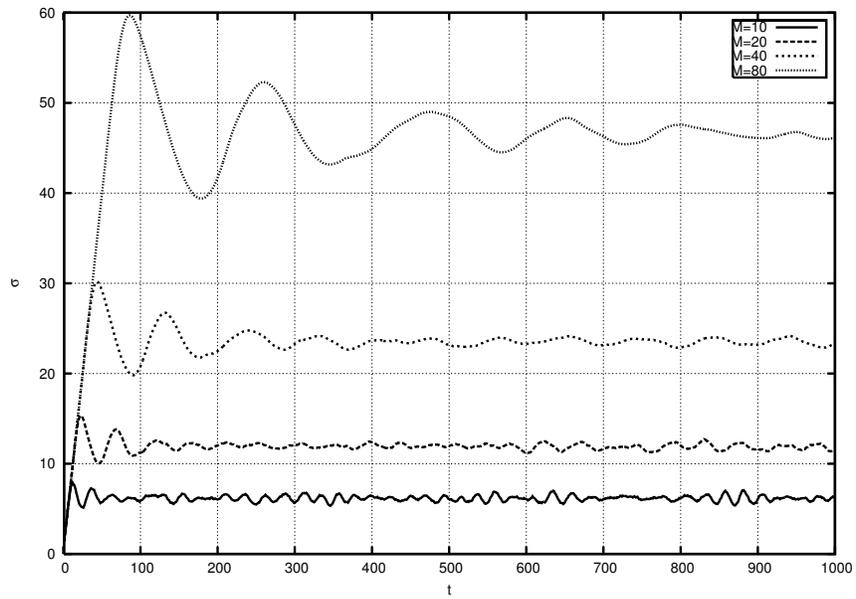


Figura 3.15: Evolução temporal do desvio padrão para o caminho de Fourier para as redes losangulares com  $M = 10$ ,  $M = 20$ ,  $M = 40$ , e  $M = 80$  e estado inicial (3.16).

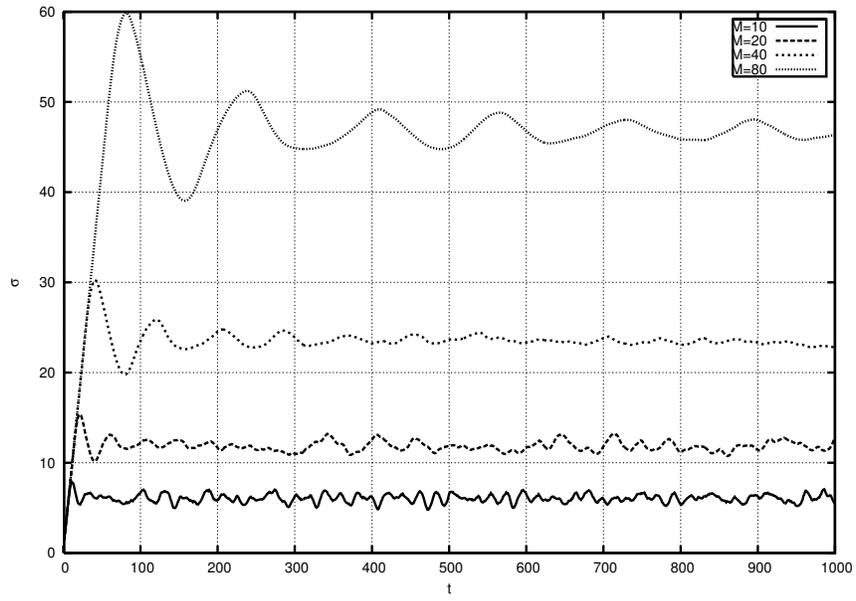


Figura 3.16: Evolução temporal do desvio padrão para o caminho de Grover para as redes losangulares com  $M = 10$ ,  $M = 20$ ,  $M = 40$ , e  $M = 80$  e estado inicial (3.18).

### Definição 3.2.1 (Mixing Time)

$$\tau_{mix} = \min\{T | \forall t \geq T, D_0 : \|D_t - \pi\| \leq \epsilon\},$$

onde usamos  $\|d_1 - d_2\| = \sum_i |d_1(i) - d_2(i)|$  para medir a distância entre duas distribuições  $d_1, d_2$ .

É sabido que qualquer caminho aleatório clássico converge para uma distribuição estacionária independente de seu estado inicial—o caminhante clássico perde sua memória do estado inicial. Já com o caminhante quântico esse fato não ocorre pois como todas as transformações são unitárias e portanto reversíveis o caminhante quântico nunca se esquece de seu estado inicial e portanto nunca converge para uma distribuição estacionária. Vejamos, para um caminhante quântico cujo estado inicial é dado por  $|\psi(0)\rangle$ , no instante  $t$  o estado do caminhante quântico será  $|\psi(t)\rangle = U^t|\psi(0)\rangle$ . Em geral, o limite de  $|\psi(t)\rangle$  quanto  $t$  tende ao infinito não existe, uma vez que  $U$  é um operador unitário e a norma de  $|\psi(t)\rangle$  sempre é preservada. A distribuição de probabilidade induzida pelo estado  $|\psi(t)\rangle$  no instante  $t$  dado que o estado inicial do caminhante é  $|\psi(0)\rangle$  é dada por

$$P_t(x) = |\langle x | \psi(t) \rangle|^2. \quad (3.26)$$

Como o operador de evolução do caso quântico é um operador unitário esta distribuição de probabilidade nunca irá convergir para um limite. Pois como todos os autovalores de  $U$  têm a forma  $e^{i\theta}$  então, após um número  $t$  finito de passos,  $e^{i\theta t}$  estará arbitrariamente próximo de 1 simultaneamente para todos os autovalores. Portanto a evolução do estado é quase periódica – o estado do sistema  $U^t|\psi(0)\rangle$  está sempre arbitrariamente próximo a  $|\psi(0)\rangle$  para muitos passos  $t$ . E como as distribuições de probabilidade nos instantes 0 e 1 são distintas,  $P_0 \neq P_1$ , isto implica que  $P_t$  não converge quando  $t$  tende ao infinito. Embora a distribuição de probabilidade não convirja, sua média no tempo converge. Seja a distribuição de

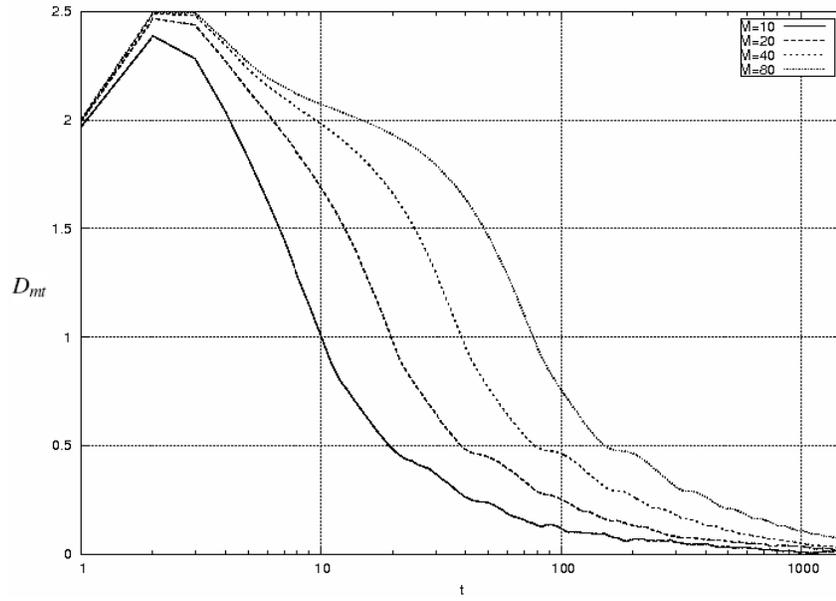


Figura 3.17:  $D_{mt} \times t$  para o caminho quântico com moeda de Grover em uma rede quadrada com  $M = 10$ ,  $M = 20$ ,  $M = 40$ , e  $M = 80$ .

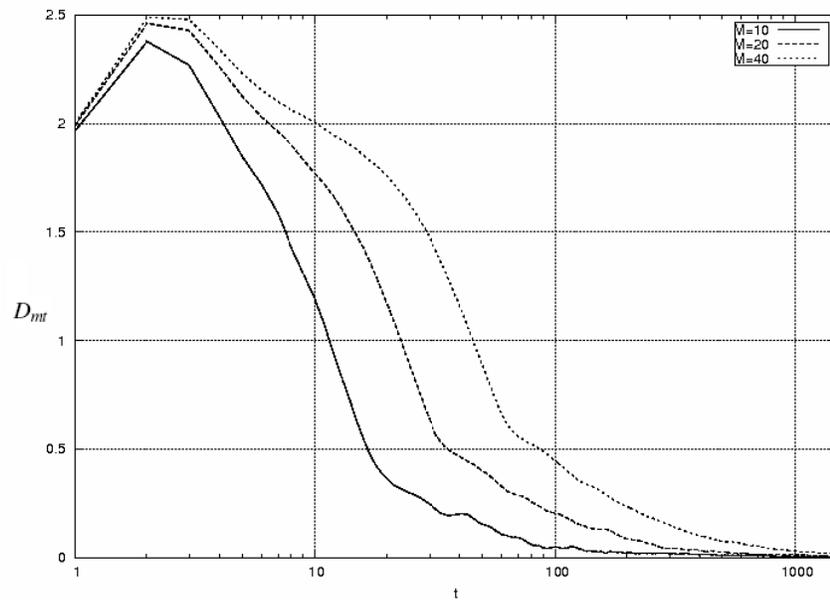


Figura 3.18:  $D_{mt} \times t$  para o caminho quântico com moeda de Hadamard em uma rede quadrada com  $M = 10$ ,  $M = 20$  e  $M = 40$ .

probabilidade induzida média dada por

$$\bar{P}_t(x) = \frac{1}{T} \sum_{t=0}^{T-1} P_t(x) \quad (3.27)$$

Esta média sempre terá um limite quando  $T$  aproximar-se do infinito e denotaremos este limite por  $\pi$ . Intuitivamente, esta grandeza capta a proporção de tempo que o caminho gasta em uma dada posição qualquer. Se escolhermos um instante  $t$  qualquer no intervalo entre  $0$  e  $T-1$  e deixarmos o sistema evoluir por  $t$  passos e então o medirmos para ver em que ponto estamos veremos que o ponto estará distribuído de acordo com  $\bar{P}_t$ .

**Definição 3.2.2 (Mixing Time)** O *mixing time*  $\tau_{mix}$ , de um caminho quântico é

$$\tau_{mix} = \min\{T | \forall t \geq T, \psi(0) : \|\pi - \bar{P}_t\| \leq \epsilon\}.$$

O *mixing time* mede o número de passos necessários para a distribuição de probabilidade média estar  $\epsilon$ -próxima da distribuição limite, partindo de um estado da base. A distância entre a distribuição estacionária  $\pi$  e a distribuição média  $\bar{P}_t$  é dada por

$$D_{mt} = \|\pi - \bar{P}_t\|. \quad (3.28)$$

Analisamos numericamente a evolução do *mixing time* para o caminho quântico 2-D com as três moedas na redes quadradas com o estado inicial que maximiza o espalhamento da distribuição. Nas Figuras 3.17, 3.18 e 3.19 apresentamos o comportamento de  $D_{mt}$  em função do número de passos para o caminho quântico 2-D com moeda de Grover, Hadamard e Fourier em redes quadradas para alguns valores de  $M$ . Vemos que o comportamento para as três moedas é muito similar. Os dois primeiros passos são idênticos ao caso clássico, já a partir do terceiro passo vemos que a distância começa a diminuir até atingir um valor mínimo em que a distribuição média fica muito próxima da distribuição uniforme. Observamos que periodicamente esta curva muda de concavidade este fato sinaliza todas as vezes em que a distribuição encosta nas bordas. Também analisamos numericamente o

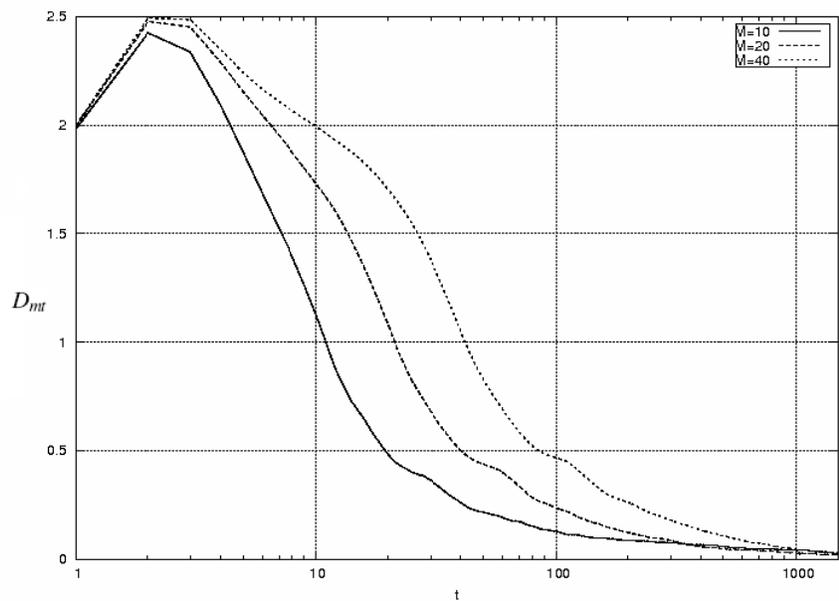


Figura 3.19:  $D_{mt} \times t$  para o caminho quântico com moeda de Fourier em uma rede quadrada com  $M = 10$ ,  $M = 20$  e  $M = 40$ .

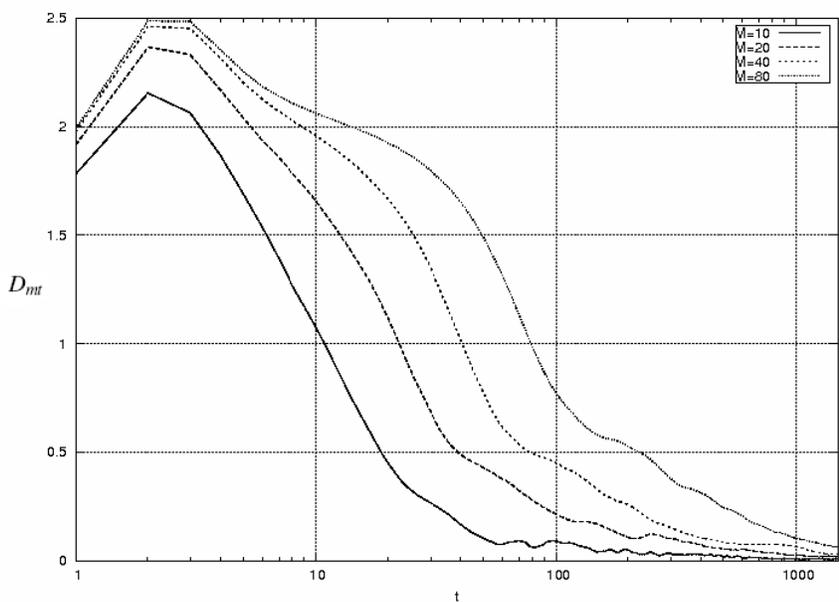


Figura 3.20:  $D_{mt} \times t$  para o caminho quântico com moeda de Grover em uma rede quadrada com o primeiro quadrante inacessível com  $M = 10$ ,  $M = 20$ ,  $M = 40$ , e  $M = 80$ .

comportamento do *mixing time* para o caso em que a partícula está restrita a uma caixa cujo primeiro quadrante se tornou inacessível. Na Figura 3.20 apresentamos o comportamento de  $D_{mt}$  em função do número de passos para o caminho quântico 2-D com moeda de Grover em redes quadradas, com o primeiro quadrante inacessível, para alguns valores de  $M$ . Observamos que, como esperado, a ausência de um quadrante faz com que a curva de  $D_{mt}$  em função do número de passos mude de concavidade mais rápido que o caso anterior. Podemos ver por esses resultados que a distribuição de probabilidade gerada por esse tipo de rede também pode ser utilizada para realizar medidas em uma distribuição uniforme com a precisão que seja necessária em uma simulação. Para se ter uma idéia de como o *mixing time* varia de acordo com o tamanho da rede temos na Figura 3.21 o gráfico do  $\tau_{mix}$  em função de  $M$  para as moedas de Hadamard, Fourier e Grover onde as condições iniciais usadas são as que maximizam o desvio padrão. Para as moedas de Grover e Fourier observamos um crescimento praticamente linear de  $\tau_{mix}$  com o aumento da rede, já para a moeda de Hadamard essa dependência não parece tão clara para a condição analisada.

### 3.2.2 Descoerência Unitária

Nesta seção apresentamos nossa contribuição no estudo dos efeitos da descoerência unitária por ligações interrompidas para um caminhante quântico no plano em uma rede quadrada infinita. A evolução temporal do caminho acontece da forma que passamos a descrever. A cada passo cada ligação tem a probabilidade  $p$  de ser rompida. Quando  $p = 0$  temos o caminho sem ligações rompidas. Dado um estado inicial  $|\psi(0)\rangle$  escolhido de tal maneira que o desvio padrão seja máximo para cada uma das moedas, aplicamos o operador moeda neste estado. Em seguida verificamos se há alguma ligação rompida para cada uma das quatro ligações. De posse desses dados aplicamos o operador translação adequado. Assim completa-se um passo para o caminhante. Repetimos esse procedimento por  $T$  vezes e então obtemos a distribuição de probabilidade para este caminho com a presença ou não

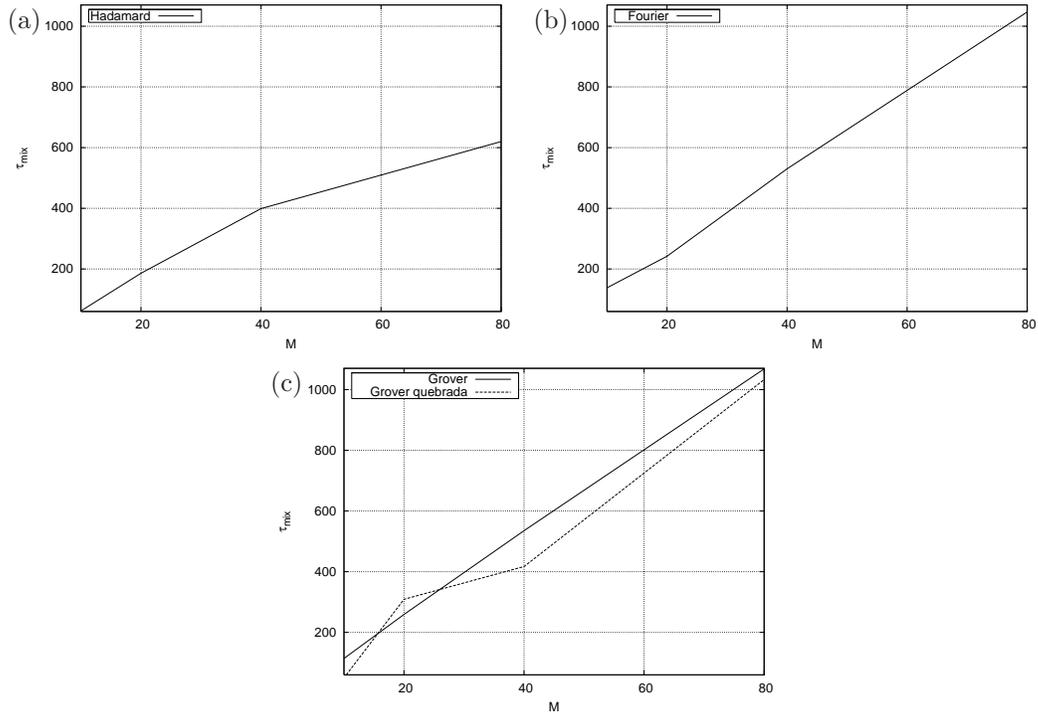


Figura 3.21: Mixing time  $\tau_{mix}$  em função de  $M$  para as moedas de Hadamard, Fourier e Grover para o caminho quântico 2-D na caixa. No caso em que  $\varepsilon = 0.10$ . Em (a) temos a moeda de Hadamard e o estado inicial é dado por 3.14. Em (b) a moeda é de Fourier e o estado inicial é dado por 3.16. Em (c) temos a moeda de Grover com estado inicial dado por 3.18. No caso para a caixa quadrada e também com o primeiro quadrante inacessível.

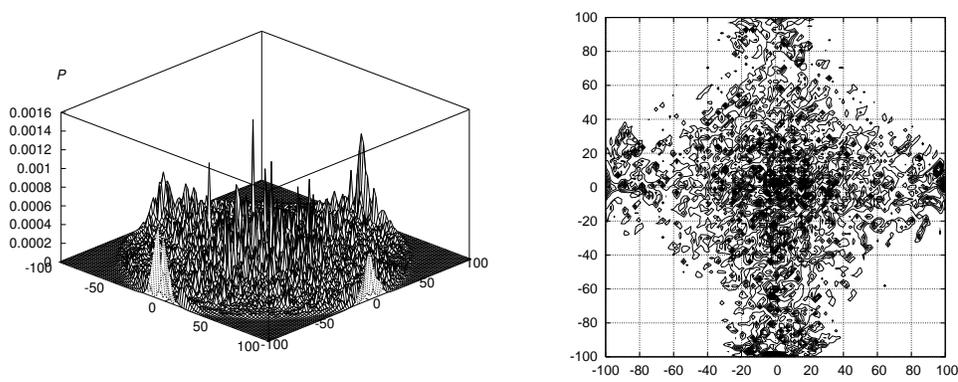


Figura 3.22: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Grover após 100 iterações com estado inicial (3.18) com probabilidade de quebra  $p = 0.01$ . o comportamento clássico começa a prevalecer sobre o comportamento quântico para  $T \approx 1/p$

de ligações interrompidas.

Vamos agora analisar a evolução do caminho quântico no caso em que, no instante  $t$ , a posição  $x, y$  do plano pode ter qualquer uma, ou até todas as suas ligações com as posições vizinhas interrompidas. Fizemos a análise da descoerência com diversos valores de  $p$  para as moedas de Hadamard, Fourier e Grover. Observamos que as três moedas apresentam comportamento similar em relação à presença da descoerência. A moeda de Grover por apresentar a maior taxa de espalhamento no plano é a mais interessante para a observação dos efeitos da quebra das ligações. Entretanto é a moeda de Hadamard a mais resistente a esse tipo de perturbação no sistema. Nas figuras 3.22, 3.23 e 3.24 temos o comportamento da distribuição de probabilidade para as moedas de Grover, Hadamard e Fourier quando a probabilidade de quebra das ligações é  $p = 0.01$  neste caso  $T \approx 1/p$  e podemos observar que o comportamento clássico e o quântico coexistem, pois ainda temos probabilidade não nula de encontrar a partícula nas extremidades, mas já há sinais de localização na origem. O desvio padrão também ainda é maior que o caso clássico. O comportamento já se altera completamente nas Figuras 3.25, 3.26 e 3.27 onde  $p = 0.1$ . Neste caso para 100 passos,  $T \gg 1/p$ . Agora o comportamento clássico já domina o comportamento da partícula e podemos ver que o desvio padrão já não cresce mais linearmente com o número de passos.

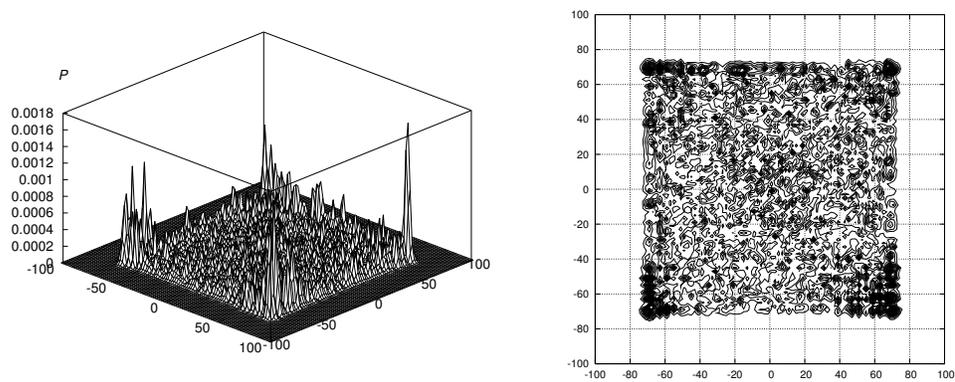


Figura 3.23: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Hadamard após 100 iterações com estado inicial (3.14) com probabilidade de quebra  $p = 0.01$ . O comportamento clássico começa a prevalecer sobre o comportamento quântico para  $T \approx 1/p$

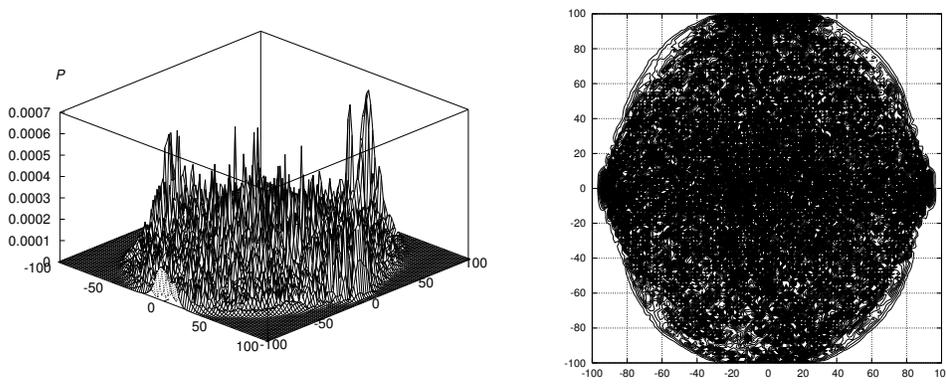


Figura 3.24: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Fourier após 100 iterações com estado inicial (3.16) com probabilidade de quebra  $p = 0.01$ . O comportamento clássico começa a prevalecer sobre o comportamento quântico para  $T \approx 1/p$

Podemos compreender melhor a transição do comportamento quântico para o comportamento clássico observando a evolução temporal do desvio padrão  $\sigma$  das distribuições de probabilidade. Na Figura 3.28 apresentamos o comportamento do desvio padrão para a moeda de Grover em escala log-log para alguns valores de  $p$ . As linhas contínuas representam o desvio padrão do caso quântico e do caso clássico sem a presença de ligações interrompidas, ou seja, com  $p = 0$ . A partir do segundo passo a curva para  $p = 0$  tem inclinação 1, significando que o desvio padrão cresce linearmente com o número de passos  $T$ . Quando  $p > 0$  todas as curvas tem comportamento similar: elas têm inclinação 1 enquanto  $T \ll t_c$  depois decrescem gradualmente até 1/2 quando  $T \gg t_c$ . Onde  $t_c$  é o tempo de coerência  $t_c \approx 1/p$ . O tempo de coerência pode ser estimado da seguinte forma. Durante os primeiros passos, o número de ligações interrompidas dentro da área acessível ao caminhante é ainda pequeno. Este número cresce com o tempo à medida que a região acessível aumenta. Como o caminho de Hadamard ocupa uma área de  $2t^2$  em  $t$  passos, então o número cumulativo de ligações interrompidas com probabilidade  $p$  após  $T$  passos é

$$\aleph = \sum_{t=0}^T 2t^2 p = \frac{1}{3} T(T+1)(2T+1)p. \quad (3.29)$$

É natural aproximar  $t_c$  como sendo o instante no qual o número cumulativo

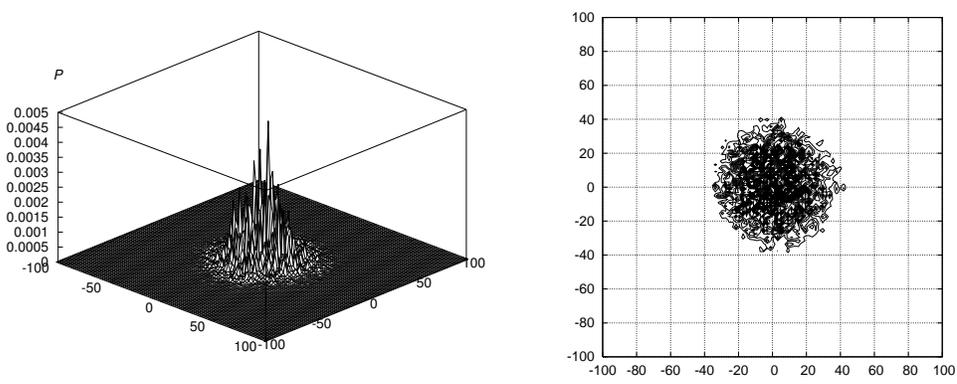


Figura 3.25: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Grover após 100 iterações com estado inicial (3.18) com probabilidade de quebra  $p = 0.1$ . O comportamento clássico já se manifestou pois  $T \gg 1/p$

$\aleph$  de ligações interrompidas torna-se igual ao número total de ligações acessíveis ao caminhante, que é  $2T^2$ . Portanto

$$t_c \approx 3/p, \quad (3.30)$$

para  $p \ll 1$ , ou seja,  $T \rightarrow \infty$ .

O coeficiente de difusão para o caso 2-D é definido por

$$D_{bl} = \frac{1}{2} \lim_{t \rightarrow \infty} \partial \sigma^2 / \partial t. \quad (3.31)$$

Apresentamos na Figura 3.29 o comportamento do coeficiente de difusão em função da probabilidade de quebra das ligações  $p$  e em função de  $(1-p)/p$ . Quando  $p = 0$ , temos  $D = \infty$  uma vez que a variância  $\sigma^2$  tem crescimento quadrático. Quando  $p > 0$ ,  $D$  é finito, para  $T \gg t_c$ , pois a variância é linear. O coeficiente de difusão  $D$  mede metade da inclinação da reta assintótica em um gráfico log-log de  $\sigma^2$  versus  $t$ . Da Figura 3.29 concluímos que a moeda de Hadamard é a moeda mais resistente à descoerência seguida pela moeda de Grover e por último a moeda de Fourier que apresenta a maior sensibilidade a este tipo de ruído no sistema. A diferença entre a moeda de Grover e Fourier é pequena se comparadas com a moeda de Hadamard. Quando  $p$  está muito próximo da unidade as moedas são todas muito similares, pois neste caso a perturbação é tão intensa que a taxa de difusão é ainda menor

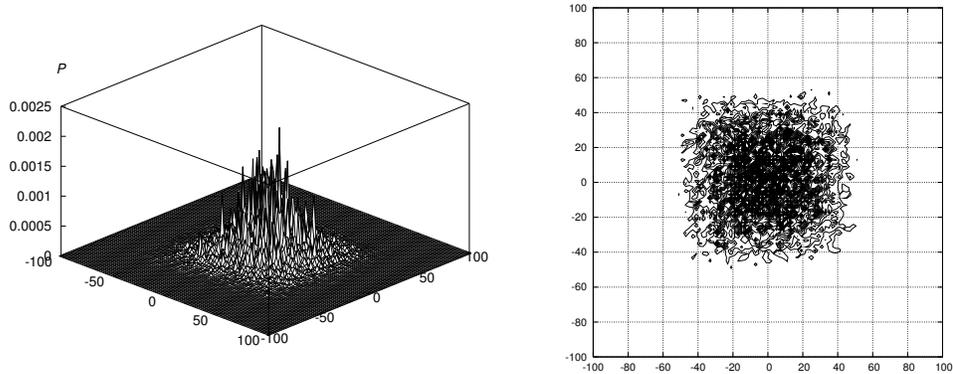


Figura 3.26: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Hadamard após 100 iterações com estado inicial (3.14) com probabilidade de quebra  $p = 0.1$ . O comportamento clássico já se manifestou pois  $T \gg 1/p$

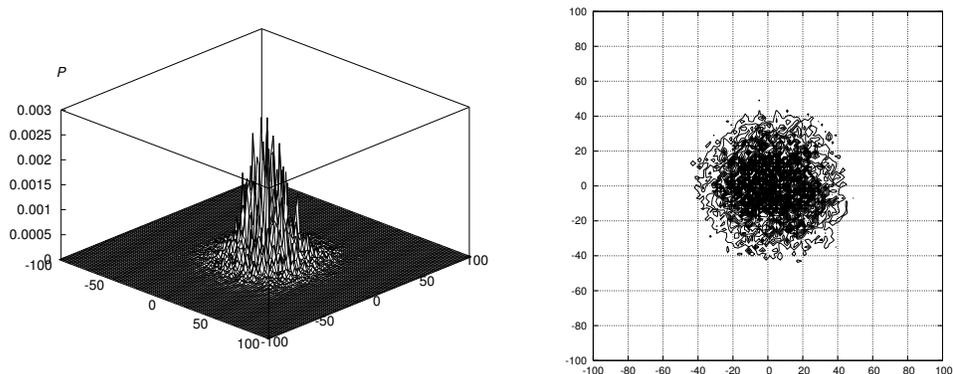


Figura 3.27: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Fourier após 100 iterações com estado inicial (3.16) com probabilidade de quebra  $p = 0.1$ . o comportamento clássico já se manifestou pois  $T \gg 1/p$

Moeda	p crítico
Hadamard ( $p_H$ )	0.41
Fourier ( $p_F$ )	0.34
Grover ( $p_G$ )	0.25

Tabela 3.3: Valores de  $p$  para os quais  $D = 1$  para as moedas de Hadamard, Fourier e Grover com condições iniciais distintas.

que a do caso clássico.

Podemos estimar o nível de ruído para o qual a taxa de difusão do caso quântico iguala-se à taxa de difusão do caso clássico sem ligações interrompidas, ou seja, quando  $D = 1$ . Na Tabela 3.3 apresentamos o valor de  $p$  crítico para as três moedas. Para valores de  $p$  maiores que esses críticos a frequência de rompimento das ligações é tamanha que o caminhante difunde-se mais lentamente que o caso clássico sem ligações interrompidas. Note também que  $p_H$  está muito próximo do valor encontrado para o caso 1-D Romanelli et al. (2005) onde  $p \simeq 0.44$ , o que é um resultado esperado pois o caminho de Hadamard 2-D corresponde a dois caminhos de Hadamard 1-D independentes. Mas assim como no caso 1-D essa análise não significa que para valores maiores que os de  $p$  crítico as correlações quânticas desapareçam as correlações quânticas persistem desde que  $T < t_c$  para todos os valores de  $p$ , mesmo que  $t_c$  se torne muito pequeno quando  $p$  se aproxima de 1. Até aqui analisamos o caso em que a perturbação produzida pelo rompimento aleatório das ligações ocorria com igual probabilidade em ambas as direções. Vamos agora investigar o caso assimétrico em que a probabilidade de quebra é diferente nas duas direções. Seja  $p_0$  a probabilidade de que uma ligação seja quebrada ao longo das linhas paralelas à diagonal principal e  $p_1$  a probabilidade de quebra ao longo das outras linhas que estão na direção perpendicular. Era esperado que neste caso de probabilidade assimétrica a descoerência sempre aumentasse quando qualquer um dos dois parâmetros associados com a quebra das ligações ao longo das duas diagonais crescesse. Entretanto, este fato não se verifica completamente. No caso assimétrico acontece um fato curioso e notável. Vejamos o que acontece com o coeficiente de difusão do caminho quando não há ligações interrompidas ao longo da

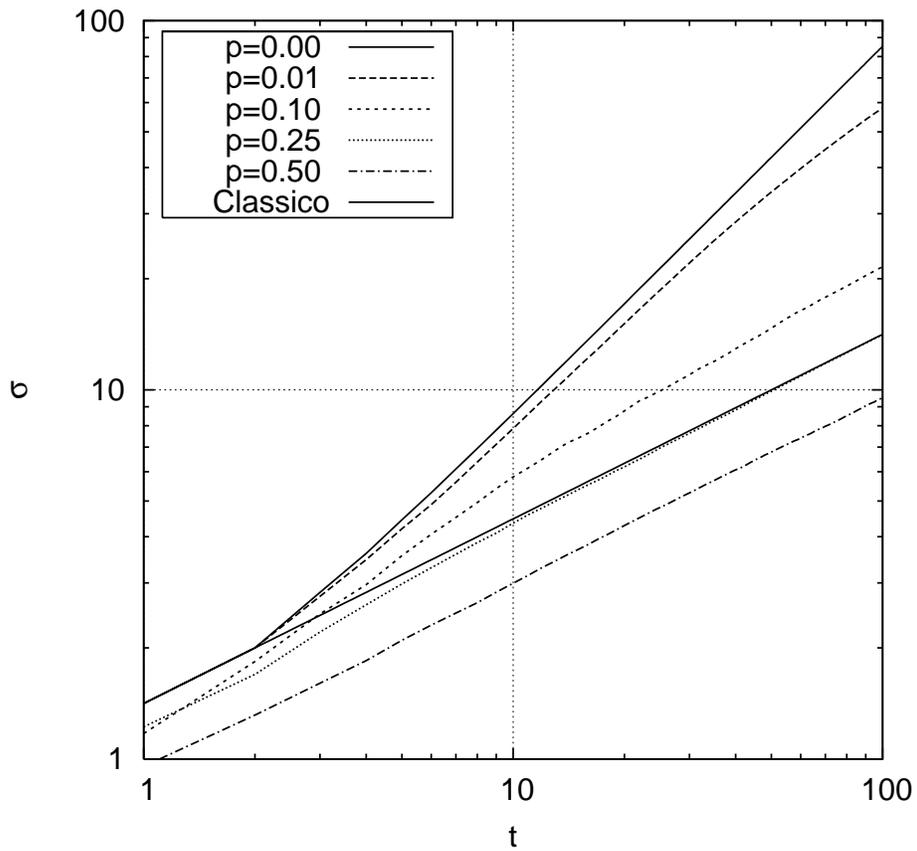


Figura 3.28: Evolução temporal do desvio padrão para o caminho de Grover com ligações interrompidas com estado inicial (3.18), nos casos em que  $p = 0.01$ ,  $0.1$ ,  $0.25$  e  $0.5$ . Nas linhas contínuas temos o caso quântico e o caso clássico sem ligações interrompidas.

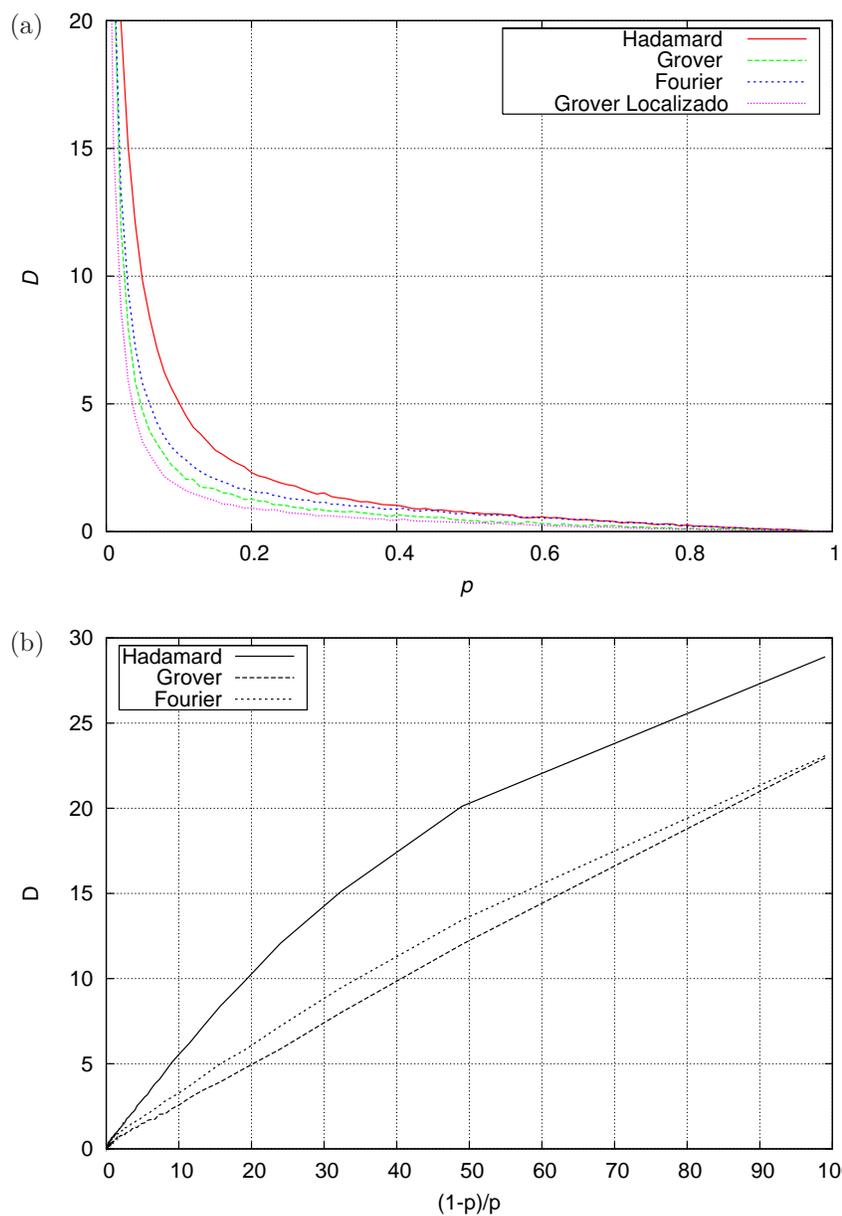


Figura 3.29: Coeficiente de difusão  $D$  para caminhantes quânticos em uma rede quadrada com ligações rompidas com probabilidade  $p$  para as moedas de Hadamard, Fourier e Grover. (a)  $D$  em função de  $p$ . (b)  $D$  em função de  $(1 - p)/p$ .

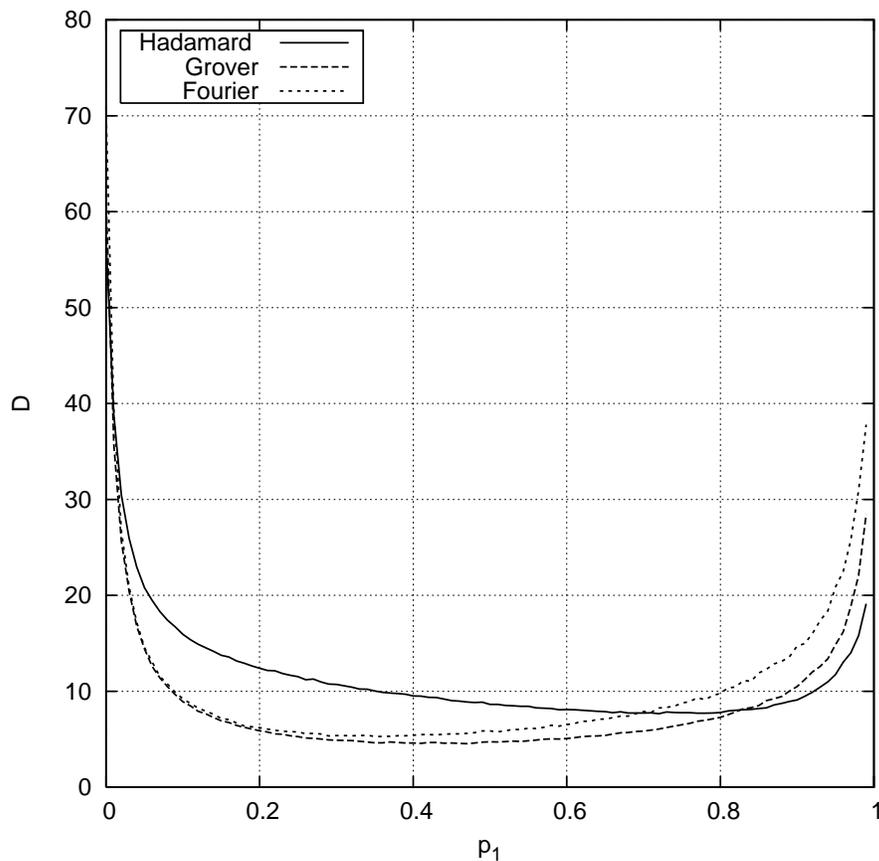


Figura 3.30: Coeficiente de difusão em função de  $p_1$  para  $p_0 = 0$  (sem ligações interrompidas nas linhas paralelas da diagonal principal). O valor mínimo do coeficiente de difusão (máxima descoerência), é alcançado para todos os casos para um valor de  $p_1 < 1$ .

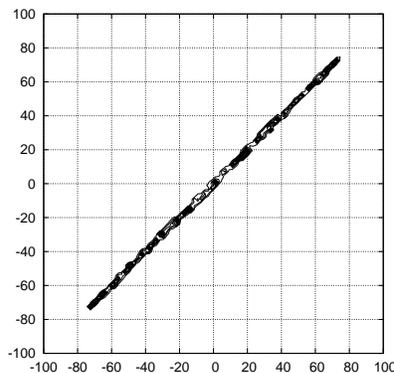
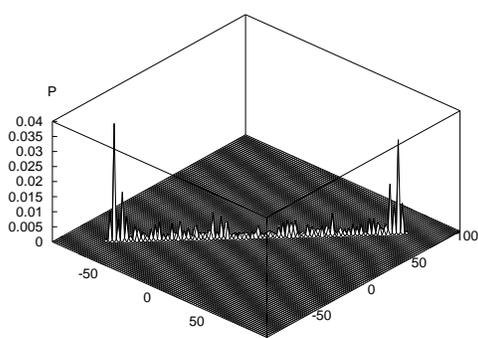


Figura 3.31: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Grover após 100 iterações com estado inicial (3.18) com probabilidade de quebra assimétrica  $p_0 = 0$  e  $p_1 = 0.99$ . O alto valor de  $p_1$  força o caminhante a ficar muito próximo da diagonal principal

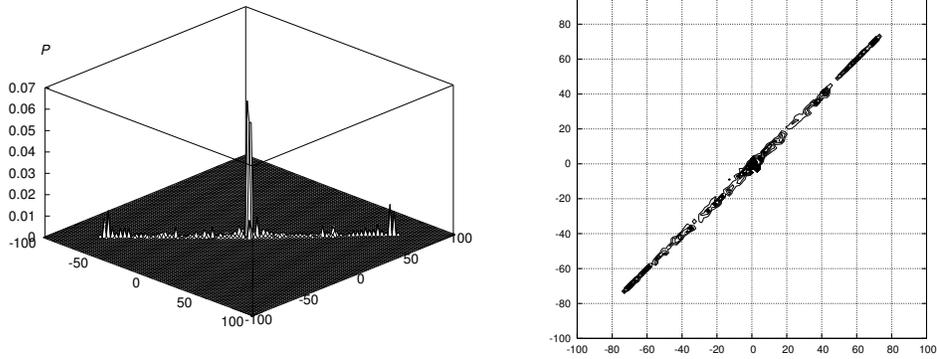


Figura 3.32: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Hadamard após 100 iterações com estado inicial (3.14) com probabilidade de quebra assimétrica  $p_0 = 0$  e  $p_1 = 0.99$ . O alto valor de  $p_1$  força o caminhante a ficar muito próximo da diagonal principal. Há também uma forte localização em torno da origem.

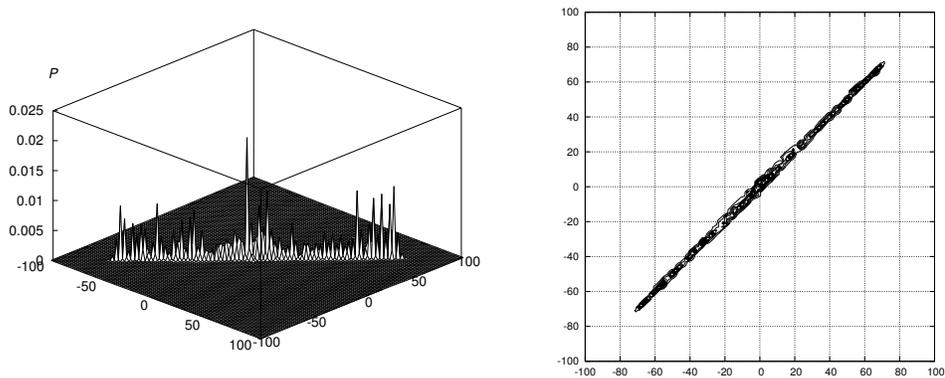


Figura 3.33: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Fourier após 100 iterações com estado inicial (3.16) com probabilidade de quebra assimétrica  $p_0 = 0$  e  $p_1 = 0.99$ . O alto valor de  $p_1$  força o caminhante a ficar muito próximo da diagonal principal. Há também uma forte localização em torno da origem.

diagonal principal, ou seja, quando  $p_0 = 0$ , em função da probabilidade de quebra ao longo da outra direção  $p_1$ . Na Figura 3.30 temos o comportamento do coeficiente de difusão em função de  $p_1$  para as três moedas consideradas. Observamos que  $D$  atinge o seu valor mínimo quando  $p_{1H} = 0.72$ ,  $p_{1F} = 0.47$  e  $p_{1G} = 0.35$  e após esse valor ele volta a crescer quando  $p_1$  aproxima-se de 1. Este é um fato totalmente diferente do que ocorre na Figura 3.29, onde  $p_0 = p_1$ , pois naquele caso o coeficiente de difusão decresce até se anular à medida que  $p_0$  e  $p_1$  vão simultaneamente para 1.

As Figuras 3.31, 3.32 e 3.33 nos ajudam a entender o que está acontecendo fisicamente. Quando  $p_0 = 0$  e  $p_1 \approx 1$  o comportamento do sistema é similar ao caso 1-D, discutido na Secção 2.3, que tem probabilidade 1/2 de se mover ao longo da diagonal principal em ambas as direções e probabilidade 1/2 de ficar no mesmo lugar. Este tipo de caminho quântico tem como operador translação

$$\begin{aligned}
S = |00\rangle\langle 00| &\otimes \sum_{x=-\infty}^{\infty} |x+1\rangle\langle x| + \\
|01\rangle\langle 01| &\otimes \sum_{x=-\infty}^{\infty} |x\rangle\langle x| + \\
|10\rangle\langle 10| &\otimes \sum_{x=-\infty}^{\infty} |x\rangle\langle x| + \\
|11\rangle\langle 11| &\otimes \sum_{x=-\infty}^{\infty} |x-1\rangle\langle x|
\end{aligned} \tag{3.32}$$

Esta variação do modelo 1-D foi estudada em Andraca et al. (2004). A distribuição de probabilidade usando o operador translação (3.33) e a moeda de Grover é apresentada na Figura 3.37. Observa-se que o seu comportamento qualitativo é muito semelhante ao da Figura 3.31. Na Figura 3.38 temos a evolução do desvio padrão para a moeda de Grover 1-D sem descoerência e 2-D em dois momentos com descoerência, podemos ver que quando aumentamos a intensidade de  $p_1$  as duas curvas praticamente coincidem sacramentando que ocorre uma transição do caso 2-D descoerente para o caso 1-D coerente. Para as moedas de Hadamard e Fourier os resultados são parecidos, como vemos nas Figuras 3.39 e 3.40, embora

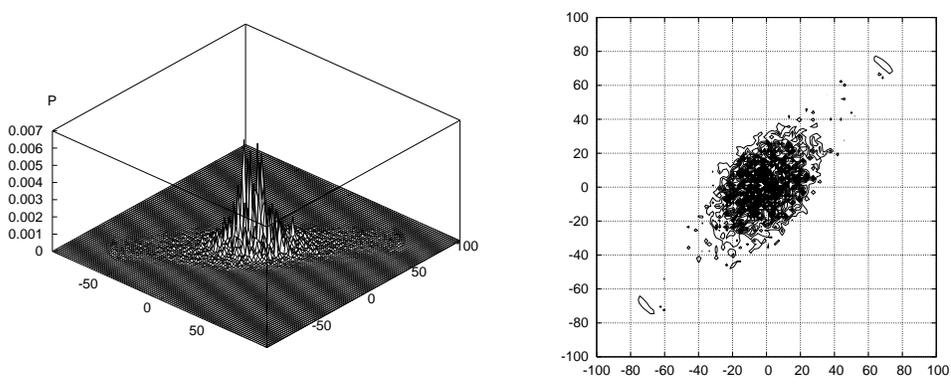


Figura 3.34: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Grover após 100 iterações com estado inicial (3.18) com probabilidade de quebra assimétrica  $p_0 = 0$  e  $p_1 = 0.35$ . O caminhante parcialmente se espalha mais ao longo da diagonal secundária, perdendo sua coerência mais rápido que o caso anterior.

a moeda de Fourier apresente a pior correspondência.

Nas Figuras 3.34, 3.35 e 3.36, quando  $p_1 = 0.35$ , vemos que o caminhante espalha-se parcialmente ao longo da direção da diagonal secundária perdendo coerência. A relação  $t_c = 1/p$  não se aplica ao caso assimétrico uma vez que temos duas probabilidades a considerar. Pelas Figuras 3.34, 3.35 e 3.36 notamos que o tempo de coerência ao longo da diagonal secundária é menor que o da diagonal principal. As correlações quânticas ainda persistem ao longo da diagonal principal mas já foram praticamente perdidas na outra direção. Como primeira aproximação podemos associar um tempo de coerência para cada direção com sendo  $t_c^{(0)} \approx 1/p_0$  e  $t_c^{(1)} \approx 1/p_1$ . Examinamos o efeito da descoerência produzida pela interrupção aleatória das ligações em uma rede quadrada. Analisamos numericamente esses efeitos nas moedas de Hadamard, Fourier e Grover tendo como estado inicial aqueles que levam ao maior desvio padrão em cada um dos casos. Encontramos que a moeda de Hadamard é mais resistente a esse tipo de descoerência que a moeda de Grover, e esta por sua vez é mais resistente que a moeda de Fourier. Encontramos também que quando as probabilidades de quebra das ligações são distintas nas duas direções o sistema apresenta uma transição de fase de um caminho 2-D coerente para um caminho 2-D descoerente e finalmente para um caminho 1-D coerente.

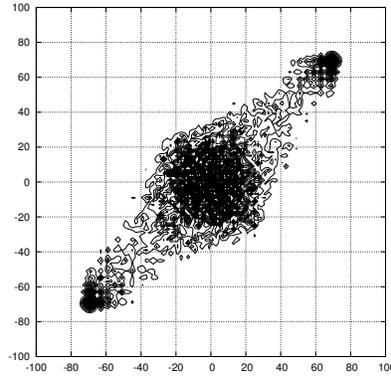
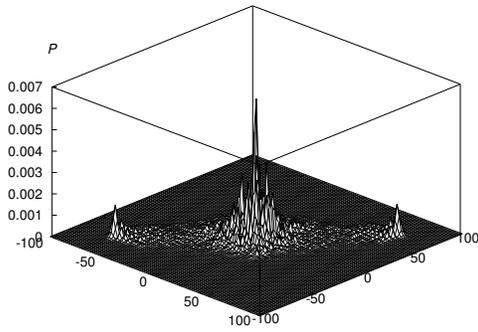


Figura 3.35: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Hadamard após 100 iterações com estado inicial (3.14) com probabilidade de quebra assimétrica  $p_0 = 0$  e  $p_1 = 0.35$ . O caminhante parcialmente se espalha mais ao longo da diagonal secundária, perdendo sua coerência mais rápido que o caso anterior.

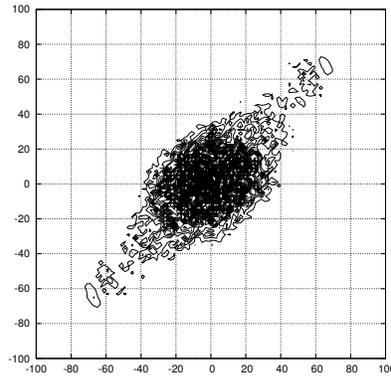
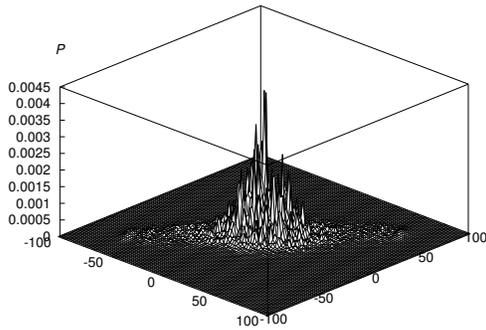


Figura 3.36: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 2-D com moeda de Fourier após 100 iterações com estado inicial (3.16) com probabilidade de quebra assimétrica  $p_0 = 0$  e  $p_1 = 0.35$ . O caminhante parcialmente se espalha mais ao longo da diagonal secundária, perdendo sua coerência mais rápido que o caso anterior.

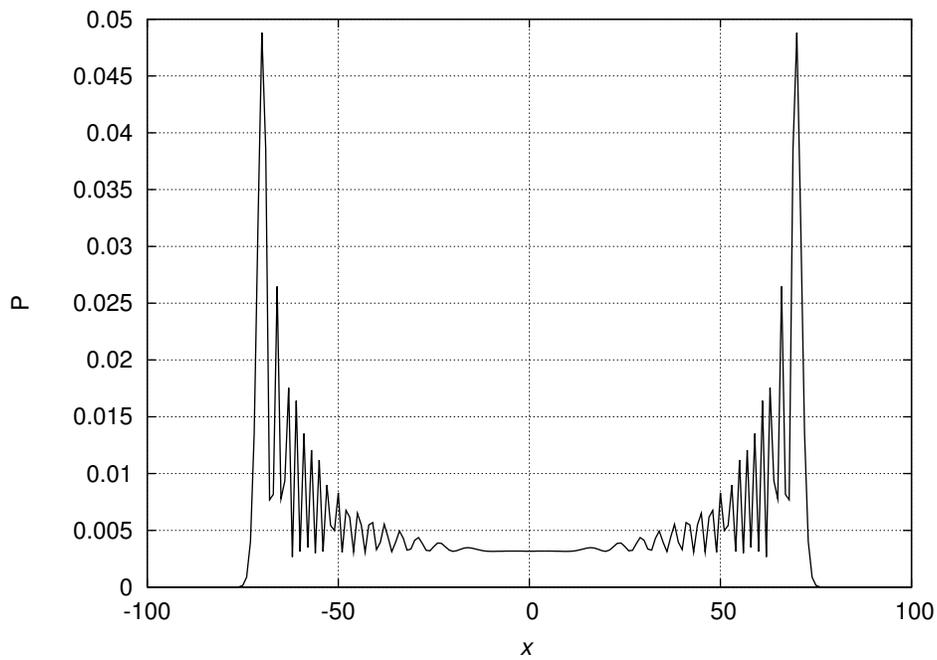


Figura 3.37: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 1-D com moeda de Grover após 100 iterações com estado inicial 3.18 usando o operador de translação (3.33).

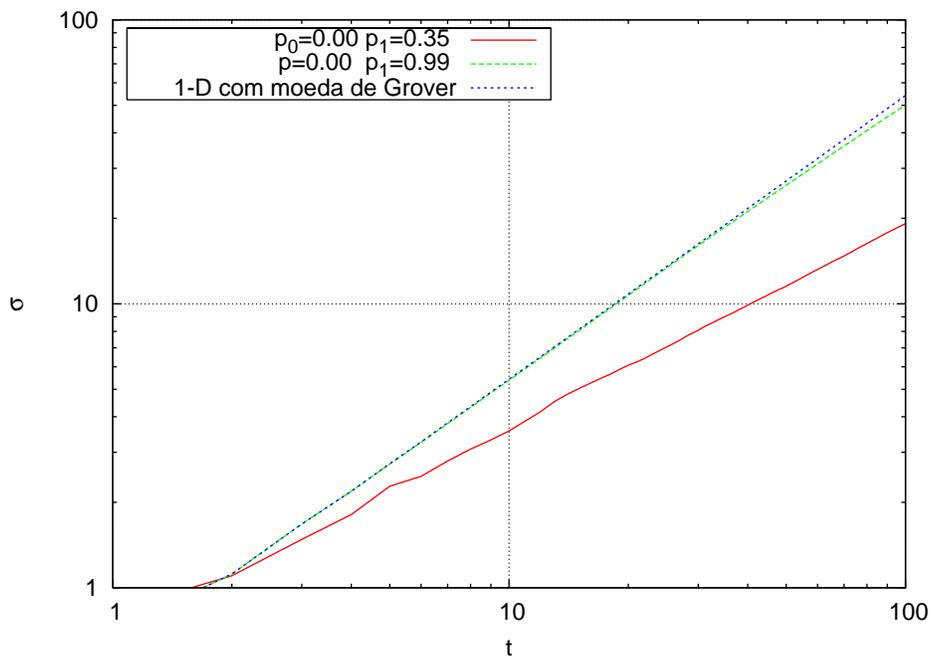


Figura 3.38: Evolução temporal do desvio padrão para o caminho de Grover com ligações interrompidas nos casos em que  $p_0 = 0$  e  $p_1 = 0.35$ ,  $p_0 = 0$  e  $p_1 = 0.99$  versus o desvio do caminho quântico 1-D com moeda de Grover após 100 iterações com estado inicial 3.18.

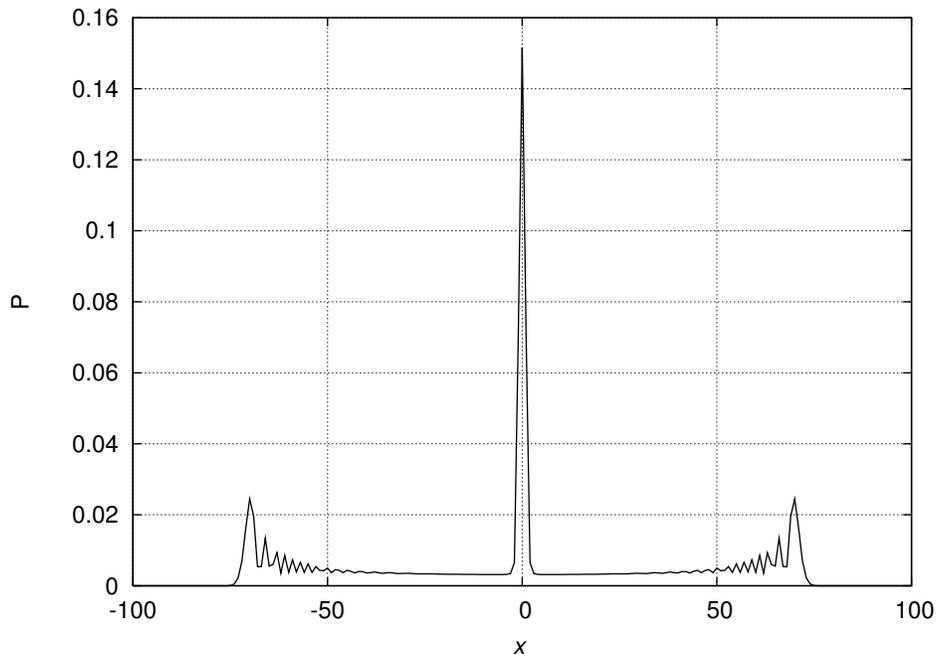


Figura 3.39: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 1-D com moeda de Hadamard após 100 iterações com estado inicial 3.14 e o operador de translação (3.33).

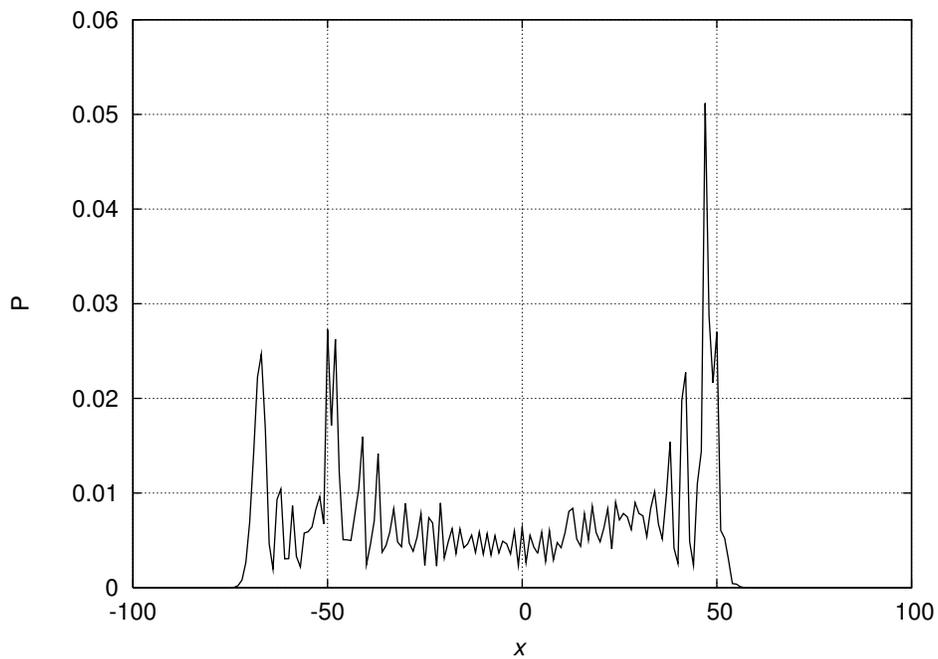


Figura 3.40: Distribuição de probabilidade do caminho quântico 1-D com moeda de Fourier após 100 iterações com estado inicial 3.16 e o operador de translação (3.33).

### 3.3 Caminhos Quânticos e Fendas

Esta secção tem como objetivo estudar as propriedades de caminhantes quânticos no plano passando por fendas. Nós usamos o formalismo geral de ligações interrompidas, através da quebra permanente das ligações apropriadas, para simular o comportamento de uma partícula quântica que passa por uma ou duas fendas. Na Figura 3.41 mostramos o esquema da simulação para um caminhante passando por uma fenda. O caminhante parte da posição  $(0, 0)$  e se move de acordo com a aplicação sucessiva do operador evolução  $U$  como é usual na teoria de caminhos quânticos. Em um ponto não tão próximo da origem existe uma parede perpendicular aos eixos horizontais com uma ou duas fendas. A parede é construída com a quebra permanente de todas as suas ligações. A fenda é constituída de pontos nessa parede que tem as ligações preservadas. Bem distante da parede há um anteparo, que está paralelo à parede, que acumula o valor da probabilidade à medida que o caminhante passa por ele. A idéia é que o aparato seja o mais próximo possível do aparato usado na experiência de fenda dupla de Young.

Atualmente os experimentos de fenda dupla são construídos de tal forma que passe somente uma partícula por vez Brukner e Zeilinger (2002); Zeilinger et al. (1988) provando que a mecânica quântica descreve corretamente o padrão de interferência de uma partícula. Aqui usamos esta mesma estratégia. Nós analisamos o padrão de interferência no anteparo através da evolução de uma única partícula. A partir da análise da distribuição de probabilidade podemos prever o que aconteceria em um experimento real.

#### 3.3.1 Caminhos Quânticos passando por uma Fenda

Vamos agora analisar o caso de um caminhante quântico em uma rede quadrada que em um dado instante se depara com uma parede com uma fenda de tamanho variável. Esta simulação apresenta muitas propriedades físicas interessantes, algumas delas similares às que aparecem no experimentos padrão de difração de ondas passando através de uma fenda.

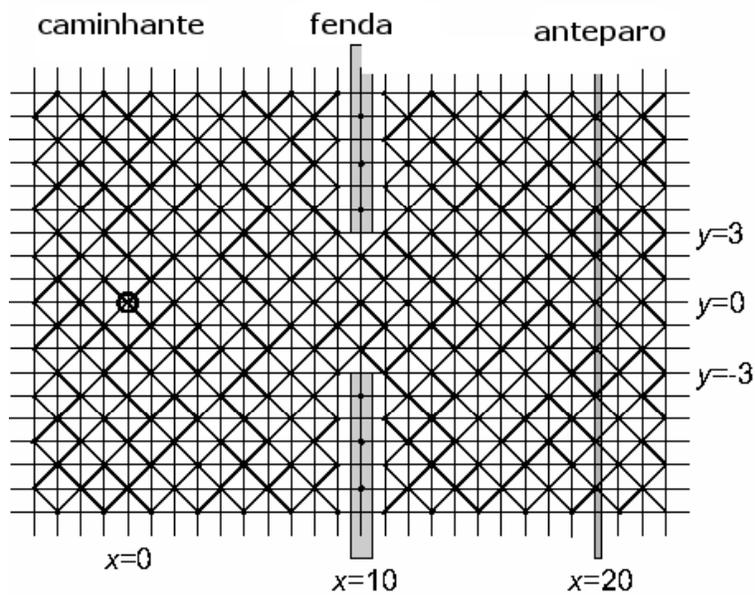


Figura 3.41: Esquema geral da simulação para uma partícula em uma rede quadrada em  $t = 0$ . A partícula está na origem  $x = y = 0$ . Em  $x = 10$  há uma parede com uma fenda entre  $y = -3$  e  $y = 3$ . O anteparo se encontra em  $x = 20$

Inicialmente falaremos, em linhas gerais, do que acontece quando uma onda de comprimento  $\lambda$  passa por uma ou por duas fendas. Na Figura 3.42 temos um esquema de uma onda passando por uma fenda de largura  $a$  e cuja distância entre a fenda e o anteparo seja  $L$ . Quando uma onda atravessa uma fenda de largura  $a$ , se  $a \gg \lambda$ , a onda passa pela fenda sem sofrer mudança de direção, reproduzindo no anteparo uma imagem com a mesma largura da fenda. Mas se a largura da fenda for reduzida, de modo que tenha um valor da mesma ordem de grandeza do comprimento de onda, isto é,  $a \cong \lambda$ , no anteparo teremos uma figura de difração que é constituída de uma pico central intenso, acompanhado de outros picos de menor intensidade, distribuídos simetricamente em relação ao pico central. Esses picos ocorrem devido à interferência construtiva devido à diferença de percurso entre as ondas. Entre os picos temos os vales de intensidade nula que são o efeito da interferência destrutiva. Fazendo  $L$  muito maior que  $a$   $L \gg a$ , pode-se considerar então que todos os raios partindo da fenda são paralelos e, assim, a localização dos mínimos de difração ( $y_{min}$ ), sobre o anteparo, pode ser determinada através da seguinte equação

$$a \sin \theta = m\lambda, \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (3.33)$$

onde  $m$  é um número inteiro que rotula os mínimos. De (3.33) é possível obter o primeiro ponto de mínima intensidade

$$y_{min} = \frac{\lambda L}{\sqrt{a^2 - \lambda^2}}, \quad (3.34)$$

onde  $L$  é a distância entre a fenda e o anteparo. Quando temos duas fendas a onda difratada por cada uma das fendas se sobrepõe (se interferem) na região entre essas fendas e o anteparo, produzindo, assim, no anteparo uma figura de interferência, também caracterizada por picos e vales bem definidos. Na Figura 3.43 apresentamos o esquema de uma onda de comprimento de onda  $\lambda$  que passa por duas fendas cujos centros distam  $d$  e com um anteparo a uma distância  $L$  das fendas. Se duas ondas coerentes, isto é, em fase, atravessam as fendas 1 e 2, elas se encontram

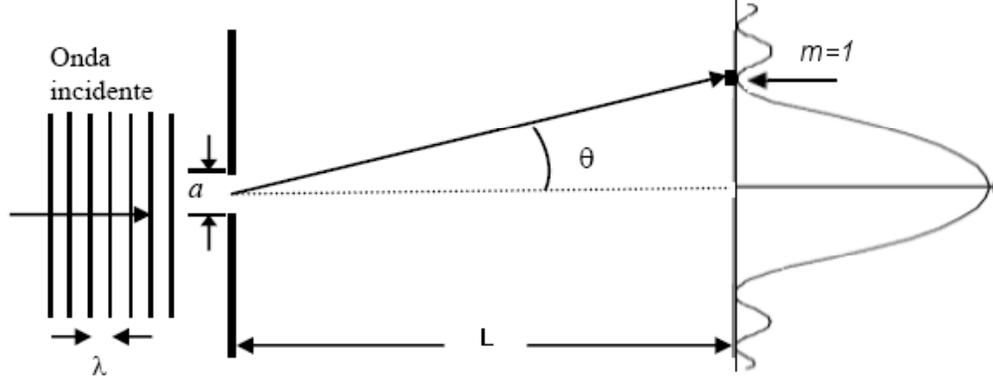


Figura 3.42: Esquema de difração de fenda única com intensidade da onda difratada.

sobre o anteparo em um ponto  $P$ , onde ocorre interferência. Se a diferença de percurso das ondas desde as fendas 1 e 2 até o anteparo no ponto  $P$ , contiver um número inteiro de comprimentos de onda, a interferência será construtiva e resulta num pico. Se a diferença de percurso contiver um número ímpar de meios comprimentos de onda, a interferência no anteparo será destrutiva, originando um vale. Em 1801, Thomas Young descreveu um método de determinar a localização dos máximos, quando ocorre interferência construtiva, e dos mínimos, quando ocorre interferência destrutiva, numa figura de interferência, numa experiência de fenda dupla. Chamando de  $d$  a distância entre os centros das duas fendas,  $L$  é a distância da fenda ao anteparo,  $\theta$  o ângulo definido na figura 2 e fazendo  $L \gg d$ , Young chegou numa equação para localização dos mínimos de interferência,

$$d \sin \theta = \left( m + \frac{1}{2} \right) \lambda, \quad m = 1, 2, \dots \quad (3.35)$$

Desta equação podemos obter as coordenadas do primeiro mínimo de intensidade ( $y_{min}$ )

$$y_{min} = \frac{\lambda L}{\sqrt{4d^2 - \lambda^2}}, \quad (3.36)$$

Como vimos nas secções anteriores a distribuição de probabilidade dos caminhan-tes quânticos sempre apresenta um padrão de paridade. Isto é, se a probabilidade em uma dada posição da rede é diferente de zero a probabilidade das suas quatro

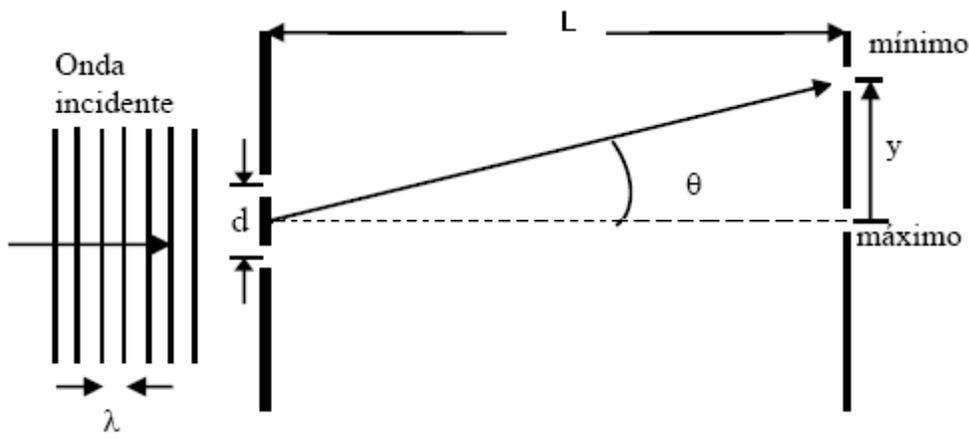


Figura 3.43: Esquema de interferência e difração numa fenda dupla.

posições vizinhas é zero e vice e versa como podemos ver na Figura 3.44. Quando a distribuição “bate” em uma parede ela é refletida e então perde esse padrão de paridade, entretanto a parte que passa através das fendas mantém sempre a mesma paridade.

Na Figura 3.45 podemos ver a figura de difração depois que a distribuição de probabilidade do caminhante 2-D para a moeda de Hadamard com estado inicial (3.14) passou através de uma fenda centrada na origem de largura<sup>1</sup> 5. Em torno de  $x = 56$  temos uma frente de onda dominante que tem um pico central rodeada por outros dois picos menores. O pico central é produzido pela interferência construtiva e tem uma natureza diferente do padrão usual do caminho de Hadamard que tem os picos maiores nas extremidades e é quase uma onda plana próximo a origem. Enquanto que os picos em  $x = -56$  são da mesma natureza daqueles produzidos no caminho de Hadamard 2-D usual. No intervalo entre  $x = -20$  e  $x = 20$  os picos são produzidos pela parte da onda que é refletida pela parede. Vemos que há diferenças significativas entre o padrão de interferência e difração produzido pelos caminhantes quânticos e o produzido pelo experimento de interferência da fenda única padrão.

A probabilidade acumulada no anteparo é a soma das probabilidades em  $x = 60$  para todos os valores de  $y$  do primeiro até o último passo. Após 100 passos

<sup>1</sup> Uma unidade é a distância entre duas posições vizinhas na direção  $x$  ou  $y$ . Só são consideradas as posições ocupadas

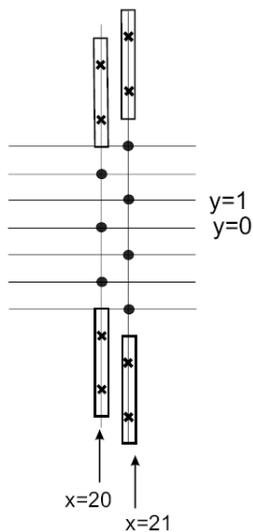


Figura 3.44: Esquema de ocupação da rede bidimensional para o lugar da fenda. Aqui observamos como a paridade da solução pode influenciar na colocação da fenda. Em  $x = 20$  a fenda tem largura 3 e em  $x = 21$  a fenda tem largura 4.

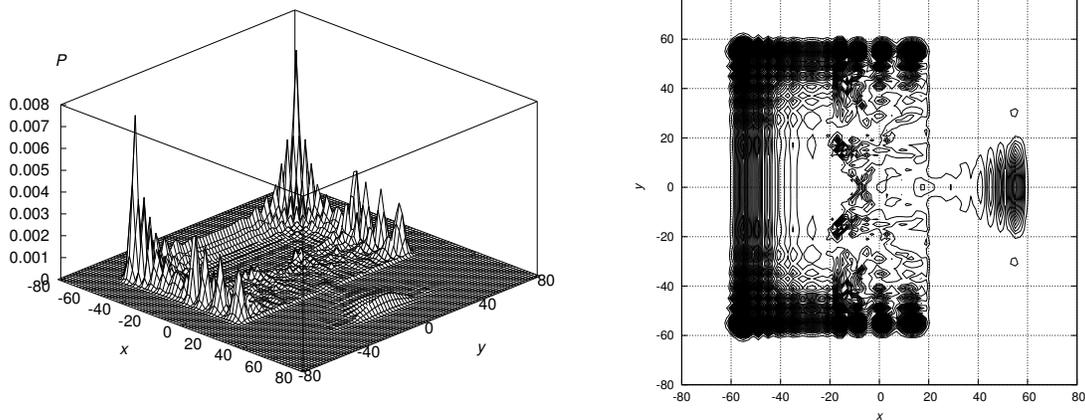


Figura 3.45: Distribuição de probabilidade para o caminhante de Hadamard em  $T = 80$  após passar por uma fenda de largura 5. A parede que contém a fenda está em  $x = 20$ . A fenda está situada no intervalo  $y \in [-4, 4]$ .

a contribuição dominante de toda a onda já passou pelo anteparo, uma vez que em  $T = 80$ , como vemos na Figura 3.45 a frente de onda acabou de chegar no anteparo que está em  $x = 60$ . Apresentamos na Figura 3.46 a distribuição de probabilidade acumulada no anteparo (*I*) Tannoudji et al. (1977) durante todo o caminho, pelos 100 passos da evolução do caminho de Hadamard, para várias larguras da fenda. Vemos claramente os padrões de interferência e difração. Para cada largura de fenda há um pico central que é produzido devido à interferência construtiva e um mínimo local de cada um dos dois lados deste pico produzido pela interferência destrutiva. Há ainda também os máximos e os mínimos secundários de ambos os lados. A intensidade do pico central cresce para as fendas de largura  $a = 3$  até as de largura  $a = 9$  quando ela atinge o seu valor máximo. Para fendas mais largas a altura do pico central passa a ser menor do que para  $a = 9$  pois a abertura já se torna muito grande comparada à frente de onda de Hadamard. Para aberturas maiores que  $a = 11$  o pico central vai desaparecendo gradativamente e os picos secundários convertem-se para os picos do caminho de Hadamard usuais nas extremidades sem efeitos de difração. Outra característica exclusiva do caminhante quântico que passa por uma fenda é que a probabilidade nos pontos de mínimos não é nula como ocorre nos experimentos padrão de difração. Nos experimentos com uma fenda os mínimos têm intensidade nula e estão localizados a um ângulo  $\theta$  do pico central dado pelas Equações (3.33) e (3.34). Estas são válidas quando ondas planas de comprimento de onda  $\lambda$  passam por uma fenda de largura  $a$  produzindo ondas secundárias coerentes de Huygen's. Neste caso a intensidade da onda nos pontos de mínimo é nula. Em nossas simulações a fenda não está longe o bastante do centro da rede, portanto poderíamos esperar somente uma coerência parcial produzindo pontos de mínimo de intensidade não nula. Além disso, tem-se que a análise de Fourier do caminho de Hadamard 1-D Nayak e Vishwanath (2000) mostra que essa onda não é composta por um único comprimento de onda. Contudo a posição do primeiro mínimo está em acordo, para um certo intervalo, com a Equação (3.34). Na Figura 3.47 temos o gráfico de  $y_{min}$  obtido da Equação (3.34)

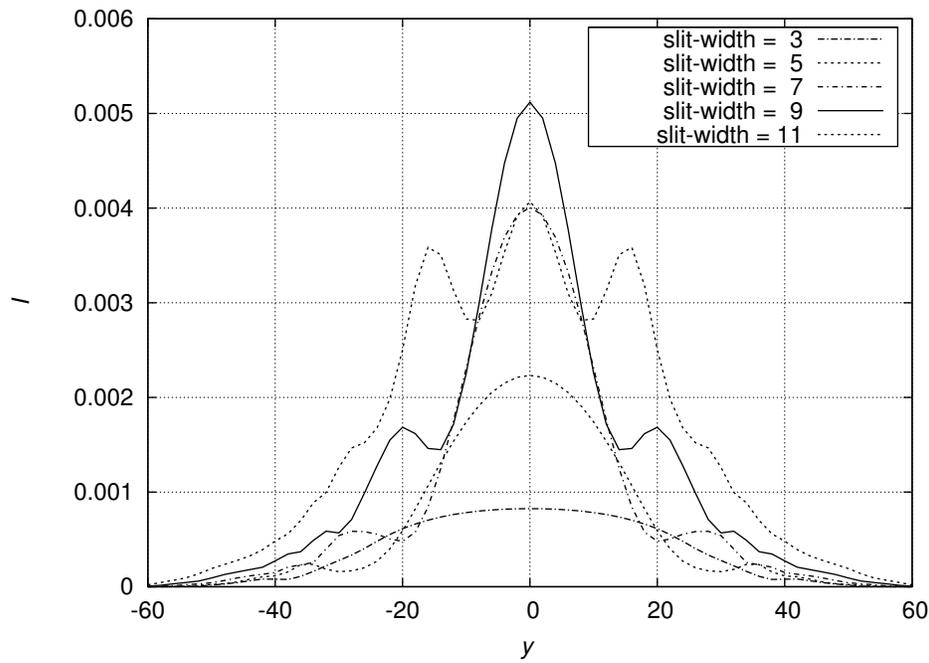


Figura 3.46: Acumulado da distribuição de probabilidade com a moeda de Hadamard após 100 passos. Para fendas com largura 3, 5, 7, 9 e 11. A fenda está em  $x = 20$  e o anteparo em  $x = 60$ .

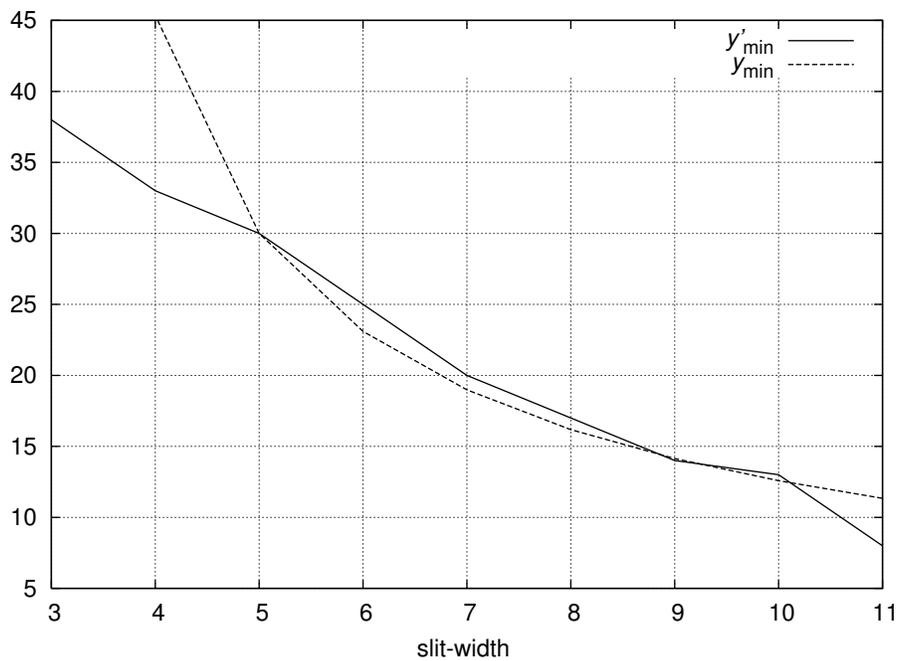


Figura 3.47: A coordenada do primeiro mínimo ( $y'_{min}$ ) do caminho de Hadamard em função da largura da fenda. A curva para ( $y_{min}$ ) dada pela Equação.(3.34) é usada para a comparação com  $\lambda = 3.0$ .

com  $\lambda = 3.0$ , curva tracejada, e o gráfico de  $y'_{min}$ , que são as coordenadas do primeiro mínimo da distribuição de probabilidade do caminhante (curva contínua), ambos em função da largura da fenda. Os valores de  $y'_{min}$  para as fendas de largura 3, 5, 7, 9 e 11 foram obtidos de acordo com a Figura 3.46, enquanto os valores para as fendas de largura 4, 6, 8 e 10 foram obtidos colocando-se a fenda em  $x = 21$  e o anteparo em  $x = 61$  por questão da paridade da solução. Note que em  $x = 21$  a posição  $y = 0$  não está ocupada, assim conseguimos obter fendas de largura par. Vemos que a difração por uma fenda padrão Equação (3.34) tem a mesma ordem de grandeza da difração dos caminhantes quânticos por uma fenda de largura maior que 4 se escolhermos  $\lambda = 3.0$ . Para valores menores ou iguais a 4 a difração padrão apresenta valores maiores que o caminhante quântico. Realmente  $y_{min}$  diverge quando  $a \rightarrow \lambda^+$ , enquanto  $y'_{min}$  não apresenta singularidades quando a largura da fenda é igual a 1, 2 ou 3. Para a fenda de largura 1 temos o menor espalhamento possível uma vez que só há um ponto de ligação entre o lado esquerdo da parede e lado direito. O espalhamento na direção  $y$  é limitado pelo espalhamento da moeda de Hadamard, que está entre  $y = \pm 60$ .

### 3.3.2 Caminhos Quânticos passando por Fenda Dupla

Imagine um caminhante quântico que inicia seu caminho partindo da origem e que se move em uma rede quadrada pela aplicação sucessiva do operador evolução unitário  $U$  e num dado instante se depara com uma parede impenetrável, que possui apenas duas fendas pelas quais é possível continuar o percurso para o outro lado. Nesta secção analisaremos o que acontece com a distribuição de probabilidade desse caminhante e compararemos os resultados com os resultados do experimento de fenda dupla de Young.

No experimento de fenda dupla de Young o padrão de intensidade no anteparo apresenta muitas franjas produzidas pela interferência e difração das ondas que passam por cada uma das duas fendas. As franjas são moduladas pela difração e interferência das ondas devido ao tamanho finito da fenda. Se a fenda é muito pe-

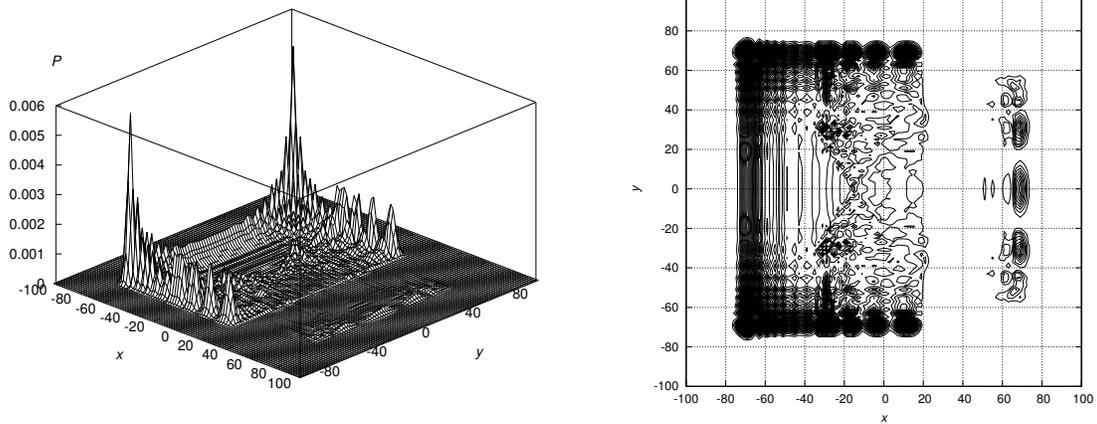


Figura 3.48: Distribuição de probabilidade para a moeda de Hadamard após 100 passos após passar por duas fendas de largura 1. O centro da fenda superior é  $y = 6$  e o da inferior é  $y = -6$ . A fenda está localizada em  $x = 20$ . A probabilidade da onda para  $(x > 20)$  foi aumentada 5 vezes para melhor visualização.

quena, em comparação com o comprimento de onda, as franjas são moduladas por um largo pico central. Na Figura 3.48 podemos observar esse mesmo tipo de comportamento para o caminhante com moeda de Hadamard. Também observamos os padrões de interferência e difração. Há cinco picos produzidos por interferência construtiva interlaçados por quatro vales produzidos pela interferência destrutiva. A frente de onda é espalhada devido ao pequeno tamanho das fendas que é da mesma ordem dos menores comprimentos de onda presentes na decomposição de Fourier do caminhante quântico. A frente de onda é plana e está localizada em torno de  $x = 70$ . No experimento de Young a frente de onda é semi-circular, o fato de aqui ela ser plana é uma característica da moeda de Hadamard produzida pelos efeitos de interferência quântica. Nas simulações com as moedas de Grover e Fourier observamos que a frente de onda apresenta uma forma mais curvada indicando uma dependência entre a forma da frente de onda e a moeda considerada. Uma outra diferença em relação ao experimento de Young é o fato de que a largura da frente de onda está limitada pelos dois extremos  $y = \pm 100$ . A função de onda é totalmente nula além desses limites.

Na Figura 3.49 temos a distribuição de probabilidade acumulada no anteparo por 100 passos para o caminhante com moeda de Hadamard como na Figura 3.48. Observamos os detalhes da seqüência alternada de máximos e mínimos. Para melhor observarmos o padrão de interferência quântica apresentamos também nesta figura as situações em que cada uma das fendas é tampada. Na curva tracejada a fenda inferior foi fechada e na curva pontilhada fechamos a fenda superior. Podemos ver claramente que se adicionarmos essas duas curvas não obteremos a curva contínua que resulta de um padrão de interferência. Também observamos que cada uma das curvas isoladas não apresenta o padrão de interferência. Este resultado sacramenta o comportamento ondulatório do caminhante quântico. Outro detalhe é que o valor da intensidade do primeiro mínimo é muito próximo de zero, sinalizando que as ondas que passam pelas fendas apresentam grande coerência.

Na Figura 3.50 apresentamos o comportamento de  $y_{min}$ , curva tracejada,

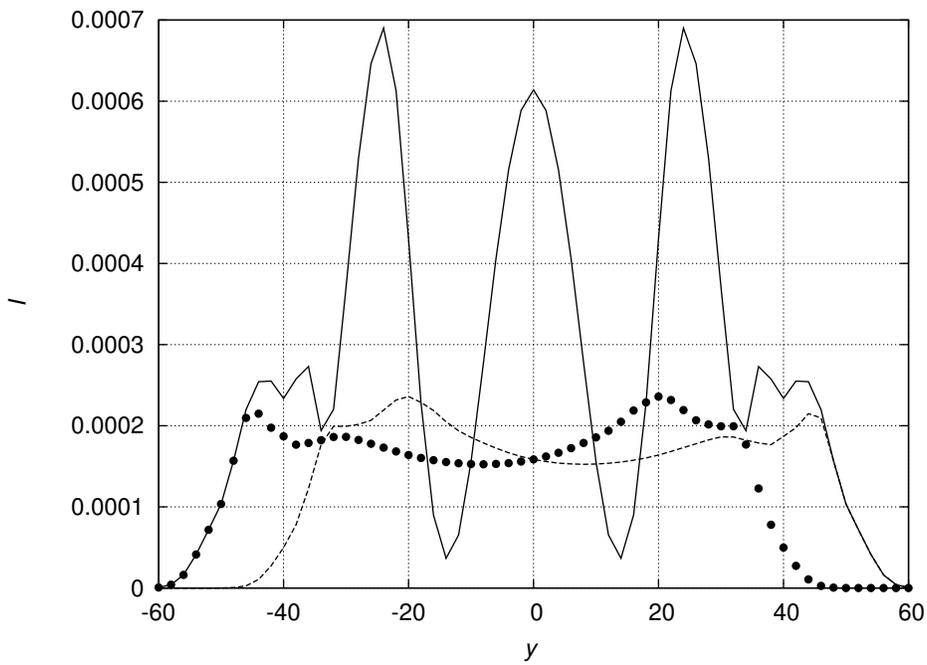


Figura 3.49: Acumulado da distribuição de probabilidade com a moeda de Hadamard após 100 passos após passar por duas fendas de largura 1. O centro da fenda superior é  $y = 6$  e o da inferior é  $y = -6$ . O anteparo está localizada em  $x = 60$ . A curva tracejada acontece quando a fenda inferior está fechada e a superior aberta. A curva pontilhada é para o caso inverso.

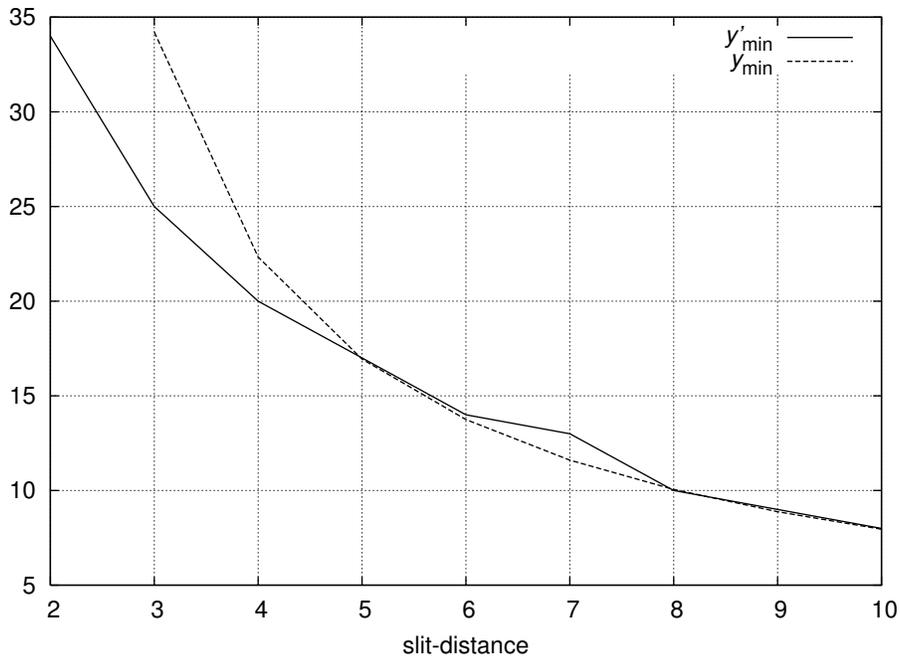


Figura 3.50: A coordenada do primeiro mínimo ( $y'_{min}$ ) do caminho de Hadamard em função da distância entre os centros das duas fendas. A curva para ( $y_{min}$ ) dada pela Equação(3.36) é usada para a comparação com  $\lambda = 3.9$ .

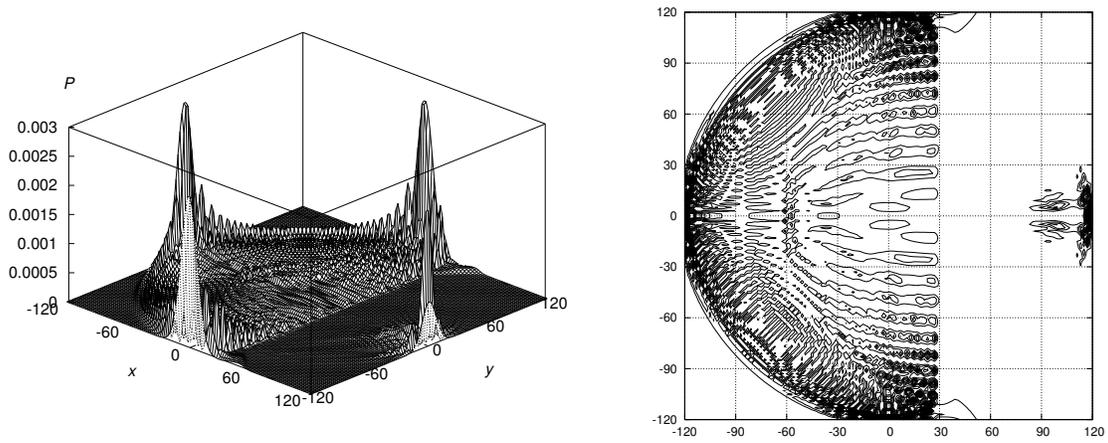


Figura 3.51: Distribuição de probabilidade para a moeda de Grover após 120 passos após passar por duas fendas de largura 1. O centro da fenda superior é  $y = 3$  e o da inferior é  $y = -3$ . A fenda está localizada em  $x = 30$ . Essas pequenas linhas que aparecem próximas a  $x = 30$  e  $y = \pm 120$  são devidas a um efeito de borda gerado pelo programa Gnuplot. No arquivo de saída de dados verificamos que não há nenhuma parte da onda nessa região.

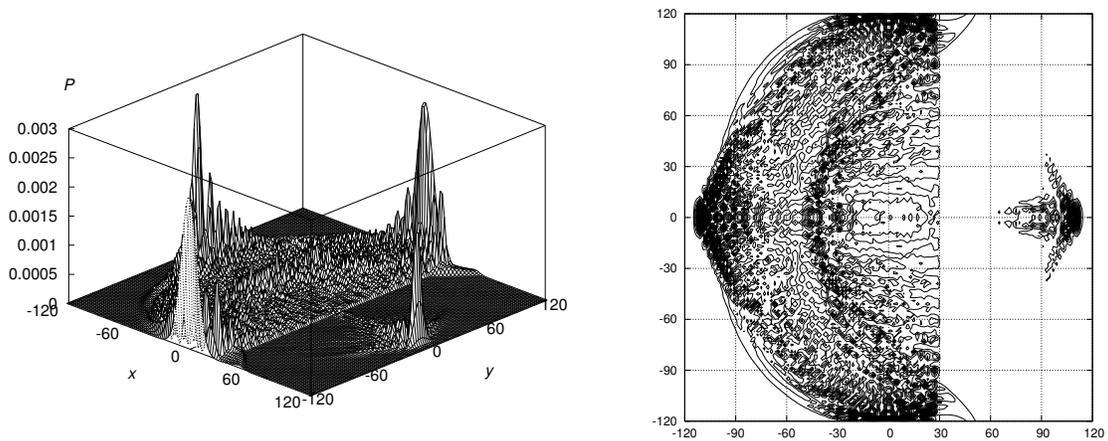


Figura 3.52: Distribuição de probabilidade para a moeda de Fourier após 120 passos após passar por duas fendas de largura 1. O centro da fenda superior é  $y = 3$  e o da inferior é  $y = -3$ . A fenda está localizada em  $x = 30$ . Essas pequenas linhas que aparecem próximas a  $x = 30$  e  $y = \pm 120$  são devidas a um efeito de borda gerado pelo programa Gnuplot. No arquivo de saída de dados verificamos que não há nenhuma parte da onda nessa região.

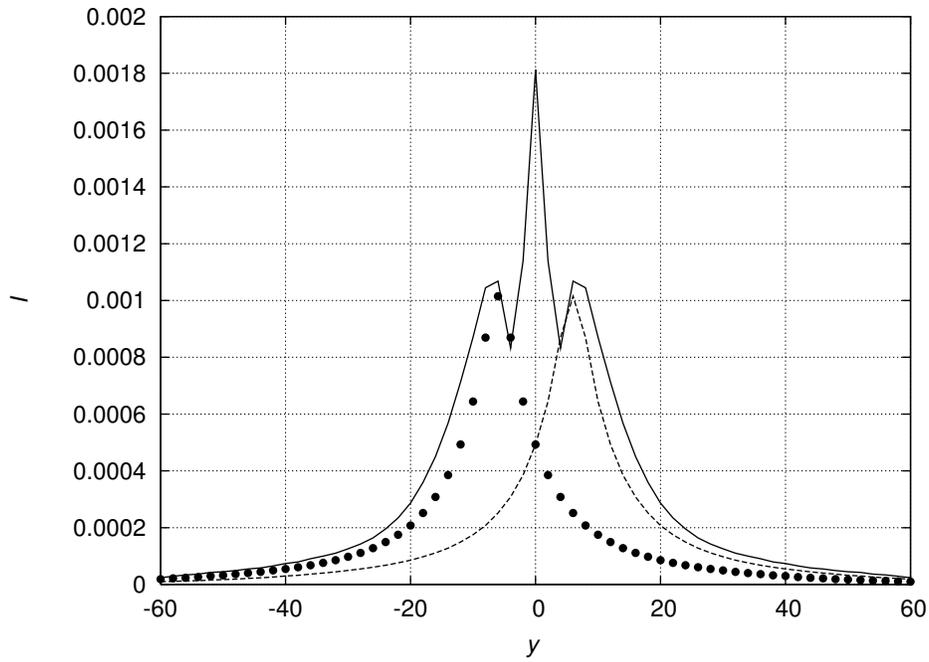


Figura 3.53: Acumulado da distribuição de probabilidade com a moeda de Grover após 120 passos após passar por duas fendas de largura 1. O centro da fenda superior é  $y = 3$  e o da inferior é  $y = -3$ . A fenda está em  $x = 30$  e o anteparo em  $x = 70$ .

dado pela Equação 3.36 com  $\lambda = 3.9$  e  $y'_{min}$  a partir da distribuição de probabilidade acumulada no anteparo, curva contínua, ambos em função da distância  $d$  entre os centros das duas fendas. Vemos que o comportamento dessa grandeza é muito similar ao encontrado para o caso de uma fenda na Figura 3.47. Novamente vemos que  $y_{min} \rightarrow \infty$  quando  $d \rightarrow \frac{\lambda^+}{2}$  enquanto  $y'_{min}$  tem um comportamento suave para  $d$  menor ou igual a  $\frac{\lambda}{2}$ . A menor distância possível entre as duas fendas é 2. No caso de duas fendas com maiores e menores distâncias entre as fendas podemos assumir que as ondas vindas das fendas são coerentes. De fato temos que a Equação 3.36 é uma boa aproximação quando a distância entre as fendas é maior ou igual a 5. Os valores de  $\lambda$  que aproximam  $y_{min}$  e  $y'_{min}$  são diferentes do caso de fenda única. Analisamos o comportamento das outras duas moedas: Grover e Fourier. Nas Figuras 3.51 e 3.52 apresentamos o comportamento da distribuição de probabilidade após 120 passos para duas fendas centradas em  $y = \pm 3$  e nas Figuras 3.53 e 3.54 o comportamento da distribuição de probabilidade acumulada no anteparo. As condições iniciais são aquelas que maximizam o espalhamento para cada uma das moedas. Ambas as moedas são caracterizadas por um grande pico central rodeado por um mínimo de cada lado. Também apresentamos o comportamento da intensidade quando fechamos uma das fendas de cada vez, e podemos ver que essas curvas de uma fenda não apresentam o comportamento de interferência presente quando as duas fendas estão abertas. Das três moedas analisadas, a moeda de Hadamard por apresentar a frente de onda plana parece ser a mais rica para o estudo de caminhantes quânticos passando por fendas.

Fizemos o estudo dos padrões de interferência e difração da distribuição de probabilidade de caminhantes quânticos passando por uma ou duas fendas usando as moedas de Hadamard, Fourier e Grover. Construimos as fendas através do formalismo de ligações interrompidas quebrando permanentemente as ligações apropriadas para gerar a parede e as fendas. Pudemos observar que o caminhante quântico ao passar por uma ou duas fendas apresenta o comportamento de interferência e de difração, sendo a moeda de Hadamard a mais interessante para este tipo

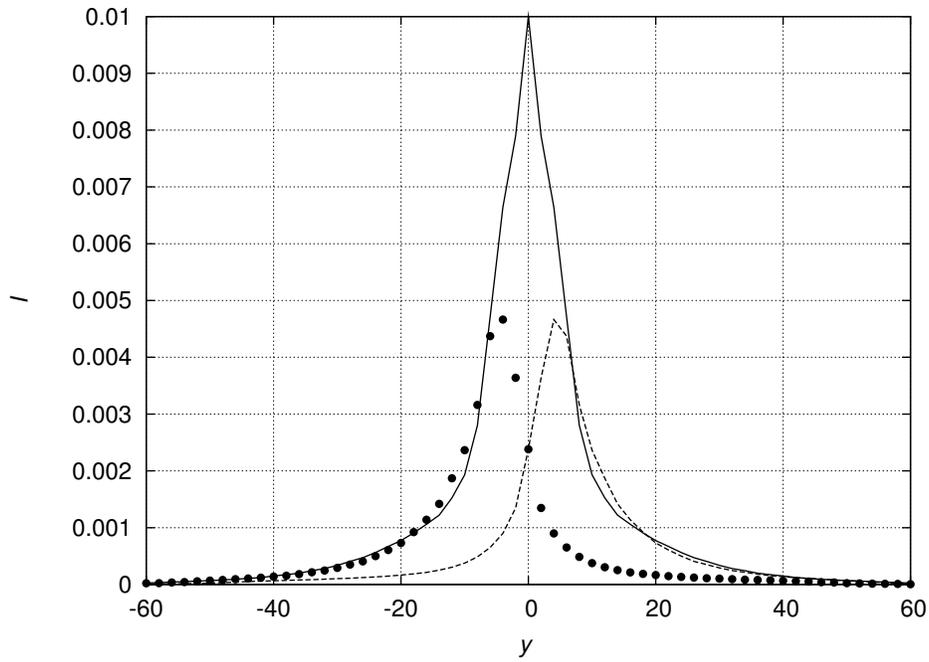


Figura 3.54: Acumulado da distribuição de probabilidade com a moeda de Fourier após 120 passos após passar por duas fendas de largura 1. O centro da fenda superior é  $y = 3$  e o da inferior é  $y = -3$ . A fenda está em  $x = 30$  e o anteparo em  $x = 70$ .

de análise. Comparamos a posição do primeiro ponto de mínimo em cada um dos dois casos e obtivemos certo acordo com os resultados obtidos experimentalmente para uma e duas fendas.

# Capítulo 4

## Conclusões e Perspectivas

O principal resultado desse trabalho foi o desenvolvimento de um formalismo geral para a análise de caminhantes quânticos, em vários tipos de redes, através do estabelecimento das ligações interrompidas apropriadas. Propiciando além do estudo dos efeitos da descoerência do tipo ligações interrompidas, como também o estudo dos mais diversos tipos de evolução de caminhantes quânticos em topologias distintas e em quantas dimensões for necessário.

Com este formalismo foi possível a descrição, simulação, interpretação e análise de diversos tipos de caminhantes quânticos em uma e duas dimensões. Obtivemos resultados novos e interessantes. Além disso simulamos, pela primeira vez na literatura, o comportamento de caminhantes quânticos passando por uma e duas fendas.

Inicialmente, para tomar familiaridade com o tipo de sistema, e início do desenvolvimento da parte teórica para estabelecimento das equações de evolução, estudamos o caminhante quântico em uma dimensão cuja moeda apresenta as três possibilidades distintas: a de ficar na posição atual e as duas outras usuais: de ir para a direita e de ir para a esquerda em cada passo. Analisamos através de nossa técnica de simulação numérica as duas moedas relevantes para este caso: Fourier e Grover. Nossos resultados apresentaram pleno acordo com os resultados analíticos aproximados na literatura Inui et al. (2005). As distribuições de probabilidade desse tipo de caminho quântico podem apresentar uma forma particular

que são notadamente diferentes dos caminhos quânticos usuais, além de poderem ser também muito diferentes de seu análogo clássico. O principal resultado dessa análise é a localização da partícula na origem com alta probabilidade, fato este que não ocorre no caso usual com a moeda de duas possibilidades. E que pode ser muito útil, por exemplo, na aplicação do algoritmo de caminhantes quânticos para a procura de soluções para um determinado problema computacional cujas soluções sejam instâncias em um conjunto contável.

Desenvolvemos o formalismo geral de evolução temporal para os caminhantes quânticos em 1-D e 2-D com ou sem ligações interrompidas no espaço posição e que pode ser facilmente estendido para qualquer dimensão. Este resultado permitiu a análise e validação de nossos resultados numéricos uma vez que com a aplicação do operador  $U$  no estado inicial evoluímos o sistema até um certo número arbitrário de passos e posteriormente com a aplicação do operador  $U^\dagger$  aplicando o mesmo número de passos no estado final gerado por  $U$  retornamos ao estado inicial com grande precisão, garantindo assim a robustez de nossa simulação.

Analizamos o comportamento da distribuição de probabilidade e do desvio padrão para um caminhante quântico que se move em uma rede quadrada usando os três tipos de moedas mais relevantes para os caminhantes no plano Hadamard, Fourier e Grover e algumas condições iniciais distintas. Verificamos que essas moedas se comportam de forma distinta e que a distribuição de probabilidade e o desvio padrão podem ser muito afetados pela escolha das condições iniciais. Encontramos ainda que a moeda de Grover é a moeda que apresenta o maior e também o menor desvio padrão de acordo com a condição inicial escolhida. Comparando com o caso 1-D observamos que o espalhamento da distribuição de probabilidade no plano é  $\sqrt{2}$  vezes mais rápida que na reta.

Desenvolvemos o formalismo geral para o caso de caminhantes quânticos com ligações interrompidas e também a sua generalização para caminhantes quânticos em redes de  $n$  dimensões, expandindo muito a possibilidade de estudos para os mais variados tipos de sistemas. Este tratamento nos permite estudar a evolução

de caminhantes quânticos em redes de formas arbitárias através da quebra das ligações apropriadas para definir as bordas das superfícies. Além do estudo geral de caminhantes quânticos em dimensões maiores há muitas outras aplicações para este método como por exemplo o estudo da transmissão dos caminhantes quânticos em mesas de bilhares abertas Berggren et al. (2002) ou em uma região em que classicamente o movimento seria caótico. Há também outras possíveis aplicações, como o problema de percolação quântica e a propagação da partícula por meios não homogêneos, onde a interface de das duas regiões apresente diferentes propriedades.

Usando o formalismo de ligações interrompidas, através da quebra permanente das ligações adequadas, colocamos o caminhante quântico em dois tipos de caixas, quadrada e losangular, e analisamos o comportamento da distribuição de probabilidade e a evolução temporal do desvio padrão para as três moedas e observamos que as moedas apresentam sensibilidades diferentes em relação ao tipo de caixa que se encontram. A moeda de Hadamard é a que se comporta com mais regularidade em caixas quadradas enquanto que no caso de caixas losangulares as moedas de Grover e Fourier se saem melhor. Também observamos o comportamento do *mixing time* para o caso da caixa quadrada e também sem o primeiro quadrante e vemos como essa grandeza pode trazer muitas informações a respeito do que está ocorrendo com a distribuição de probabilidade, e como pode ser muito útil na investigação do caminhante quântico em grafos e em especial no hipercubo.

Estudamos criteriosamente a descoerência produzida pela quebra aleatória das ligações em uma rede quadrada. Usamos as moedas de Hadamard, Fourier e Grover tendo como condição inicial as que levam ao maior espalhamento no plano para cada uma das moedas. Encontramos que a moeda de Hadamard, com essa condição inicial, é a mais resistente a este tipo de descoerência seguida pela moeda de Grover e por último a de Fourier. Comparamos nossos resultados com os existentes para o caso 1-D e observamos certo acordo. Entretanto quando introduzimos assimetria na descoerência vimos que os caminhantes quânticos se comportam de maneira peculiar que leva a uma transição de um caminhante quântico 2-D coe-

rente para um caminhante quântico 2-D descoerente e posteriormente para um caso 1-D coerente. Há grande interesse em se investigar o que acontece em dimensões maiores, bem como na evolução com ligações interrompidas para o hipercubo de  $n$  dimensões.

Simulamos através da quebra permanente das ligações apropriadas o comportamento de caminhantes quânticos passando através de uma ou duas fendas e comparamos com os resultados do experimento padrão de interferência e difração para uma e duas fendas. Observamos que os caminhantes quânticos também apresentam interferência e difração ao passarem por fendas e se depararem com um anteparo. Analisamos o comportamento desses sistemas para a três moedas e para vários tamanhos de fendas. A posição do primeiro mínimo de interferência e difração foi analisada e comparada com os resultados do experimento de uma e duas fendas. A simulação de Hadamard se mostrou a mais interessante para este estudo, pois a onda que chega na fenda está mais homogênea, enquanto que para as duas outras situações analisadas, Fourier e Grover, há um pico central no entre as fendas. Observamos também que as fórmulas padrão podem explicar para um certo valor de comprimento de onda  $\lambda$  a posição do primeiro mínimo para um certo intervalo de largura das fendas. Vimos que as fórmulas padrão são boas aproximações para nossos resultados exceto para fendas muito pequenas. Em trabalhos futuros há o interesse em se introduzir medidas parciais para se analisar a relação de complementaridade entre o aparecimento das franjas de interferência e o conhecimento de por qual fenda o caminhante passou. Há interesse também em se analisar o comportamento de mais de um caminhante passando por uma e duas fendas.

Dada a extrema simplicidade, versatilidade e robustez do formalismo de ligações interrompidas para caminhantes quânticos, que foi por nós aplicado e generalizado para diversos tipos de topologias e sistemas, surgiram muitas frentes de trabalho que ainda precisam ser exploradas. Este método pode ser útil não somente como ferramenta para o desenvolvimento de algoritmos quânticos mais eficientes

como também para a modelagem de diversos sistemas quânticos. Para trabalhos futuros há grande interesse em se modelar o comportamento da descoerência unitária por ligações interrompidas no hipercubo de  $n$ -dimensões . Há também interesse em se investigar o comportamento da descoerência assimétrica em caminhantes quânticos em dimensões maiores que dois, além de outras topologias possíveis.

# Referências Bibliográficas

- D. Aharonov, A. Ambainis, J. Kempe, e U. Vazirani. Quantum walks on graphs. In **Proc. 33th STOC**, páginas 50–59, New York, NY, 2001. ACM.
- Y. Aharonov, L. Davidovich, e N. Zagury. Quantum random walks. **Phys. Rev. A**, 48(2):1687–1690, 1993.
- A. Ambainis. Quantum walk algorithm for element distinctness. **SIAM Journal on Computing**, 37, 2003a. lanl-arXive quant-ph/0311001.
- A. Ambainis. Quantum walks and their algorithmic applications. **International Journal of Quantum Information**, 1:507, 2003b. lanl-arXive quant-ph/0403120.
- A. Ambainis. Quantum search algorithms. **SIGACT News**, 35, 2004. lanl-arXive quant-ph/0504012.
- A. Ambainis, E. Bach, A. Nayak, A. Vishwanath, e J. Watrous. One-dimensional quantum walks. In **Proc. 33th STOC**, páginas 60–69, New York, NY, 2001. ACM.
- S. E. Venegas Andraca, J. L. Ball, K. Burnett, e S. Bose. Quantum walks with entangled coins. **New J. Phys.**, 7:221, 2004. lanl-arXive quant-ph/0411151.
- H. Azuma. Decoherence on grover’s quantum algorithm: perturbative approach. **Phys. Rev. A**, 65:042311, 2002.
- D. Bacon, D. A. Lidar, e K. B. Whaley. Robustness of decoherence-free subspaces for quantum computation. **Phys. Rev. A**, 60:1944, 1999.

- K. F. Berggren, A. F. Sadreev, e A. A. Starikov. Crossover from regular to irregular behavior in current flow through open billiards. **Physical Review E**, 66:016218, 2002.
- G. P. Berman, D. I. Kamenev, R. B. Kassman, C. Pineda, e V. I. Tsifrinovich. Method for implementation of universal quantum logic gates in a scalable ising spin quantum computer. **Int. J. Quant. Inf.**, 1:51, 2003. lanl-arXive quant-ph/0212070.
- E. Bernstein e U. Vazirani. Quantum complexity theory. In **SIAM J. Comp**, página 1411, 1997.
- P. Brémaud. **Markov chains, Gibbs fields, Monte Carlo simulation, and queues**. Springer-Verlag, New York, 1999.
- C. Brukner e A. Zeilinger. Young's experiment and the finiteness of information. **Phil. Trans. R. Soc. Lond. A**, 409:46, 2002.
- T. A. Brun, H. A. Carteret, e A. Ambainis. Quantum random walks with decoherent coins. **Phys. Rev. A**, 67:032304, 2003a. lanl-arXive quant-ph/0210180.
- T. A. Brun, H. A. Carteret, e A. Ambainis. The quantum to classical transition for random walks. **Phys. Rev. Lett.**, 91:130602, 2003b.
- T. A. Brun, H. A. Carteret, e A. Ambainis. Quantum to classical transition for random walks. **Phys. Rev. Lett.**, 91:130602, 2003c. lanl-arXive quant-ph/0208195;*ibid.* Phys. Rev. A 67, 032304 (2003) lanl-arXiv:quant-ph/0210180, quant-ph/0210161.
- T. A. Brun, H. A. Carteret, e A. Ambainis. Quantum walks driven by many coins. **Phys. Rev. A**, 67:052317, 2003d.
- A. M. Childs, R. Cleve, E. Deotto, E. Farhi, S. Gutmann, e D. A. Spielman. Exponential algorithmic speedup by quantum walk. **Proc. 35th ACM Sym-**

- posium on Theory of Computing**, páginas 59–68, 2003. lanl-arXive quant-ph/0209131.
- A. M. Childs e J. Goldstone. Spatial search by quantum walk. **Phys. Rev. A**, 70:022314, 2004. lanl-arXive quant-ph/0306054.
- R. P. Crease. The most beautiful experiment. **Physics World**, Setembro, 2002. <http://physicsweb.org/articles/world/15/9/2/1>.
- J. C. Cressoni, M. A. A. da Silva, e G. M. Viswanathan. Amnestically induced persistence in random walks. **Phys. Rev. Lett.**, 98:070603, 2007.
- B. Do, M. L. Stohler, S. Balasubramanian, D. S. Elliot, C. Eash, E. Fischbach, M. A. Fischbach, e A. Mills. Experimental realization of a quantum quincux by use of linear optical elements. **Phys. Rev. A**, 72:062317, 2005.
- J. Du, X. Xu, M. Shi, J. Wu, X. Zhou, e R. Han. Experimental implementation of the quantum random-walk algorithm. **Phys. Rev. A**, 67:042316, 2003. lanl-arXive quant-ph/0203120.
- M. Dyer, A. Frieze, e R. Kannan. A random polynomial-time algorithm for approximating the volume of convex bodies. **J. ACM**, 38(1):1–17, January 1991.
- K. Eckert, J. Mompart, G. Birkel, e M. Lewenstein. One- and two-dimensional quantum walks in arrays of optical traps. 2005. lanl-arXive quant-ph/0503084.
- E. Farhi, J. Goldstone, e S. Gutmann. A quantum algorithm for the hamiltonian nand tree. 2007. lanl-arXive quant-ph/0702144v2.
- E. Farhi e S. Gutmann. Quantum computation and decision trees. **Phys. Rev. A**, 58:915–928, 1998.
- E. B. Feldman, R. Brüsweiler, e R. R. Ernst. From regular to erratic quantum dynamics in long spin 1/2 chains with an xy hamiltonian. **Chem. Phys. Lett.**, 294:297, 1998.

- N. Gisin, G. Ribordy, W. Tittel, e H. Zbinden. Quantum cryptography. **Rev. Mod. Phys.**, 74(1):145–195, 2002.
- D. Halliday e R. Resnick. **Fundamentos de Física, v. 4. Ótica e Física Moderna**. Livros Técnicos e Científicos - Rio de Janeiro, 1991.
- T. Hofmeister, U. Schöning, R. Schuler, e O. Watanabe. A probabilistic 3-sat algorithm further improved. In **Symposium on Theoretical Aspects of Computer Science**, páginas 192–202, 2002.
- R. J. Hughes, D. M. Alde, P. Dyer, G. G. Luther, G. L. Morgan, e M. Schauer. Quantum cryptography. **Contemporary Physics**, 36(3):149–163, 1995.
- N. Inui, Y. Konishi, e N. Konno. Localization of two-dimensional quantum walks. 2003. lanl-arXive quant-ph/0311118.
- N. Inui, N. Konno, e E. Segawa. One-dimensional three-state quantum walk. 2005. lanl-arXive quant-ph/0507207.
- H. Jeong, M. Paternostro, e M. S. Kim. Simulation of quantum random walks using the interference of a classical field. **Phys. Rev. A**, 69:012310, 2004.
- M. Jerrum, A. Sinclair, e E. Vigoda. A polynomial-time approximation algorithm for the permanent of a matrix with non-negative entries. In **Proc. 33th STOC**, páginas 712–721, New York, NY, 2001. ACM.
- J. Kempe. Discrete quantum walks hit exponentially faster. In **RANDOM-APPROX 2003**, Lecture Notes in Computer Science, páginas 354–369, Heidelberg, 2003. Springer. lanl-arXiv quant-ph/0205083.
- J. Kempe, D. Bacon, D. A. Lidar, e K. B. Whaley. Theory of decoherence-free fault-tolerant universal quantum computation. **Phys. Rev. A**, 63:042307, 2001.
- V. Kendon e B. Tregenna. Decoherence in a quantum walk on the line. In **QCMC02**, 2002a. lanl-arXive quant-ph/0210047.

- V. Kendon e B. Tregenna. Decoherence in discrete quantum walks. In **DICE2002 - Lecture Notes in Physics**. Springer-Verlag, 2002b. lanl-arXive quant-ph/0301182.
- V. Kendon e B. Tregenna. Decoherence can be useful in quantum walks. **Phys. Rev. A**, 67:042315, 2003. lanl-arXive quant-ph/0209005.
- P. L. Knight, E. Roldán, e E. Sipe. Quantum walk on the line as an interference phenomenon. **Phys. Rev. A**, 68:020301, 2003.
- E. Knill e R. Laflamme. Theory of quantum error-correcting codes. **Phys. Rev. A**, 55:900, 1997.
- E. Knill, R. Laflamme, e G. J. Milburn. A scheme for efficient quantum computation with linear optics. **Nature**, 360:1061, 2001.
- N. Konno. A new type of limit theorems for the one-dimensional quantum random walk. **JOURNAL OF THE MATHEMATICAL SOCIETY OF JAPAN**, 57:1179, 2005a. lanl-arXive quant-ph/0206103.
- N. Konno. A path integral approach for disordered quantum walks in one dimension. **Fluctuation and Noise Letters**, 5(4):529–537, 2005b. lanl-arXive quant-ph/0406233.
- D. A. Lidar, I. L. Chuang, e K. B. Whaley. Decoherence-free subspaces for quantum computation. **Phys. Rev. Lett.**, 81:2594, 1998.
- T. D. Mackay, S. D. Bartlett, L. T. Stephenson, e B. C. Sanders. Quantum walks in higher dimensions. **J. Phys. A**, 35:2745, 2002.
- Z. L. Mádi, B. Brutscher, T. Schulte-Herbrüggen, R. Brüschweiler, e R. R. Ernst. Time-resolved observation of spin waves in a linear chain of nuclear spins. **Chem. Phys. Lett.**, 268:300, 1997.
- K. Manouchehri e J. B. Wang. Physical implementation of quantum random walks. 2006. lanl-arXive quant-ph/0609088.

- D. A. Meyer. From quantum cellular automata to quantum lattice gases. **J.Stat.Phys.**, 85:551–574, 1996a. lanl-arXive quant-ph/9604003.
- D. A. Meyer. On the absence of homogeneous scalar unitary cellular automata. **Phys.Lett. A**, páginas 337–340, 1996b. lanl-arXive quant-ph/9604011.
- D. A. Meyer. Unitarity in one dimensional nonlinear quantum cellular automata. 1996c. lanl-arXive quant-ph/9605023.
- C. Moore e A. Russel. Quantum walks on the hypercube. 2001. lanl-arXive quant-ph/0104137.
- R. Motwani e P. Raghavan. **Randomized Algorithms**. Cambridge University Press, UK, 1995.
- A. Nayak e A. Vishwanath. Quantum walk on a line. 2000. lanl-arXive quant-ph/0010117.
- M. A. Nielsen e I. L. Chuang. **Quantum Computation and Quantum Information**. Cambridge University Press, UK, 2000.
- N.Konno. Quantum random walks in one dimension. **Quantum Information Processing**, 1:345, 2002. lanl-arXive quant-ph/0206053.
- A. C. Oliveira, R. Portugal, e R. Donangelo. Two-dimensional quantum walks with boundaries. In **Anais do WECIQ 2006**. PPGINF-UCPEL.
- A. C. Oliveira, R. Portugal, e R. Donangelo. Decoherence in 2-d quantum walks. **Physical Review A**, 74:012312, 2006.
- A. C. Oliveira, R. Portugal, e R. Donangelo. Simulation of the double-slit experiment with quantum walkers. 2007. lanl-arXive 0706.3181v1.
- H. M. Pawstowski, G. Usaj, e P. R. Levstein. Quantum interference phenomena in the local polarization dynamics of mesoscopic systems: an nmr observation. **Chem. Phys. Lett.**, 261:329, 1996.

- R. P. Feynman, R. B. Leighton, e M. Sands. **The Feynman lectures on physics**. Addison-Wesley, 1969.
- J. Preskill. **Lectures notes for physics 229: Quantum Information and Computation**. disponível em [www.theory.caltech.edu/people/preskill/ph299/](http://www.theory.caltech.edu/people/preskill/ph299/).
- F. Reif. **Fundamentals of Statistical and Thermal physics**. McGRAW-HILL KOGAKUSHA, 1965.
- P. Ribeiro, P. Milman, e R. Mosseri. Aperiodic quantum random walks. 2004. [lanl-arXive quant-ph/0406071](http://lanl-arXive.org/quant-ph/0406071).
- A. Romanelli, A. C. Sicardi Schifino, R. Siri, G. Abal, A. Auyuanet, e R. Donangelo. Quantum random walk on the line as a markovian process. **Physica A**, 338:395–405, 2004. [lanl-arXive quant-ph/0310171](http://lanl-arXive.org/quant-ph/0310171).
- A. Romanelli, A. C. Sicardi Schifino, R. Siri, G. Abal, e R. Donangelo. Markovian behaviour and constrained maximization of the entropy in chaotic quantum systems. **Phys. Lett. A**, 313:325, 2003. [lanl-arXive quant-ph/0204135](http://lanl-arXive.org/quant-ph/0204135).
- A. Romanelli, R. Siri, G. Abal, A. Auyuanet, e R. Donangelo. Decoherence in the quantum walk on the line. **Physica A**, 347C:137, 2005. [lanl-arXive quant-ph/0403192](http://lanl-arXive.org/quant-ph/0403192).
- 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. **J. Opt. Soc. Am. B**, 22:499–504, 2005.
- B. Sanders, S. Bartlett, B. Tregenna, e P. Knight. Quantum quincunx in cavity quantum electrodynamics. **Phys. Rev. A**, 67:042305, 2003. [lanl-arXive quant-ph/0207028](http://lanl-arXive.org/quant-ph/0207028).
- D. Shapira, O. Biham, A. J. Bracken, e M. Hackett. One dimensional quantum walk with unitary noise.

- N. Shenvi, J. Kempe, e K. B. Whaley. A quantum random walk search algorithm. **Phys. Rev. A**, 67(5):052307, 2003. lanl-arXive quant-ph/0210064.
- P. Shor. Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory. **Phys. Rev. A**, 52:2493, 1995.
- P. Shor. Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer. In **SIAM J. Comp**, volume 26(5), páginas 1484–1509, 1997.
- P. Shor e A. R. Calderbank. Good quantum error-correcting codes exist. **Phys. Rev. A**, 54:1098, 1996.
- M. H. R. Stanley, L. A. N. Amaral, S. V. Buldyrev, S. Havlin, H. Leschhorn, P. Maass, M. A. Salinger, e H. E. Stanley. Oscaling behaviour in the growth of companies. **Nature**, 379:804, 1996.
- A. Steane. Error correcting codes in quantum theory. **Phys. Rev. Lett.**, 77:793, 1996a.
- A. Steane. Multiple-particle interference and quantum error correction. **Proc. R. Soc. London, Ser. A**, 452:2551, 1996b.
- F. W. Strauch. Connecting the discrete and continuous-time quantum walks. **Phys. Rev. A**, R:030301, 2006.
- C. C. Tannoudji, B. Diu, e F. Laloë. **Quantum Mechanics**. John Wiley and Sons, 1977.
- B. C. Travaglione e G. J. Milburn. Implementing the quantum random walk. **Phys. Rev. A**, 65:032310, 2002.
- B. Tregenna, W. Flanagan, R. Maile, e V. Kendon. Controlling discrete quantum walks: coins and initial states. **New J. Phys.**, 5:83, 2003. lanl-arXive quant-ph/0304204.

- G. E. Uhlenbeck e L. S. Ornstein. On the theory of brownian motion. **Phys. Rev.**, 17:823–841, 1945.
- G. E. Uhlenbeck e M. C. Wang. On the theory of brownian motion ii. **Rev. Mod.Phys.**, 36:323–342, 1930.
- J. Watrous. Quantum simulations of classical random walks and undirected graph connectivity. **J.Comp.System Sciences**, 62:376, 2001. lanl-arXive cs.CC/9812012.
- W.Dür, R. Raussendorf, V. Kendon, e H. Briegel. Quantum random walks in optical lattices. **Phys. Rev. A**, 66:052319, 2002. lanl-arXive quant-ph/0207137.
- P. Zanardi. Dissipative dynamics in a quantum register. **Phys. Rev. A**, 56:4445, 1997.
- A. Zeilinger, A. Gähler, R. Shull, C. G. Treimer, e W. Mampe. Single- and double-slit diffraction of neutrons. **Reviews of Modern Physics**, 60:1067–1073, 1988.
- Z. Zhao, J. Du, H. Li, T. Yang, e J. Pan Z. Chen. Implement quantum random walks with linear optics elements. 2002. lanl-arXive quant-ph/0212149.
- W. H. Zurek. Decoherence and the transition from quantum to classical. **Physics Today**, 44:36–44, 1991. lanl-arXive quant-ph/0306072-Revisited.
- W. H. Zurek. Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical. **Rev. Mod. Phys**, 75:715, 2003. lanl-arXive quant-ph/0105127.

# Apêndice A

## Caminhos Aleatórios Clássicos

Para que tenhamos uma certa intuição sobre a teoria dos caminhos aleatórios, vamos fazer uma rápida revisão sobre os caminhos aleatórios clássicos. Em sua forma mais simples e ilustrativa, o problema pode ser formulado da maneira tradicional pela qual ainda na graduação conheci o problema. Um bêbado, Reif (1965) está parado em frente a um poste em uma avenida e pretende ir para sua casa que fica naquela rua algumas quadras a direita. A questão de interesse é: qual é a probabilidade de que após  $N$  passos ele consiga chegar em casa? Todos os passos que ele dá são de mesmo comprimento  $l$ . O coitado está tão bêbado que a direção de cada passo, se vai para a esquerda ou direita, é completamente independente do passo anterior. Então a única certeza que temos é que cada passo que ele dá tem probabilidade  $p$  de ser para a direita e probabilidade  $q = 1 - p$  de ser para a esquerda. Sendo no caso mais simples  $p = q$ , mas em geral  $p \neq q$ . Vamos supor que o poste esteja na posição  $x = 0$ . Como cada passo que ele dá é de comprimento  $l$ , a localização dele ao longo da avenida (eixo- $x$ ), deve ser da forma  $x = ml$ , com  $m$  sendo um número inteiro. É claro que a formulação estatística do problema exige que este “passeio” seja repetido um número bem grande de vezes  $\Pi$ . E cada vez que este passeio for repetido encontraremos o bêbado em um ponto diferente da avenida. Só então, após  $\Pi$  vezes poderemos nos perguntar com que probabilidade após  $N$  passos encontraremos o indivíduo em casa.

Deixemos de lado esta estorinha do bêbado e vamos discutir o problema do

caminho aleatório clássico em uma dimensão um pouco mais formalmente. Vamos imaginar uma partícula se move em uma reta dando passos sucessivos de acordo com o resultado de uma certa variável aleatória. Por exemplo de acordo com as saídas de uma moeda, se der cara vai para a esquerda, se der coroa vai para direita. Após um total de  $N$  passos de comprimento  $l$ , a partícula estará localizada em

$$x = ml, \tag{A.1}$$

com  $m$  sendo um inteiro no intervalo

$$-N \leq m \leq N. \tag{A.2}$$

Queremos calcular a probabilidade  $P_N(m)$  de após  $N$  passos encontrar a partícula na posição  $x = ml$ . Seja  $n_1$  o número de passos que a partícula dá para a direita e  $n_2$  o número de passos para a esquerda tal que

$$N = n_1 + n_2. \tag{A.3}$$

O deslocamento líquido da partícula é

$$m = n_1 - n_2 \tag{A.4}$$

A principal característica deste processo é que os passos sucessivos são estatisticamente independentes uns dos outros, ou seja, um processo markoviano Brémaud (1999). Seja  $p$  a probabilidade de que o passo seja para a direita e  $q$  a probabilidade de que seja para a esquerda com

$$p + q = 1. \tag{A.5}$$

Então a probabilidade de que uma dada seqüência de  $n_1$  passos para a direita e  $n_2$

para a esquerda é dada simplesmente multiplicando as respectivas probabilidades

$$\underbrace{p \times p \times \cdots \times p}_{n_1 \text{ vezes}} \times \underbrace{q \times q \times \cdots \times q}_{n_2 \text{ vezes}} = p^{n_1} \times q^{n_2}. \quad (\text{A.6})$$

Contudo, existem muitas possibilidades de termos em  $N$  passos,  $n_1$  para a direita e  $n_2$  para a esquerda. De fato, o número de possibilidades distintas é dado por

$$\frac{N!}{n_1!n_2!}. \quad (\text{A.7})$$

Portanto a probabilidade  $W_N(n_1)$  de num total de  $N$  passos termos  $n_1$  para a direita e  $n_2 = N - n_1$  para a esquerda em qualquer ordem é dada por

$$W_N(n_1) = \frac{N!}{n_1!n_2!} p^{n_1} \times q^{n_2}. \quad (\text{A.8})$$

Se sabemos que a partícula efetuou  $n_1$  passos para a direita de um total de  $N$  passos, então seu deslocamento  $m$  a partir da origem está totalmente determinado. Logo a probabilidade  $P_N(m)$  é a mesma que  $W_N(n_1)$ . E com algumas manipulações algébricas temos que

$$P_N(m) = \frac{N!}{\left(\frac{N+m}{2}\right)! \left(\frac{N-m}{2}\right)!} p^{\left(\frac{N+m}{2}\right)} q^{\left(\frac{N-m}{2}\right)}. \quad (\text{A.9})$$

Na figura A.1 apresentamos um exemplo da distribuição de probabilidade binomial do caminho aleatório clássico,  $P_N(m)$  após 20 passos para uma partícula que partiu da origem com  $p = q = \frac{1}{2}$ . A envoltória dessa curva é uma função bem comportada. O significado físico é bem intuitivo, após  $N$  passos, a probabilidade da partícula ser encontrada a uma distância  $N$  da origem é muito pequena, mas a probabilidade de ser localizada na vizinhança da origem é bem grande. A equação [A.9] é a

chamada distribuição binomial. Quando  $p = q = 1/2$  temos

$$P_N(m) = \frac{N!}{\left(\frac{N+m}{2}\right)! \left(\frac{N-m}{2}\right)!} \left(\frac{1}{2}\right)^N. \quad (\text{A.10})$$

Vamos agora obter o valor médio de  $x$  e a sua dispersão ou variância para o caminho aleatório clássico após  $N$  passos. Sabemos que a variância mede o quanto o nosso conjunto de dados se espalhou em torno do valor médio. Seja a variância de uma distribuição de probabilidade  $P$  dada por

$$\sigma^2 = M_2(x) - M_1(x)^2, \quad (\text{A.11})$$

onde  $M_2(x) = \sum_x x^2 P(x)$  é o segundo momento da distribuição e  $M_1(x) = \sum_x x P(x)$  é a sua distribuição média. A média de  $x$  é dada por  $M_1(x) = M_1(ml)$ , como o tamanho do passo  $l$  é um valor fixo, basta que calculemos  $M_1(m)$  e posteriormente multipliquemos pelo tamanho do passo. Entretanto, como  $m = n_1 - n_2$  temos que  $M_1(m) = M_1(n_1) - M_1(n_2)$ . Como  $p$  é a probabilidade de dar uma passo para a direita, o número médio de passos para a direita após  $N$  passos será  $M_1(n_1) = Np$ , analogamente para a esquerda temos que  $M_1(n_2) = Nq$ , portanto

$$M_1(m) = N(p - q). \quad (\text{A.12})$$

Vamos agora calcular  $M_2(n_1)$

$$M_2(n_1) = \sum_{n_1=0}^N n_1^2 W_N(n_1) = \sum_{n_1=0}^N \frac{N!}{n_1! n_2!} p^{n_1} \times q^{n_2} n_1^2 \quad (\text{A.13})$$

com algumas manipulações algébricas e usando que  $p + q = 1$  obtemos que

$$M_2(n_1) = (Np)^2 + Npq = M_1(n_1)^2 + Npq. \quad (\text{A.14})$$

E portanto

$$\sigma^2(n_1) = Npq. \quad (\text{A.15})$$

Mas temos que  $m = n_1 - n_2 = 2n_1 - N$  então  $\sigma^2(m) = \sigma^2(2n_1 - N) = \sigma^2(2n_1)$  pois  $N$  é uma constante e portanto

$$\sigma^2(2n_1) = 4\sigma^2(n_1) = 4Npq. \quad (\text{A.16})$$

Então

$$\sigma^2 = 4Npql^2, \quad (\text{A.17})$$

para o caso em que  $p = q = 1/2$  temos que o desvio padrão torna-se:

$$\sigma = \sqrt{N}l \quad (\text{A.18})$$

Isto é para o caminho aleatório clássico cuja distribuição de probabilidade é binomial o desvio padrão cresce com a raiz quadrada do número de passos caracterizando um processo totalmente difusivo. Quando o número de passos  $N$  é grande, a distribuição binomial começa a exibir um máximo pronunciado em um dado valor  $n_1 = \bar{n}_1$ , e a decrescer rapidamente à medida que nos afastamos desse valor. Nesse caso podemos considerar que a distribuição de probabilidade seja uma função contínua da variável  $n_1$ , embora só tenha interesse físico os valores inteiros de  $n_1$ . Assim para  $N$  suficientemente grande obtemos que a distribuição de probabilidade é a distribuição Gaussiana dada por:

$$P_N(m) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Npq}} \exp\left\{-\frac{[m - N(p - q)]^2}{8Npq}\right\}. \quad (\text{A.19})$$

Na figura A.2 apresentamos um gráfico da distribuição de probabilidade Gaussiana para um caminho aleatório clássico balanceado com  $p = q = \frac{1}{2}$  após 1000 passos. A localização em torno da origem é a característica mais marcante desse tipo de caminho.

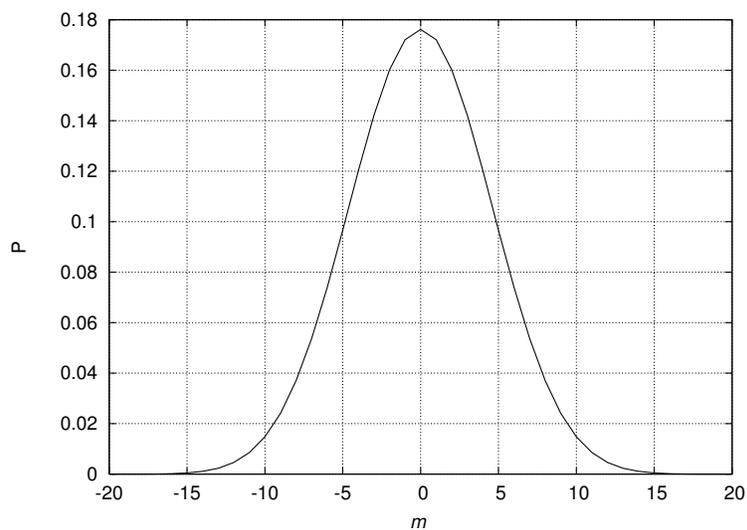


Figura A.1: Distribuição de probabilidade binomial do caminho aleatório clássico com  $N = 20$  passos para  $p = q = \frac{1}{2}$  de uma partícula partindo da origem.

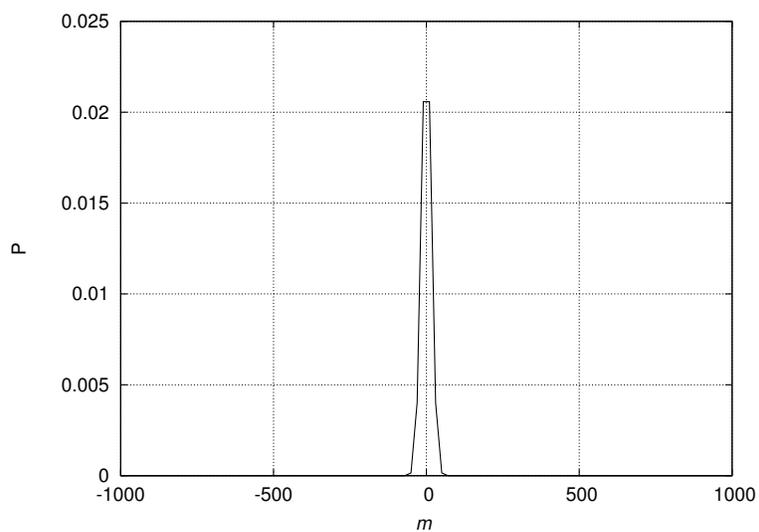


Figura A.2: Distribuição de probabilidade Gaussiana do caminho aleatório clássico após 1000 passos para  $p = q = \frac{1}{2}$  de uma partícula partindo da origem.