

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS

Jefferson Deyvis dos Santos Silva

**TRANSFERÊNCIA DE ESTADOS QUÂNTICOS EM
CADEIAS COM CORRELAÇÕES NA DESORDEM**

Alagoas, Maceió

2022

Jefferson Deyvis dos Santos Silva

TRANSFERÊNCIA DE ESTADOS QUÂNTICOS EM
CADEIAS COM CORRELAÇÕES NA DESORDEM

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Alagoas para a obtenção do Grau de Mestre em Física.

Orientador: Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

Alagoas, Maceió

2022

Catálogo na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico

Bibliotecária: Taciana Sousa dos Santos – CRB-4 – 2062

S586t Silva, Jefferson Deyvis dos Santos.
Transferência de estados quânticos em cadeias com correlações na
de sordem / Jefferson Deyvis dos Santos Silva. – 2022.
70 f. : il. color.

Orientador: Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura.
Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Alagoas.
Instituto de Física. Programa de Pós-Graduação em Física. Maceió, 2022.

Bibliografia: f. 69-70.

1. Modelo de Anderson. 2. Transferência de estado quântico. 3. Desordem
correlacionada. I. Título.

CDU: 53



PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE
DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**“Transferência de estados quânticos em cadeias com correlações na
desordem”**

por

Jefferson Deyvis dos Santos Silva

A Banca Examinadora composta pelos professores Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura (orientador e presidente da banca), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; Guilherme Martins Alves de Almeida, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; e Adauto José Ferreira de Souza, da Universidade Federal Rural de Pernambuco, consideram o candidato aprovado com grau “A”.

Maceió, 28 de fevereiro de 2022.

Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

Prof. Dr. Guilherme Martins Alves de Almeida

Prof. Dr. Adauto José Ferreira de Souza

*Este trabalho é dedicado aos meus pais,
por sempre acreditarem nos meus sonhos.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, por todas as realizações e conquistas. Agradeço aos meus pais, Cristiane Julia e Gilberto Antonio, que são o verdadeiro pilar da construção do meu caráter, por todo apoio, incentivo e cuidado. Este trabalho é dedicado a vocês. Agradeço também ao meu orientador, pelos ensinamentos, dedicação, paciência, e profissionalismo. Conseguimos desenvolver um excelente trabalho ao longo desses anos. Agradeço também aos amigos que fiz na graduação. São muitas pessoas, pouparei escrever nomes, com o intuito de não acabar sendo injusto por deixar de mencionar alguém. Então, a todos, deixo meus cinceiros agradecimentos. Agradeço aos meus amigos Guilherme Bispo e Filipe Rodrigues, pelos vários anos de amizade, e eventuais discussões pontuais acerca deste trabalho. Agradeço aos professores que tive, tanto na graduação quanto no mestrado. Eu aprendi muito ao longo desses anos. Esses ensinamentos, levarei comigo para o resto da vida. como disse o Newton, porém com teor não pejorativo, se cheguei onde cheguei, foi por me apoiar sobre ombros de gigantes. Muito obrigado, professores. Agradeço a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, CAPES, por poder contribuir de maneira significativa com essa pesquisa, este material é reflexo desta contribuição. Por fim, e não menos importante, agradeço ao departamento de física da UFAL, pela oportunidade de realizar esta pesquisa e aprender mais. Este agradecimento é para todas as pessoas que contribuíram direta ou indiretamente com a realização desta dissertação.

*“Podes dizer-me, por favor, que caminho devo seguir para sair daqui?
Isso depende muito de para onde queres ir - respondeu o gato.
Preocupa-me pouco aonde ir - disse Alice.
Nesse caso, pouco importa o caminho que sigas - replicou o gato. ”*

Lewis Carroll

RESUMO

Neste Trabalho, estudamos a dinâmica de um elétron em um canal unidimensional desordenado. O formalismo empregado baseia-se na solução da equação de *Schrödinger* através do operador de evolução temporal, onde o hamiltoniano, que é explicitado em forma matricial, considerando-se a base dos orbitais $\{|n\rangle\}$, é diagonalizado computacionalmente. Apesar do alto custo computacional, os métodos numéricos empregados possibilitam realizar uma análise precisa da dinâmica do elétron, uma vez que estamos lidando com a solução formal da equação de *Schrödinger*. O potencial desordenado no hamiltoniano do sistema, possui correlações intrínsecas entre os primeiros vizinhos. O cálculo empregado, permite-nos entender a natureza dos estados do modelo proposto, a partir do uso das propriedades de localização discutidas ao longo do texto, variando o comprimento de correlação do potencial desordenado, além de verificar se o sistema em questão é um bom candidato a realizar transferência de estados quânticos. Também realizamos cálculos numéricos que envolvem as propriedades de transporte, para o canal de átomos propostos, permitindo-nos encontrar com precisão alguns parâmetros ajustáveis que nos possibilitem encontrar maior fidelidade possível em uma transferência de estados quânticos.

Palavras-chaves: Desordem correlacionada. Localização. Transferência de estados quânticos. Fidelidade.

ABSTRACT

In this work, we study the dynamics of an electron at a disordered potential. The formalism used is based on the solution of the *Schrödinger* equation, through the time evolution operator, where the Hamiltonian, which is given by a matricial form, on the orbital basis $\{|n\rangle\}$, is computationally diagonalized. Despite the high computational cost, the numerical methods employed make it possible to carry out a precise analysis of the electron dynamics, once we deal with the formal solution of *Schrödinger* equation. The disordered potential embedded in the Hamiltonian has intrinsic correlations between first neighbors. The calculation allows us to understand the nature of the states of the proposed model, Using the location properties discussed throughout the text, changing the correlation length of the disordered potential, in addition to verifying whether the system in question is a good candidate to perform quantum state transfer. For the proposed atom channel, we also perform numerical calculations involving transport properties. allowing us to find precisely some adjustable parameters that allow us to find the highest possible fidelity in a transfer of quantum states.

Keywords: Correlated disorder. Fidelity. Localization. Quantum transfer states.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Representação de uma rede cristalina	17
Figura 1.2 – A imagem é composta de 2 quadros. Os quadros representam um fragmento de uma rede de átomos Na. O quadro esquerdo representam um arranjo de átomos neutros, enquanto que o quadro direito um arranjo onde 2 elétrons compartilham do mesmo átomo.	22
Figura 1.3 – Esquema em que os átomos são representados por poços de potencial. Os níveis eletrônicos da camada de valência são representados por traços horizontais dentro dos poços de potencial	23
Figura 1.4 – Rede de átomos de uma representação hipotética de um material amorfo	24
Figura 1.5 – diagrama com comportamento $\beta(g)$ para $d > 2$, $d = 2$, $d < 2$ na teoria de escala descrita por <i>Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnam</i>	29
Figura 1.6 – Representação esquemática de um grafo hipotético em que os vértices representam os spins e as arestas representam as conexões entre os spins interagentes.	36
Figura 1.7 – Representação da cadeia de spins em um campo magnético externo, inicialmente no estado fundamental, para o protocolo de comunicação quântica entre Alice e Bob.	36
Figura 1.8 – Protocolo de comunicação quântica em que após um tempo específico $t > 0$, Bob recebe o estado transmitido por Alice.	37

Figura 1.9 – Fidelidade máxima da comunicação quântica alcançada em uma cadeia de spins de Heisenberg no intervalo de tempo de $[0, 4000/J]$ como função do comprimento $N = [2, 80]$ da cadeia. A linha horizontal representa a maior fidelidade para uma transmissão clássica de um estado quântico.	42
Figura 2.1 – Em 2.1a é apresentada a energia típica de cada sítio, gerada pela equação (2.2), para $N = 60\,000$ e seu comportamento para o aumento progressivo do comprimento de correlação A . Em 2.1b é mostrado o gráfico da autocorrelação em função da distância onde cada curva é calculada para um dado A	49
Figura 2.2 – Desvio Padrão local médio do potencial com desordem correlacionada em função de A/N	50
Figura 2.3 – Canal unidimensional com N átomos, com potencial de ionização aleatório ε_i e força de acoplamento T	51
Figura 2.4 – A figura é constituída de 6 gráficos que exibem o comportamento da razão de participação em função da energia. Cada quadro apresenta um panorama hipotético para 5 sistemas com tamanhos N distintos, onde é considerado um valor fixado para o comprimento de correlação A	53
Figura 2.5 – Em 2.5a é apresentado o gráfico da participação em função do tamanho do sistema, para alguns valores do comprimento de correlação. Em 2.5b é mostrado o gráfico da entropia de <i>Shannon</i> em função de N , onde da mesma forma como no caso anterior, são considerados alguns valores para o comprimento de correlação. Em ambos os gráficos há uma expressão do tipo lei de potência com correção logarítmica que pode caracterizar a natureza dos estados do sistema.	55

Figura 2.6 – Em 2.6a é mostrado o comportamento de $P(A/N)$ para vários valores de N . P satura quando $A = N$. A figura 2.6b é composta de 2 gráficos, o maior representa o comportamento de P/N^α enquanto que o menor representa o comportamento de $P(N)$ para $A = N$ com o ajuste de regressão do tipo lei de potencia.	56
Figura 2.7 – razão da participação P em função de E , considerando $A = N$	58
Figura 2.8 – Canal unidimensional com N átomos acoplado a uma fonte S e um receptor R	59
Figura 2.9 – Gráfico que representa o comportamento da Fidelidade máxima F em função da energia E	60
Figura 2.10 – Gráfico que representa o comportamento da concorrência C em função das autoenergias de \mathcal{H}	62
Figura 2.11 – Em 2.11a plotamos o gráfico da fidelidade em relação a energia considerando $g = 0,01$ e em 2.11b foi realizado a mesma plotagem porém considerando a intensidade do acoplamento das bordas com o canal 10 vezes maior. Em ambos os gráficos foram considerados valores do comprimento de correlação $A \leq N$	63
Figura 2.12 – Gráfico que representa o comportamento da Fidelidade e concorrência C em função das autoenergias de \mathcal{H} . São apresentados $F(E)$ e $C(E)$ para os valores do comprimento de correlação $A = 5$ e $A = 30$ para um canal acoplado de tamanho $N = 60$	64
Figura 2.13 – Em 2.13a plotamos o gráfico da fidelidade em relação a energia considerando $g = 0,01$ e $N = 60$. apresentando, na curva mais baixa, o valor máximo da fidelidade para uma QST em um potencial desordenado descorrelacionado. Em 2.13b Realizamos o mesmo experimento, porém avaliando o grau de emaranhamento entre as o emissor e o receptor.	65

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO		12
1	O MODELO DE ANDERSON E A TRANSFERÊNCIA DE ESTADOS QUÂNTICOS .	15
1.1	O modelo de Drude	15
1.2	O Teorema de Bloch	16
1.3	Transição de Mott	21
1.4	O Modelo de Anderson	23
1.4.1	Teoria de Escala Para Transição de Anderson . .	26
1.4.2	Evolução temporal	30
1.5	Medidas do grau Localização	32
1.6	Fidelidade para um Grafo Arbitrário	35
1.7	Emaranhamento	41
1.7.1	Concorrência	43
2	RESULTADOS	47
2.1	Desordem Correlacionada	47
2.2	Propriedades do Canal de Átomos	51
2.2.1	Fenômenos de Localização	52
2.3	O canal com acoplamento	58
2.4	Transferência de estados quânticos	60
	Considerações e Perspectivas	66
	Referências	69

INTRODUÇÃO

Criar um processador quântico, capaz de acessar e manipular dados numa velocidade muito superior a de processadores clássicos (ARUTE et al., 2019) é a principal motivação do estudo apresentado neste trabalho. Tal tecnologia pode impactar a vida das pessoas e a sociedade, através de protocolos sofisticados de segurança, tráfego de dados ainda mais rápidos e seguros, além da simulação de sistemas quânticos, uma vez que a execução de certas tarefas se tornam exponencialmente mais rápidas que em computadores clássicos (DE WOLF, 2017).

Uma maneira muito importante de contribuir com a criação dos computadores quânticos é através de estudos que envolvem à transferência de estados quânticos, QST¹. Nossa motivação é realizar o processo de comunicação quântica em um processador quântico e ainda, garantir que a informação emitida a partir de um ponto deste processador, seja recebida em outro ponto com boa fidelidade.

É importante que a comunicação quântica seja estabelecida. Sendo assim, é preciso que a informação emitida não se perca durante a transferência de estados quânticos. A ideia é que todo o processo ocorra de maneira rápida o suficiente para que a informação seja transferida antes que fatores externos ao sistema, como o aumento da temperatura, atrapalhem o protocolo da comunicação.

¹do inglês, *qauntum state transfer*

O protocolo de transferência de estados quânticos pode ser realizado através de um canal de átomos. De maneira que quando um estado quântico é preparado em uma ponta da cadeia, a função de onda eletrônica carrega consigo a informação que queremos transferir de um ponto a outro do espaço.

Concentramos o estudo da comunicação quântica ao longo de uma rede unidimensional de átomos que está sujeita a um potencial desordenado dotado de correlações intrínsecas entre átomos vizinhos. Nós mostramos que a correlação presente no potencial desordenado, é um ingrediente necessário para que a transferência de estados quânticos ocorra.

Este texto é constituído de 2 capítulos, onde cada capítulo está dividido em seções. No capítulo 1, das seções 1.1 à 1.4, fazemos uma breve introdução histórica aos principais modelos de condução, apresentando resultados, teoremas e outras descobertas que são relevantes e úteis até os dias atuais.

Na seção 1.4 apresentamos a formulação matemática do modelo de *Anderson*, a partir da aproximação *tight binding* em que, para um regime cristalino, onde a desordem é nula, mostramos que o modelo de *Anderson* se aproxima do modelo obtido a partir da teoria de *Bloch*. Na subseção 1.4.1 apresentamos a teoria de escala para o modelo de *Anderson*, onde mostramos alguns critérios para a existência, ou não, da transição metal isolante de acordo com a dimensão do sistema

Das subseções 1.4.2 à seção 1.7 iniciamos o estudo a cerca da dinâmica do elétron para o modelo de *Anderson*. Investigamos propriedades de localização, a fim de entender a natureza dos estados em um dado sistema e sua viabilidade para uma possível QST. Também investigamos as propriedades de transporte, especificamente nas seções 1.6 e 1.7, compreendendo o protocolo de comunicação quântica. Os resultados obtidos em 1.6 e 1.7 são essenciais para qualificar uma transferência de estados quânticos.

No capítulo 2 discutimos os resultados obtidos. Este capítulo está dividido em 5 seções. Na seção 2.1 discutimos os resultados obti-

dos a cerca do modelo de desordem com correlação de longo alcance que foi proposto para estudo. Na seção 2.2 mostramos a formulação hamiltoniana, na representação *tight binding* para um canal unidimensional de átomos sujeito ao potencial desordenado que definimos na seção imediatamente anterior. A seção 2.2.1 exhibe as discussões e resultados a respeito das propriedades de localização do canal de átomos construído na seção 2.2. Na seção 2.3 adicionamos bordas ao canal. Essas bordas podem ser compreendidas como um termo de fonte e um termo receptor. Este acoplamento possibilitará analisar as propriedades de transporte do modelo proposto. Na seção 2.4 são mostradas discussões e resultados a cerca dos fenômenos de transporte, a partir do modelo que foi proposto a ser estudado. Por fim, fazemos algumas considerações dando um fechamento as discussões abordadas no texto, além algumas digressões, com perspectivas futuras de continuidade no estudo desta pesquisa.

CAPÍTULO 1

O MODELO DE ANDERSON E A TRANSFERÊNCIA DE ESTADOS QUÂNTICOS

1.1 O MODELO DE DRUDE

O primeiro modelo teórico de condução elétrica foi descrito por (DRUDE, 1900). Drude aplicou a teoria cinética para um gás eletricamente neutro chamado de gás de elétrons. Para a confecção do seu modelo, Drude fez algumas considerações: Os elétrons colidiam apenas com os íons da rede de maneira que as colisões entre elétrons não ocorriam. A interação entre uma colisão e outra era desprezível, de maneira que, na ausência de campos externos, o elétron se moveria em uma trajetória retilínea.

Drude propôs ainda que a probabilidade para que ocorresse uma colisão, em um tempo infinitesimal, seria dada por dt/τ em que τ é conhecido como tempo de relaxação e por fim, enunciou que o equilíbrio térmico do gás de elétrons seria estabelecido após sucessivas colisões dos elétrons com os íons da rede. Segundo o modelo de Drude o gás de elétrons, no equilíbrio, com temperatura T e com

densidade $n = N/V$, possuía distribuição da velocidade eletrônica, dada pela estatística de Maxwell-Boltzmann.

As previsões no modelo de Drude explicam razoavelmente a condutividade $\sigma(\tau)$, a condutividade térmica e o efeito Hall. No entanto, quando essas previsões foram confrontadas com os resultados experimentais surgiram algumas divergências. Um exemplo, é a dependência da condutividade com a temperatura, que foi considerada a partir das teorias clássicas, onde foi introduzido o calor específico c_v como $\frac{3}{2}nk_b$, um resultado que não foi observado experimentalmente (ASHCROFT; MERMIN et al., 1976).

O uso da mecânica estatística clássica no modelo de Drude resultou na descoberta de campos termoelétricos e capacidades caloríficas com valores centenas de vezes maiores mesmo mantendo-se temperatura ambiente. O advento da teoria quântica foi uma maneira de remover os paradoxos existentes no modelo de Drude, o princípio da exclusão de Pauli implica como pré-requisito que haja uma substituição no uso da estatística de Maxwell-Boltzmann para a de Fermi-Dirac. Um novo modelo de um gás de elétrons livres foi então construído por Sommerfeld incluindo a estatística de Fermi-Dirac.

Na natureza existem diversos tipos de interações aos quais os elétrons estão sujeitos, então surgiu a necessidade de se investigar os modelos de condução introduzindo essas interações sofridas pelos elétrons porque os modelos existentes até então não se adequavam ao mundo real. A teoria de Sommerfeld deu lugar a Teoria de Bloch que considera que o elétron interage com um potencial periódico.

1.2 O TEOREMA DE BLOCH

Os metais possuem um caráter cristalino. Sua estrutura atômica é tal que os íons estão organizados em um arranjo periódico como é mostrado, na figura 1.1, a representação de uma rede cristalina. Na teoria de elétrons livres é assumido que os elétrons se movem em uma região do espaço com potencial constante em um poço de potencial. A pesar da teoria de elétrons livres ser muito útil para explicar alguns fenômenos, como a condutividade elétrica,

ela falha ao explicar porque alguns materiais são bons condutores elétricos enquanto que outros são ótimos materiais isolantes e ainda outros, que são semicondutores. A fim de verificar se um material é isolante ou condutor é necessário variar o potencial dentro do cristal devido aos núcleos dos íons positivos no modelo de elétrons livres, (WAHAB, 2005).

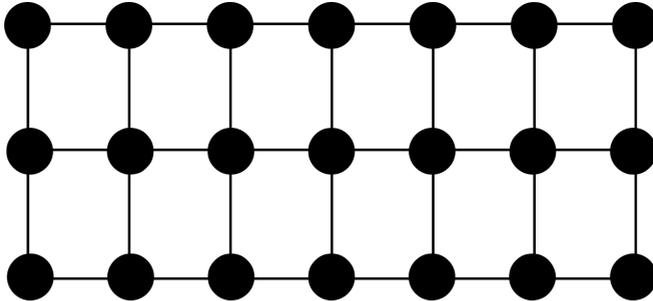


Figura 1.1 – Representação de uma rede cristalina

Fonte: O Autor (2021)

Bloch usou o potencial periódico $V(\mathbf{r})$ para descrever um modelo de elétrons independentes (ASHCROFT; MERMIN et al., 1976). O potencial em questão tem a periodicidade da rede de Bravais, $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$. Para o caso mais simples de potencial periódico, $V(r) = 0$, que representa o caso cristalino, o problema é reduzido ao problema dos elétrons livres. No caso geral, os *elétrons de Bloch* (elétrons que estejam sujeitos a um potencial periódico regular) serão descritos pela equação de *Schrödinger*. Bloch enunciou o seguinte teorema acerca dos estados estacionários do elétron sujeito a um potencial periódico:

Teorema de Bloch

Os autoestados ψ do hamiltoniano mono-eletrônico $\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r})$, onde $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ para todo \mathbf{R} em uma rede de Bravais, podem ser escolhidos de tal forma que associado a cada ψ esteja um vetor de onda \mathbf{k} tal que:

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi(\mathbf{r}).$$

Para a demonstração da primeira forma do teorema de Bloch vamos tomar $V(x)$ como um potencial periódico unidimensional, tal que, $V(x) = V(x+a)$. Queremos saber como uma solução da equação de *Schrödinger* será afetada pelo hamiltoniano $\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, em que há a presença de um potencial periódico. Para verificar isto vamos definir o operador translação \mathcal{T}_a como:

$$\mathcal{T}_a \psi(x) = \psi(x + a). \quad (1.1)$$

Vamos Verificar a relação de comutação $[\mathcal{H}, \mathcal{T}_a]$ para o caso unidimensional:

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}, \mathcal{T}_a] &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} \right) + V(x), \mathcal{T}_a \right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dx^2}, \mathcal{T}_a \right] + [V(x), \mathcal{T}_a]. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Na segunda parcela da equação (1.2) note que:

$$\begin{aligned} [V(x), \mathcal{T}_a] \psi &= V(x) \mathcal{T}_a \psi(x) - \mathcal{T}_a (V(x) \psi(x)) \\ &= V(x) \psi(x + a) - V(x + a) \psi(x + a) \\ &= (V(x) - V(x + a)) \psi(x + a) \\ &= 0, \end{aligned}$$

ou seja, $[V(x), \mathcal{T}_a] = 0$ já que, por definição, V é periódica. Verificando agora o comutador $\left[\frac{d^2}{dx^2}, \mathcal{T}_a\right]$ obtemos:

$$\begin{aligned} \left[\frac{d^2}{dx^2}, \mathcal{T}_a\right] \psi(x) &= \frac{d^2}{dx^2} (\mathcal{T}_a \psi(x)) - \mathcal{T}_a \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} \\ &= \frac{d^2}{dx^2} (\psi(x+a)) - \mathcal{T}_a g(x), \end{aligned}$$

em que definimos $\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = g(x)$. Realizando a mudança de variável $x+a = u \Rightarrow \frac{d}{dx} = \frac{d}{du} \frac{dx}{du} = \frac{d}{du}$, assim ficamos com:

$$\begin{aligned} \left[\frac{d^2}{dx^2}, \mathcal{T}_a\right] \psi(x) &= \frac{d^2}{du^2} (\psi(u)) - g(x+a) \\ &= g(u) - g(x+a) \\ &= g(x+a) - g(x+a) \\ &= 0. \end{aligned}$$

Assim verificamos que $[\mathcal{H}, \mathcal{T}_a] = 0$, isso indica que os autoestados de \mathcal{H} podem ser autoestados simultâneos de \mathcal{T}_a , $\mathcal{H}\psi(x) = E\psi(x)$, $\mathcal{T}_a\psi(x) = \lambda_a\psi(x)$. Vamos investigar qual é a forma de λ_a , tomemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{a'} \psi(x) &= \lambda_{a'} \psi(x) \\ \mathcal{T}_{a''} \psi(x) &= \lambda_{a''} \psi(x). \end{aligned}$$

A translação $\mathcal{T}_{a'} \mathcal{T}_{a''} \psi(x)$ será:

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{a'} \mathcal{T}_{a''} \psi(x) &= \lambda_{a''} \mathcal{T}_{a'} \psi(x) \\ &= \lambda_{a''} \lambda_{a'} \psi(x). \end{aligned} \tag{1.3}$$

Entretanto, de acordo com a equação (1.1) temos que:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{T}_{a'} \mathcal{T}_{a''} \psi(x) &= \mathcal{T}_{a'} \psi(x + a'') \\
 &= \psi(x + a' + a'') \\
 &= \mathcal{T}_{a'+a''} \psi(x) \\
 &= \lambda_{a'+a''} \psi(x).
 \end{aligned} \tag{1.4}$$

Igualando as equações (1.3) e (1.4) obtemos que $\lambda_{a''} \lambda_{a'} = \lambda_{a'+a''}$ o que indica que a forma de lambda é exponencial $\lambda_a = e^{\theta a}$. notemos que:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{T}_{a'} \psi(x) &= e^{\theta a'} \psi(x) \\
 \psi(x + a') &= e^{\theta a'} \psi(x),
 \end{aligned} \tag{1.5}$$

então tomando o produto da função de onda pelo seu complexo conjugado, $\psi(x + a')\psi^*(x + a') = |\psi(x + a')|^2$ encontraremos que $|\psi(x + a')|^2 = e^{(\theta+\theta^*)a'} |\psi(x)|^2$, e para que a densidade de probabilidade da função de onda seja conservada teremos que $e^{(\theta+\theta^*)a'} = 1$ logo θ deverá ser imaginário puro $\theta = ik$, por tanto da equação (1.5):

$$\psi(x + a') = e^{ik \cdot a'} \psi(x). \tag{1.6}$$

A equação (1.6) encerra a demonstração do teorema de Bloch.

Vamos considerar uma cadeia linear de N átomos. A função de onda de um elétron nesta cadeia poderá ser escrita da seguinte forma:

$$\psi(x + Na) = e^{ikNa} \psi(x). \tag{1.7}$$

Tomando o complexo conjugado da equação (1.7) teremos, $\psi^*(x + Na) = e^{-ikNa} \psi^*(x)$. Realizando o produto da equação (1.7) com seu conjugado encontraremos:

$$|\psi(x + Na)|^2 = |\psi(x)|^2. \quad (1.8)$$

Este resultado mostra que a função de onda do elétron não está localizada em um átomo da cadeia mais é compartilhada com toda a cadeia, em outras palavras, a probabilidade de encontrar o elétron é sempre a mesma em qualquer ponto da cadeia de átomos (WAHAB, 2005).

Vamos escrever a segunda forma do teorema de Bloch, $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}$ em que $u_{n\mathbf{k}}$ é uma função periódica com a mesma periodicidade da rede. Os números quânticos que caracterizam as funções de onda, são os autovalores de energia $E_n(\mathbf{k})$ e os índices de banda n surge em virtude da presença de estados degenerados.

De acordo com o modelo de Bloch, um sólido será isolante se cada banda de energia estiver completamente cheia ou completamente vazia, entretanto, seu regime será metálico se pelo menos uma banda for parcialmente preenchida, (ZALLEN, 2008). Considerando $T = 0$, todos os estados com energia abaixo da energia de Fermi ε_F são ocupados por elétrons, chamaremos de preenchidos, enquanto que os estados acima de ε_F ficam desocupados. Para o caso metálico, a energia de Fermi se sobrepõe sobre outros níveis de energia, e ε_F fica parcialmente preenchida. Para o caso isolante, há um *gap* de energia que separa a banda de valência (mais alta) da banda de condução (mais baixa).

1.3 TRANSIÇÃO DE MOTT

Vamos considerar inicialmente, uma rede, com periodicidade a , de átomos de sódio Na. Para ocorrer condução elétrica os elétrons devem se propagar ao longo da rede, através de flutuações de carga elétrica. E nesta flutuação de carga, a transferência de um elétron entre um par de átomos neutros $\text{Na} + \text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{Na}^-$ requer um aumento de energia ε . Vamos considerar o seguinte caso: 2 elétrons compartilham o mesmo átomo da rede, como no quadro direito da figura 1.2

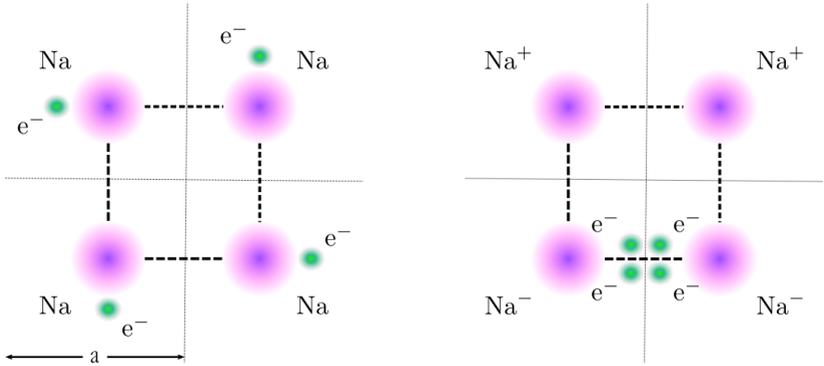


Figura 1.2 – A imagem é composta de 2 quadros. Os quadros representam um fragmento de uma rede de átomos Na. O quadro esquerdo representam um arranjo de átomos neutros, enquanto que o quadro direito um arranjo onde 2 elétrons compartilham do mesmo átomo.

Fonte: O Autor (2021)

É perceptível que, para o quadro direito da figura 1.2, o custo energético para esta configuração é muito maior que o lado esquerdo, devido a forte interação coulombiana $\frac{e^2}{r_{12}}$, repulsiva, entre os elétrons, que denotaremos por U . O que acontece em sólidos reais é que a configuração do lado direito tende a ser evitada. Os elétrons correlacionam seus movimentos, passando de um átomo para o outro com o menor custo energético possível.

O físico *Nevill Francis Mott* (MOTT, 1968), ganhador do prêmio Nobel em física, propôs que, sob algumas condições, a energia da correlação eletrônica pode fazer com que o sólido adquira um estado fundamental isolante (ZALLEN, 2008). Poderemos entender da seguinte forma:

Na figura 1.3, os átomos são representados por poços de potencial, em que o nível eletrônico da camada de valência de um átomo isolado é representado por um traço horizontal. Note que quando a periodicidade da rede aumenta, a largura de banda B diminui. Dife-

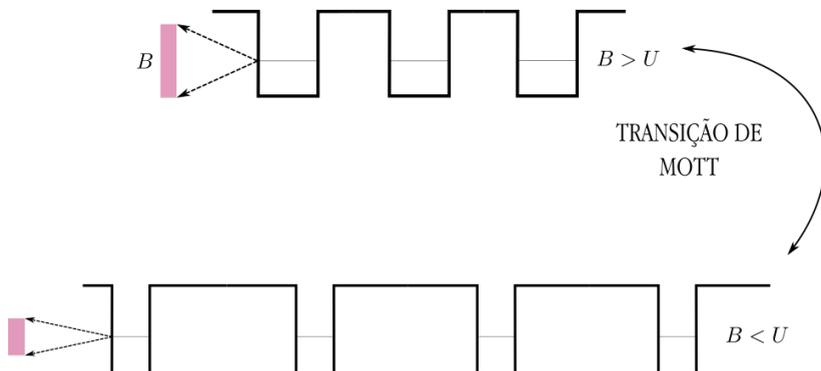


Figura 1.3 – Esquema em que os átomos são representados por poços de potencial. Os níveis eletrônicos da camada de valência são representados por traços horizontais dentro dos poços de potencial

Fonte: O Autor (2021)

rentemente da teoria de Bloch, onde o elétron era visto de maneira independente, e aqui 2 elétrons podem ser compartilhados com um único átomo. Neste caso, há um custo energético U para que essa configuração ocorra e diferentemente do resultado obtido no teorema de Bloch, onde todos os sítios apresentam igual probabilidade para a ocupação orbital do elétron, poderemos ter um orbital vazio, ou com um, ou com 2 elétrons, e as probabilidades de encontrar o elétron são, neste caso ($B > U$), $1/4$, $1/2$, $1/4$, respectivamente. Desta forma a energia média de um elétron delocalizado é $U/4 - B/4$. Uma transição metal isolante ocorre para um valor crítico entre a diminuição da largura de banda e o custo da correlação energética U . Quando $U > B$, configurações de mobilidade eletrônica são menos viáveis, e a energia de correlação passa a induzir localização.

1.4 O MODELO DE ANDERSON

Grande parte dos sólidos encontrados na natureza não apresentam uma estrutura regular dos íons como as redes cristalinas. Os Materiais amorfos apresentam uma estrutura topológica desordenada. Neste tipo de material, a maior parte dos sítios constituintes da

rede serão diferentes, (ZALLEN, 2008). Alguns exemplos de sólidos amorfos são o vidro, o plástico e o gel.

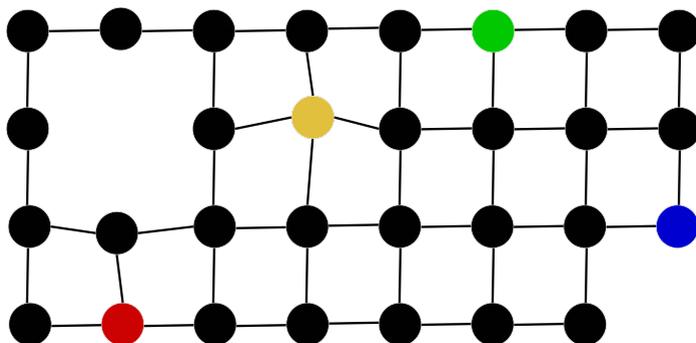


Figura 1.4 – Rede de átomos de uma representação hipotética de um material amorfo

Fonte: O Autor (2021)

Na imagem 1.4 podemos observar uma representação característica de um sólido amorfo. Este sólido pode conter diversas irregularidades estruturais. Podem não apresentar invariância translacional, apresentando impurezas, como é o caso dos pontos coloridos da figura 1.4, que representam átomos de tipos diferentes. A rede também pode conter buracos, isto é, a falta de átomos, que promovem a quebra da regularidade estrutural.

Na nossa busca por melhores modelos de condução, tentamos aproximar, cada vez mais, o modelo teórico da realidade. A partir segunda metade dos anos 50, os estudos de Anderson, (ANDERSON, 1958), (ABRAHAMS et al., 1979), (KRAMER; MACKINNON, 1993) introduziram um modelo que possibilitou entender o processo difusivo do elétron, as propriedades de condução eletrônica e transições metal-isolante, presentes nos materiais amorfos.

O modelo de Anderson, na representação *tight-binding*, é dado por:

$$\mathcal{H} = \sum_n \varepsilon_n |n\rangle \langle n| + \sum_{n \neq m} J_{nm} |n\rangle \langle m| \quad (1.9)$$

A equação (1.9) contém um termo de energia cinética J_{nm} , chamado de integral de transferência, ou amplitude de *hopping* e representa a *hopping* do elétron. E também possui um termo ε_n que representa a energia potencial de ionização atômico de cada um dos átomos da cadeia.

Cada ε_n é um número aleatório contido em um intervalo de largura W , que é justamente a magnitude do potencial aleatório, em geral, chamado de largura ou força de desordem. Vamos tomar a equação de Schrödinger $\mathcal{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$, em que $|\Psi\rangle$ representa o conjunto dos autoestados do Hamiltoniano \mathcal{H} . Expandindo $|\Psi\rangle$ na base de orbitais $\{|n\rangle\}$, temos $|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ e projetando Ψ na equação (1.9) teremos:

$$E c_n = \varepsilon_n c_n + \sum_m J_{nm} c_m \quad (1.10)$$

Vamos analisar a expressão acima para o caso cristalino em que $W = 0$. Todas as energias potenciais são iguais (vamos escolher $\varepsilon_n = 0$). Vamos considerar ainda que as integrais de transferência têm mesma magnitude $J_{nm} = J$. A equação assume a forma:

$$E c_n = J \sum_{n=1}^p c_{n+p}, \quad (1.11)$$

onde a soma da expressão (1.11) está compreendida ao longo dos p primeiros vizinhos. Aqui, nós consideraremos que há interação apenas entre os primeiros vizinhos. Deste modo obteremos a equação:

$$E c_m = J c_{m+1} + J c_{m-1}. \quad (1.12)$$

Na equação (1.12) vamos supor que a solução é $c_p = c_0 e^{ikp}$ (k é o número de onda). Então encontraremos:

$$E = 2J \cos k, \quad (1.13)$$

A equação (1.13) representa a relação de dispersão de energia, ($-2J \leq E \leq +2J$), obtida na teoria de Bloch. É notável que o modelo de Anderson é uma extensão do modelo de Bloch, uma vez que ε_n caracteriza o tipo de potencial e por sua vez a distinção entre materiais amorfos e cristalinos.

Em 1958, Anderson mostrou que existe uma transição de estados metálicos para isolantes, em virtude do grau de desordem do potencial. Quando o $\frac{W}{J} < 1$, ou seja, o sistema está em um regime de fraca desordem, os estados deste sistema são estendidos ao longo da rede amorfa. No entanto, o aumento da desordem no potencial, promove padrões de interferência extremamente destrutivas. Anderson descobriu que para um potencial altamente desordenado, $\frac{W}{J} > 1$, a função de onda do elétron fica localizada em uma região do material.

A transição metal-isolante de Anderson ocorre justamente no limite em que $W = J$. Este resultado, na verdade ocorre apenas quando o sistema em questão é tridimensional. Em 1979 o estudo de (ABRAHAMS et al., 1979), mostrou que há uma dependência da transição de Anderson com a dimensão do sistema. Este resultado será visto a seguir.

1.4.1 Teoria de Escala Para Transição de Anderson

Na década de setenta foi mostrando que existe uma dependência na transição de Anderson com a dimensão do sistema. Esta dependência devidamente demonstrada pelo famoso trabalho de *Abrahams, Anderson, Licciardello, e Ramakrishnan* em (ABRAHAMS et al., 1979). A hipótese sustentada era de que, em temperatura $T = 0$ a condutância generalizada g seria a quantidade de escala necessária para se investigar a transição da fase metálica (estados estendidos) para a fase isolante (estados localizado).

Anderson e colaboradores então apresentaram uma elegante teoria de escala para entender a dependência de g com o tamanho do sistema, dimensão topológica bem como intensidade de desordem. Para descrição de uma teoria de escala para a transição de Anderson, vamos considerar um hipercubo d -dimensional de aresta L , contendo níveis de energia com espaçamento $\Delta(E)$. Os níveis também apresentam uma certa sensibilidade as mudanças nas condições de borda das caixas. Esta sensibilidade é medida indiretamente pela flutuação $\delta(E)$ na energia dos níveis devido tais flutuações/modificações nas bordas dos hiper cubos. Foi considerado que o elétron "percorre" os níveis dos hiper cubos seguindo um processo de difusão normal tipo um movimento browniano. O tempo t_D para que o elétron seja difundido ao longo dos níveis de energia será dado por:

$$t_D = \frac{L^2}{D}, \quad (1.14)$$

em que D é o coeficiente de difusão. Como o elétron executa um movimento Browniano, poderemos lançar mão da relação de Einstein para a condutividade:

$$\sigma = e^2 D n(E), \quad (1.15)$$

onde e^2 é a carga do elétron e $n(E)$, que é função do espaçamento médio entre os níveis de energia, é a densidade de estados média ($n(E) = 1/L^d \Delta(E)$). Isolando D na equação (1.15) e substituindo na equação (1.14) encontramos:

$$t_D = \frac{e^2}{\sigma L^{d-2} \Delta(E)}. \quad (1.16)$$

vamos escrever $\delta(E)$ a partir do princípio da incerteza de Heisenberg:

$$\delta(E) = \frac{\hbar}{t_D}. \quad (1.17)$$

Vamos usar as relações (1.16) e (1.17) para definir o parâmetro de desordem $g^{-1}(E)$:

$$\frac{1}{g(E)} \equiv \frac{\Delta(E)}{\delta(E)}. \quad (1.18)$$

É importante ressaltar que a relação $\Delta(E)/\delta(E)$ é equivalente a expressão W/J que mede a grau da desordem, ou seja, quando $g \rightarrow \infty$ o sistema exibe uma desordem fraca, apresentando estados estendidos. A equação (1.18) tem validade justamente dentro deste regime, onde os valores de g são expressivos. quando $g \rightarrow 0$ o comportamento do parâmetro de desordem g^{-1} muda, como veremos mais adiante, por enquanto concentraremos nossos esforços para entender o comportamento de g no limite macroscópico. A equação (1.18) nos fornece:

$$g(L) = \left(\frac{\hbar}{e^2} \right) \sigma L^{d-2}. \quad (1.19)$$

$g(L)$ pode ser compreendido como uma condutância generalizada em termos de e^2/\hbar , já que o termo σL^{d-2} é a condutância de um hipercubo d -dimensional de aresta L . Consideremos um hipercubo de volume L_0^d , a condutância generalizada, como função de L_0 , será:

$$g_0 = g(L_0) = \left(\frac{\hbar}{e^2} \right) \sigma L_0^{d-2}.$$

Podemos obter g em uma nova escala, $L' = c L_0$ de maneira que sempre será possível escrever g a partir de g_0 e pelo fator de escala c . É possível obter o comportamento $\beta(g)$ da condutância generalizada a partir da expressão:

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L}, \quad (1.20)$$

Podemos descrever o comportamento qualitativo de $\beta(g)$, tal comportamento pode ser observado na figura 1.5.

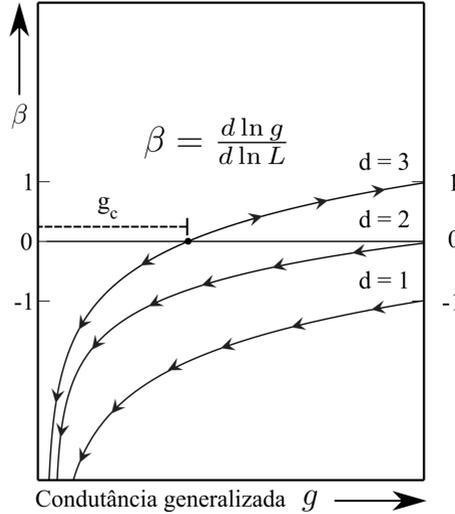


Figura 1.5 – diagrama com comportamento $\beta(g)$ para $d > 2$, $d = 2$, $d < 2$ na teoria de escala descrita por *Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnam*.

Fonte: O Autor (2021)

Fazendo uso das equações (1.19) e (1.20) obtemos o comportamento de $\beta(g)$ para g grande:

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = d - 2. \quad (1.21)$$

Assumindo, para d , os valores 3, 2 e 1, obtemos os valores assintóticos respectivos de β : 1, 0 e -1 , no limite $g \rightarrow \infty$ para $\beta(g)$. Agora, quando olhamos para valores de g muito pequenos, $g \rightarrow 0$,

g decai exponencialmente com L com a forma: $g \propto e^{-\gamma L}$, onde γ é o expoente de *Lyapunov*. Usando a equação (1.20) com a nova expressão para g , com $g \rightarrow 0$ obtemos que:

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = \ln g. \quad (1.22)$$

Ou seja, quando $g \rightarrow 0$, $\beta \rightarrow -\infty$, isso ocorre independente da dimensão. Este resultado pode ser verificado no diagrama da figura 1.5. As setas na figura 1.5 representam a direção da variação de g a medida que L cresce, por exemplo, a medida que L cresce na curva para $d = 1$, g sempre decresce, enquanto que a curva para $d = 3$ apresenta um comportamento onde g cresce e decresce, a transição, neste caso, ocorre em torno de um certo $g = g_c$ tal que $\beta(g_c) = 0$. Note que quando $\beta(g) > 0$ a condutância aumenta a medida que L cresce, enquanto que para $\beta(g) < 0$ a condutância diminui a medida que L cresce. Em resumo, este diagrama nos mostra que para $d > 2$ há transição metal-isolante, enquanto que $d = 1$ e $d = 2$ não existe transição de fase (apenas uma fase localizada).

1.4.2 Evolução temporal

Estudar a dinâmica de um sistema quântico desordenado pode nos dar indícios de que há estados estendidos ou localizados no sistema. Vamos considerar o modelo unidimensional descrito na equação (1.9), vamos ainda supor que em $t_0 = 0$ um elétron está localizado no k -ésimo sítio da cadeia onde sua função de onda tem um caráter do tipo delta em que a amplitude de sua função de onda é 1 apenas no sítio k , $|c_k(t_0)| = 1$, e nula ao longo de todos os outros sítios da cadeia, $|c_n(t_0)| = 0$, $n \neq k$. A solução da equação de *Schrödinger* dependente do tempo nos fornecerá a evolução temporal deste estado, utilizando a equação (1.11), considerando ainda a interação apenas com os primeiros vizinhos, a evolução do estado será dada por:

$$i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} = \varepsilon_n c_n(t) + Jc_{n+1}(t) + Jc_{n-1}(t), \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (1.23)$$

Se existir solução para este conjunto de equações estaremos interessados em analisar o comportamento de $c_k(t)$ para tempos longos, ora, se após transcorrido um período de tempo longo existir alguma probabilidade não nula de o elétron se encontrar no k -ésimo sítio, $c_k(t \rightarrow \infty) \neq 0$, significa que o elétron não se difundiu ao longo da cadeia e o estado ainda é localizado, pois o elétron pode ser encontrado nas vizinhanças do k -ésimo sítio. No entanto, se a probabilidade do elétron se encontrar no sítio k for nula, $c_k(t \rightarrow \infty) = 0$, este é um forte indício que sua função de onda seja estendida ao longo da cadeia. Assim a quantidade $|c_k(t)|^2$ representará a probabilidade de retorno ao ponto de partida, se tornando um ingrediente importante para descrever a natureza dos estados do sistema em questão.

Uma das maneiras de se obter a dinâmica de um estado quântico é usando o operador de evolução temporal, a vantagem empregada na escolha deste método é a precisão numérica, pois estaremos lidando com a solução formal e exata do problema. A evolução temporal de um sistema quântico será dada por:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\Psi(t_0)\rangle, \quad (1.24)$$

em que $|\Psi(t_0)\rangle$ representa o estado em $t = 0$. Podemos expandir $|\Psi(t)\rangle$ em termos da base dos orbitais $\{|n\rangle\}$, $|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n\rangle$. Da equação de *Schrödinger* temos que $\mathcal{H} |E\rangle = E |E\rangle$, poderemos expandir os autovetores de \mathcal{H} na base dos orbitais, $|E\rangle = \sum_n f_n^E |n\rangle$, deste modo teremos:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} \sum_E |E\rangle \langle E | \Psi(t_0)\rangle, \quad (1.25)$$

poderemos resolver o produto $\langle E|\Psi(t_0)\rangle$ expandindo $|\Psi(t_0)\rangle$ na base dos orbitais, $|\Psi(t_0)\rangle = \sum_n c_n^0 |n\rangle$ ficaremos com:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} \sum_{n,E} \left[c_n^0 f_n^E \right] |E\rangle = \sum_{n,E} e^{-iEt/\hbar} \left[c_n^0 f_n^E \right] |E\rangle, \quad (1.26)$$

separando os somatórios encontramos a expressão:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_E e^{-iEt/\hbar} \left[\sum_n c_n^0 f_n^E \right] |E\rangle,$$

por fim, chamaremos o termo entre colchetes de $G(E)$ e expandiremos novamente $|E\rangle$ na base dos orbitais:

$$\sum_n c_n(t) |n\rangle = \sum_n \left[\sum_E G(E) f_n^E e^{-iEt/\hbar} \right] |n\rangle$$

e então obtemos $c_n(t)$:

$$c_n(t) = \sum_E G(E) f_n^E e^{-iEt/\hbar} \quad (1.27)$$

Há uma desvantagem no uso deste método, já que é necessário realizar a diagonalização direta do Hamiltoniano, este procedimento, em geral, tem um custo computacional muito alto se considerarmos cadeias unidimensionais com $N > 10^4$, no entanto continua sendo uma estratégia muito interessante para abordagem no modelo de Anderson de cadeias unidimensionais como será abordado no capítulo 2.

1.5 MEDIDAS DO GRAU LOCALIZAÇÃO

A Transição metal-isolante é caracterizada a partir dos autoestados do Hamiltoniano do sistema, uma vez eles apresentem mudança em sua natureza, estendidos ou localizados. Uma das formas

de estudar este fenômeno é analisar algumas grandezas físicas que medem o grau de localização dos autoestados (KRAMER; MAC-KINNON, 1993), para isso é necessário realizar uma investigação nos autovetores, partindo da solução da equação de *Schrödinger*:

$$\mathcal{H} |\Psi_k\rangle = E_k |\Psi_k\rangle. \quad (1.28)$$

Encontrar a solução analítica da equação (1.28) pode ser um processo extremamente complicado se o Hamiltoniano apresentar alguma complexidade como a inserção da desordem, no entanto, ainda é possível obter os autoestados $|\Psi_k\rangle$ e as autoenergias E_k utilizando procedimentos numéricos que envolvam a diagonalização direta de \mathcal{H} . A diagonalização é feita considerando a representação matricial para o Hamiltoniano, utilizando uma base de autoestados $\{|n\rangle\}$ que é a base dos orbitais atômicos, onde cada $|\Psi_k\rangle$ pode ser expandido nesta base, $|\Psi_k\rangle = \sum_n c_n^{(k)} |n\rangle$. Esta expansão é extremamente útil para o cálculo de algumas grandezas físicas que nos informam o grau de localização de dos estados $|\Psi_k\rangle$, uma dessas grandezas é a razão de participação ξ dada por:

$$\xi_k = \frac{\sum_n^N |c_n^{(k)}|^2}{\sum_n |c_n^{(k)}|^4}, \quad (1.29)$$

como os autoestados do Hamiltoniano são normalizados $\langle \Psi_k | \Psi_k \rangle = 1$ o numerador deve ser igual a 1, uma vez que $\sum_{n=1}^N |c_n|^2 = 1$. Se considerarmos, por exemplo o caso puro em que todos os autoestados são estendidos teremos $c_1 = c_2 = \dots = c_n$, logo $\sum_{n=1}^N |c_n|^2 = N \cdot c_n^2$ ou seja, $c_n = 1/\sqrt{N}$, assim o valor da participação será:

$$\xi = \frac{1}{\sum_n |c_n|^4} = N. \quad (1.30)$$

Ou seja, ξ representa efetivamente o número de sítios sobre os quais a função de onda está efetivamente distribuída. Para o caso mais geral, com dimensão d , a participação é do tipo $\xi \propto N^d$ e diverge no limite termodinâmico. Podemos ainda estudar a flutuação η relativa ao número de participação discutido por (DOS SANTOS et al., 2007) que será útil para descrever a natureza dos estados, estendido ou localizado. η é dado por:

$$\eta = \frac{\Delta\xi}{\langle\xi\rangle}, \quad (1.31)$$

onde $\langle\xi\rangle = \langle\xi(E)\rangle$ representa o número de participação médio dentro de um intervalo de largura $\Delta E = [-\epsilon, \epsilon]$ calculado, por exemplo, no centro da banda e $\Delta\xi = \Delta\xi(E)$ é o desvio padrão $\Delta\xi(E) = \sqrt{\langle\xi^2(E)\rangle - \langle\xi(E)\rangle^2}$. Analisando $\eta(N)$ tem-se que se $\eta \rightarrow 0$ quando N cresce trata-se de um estado estendido em contrapartida se η cresce quando N cresce então esse estado é localizado.

Outra quantidade que pode ser destacada é a entropia de *Shannon*, similarmente a razão de participação, é possível caracterizar os estados como estendido ou localizado através da expressão:

$$S_k = - \sum_n^N |c_n^{(k)}|^2 \log |c_n^{(k)}|^2. \quad (1.32)$$

Para um estado localizado $S = 0$, no entanto, para estados localizados em um sistema com dimensão d a entropia é $S \approx \log(N^d)$.

1.6 FIDELIDADE PARA UM GRAFO ARBITRÁRIO

Imagine que queiramos transmitir um estado quântico ao longo de uma cadeia de spins. De maneira genérica, a ideia principal é preparar um estado inicialmente desconhecido, em um ponto da cadeia, e em seguida, transmiti-lo a outro ponto com alguma garantia.

Uma grandeza chamada fidelidade pode ser definida, tendo o intuito de verificar a qualidade da transferência de estados quânticos entre os dois pontos da rede em questão. Este é um resultado importante pois não queremos que o estado quântico que for enviado seja alterado ou perdido ao longo do processo de comunicação. Considerando esses fatos, a fidelidade se torna uma medida essencial para estudar o comportamento da transferência de estados quânticos.

Vamos mostrar o cálculo da fidelidade que foi discutido por Bose nas referências: (BOSE, 2003) e (BOSE, 2007). Para isso iremos estabelecer um protocolo de comunicação quântica entre Alice e Bob. Consideremos um grafo¹ geral \mathbf{G} , como o da figura 1.6: os vértices são os spins e as arestas as conexões entre spins. O sistema é constituído de N spins e seu hamiltoniano é dado por:

$$\mathcal{H}_{\mathbf{G}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \boldsymbol{\sigma}^i \boldsymbol{\sigma}^j - \sum_{i=1}^N B_i \sigma_z^i, \quad (1.33)$$

em que $\langle i, j \rangle$ representam os pares de spin, J_{ij} é a força de acoplamento, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, onde as componentes de $\boldsymbol{\sigma}$ representam as matrizes de Pauli e B_i é um campo magnético estático e positivo.

No protocolo de comunicação quântica a rede deverá estar inicialmente no estado fundamental, onde todos os spins da cadeia estarão alinhados ao longo da direção $-z$. Nesse estado a rede será representada por $|\mathbf{0}\rangle = |0_1 0_2 \cdots 0_N\rangle$. Para que o estado fundamental seja atingido a temperatura do sistema será reduzida até

¹Um grafo \mathbf{G} é um par (\mathbf{V}, \mathbf{A}) onde \mathbf{V} é um conjunto finito de vértices e \mathbf{A} , conjunto finito de arestas ou arcos, é uma relação binária sobre \mathbf{V} .

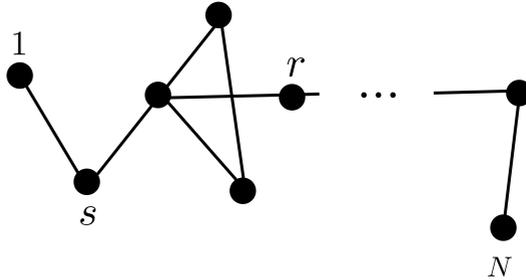


Figura 1.6 – Representação esquemática de um grafo hipotético em que os vértices representam os spins e as arestas representam as conexões entre os spins interagentes.

Fonte: O Autor (2021)

que todos os spins da cadeia estejam para baixo como na figura 1.7. $|\mathbf{0}\rangle$ é autoestado de \mathcal{H}_G que corresponde a energia nula, então vamos reescrever o hamiltoniano do sistema considerando agora a energia no estado fundamental $E_0 = 0$, $\mathcal{H} = E_0 + \mathcal{H}_G$. por fim, teremos que considerar uma classe de estados dada por $|j\rangle = |0_1 \cdots 0_{1_j} 0 \cdots 0_N\rangle$, $j = 1, 2, \dots, s, \dots, r, \dots, N$, em que 1_j representa o spin para cima, dado por $|1\rangle$.

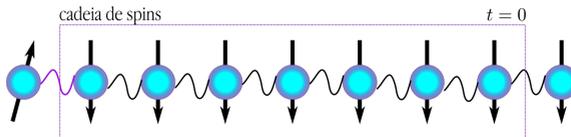


Figura 1.7 – Representação da cadeia de spins em um campo magnético externo, inicialmente no estado fundamental, para o protocolo de comunicação quântica entre Alice e Bob.

Fonte: O Autor (2021)

Vamos considerar o seguinte protocolo de comunicação quântica: o emissor, Alice, e o receptor, Bob, que indicaremos como $|s\rangle$ e $|r\rangle$ respectivamente, desejam enviar e receber certa informação. A-

lice deverá preparar um estado desconhecido de entrada da forma, $|\psi_{\mathcal{E}}\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$, e colocá-lo no s -ésimo sítio da cadeia de spins, então, poderemos descrever o estado inicial de toda a cadeia, em $t = 0$, como sendo:

$$\begin{aligned} |\Psi(0)\rangle &= |\psi_{\mathcal{E}}\rangle \otimes |0_2 \cdots 0_N\rangle \\ |\Psi(0)\rangle &= \alpha |\mathbf{0}\rangle + \beta |\mathbf{s}\rangle. \end{aligned} \quad (1.34)$$

Para que Bob receba o estado que foi emitido por Alice, ele deverá esperar um determinado tempo, para que o estado inicial evolua para um estado igual ou muito próximo de $|\Psi(t)\rangle = \alpha |\mathbf{0}\rangle + \beta |\mathbf{r}\rangle$. Queremos encontrar $|\Psi(t)\rangle$, sendo assim, vamos lançar mão do operador de evolução temporal, $\mathcal{U}(t)$, utilizado na equação (1.24) onde tomaremos $\hbar = 1$.

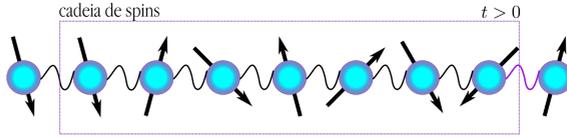


Figura 1.8 – Protocolo de comunicação quântica em que após um tempo específico $t > 0$, Bob recebe o estado transmitido por Alice.

Fonte: O Autor (2021)

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(t) |\Psi(0)\rangle &= e^{-i\mathcal{H}t} |\psi_{\mathcal{E}}\rangle \otimes |0_2 \cdots 0_N\rangle \\ \mathcal{U}(t) |\Psi(0)\rangle &= \alpha e^{-i\mathcal{H}t} |\mathbf{0}\rangle + \beta e^{-i\mathcal{H}t} |\mathbf{s}\rangle. \end{aligned} \quad (1.35)$$

$|\mathbf{0}\rangle$ não evoluirá no tempo porque é autoestado com autoenergia $E_0 = 0$ de \mathcal{H} :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} |\mathbf{0}\rangle &= E_0 |\mathbf{0}\rangle \\ \mathcal{U}(t) |\mathbf{0}\rangle &= e^{-iE_0 t} |\mathbf{0}\rangle = |\mathbf{0}\rangle. \end{aligned} \quad (1.36)$$

O operador da componente z total dos spins dado por $\sigma_{zT} = \sum_{i=1}^N \sigma_z^i$ comuta com \mathcal{H} , $[\mathcal{H}, \sigma_{zT}] = 0$, ou seja, a componente z total do spin é conservada, o que indica que o estado $|\mathbf{s}\rangle$ deverá evoluir como uma superposição de estados $|\mathbf{j}\rangle$:

$$|\Psi(t)\rangle = \alpha |\mathbf{0}\rangle + \beta \sum_{\mathbf{j}=1}^N \langle \mathbf{j} | e^{-i\mathcal{H}t} | \mathbf{s} \rangle |\mathbf{j}\rangle. \quad (1.37)$$

em que definiremos:

$$f_{\mathbf{j},\mathbf{s}}(t) := \langle \mathbf{j} | e^{-i\mathcal{H}t} | \mathbf{s} \rangle, \quad (1.38)$$

como sendo a amplitude de transição de uma excitação do s -ésimo para o r -ésimo sítio de um grafo com N spins. Note que $|\Psi(t)\rangle \in H = H_1 \otimes H_2$ em que $\{|v\rangle\}$ e $\{|w\rangle\}$ são bases de H_1 e H_2 . A matriz densidade ρ em $H_1 \otimes H_2$ é dada por $\rho = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$. Estaremos interessados em analisar o estado de saída $|\psi_s\rangle$ que está definido em H_1 . Desta forma, precisaremos obter uma matriz densidade $\rho_s \in H_1$. A meio para se obter ρ_s é através do traço parcial de ρ .

Para exemplificar a obtenção do traço parcial, tomemos $\{|v_i\rangle\}$, $\{|w_j\rangle\}$ bases de H_1 e H_2 , então $\{|v_i\rangle \otimes |w_j\rangle\} = \{|v_i w_j\rangle\}$ é base de H . Tomemos:

$$\rho = \sum_{i,j} p_{ij} |v_i w_j\rangle \langle v_i w_j|.$$

A matriz densidade reduzida ρ_1 será dada por:

$$\rho_1 = Tr(\rho)_1 = \sum_k \langle w_k | \rho | w_k \rangle. \quad (1.39)$$

Então:

$$\begin{aligned}
 \rho_1 &= \sum_k \sum_{i,j} p_{ij} \langle w_k | v_i w_j \rangle \langle v_i w_j | w_k \rangle \\
 &= \sum_k \sum_{i,j} p_{ij} \delta_{kj} |v_i\rangle \langle v_i| \delta_{ki} \\
 &= \sum_i \left(\sum_k p_{ik} \right) |v_i\rangle \langle v_i| \\
 &= \sum_i q_i |v_i\rangle \langle v_i|, \tag{1.40}
 \end{aligned}$$

em que q_i representa o termo entre parênteses. Assim, a matriz densidade $\rho_s(t)$ dos estados de saída $|\psi_s(t)\rangle$ pode ser obtida a partir de $\rho_s = \sum_i \langle v_i | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | v_i \rangle$, em que $\{|v_i\rangle\} = \{|v_1 v_2 \cdots v_N\rangle\}$ é base de H_2 , então a matriz densidade ρ_s será dada por:

$$\rho_s(t) = P(t) |\psi_s(t)\rangle \langle \psi_s(t)| + [1 - P(t)] |0\rangle \langle 0|, \tag{1.41}$$

onde $|\psi_s(t)\rangle = (\alpha |0\rangle + \beta f_{r,s}(t) |1\rangle) [P(t)]^{-\frac{1}{2}}$ representa o estado de saída e $P(t) = |\alpha|^2 + |\beta|^2 |f_{r,s}(t)|^2$. A fidelidade média da comunicação quântica através do canal sobre os estados puros $|\psi_{\mathcal{E}}\rangle$ em uma esfera de Bloch será:

$$\mathcal{F} = \frac{1}{4\pi} \int \langle \psi_{\mathcal{E}} | \rho_s(t_0) | \psi_{\mathcal{E}} \rangle d\Omega. \tag{1.42}$$

Como a integração será realizada sob uma esfera, com elemento de ângulo sólido $d\Omega$, será conveniente reescrever α e β em termos das variáveis de integração, assim tomaremos $\alpha = \cos \frac{\theta}{2}$ e $\beta = e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2}$ no momento da integração. Vamos explicitar o integrando da equação (1.42):

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_{\mathcal{E}} | \rho_s(t_0) | \psi_{\mathcal{E}} \rangle = & (\langle 0 | \alpha^* + \langle 1 | \beta^* \rangle (\alpha | 0 \rangle + \beta f_{r,s}(t_0) | 1 \rangle)) \\
 & (\langle 0 | \alpha^* + \langle 1 | \beta^* f_{r,s}^*(t_0) \rangle (\alpha | 0 \rangle + \beta | 1 \rangle) + \\
 & + (\langle 0 | \alpha^* + \langle 1 | \beta^* \rangle (| 0 \rangle) (\langle 0 |) (\alpha | 0 \rangle + \beta | 1 \rangle)) - \\
 & - (|\alpha|^2 + |\beta|^2 |f_{r,s}(t_0)|^2) (\langle 0 | \alpha^* + \langle 1 | \beta^* \rangle \\
 & (| 0 \rangle) (\langle 0 |) (\alpha | 0 \rangle + \beta | 1 \rangle))
 \end{aligned}$$

realizando os produtos internos na expressão acima encontraremos:

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_{\mathcal{E}} | \rho_s(t_0) | \psi_{\mathcal{E}} \rangle = & (|\alpha|^2 + |\beta|^2 f_{r,s}(t_0)) (|\alpha|^2 + |\beta|^2 f_{r,s}^*(t_0)) + \\
 & + |\alpha|^2 - (|\alpha|^2 + |\beta|^2 |f_{r,s}(t_0)|^2) |\alpha|^2,
 \end{aligned}$$

onde os termos serão reorganizados da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_{\mathcal{E}} | \rho_s(t_0) | \psi_{\mathcal{E}} \rangle = & |\alpha|^2 |\beta|^2 (f_{r,s}^*(t_0) + f_{r,s}(t_0)) + |\beta|^4 |f_{r,s}|^2 - \\
 & - |\alpha|^2 |\beta|^2 |f_{r,s}(t_0)|^2 + |\alpha|^2. \tag{1.43}
 \end{aligned}$$

Vamos reescrever o termo $(f_{r,s}^*(t_0) + f_{r,s}(t_0))$, presente na equação (1.43). Para isso, perceba $f_{r,s}(t_0) = |f_{r,s}(t_0)| e^{i\gamma}$, em que $\gamma = \arg\{f_{r,s}(t_0)\}$, então:

$$\begin{aligned}
 f_{r,s}^*(t_0) + f_{r,s}(t_0) = & 2 |f_{r,s}(t_0)| \frac{(e^{i\gamma} + e^{-i\gamma})}{2} \\
 = & 2 |f_{r,s}(t_0)| \cos \gamma. \tag{1.44}
 \end{aligned}$$

Substituindo a equação (1.44) na equação (1.43) e escrevendo α e β em termos dos ângulos θ e ϕ respectivamente, encontraremos o nosso integrando em sua forma explicitada:

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_{\mathcal{E}} | \rho_s(t_0) | \psi_{\mathcal{E}} \rangle = & 2 \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \cos \gamma |f_{r,s}(t_0)| + \sin^4 \frac{\theta}{2} |f_{r,s}(t_0)|^2 \\
 & - \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} |f_{r,s}(t_0)|^2 + \cos^2 \frac{\theta}{2}. \tag{1.45}
 \end{aligned}$$

Para realizar a integração notamos que o integrando da equação (1.45) não apresenta dependência em ϕ assim:

$$\int \langle \psi_{\mathcal{E}} | \rho_s(t_0) | \psi_{\mathcal{E}} \rangle d\Omega \Rightarrow 2\pi \int_0^\pi \langle \psi_{\mathcal{E}} | \rho_s(t_0) | \psi_{\mathcal{E}} \rangle \sin \theta d\theta,$$

restando apenas integrar a variável θ . Finalmente obtemos a expressão para a fidelidade:

$$\mathcal{F} = \frac{|f_{r,s}(t_0)| \cos \gamma}{3} + \frac{|f_{r,s}(t_0)|^2}{6} + \frac{1}{2}. \quad (1.46)$$

A fim de obtermos o valor máximo para a fidelidade teremos que escolher os campos magnéticos B_i de modo que $\cos \gamma = 1$ e que a amplitude de excitação seja ao longo de toda a cadeia $f_{N,1}(t) = f_N(t)$, assim obteremos:

$$F = \frac{1}{2} + \frac{|f_N(t)|}{3} + \frac{|f_N(t)|^2}{6}. \quad (1.47)$$

Quando ocorre a perfeita transmissão de estado, $F = 1$, em contrapartida, quando nada é transmitido, $F = \frac{1}{2}$, ou seja, $f_N(t) = 0$.

Na referência (BOSE, 2003), Bose mostrou em uma simulação numérica, apresentada na figura 1.9, que o modelo, representado pela equação (1.33), apresentava uma transferência de estados quânticos perfeita, ou seja, $F = 1$ para uma cadeia com $N = 2$ e $N = 4$, além disso mostrou que para valores crescentes de N o valor da fidelidade diminui. Utilizaremos a equação (1.47), no capítulo 2, para estudar o comportamento da fidelidade em uma cadeia de átomos que apresenta uma desordem correlacionada.

1.7 EMARANHAMENTO

Existem algumas partículas que apresentam uma característica que nos impossibilita descrever cada uma delas de maneira

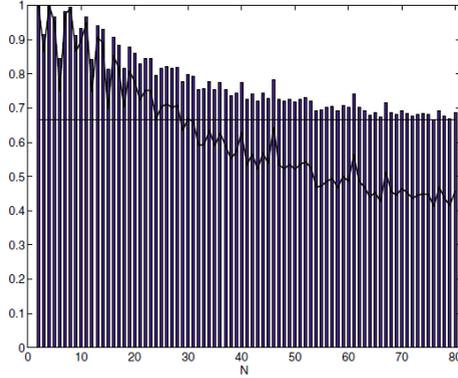


Figura 1.9 – Fidelidade máxima da comunicação quântica alcançada em uma cadeia de spins de Heisenberg no intervalo de tempo de $[0, 4000/J]$ como função do comprimento $N = [2, 80]$ da cadeia. A linha horizontal representa a maior fidelidade para uma transmissão clássica de um estado quântico.

Fonte: (BOSE, 2003)

independente, dizemos que estas partículas estão emaranhadas. Este é um conceito imprescindível na computação quântica pois possibilita a criação de protocolos de comunicação inquebráveis além de ser um recurso muito importante na transferência de estados quânticos, (ZWICK, 2012). Vamos considerar um estado bipartido $|\psi_{AB}\rangle$, que pertence ao espaço de Hilbert $H_A \otimes H_B$, em que $|\psi_A\rangle \in H_A$ e $|\psi_B\rangle \in H_B$. Um estado $|\psi_{AB}\rangle$ é dito emaranhado se ele não pode ser escrito como o estado produto:

$$|\psi_{AB}\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle \quad (1.48)$$

Para exemplificar um estado emaranhado, consideremos o estado $|\psi^+\rangle = 2^{-\frac{1}{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$, se este estado for emaranhado não poderá ser escrito como o estado produto $|v\rangle \otimes |w\rangle$ em que $|v\rangle \in H_A$ e $|w\rangle \in H_B$. Afim de verificar se $|\psi^+\rangle$ é de fato um estado emaranhado, vamos supor que $|\psi^+\rangle = |v\rangle \otimes |w\rangle$, e analisar se a igualdade será satisfeita:

$$\begin{aligned}
 |\psi^+\rangle &= |v\rangle \otimes |w\rangle \\
 &= (\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle) \otimes (\gamma |0\rangle + \delta |1\rangle) \\
 &= \alpha\gamma |00\rangle + \alpha\delta |01\rangle + \beta\gamma |10\rangle + \beta\delta |11\rangle.
 \end{aligned}$$

Comparando os termos da igualdade acima encontraremos:

$$\begin{aligned}
 \alpha\gamma &= 0 & \beta\delta &= 0 \\
 \alpha\delta &= \frac{1}{\sqrt{2}} & \beta\gamma &= \frac{1}{\sqrt{2}}.
 \end{aligned} \tag{1.49}$$

Que resulta em um absurdo já que pelo menos um dos coeficientes da igualdade sempre será nulo. Em outras palavras, $|\psi^+\rangle \neq |v\rangle \otimes |w\rangle$, logo $|\psi^+\rangle$ é um estado emaranhado. $|\psi^+\rangle$ faz parte de uma classe de estados emaranhados conhecidos como estados de Bell, são eles:

$$\begin{aligned}
 |\phi^\pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle \pm |11\rangle) \\
 |\psi^\pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle \pm |10\rangle).
 \end{aligned} \tag{1.50}$$

1.7.1 Concorrência

A concorrência C , (WOOTTERS, 1998), é uma grandeza que quantifica o emaranhamento entre duas partículas. Estamos interessados em definir uma expressão para a concorrência, para um dado sistema físico de interesse. Vamos considerar o hamiltoniano descrito por (ALMEIDA et al., 2017), que trata de um sistema de férmions não interagentes:

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^N \varepsilon_n \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n - J \sum_{n=1}^{N-1} (\hat{c}_n^\dagger \hat{c}_{n+1} + \hat{c}_{n+1}^\dagger \hat{c}_n), \tag{1.51}$$

em que \hat{c}_n^\dagger cria e \hat{c}_n aniquila uma partícula no n -ésimo sítio. A presença ou ausência de um férmion em determinado sítio representa

um estado com spin para cima ou um spin para baixo, respectivamente.

Tomando $|\psi\rangle$ um estado arbitrário, Podemos escrevê-lo como uma combinação linear dos vetores da base $\{|i\rangle\}$:

$$|\psi\rangle = \sum_i w_i |i\rangle, \quad (1.52)$$

em que w_i são as amplitudes de probabilidade e $|w_i|^2$ representa a probabilidade de encontrar a partícula no i -ésimo sítio. O operador densidade pode ser escrito da seguinte forma:

$$\rho = |\psi\rangle \langle\psi| = \sum_i \sum_j w_i w_j^* |i\rangle \langle j|. \quad (1.53)$$

Utilizando a base computacional $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$, para 2 bits quânticos, podemos escrever a matriz densidade reduzida com o intuito de verificar o quão emaranhado está um determinado par de spins (i, j) . A matriz densidade reduzida $\rho_{i,j}$ para um par de spins é escrita da seguinte forma:

$$\rho_{i,j} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & c & 0 \\ 0 & d & e & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.54)$$

Onde, $a = 1 - |w_i|^2 - |w_j|^2$, $b = |w_i|^2$, $c = w_i w_j^*$, $d = w_i^* w_j$, $e = |w_j|^2$.

De acordo com (WOOTTERS, 1998) a concorrência para um estado misto bipartido será dada por:

$$C(\rho) = \max\{0, (\lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4)\}, \quad (1.55)$$

onde os λ_i são os autovalores, dispostos em ordem decrescente, da matriz hermitiana $R = \sqrt{\sqrt{\rho} \tilde{\rho} \sqrt{\rho}}$. Há uma alternativa mais simples

para encontrar os $\{\lambda_i\}$, que é a partir da raiz quadrada dos autovalores, todos reais, da matriz não hermitiana $\rho\tilde{\rho}$, e $\tilde{\rho}$ é dado pela seguinte expressão:

$$\tilde{\rho} = (\hat{\sigma}^y \otimes \hat{\sigma}^y) \rho^* (\hat{\sigma}^y \otimes \hat{\sigma}^y), \quad (1.56)$$

ρ^* é o complexo conjugado de ρ e $\hat{\sigma}^y$ é a matriz de *Pauli*. Vamos encontrar a matriz $\tilde{\rho}$. Primeiramente, o produto tensorial entre as matrizes de *Pauli* resultará em:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}^y \otimes \hat{\sigma}^y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sigma_{11}^y \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} & \sigma_{12}^y \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_{21}^y \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} & \sigma_{22}^y \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Tomando o complexo conjugado de ρ , $\tilde{\rho}$ poderá ser obtido a partir do produto das matrizes:

$$\tilde{\rho} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & d & 0 \\ 0 & c & e & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

Por fim, o Produto das matrizes ρ e $\tilde{\rho}$ resulta em:

$$\rho\tilde{\rho} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k_1 & k_2 & 0 \\ 0 & k_3 & k_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.57)$$

em que $k_1 = 2|w_i|^2|w_j|^2$, $k_2 = 2|w_i|^2w_iw_j^*$ e $k_3 = 2|w_j|^2w_jw_i^*$ e os autovalores de 1.57 são $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 0$ e $\alpha_4 = 4|w_i|^2|w_j|^2$. Desta forma poderemos encontrar uma expressão para a concorrência, utilizando a equação (1.55) e os autovalores da equação (1.57), então encontraremos:

$$C(\rho_{ij}) = 2|w_i||w_j|. \quad (1.58)$$

Esta medida, assim como a fidelidade, é muito importante, pois relaciona o grau do emaranhamento com a qualidade da transferência de estados quânticos. C é um valor real que pertence ao intervalo $[0, 1]$. Em uma rede que apresenta um uma transferência de estados quânticos, entre 2 bits quânticos, a e b , o valor da concorrência $C(\rho_{ab}) = 1$ indica a ocorrência de uma transferência de estados quânticos perfeita pois o emaranhamento entre as partículas a e b é máximo. Em contrapartida, $C(\rho_{ab}) = 0$ não apresenta transferência de estados quânticos, uma vez que as partículas estão não emaranhadas.

CAPÍTULO 2

RESULTADOS

2.1 DESORDEM CORRELACIONADA

Iniciamos o estudo da transferência de estados quânticos (QST) a partir da criação do potencial desordenado. Trata-se de uma série de N números que apresenta aleatoriedade e também certo grau de correlações dentro desta aleatoriedade. Cada elemento desta série é gerado pela seguinte expressão:

$$y_i = \sum_{j=1}^N \frac{z_j}{(1 + |i - j|/A)^2}, \quad (2.1)$$

em que z_j é um número aleatório uniformemente distribuído tal que $z_j \in [-1, 1]$ e A é um parâmetro ajustável, que chamaremos de comprimento de correlação. Com $\{y_i\}$ podemos construir uma outra série de números $\{\varepsilon_i\}$, que será nossa representação para o potencial aleatório de uma rede unidimensional. ε_i é gerado pela seguinte expressão:

$$\varepsilon_i = \frac{y_i - \langle y_i \rangle}{\sqrt{\langle y_i^2 \rangle - \langle y_i \rangle^2}}, \quad (2.2)$$

onde a notação:

$$\langle x_i \rangle = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k x_i, \quad (2.3)$$

representa a média aritmética de um dado $\{x_i\} = \{x_1, x_2, \dots, x_k\}$. A construção do potencial aleatório a partir da equação (2.2) garante que o potencial terá média nula, $\langle \varepsilon_i \rangle = 0$ e desvio padrão igual a 1. Desta maneira, o sistema físico estudado a partir deste potencial, poderá ser construído sem que as propriedades estatísticas do sistema dependam do tamanho N da rede.

Podemos agora compreender de que maneira um dado ε_k de $\{\varepsilon_i\}$, influencia os seus vizinhos. Para isto vamos utilizar a função de autocorrelação:

$$C(r) = \langle \varepsilon_i \varepsilon_{i+r} \rangle - \langle \varepsilon_i \rangle \langle \varepsilon_{i+r} \rangle, \quad (2.4)$$

em que $\langle \varepsilon_i \varepsilon_{i+r} \rangle = \left[\frac{1}{N-r} \right] \cdot \sum_{i=1}^{N-r} \varepsilon_i \varepsilon_{i+r}$ e $\langle \varepsilon_i \rangle = \langle \varepsilon_{i+r} \rangle$. Vamos analisar a autocorrelação do potencial aleatório variando o comprimento de correlação A . Além disso, iremos analisar o comportamento da energia potencial em função dos sítios da rede, também levando em conta vários valores do comprimento de correlação.

Observamos, na figura 2.1b, que quando o comprimento de correlação tem valor $A = 25$, $C(r)$ tende a zero para distâncias r pequenas; este resultado indica que a série para $A = 25$ tem correlações pequenas. Por outro lado, para $A > 25$ observamos que a função de correlação tem comportamento não nulo para distâncias bem maiores do que no caso de $A = 25$. Ou seja, em linhas gerais,

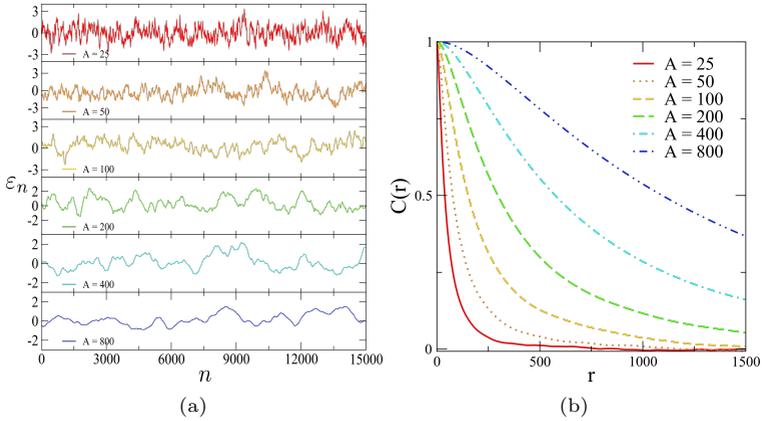


Figura 2.1 – Em 2.1a é apresentada a energia típica de cada sítio, gerada pela equação (2.2), para $N = 60\,000$ e seu comportamento para o aumento progressivo do comprimento de correlação A . Em 2.1b é mostrado o gráfico da autocorrelação em função da distância onde cada curva é calculada para um dado A .

Fonte: O Autor (2021)

estes resultados indicam que a medida que o valor de A diminui, a série desordenada tem correlações internas mais fracas. Por outro lado, a medida que A cresce, a distribuição de desordem apresenta comprimento de correlação maior. A figura 2.1a mostra como a distribuição de energia é abrupta em relação a um dado sítio n e seus vizinhos, no entanto o aumento progressivo de A aumenta a força de correlação de $C(r)$ e a distribuição de energia se torna gradualmente mais tênue $\{\varepsilon_i\}$, deste modo, o valor que a energia potencial de um dado sítio k se torna cada vez menor em relação aos seus vizinhos, $|\varepsilon_k - \varepsilon_{k\pm 1}| = |\epsilon|$, com o aumento do comprimento de correlação. Este resultado é importante pois mostra que o parâmetro de correlação A está intimamente ligado com o grau(comprimento) de correlação da série dos potenciais $\{\varepsilon_i\}$.

Uma outra análise foi feita com respeito ao potencial e sua relação com o crescimento do comprimento de correlação. Investigamos como o desvio padrão local médio, $\bar{\sigma}$, é influenciado pelo aumento gradativo de A . O cálculo de $\bar{\sigma}$ foi realizado considerando um Potencial com $N = 100$ sítios, em seguida foi calculado o desvio

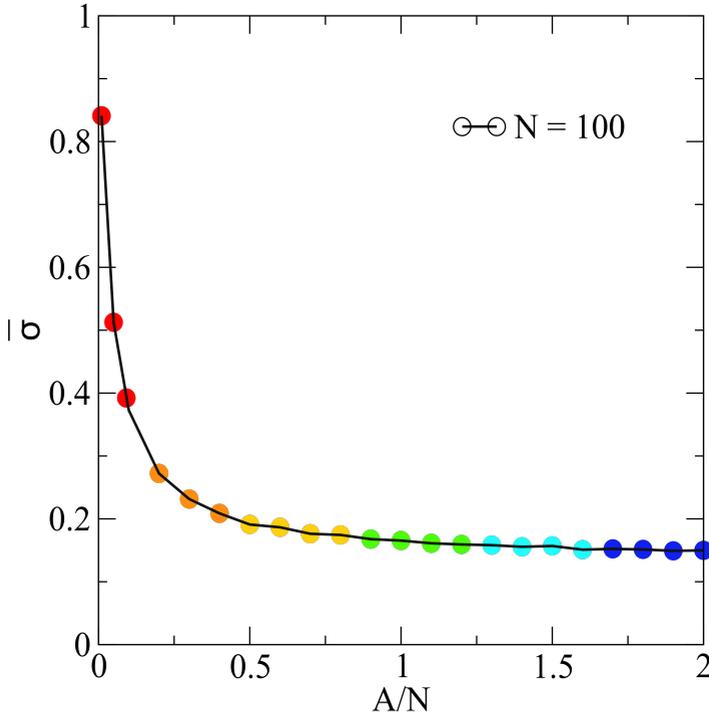


Figura 2.2 – Desvio Padrão local médio do potencial com desordem correlacionada em função de A/N

Fonte: O Autor (2021)

padrão local, σ_L , em um intervalo de tamanho $I_0 = 10$, a quantidade de desvios locais é dada pela quantidade de intervalos I_0 que cabem na sequência ε_i de tamanho N e o desvio padrão local médio é dado então por:

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \sigma_{Li}, \quad m = \frac{N}{I_0}. \quad (2.5)$$

Como se pode observar na figura 2.2 o desvio padrão se torna constante a medida que A/N cresce, esse resultado corrobora com os resultados obtidos na figura 2.1a e trás um forte indício de

que a sequência $\{\varepsilon_i\}$, para valores crescentes do comprimento de correlação, e para uma cadeia curta, não apresenta flutuações na média dos desvios locais.

Em resumo, A função de autocorrelação apresenta um comprimento característico de correlação, o que indica que se trata de uma função de correlação de curto alcance, atuando em 2 regimes: Quando o comprimento de correlação é pequeno, $C(r)$ apresenta fracas correlações, em contrapartida, quando A é grande, $C(r)$ apresenta fortes correlações.

2.2 PROPRIEDADES DO CANAL DE ÁTOMOS

Vamos considerar inicialmente um canal de átomos distribuídos unidimensionalmente como mostra a figura 2.3, em que T representa a energia de *hopping* entre os sítios. Vamos considerar ainda que cada átomo contém um potencial de ionização aleatório, de maneira que o potencial do i -ésimo sítio da cadeia obedecerá a expressão da equação 2.2.

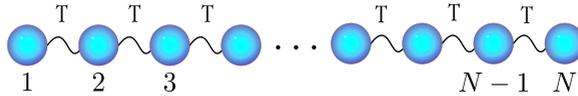


Figura 2.3 – Canal unidimensional com N átomos, com potencial de ionização aleatório ε_i e força de acoplamento T

Fonte: O Autor (2021)

Considerando que cada átomo interage apenas com seus primeiros vizinhos, vamos utilizar a representação de *tight binding* para descrever o hamiltoniano \mathcal{H}_c deste canal de átomos com potencial aleatório. Ele será dado por:

$$\mathcal{H}_c = \sum_{n=1}^N \varepsilon_n |n\rangle \langle n| + T \sum_{n=1}^N (|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|), \quad (2.6)$$

Queremos entender as propriedades deste canal. Estamos interessados em investigar a natureza dos estados deste sistema e

descobrir se ele pode ser usado na transferência de estados quânticos. Uma maneira de entender essas propriedades é por meio da dinâmica do sistema. Iremos executar a diagonalização direta do hamiltoniano para que possamos estudar os fenômenos de localização do nosso modelo, através dos autovalores e autovetores de \mathcal{H}_c . Utilizando a base dos orbitais $\{|n\rangle\}$ poderemos escrever o hamiltoniano na representação matricial da seguinte forma:

$$\mathcal{H}_c = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & T & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ T & \varepsilon_2 & T & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & T & \varepsilon_3 & T & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & T & \varepsilon_4 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & T & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & T & \varepsilon_{N-1} & T \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & T & \varepsilon_N \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Trata-se de uma matriz tri-diagonal, em que a diagonal principal representa o potencial aleatório, e as sub-diagonais representam o termo de *hopping* do elétron, os outros elementos da matriz são nulos já que não há interações entre vizinhos distantes. Em nossos cálculos consideraremos $T = 1$. Utilizamos a rotina computacional LAPACK¹, implementado códigos em python para diagonalizar o hamiltoniano e gerar os dados necessários para as análises.

2.2.1 Fenômenos de Localização

Os fenômenos de localização nos ajudam a compreender a natureza dos estados do sistema. Estes estados podem ser localizados, dando ao sistema um caráter isolante, ou estendidos, indicando que o sistema é metálico. Grandezas físicas, como a razão de participação, por exemplo, que nos mostra a quantidade de sítios que efetivamente participam da função de onda não nula, caracteriza a natureza do sistema. Estes resultados são importantes pois nos a-

¹LAPACK é um pacote computacional de álgebra linear, escrito em Fortran 90, possuindo várias rotinas, uma delas resolve problemas de autovalor, (LAPACK..., 2021).

judarão a descobrir se alguns sistemas estão suscetíveis ou não a serem bons candidatos para realização de transferência de estados quânticos. Nesta seção discutiremos alguns sistemas físicos do ponto de vista de alguns fenômenos de localização.

A figura 2.4 pode nos trazer um panorama acerca da natureza dos estados do Sistema. Nela são apresentados alguns gráficos onde o eixo E representa a energia e o eixo P a razão de participação, e cada quadro da figura representa um panorama para cada N com um certo valor do comprimento de correlação previamente fixado.

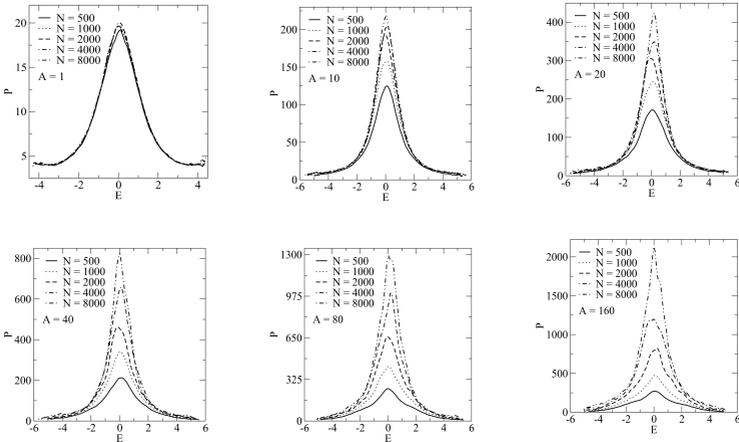


Figura 2.4 – A figura é constituída de 6 gráficos que exibem o comportamento da razão de participação em função da energia. Cada quadro apresenta um panorama hipotético para 5 sistemas com tamanhos N distintos, onde é considerado um valor fixado para o comprimento de correlação A .

Fonte: O Autor (2021)

Notamos que, para $A = 1$, a participação é, em termos numéricos, uma fração muito pequena do tamanho do sistema. Observamos que o valor da participação permaneceu praticamente inalterado. Se considerarmos o centro da banda $E = 0$ vamos perceber que o valor da participação é praticamente constante $P_0 \approx 20$. Este

resultado mostra que o sistema, para o comprimento de correlação $A = 1$, é localizado e altamente isolante já que a função de onda fica localizada em uma parcela muito pequena dos átomos que compõem a cadeia, além disso não aparenta ser um bom candidato para a transferência de estados quânticos porque o comprimento de onda da função de onda localizada é muito pequeno em comparação ao tamanho do sistema. Este resultado se repetiu para os diversos valores de N analisados. consideramos inicialmente, $N = 500$ e então dobramos valor de N obtendo a razão de participação respectiva para cada N até $N = 8000$.

No entanto, para valores crescentes do comprimento de correlação, a participação assume valores de pico significativamente maiores e distintos, como se pode observar nos demais quadros da figura 2.4. Em torno de $E = 0$, observamos que o aumento do comprimento da correlação, por exemplo, para $A = 80$, acarreta em um aumento da razão de participação com o aumento do valor de N , atingindo valores que são da ordem do tamanho do sistema. Este resultado indica que sistemas com comprimento de correlação alto podem se tornar bons candidatos a serem suscetíveis a transferência de estados quânticos, já que a função de onda não nula passa adquirir um comprimento de onda da ordem do tamanho do sistema. É importante investigar o comportamento de $P(N)$ para entender com mais detalhes a relação entre a razão de participação e o tamanho do sistema.

No gráfico da figura 2.5a obtivemos o comportamento de $P(N)$. Calculamos o valor da razão de participação versus N apenas considerando a energia no centro da banda. Consideramos um intervalo de tamanho $\delta E = 0.1$ em torno de $E = 0$ e calculamos o valor médio da participação dentro deste intervalo, utilizando a expressão definida na equação (1.30). Este resultado nos dá um panorama a respeito do comportamento razão de participação. Com ele foi possível encontrar uma expressão analítica, através do uso de um ajuste não linear, que obedece uma lei de potência com uma correção logarítmica:

$$P \propto N^{\gamma_A} \ln N, \quad (2.8)$$

em que γ_A representa a potência para determinado comprimento de correlação A . Note que $\gamma_A < 1$ o que nos dá um forte indício de que o sistema apresenta estados que são sempre localizados.

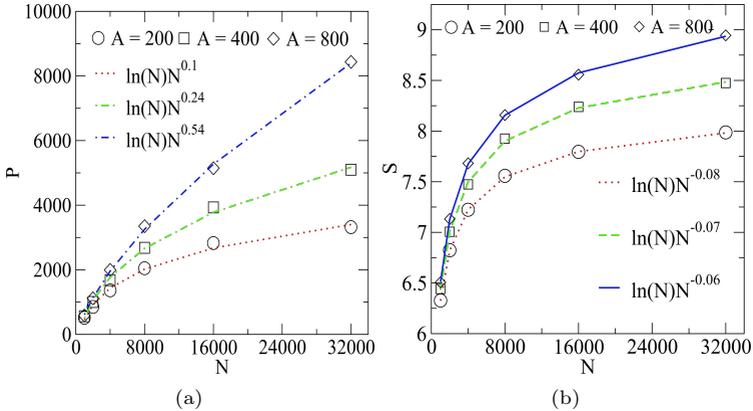


Figura 2.5 – Em 2.5a é apresentado o gráfico da participação em função do tamanho do sistema, para alguns valores do comprimento de correlação. Em 2.5b é mostrado o gráfico da entropia de Shannon em função de N , onde da mesma forma como no caso anterior, são considerados alguns valores para o comprimento de correlação. Em ambos os gráficos há uma expressão do tipo lei de potência com correção logarítmica que pode caracterizar a natureza dos estados do sistema.

Fonte: O Autor (2021)

Na figura 2.5b é apresentado o gráfico da entropia de Shannon em função do tamanho da cadeia. Este resultado é uma outra análise que pode ser feita para verificar a natureza dos estados. Aqui, utilizamos a equação (1.32) e consideramos o mesmo intervalo ϵ no centro da banda. Por fim, obtivemos o valor médio de S dentro deste intervalo. E utilizando um ajuste não linear também foi possível obter uma expressão analítica do tipo lei de potência com correção logarítmica:

$$S \propto N^{\beta_A} \ln N, \quad (2.9)$$

em que β_A representa o expoente de N . Descobrimos que, como β_A é sempre menor que 1, os estados são localizados, reforçando o resultado que obtivemos anteriormente para a razão de participação na equação (2.8). Em resumo, como os estados são localizados, definimos o sistema como isolante. No entanto percebemos que o comprimento de localização desses sistemas é bem grande, para comprimentos de correlação altos. Este resultado sugere que, para sistemas com tamanho N pequenos, esta modelagem pode ser um bom candidato para realizar experimento de transferência de estados quânticos que serão discutidos na seção 2.4. Agora precisaremos investigar o comportamento de P em relação a A , pois como o valor do comprimento de correlação muda o valor da razão de participação, queremos saber quais são os melhores valores de A , para obter os maiores valores de P possíveis.

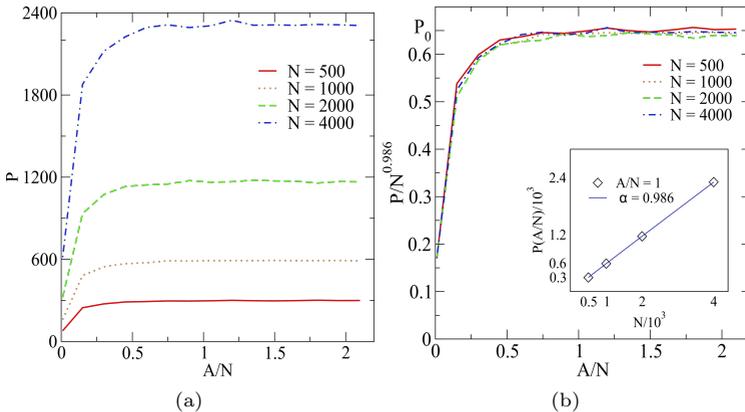


Figura 2.6 – Em 2.6a é mostrado o comportamento de $P(A/N)$ para vários valores de N . P satura quando $A = N$. A figura 2.6b é composta de 2 gráficos, o maior representa o comportamento de P/N^α enquanto que o menor representa o comportamento de $P(N)$ para $A = N$ com o ajuste de regressão do tipo lei de potencia.

Fonte: O Autor (2021)

Mostramos o comportamento de $P(A/N)$ na figura 2.6a onde variamos a participação em termos de $\frac{A}{N}$. Notamos que quando o comprimento de correlação é maior que o tamanho do sistema, a razão de participação assume um regime de saturação do tipo platô,

o que indica que P evolui apenas para valores de $A < N$ e entra em um regime de saturação para $A \geq N$.

Percebemos também que, na figura 2.6a no regime de $A \geq N$, o valor de P aparenta dobrar a medida que o valor de N é dobrado. Por exemplo, para $N = 500$, $P \approx 300$ e para $N = 1000$, $P \approx 600$. Queremos encontrar uma forma de estimar o valor da razão de participação mais precisamente, no regime de saturação, para um certo N , considerando $A = N$. Este resultado é mostrado na figura 2.5b em que as curvas colapsam quando dividimos a participação em cada curva por uma potência do N respectivo a cada curva. Obtemos, na figura 2.5b, um regime de saturação $P_0 \approx 0,65$ que é comum a todas as curvas, com este resultado poderemos construir uma expressão que indique a saturação de P para qualquer N dada por:

$$P_M = P_0 N^\alpha \quad (2.10)$$

A potência que obtivemos foi $\alpha = 0,986$. Para encontrar este resultado, selecionamos os pontos P em torno de $A/N = 1$ na figura 2.6a, em seguida plotamos esses valores em função do seus N respectivos. Uma regressão não linear do tipo lei de potência foi aplicada para encontrarmos o valor de α . Este resultado é mostrado no gráfico menor da figura 2.6b. Como os valores de α obtidos na vizinhança de $A/N = 1$ foram muito parecidos, diferindo apenas na quarta casa decimal, mostramos apenas o valor para $A/N = 1$.

Na figura 2.7 plotamos o comportamento da razão de participação em função da energia, ilustrando o comportamento da participação quando os valores do comprimento de correlação são da ordem do tamanho do sistema. Comparando diretamente com os gráficos obtidos na figura 2.4, observamos que, Quando $A = N$, ou seja, quando estamos no regime de saturação, os valores de P obtidos em 2.7 são sempre maiores que os obtidos em 2.4.

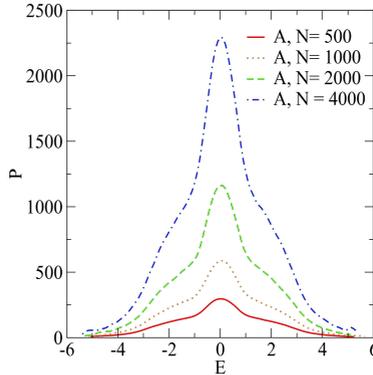


Figura 2.7 – razão da participação P em função de E , considerando $A = N$.

Fonte: O Autor (2021)

2.3 O CANAL COM ACOPLAMENTO

Agora estamos interessados em investigar propriedades transferência de estados quânticos em nosso sistema. Então, para o canal N de átomos que definimos na seção 2.2, iremos acoplar uma fonte com energia ε_s e um receptor com energia ε_r , de maneira que o novo canal passará a conter $N + 2$ átomos, onde o primeiro átomo será o termo de fonte e o último átomo será o termo receptor. Este canal pode ser visto com mais detalhes na figura 2.8. O canal acoplado herda as características no canal sem acoplamento, com energia potencial ε_i e *hopping* T a diferença é que o termo de acoplamento da fonte com o canal e o acoplamento do canal com o receptor será dado por g , que será ajustável.

O hamiltoniano do sistema, na representação *Thigt Binding*, será dado por:

$$\mathcal{H} = |s\rangle \langle s| \varepsilon_s + g(|s\rangle \langle 2| + |N+1\rangle \langle r| + c.c) + |r\rangle \langle r| \varepsilon_r + \mathcal{H}_c, \quad (2.11)$$

em que g é a *amplitude de hopping* entre os sítios $|s\rangle$ e $|2\rangle$ e entre $|N+1\rangle$ e $|r\rangle$ e \mathcal{H}_c é o Hamiltoniano do canal sem acoplamento que

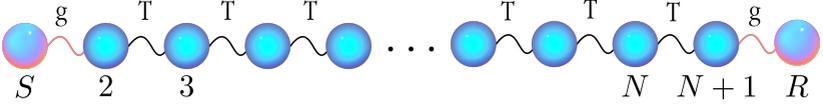


Figura 2.8 – Canal unidimensional com N átomos acoplado a uma fonte S e um receptor R

Fonte: O Autor (2021)

definimos na equação (2.6), porém reescrito da seguinte forma:

$$\mathcal{H}_c = \sum_{n=2}^{N+1} \varepsilon_n |n\rangle \langle n| + T \sum_{n=2}^{N+1} (|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|), \quad (2.12)$$

já que o canal de átomos começa a partir do segundo átomo e termina no penúltimo átomo da cadeia com acoplamento. Uma forma de estudar os fenômenos de transporte do nosso sistema é por meio do operador de evolução temporal, através da diagonalização direta de \mathcal{H} . Deste modo, estaremos resolvendo a equação de *Schrödinger* formalmente, obtendo sua solução exata. A representação matricial do Hamiltoniano, na base dos orbitais, será dada por:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_s & g & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ g & \varepsilon_2 & T & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & T & \varepsilon_3 & T & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & T & \varepsilon_4 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & T & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & T & \varepsilon_{N+1} & g \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g & \varepsilon_r \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

Trata-se de uma matriz tri-diagonal, em que o termo de *hopping* g é ajustável, além disso, em nossos cálculos consideramos $T = 1$. Assim como na seção 2.6, utilizamos a rotina LAPACK para diagonalizar o hamiltoniano e com o auxílio da linguagem python, implementamos os códigos para realizar a diagonalização e para estudar os fenômenos de transporte.

2.4 TRANSFERÊNCIA DE ESTADOS QUÂNTICOS

No gráfico da Figura 2.9 mostramos os valores da Fidelidade máxima em função das autoenergias do hamiltoniano do sistema para uma cadeia de tamanho $N = 60$ e *hopping* de acoplamento $g = 0.01$. Notamos que, quando o comprimento de correlação é $A = 1$ a curva da Fidelidade atinge um valor de pico $F \approx 0,56$. Se atentarmos para a equação (1.47), perceberemos que, como dissemos, quando não ocorre transferência de estados quânticos o valor da fidelidade máxima é de 0,5. Logo, para $A = 1$, o nosso modelo apresenta uma fidelidade extremamente fraca, se aproximando do caso em que não ocorre transferência de estados quânticos. Este resultado já era esperado, pois ao analisar o primeiro quadro da figura 2.4 notamos que o comprimento da função de onda localizada, para este mesmo comprimento de correlação, é muito pequeno em comparação com o tamanho do sistema.

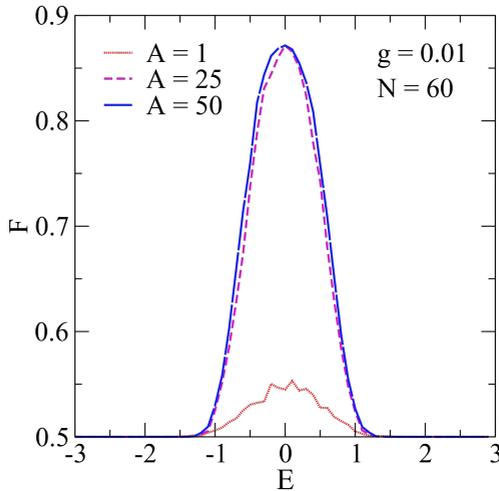


Figura 2.9 – Gráfico que representa o comportamento da Fidelidade máxima F em função da energia E .

Fonte: O Autor (2021)

No entanto percebemos que o aumento do valor do comprimento de correlação acarreta em um aumento da fidelidade do

sistema. os maiores valores de pico obtidos, na figura 1.47 são de $F \approx 0,875$, indicando que F satura próximo deste valor. Este é um bom resultado para a transferência de estados quânticos, mas não é considerada uma excelente transferência. Também é importante observar que para $A = 100$ e $A = 200$ houve uma diminuição do valor máximo da fidelidade em comparação com valores menores do comprimento de correlação. Isso indica que parece haver um ponto de saturação da fidelidade em relação ao crescimento de A .

Outra análise foi feita para a transferência de estados quânticos através da concorrência, que mede o grau de emaranhamento do sistema. Tal resultado pode ser observado na figura 2.10 em que o eixo vertical do gráfico representa a medida da concorrência e o eixo horizontal representam as auto autoenergias obtidas na diagonalização do hamiltoniano \mathcal{H} . A concorrência varia entre 0 e 1. $C = 0$ indica que o sistema não apresenta emaranhamento, não há transferência de estados quânticos, em outras palavras. Enquanto que $C = 1$ representa o emaranhamento máximo, indicando uma transferência de estados quânticos perfeita. Notamos que Para o comprimento de correlação $A = 1$ o valor de pico da concorrência fica em torno de 20% do emaranhamento máximo. Este resultado corrobora com o que obtemos na fidelidade para o mesmo comprimento de correlação, indicando que não há transferência de estados quânticos. Quando Aumentamos o valor de A as curvas parecem colapsar em um mesmo conjunto de valores, apresentando um valor de pico de aproximadamente 93% do emaranhamento máximo, indicando que há transferência de estados quânticos. Assim como o resultado obtido no gráfico da fidelidade, esta transferência de estados quânticos não é excelente, mas é um bom valor para QST.

Queremos investigar de que maneira uma mudança no valor do termo de acoplamento da fonte e do receptor com o canal afeta a transferência de estados quânticos.

Na figura 2.13, plotamos o valor da fidelidade em função da energia para diversos valores do comprimento de correlação. Selecionamos os valores de A sempre menores ou iguais a N , visto que a participação satura quanto o comprimento de correlação é maior que

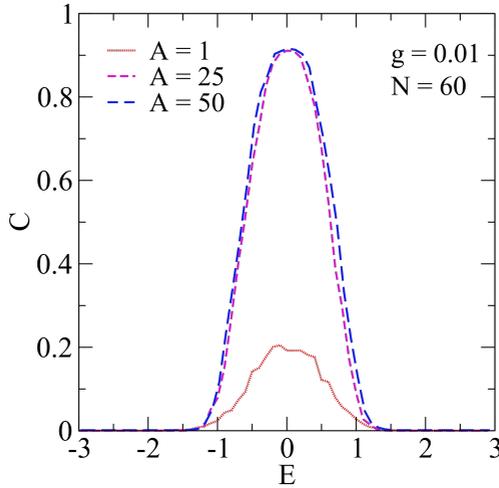


Figura 2.10 – Gráfico que representa o comportamento da concorrência C em função das autoenergias de \mathcal{H} .

Fonte: O Autor (2021)

o tamanho do sistema. As figuras também apresentam um certo valor de acoplamento g das bordas com o canal. Podemos observar que, na figura 2.11a, onde o acoplamento das bordas com o canal é mais fraco, os valores para fidelidade atingidos foram mais altos que os da figura 2.11b, que apresenta um acoplamento do canal com as bordas mais forte. Este resultado dá um indício de que o enfraquecimento do acoplamento das boras com o canal melhora a transferência de estados quânticos. Para entender melhor como se dá a transferência de estados quânticos em relação ao *hopping* de acoplamento g , vamos plotar a fidelidade e a concorrência, em função da energia, para o mesmo sistema, isto é, para um único valor de A e N , variando apenas a intensidade do acoplamento das bordas com o canal, este resultado é mostrado na figura 2.12.

Notamos que, no primeiro quadro da figura, onde tomamos $A = 5$, obtemos valores de fidelidade que não ultrapassaram 75% do valor máximo possível para a fidelidade. No quadro abaixo, ainda para $A = 5$, encontramos um valor de concorrência de aproxima-

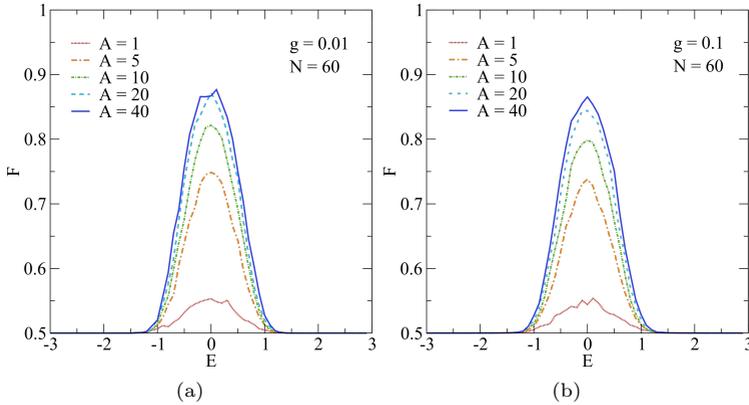


Figura 2.11 – Em 2.11a plotamos o gráfico da fidelidade em relação a energia considerando $g = 0,01$ e em 2.11b foi realizado a mesma plotagem porém considerando a intensidade do acoplamento das bordas com o canal 10 vezes maior. Em ambos os gráficos foram considerados valores do comprimento de correlação $A \leq N$.

Fonte: O Autor (2021)

damente 0,73. Esses valores foram os maiores possíveis para este comprimento de correlação, considerando o acoplamento das bordas com o canal $g = 0,001$. Quando aumentamos a intensidade do acoplamento g , para um valor 10 vezes maior, isto é, $g = 0,1$, a fidelidade e a concorrência diminuíram. O mesmo fenômeno ocorreu quando aumentamos mais ainda a intensidade do acoplamento, passando a considerar $g = 0,2$. Observamos os quadros à direita, ainda na figura 2.12, notamos que o aumento do comprimento de correlação para $A = 30$ aumentou os valores da fidelidade e da concorrência em comparação com os gráficos para $A = 5$. Este resultado mostra que o aumento do comprimento de correlação A e o enfraquecimento da intensidade do acoplamento das bordas com o canal melhoram a transferência de estados quânticos.

Podemos ainda observar a Transferência de estados quânticos, fazendo uma breve comparação com um potencial desordenado que não apresenta correlações Intrínsecas entre seus vizinhos e o potencial dotado de correlações. Este caso é mostrado nas figuras 2.13a e 2.13b, onde a curva com o pico mais baixo, em ambas as imagens,

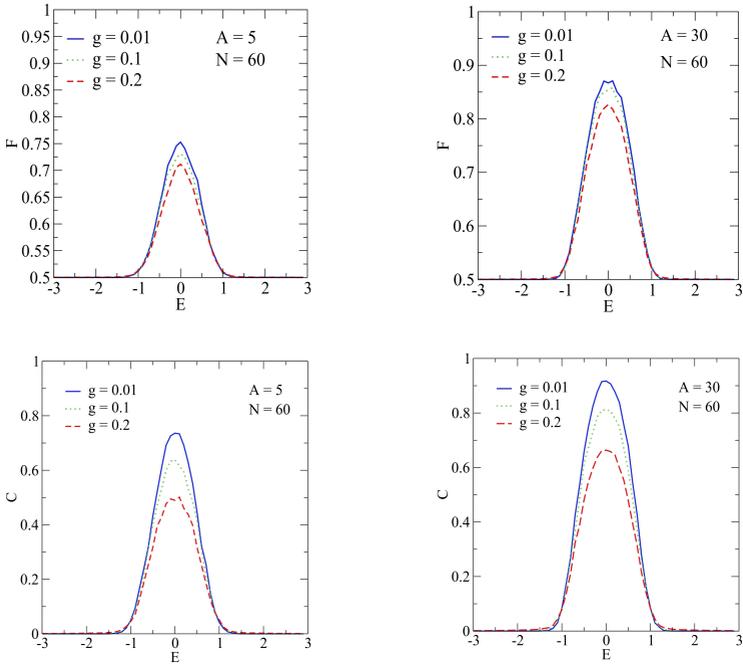


Figura 2.12 – Gráfico que representa o comportamento da Fidelidade e concorrência C em função das autoenergias de \mathcal{H} . São apresentados $F(E)$ e $C(E)$ para os valores do comprimento de correlação $A = 5$ e $A = 30$ para um canal acoplado de tamanho $N = 60$.

Fonte: O Autor (2021)

representa a fidelidade e a concorrência respectiva para o potencial descorrelacionado. Este potencial é tal que cada sítio do canal possui um potencial, normalizado, que foi gerado a partir de um número aleatório dentro do intervalo $[-1, 1]$. Percebemos que para o potencial descorrelacionado tanto a fidelidade quanto a concorrência assumem valores muito baixos, mais ainda que o valor para o comprimento de correlação mais baixo que estudamos. este é um resultado que inviabiliza a transferência de estados quânticos e mostra resultados significativamente mais expressivos quando tomamos um potencial correlacionado.

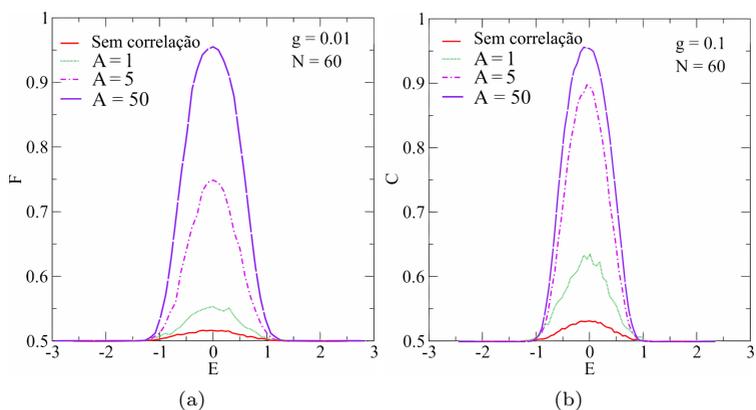


Figura 2.13 – Em 2.13a plotamos o gráfico da fidelidade em relação a energia considerando $g = 0,01$ e $N = 60$. apresentando, na curva mais baixa, o valor máximo da fidelidade para uma QST em um potencial desordenado descorrelacionado. Em 2.13b Realizamos o mesmo experimento, porém avaliando o grau de emaranhamento entre as o emissor e o receptor.

Fonte: O Autor (2021)

CONSIDERAÇÕES E PERSPECTIVAS

Investigamos a dinâmica de um elétron para uma cadeia unidimensional de átomos em que, por hipótese, cada átomo apresenta um potencial aleatório pertencente a um intervalo de largura W que pode ser percebido através do gráfico da figura 2.1a, e é gerado pela equação (2.4). Este potencial é uma consequência dos muitos defeitos que um sólido real apresenta, como a falta da invariância translacional. Calculamos o hamiltoniano do sistema na representação *tight binding*, supondo que a interação de um dado átomo ocorre apenas entre os seus primeiros vizinhos. Estes resultados possibilitaram o estudo das propriedades de localização da rede em questão. Descobrimos que um comprimento de correlação muito fraco, gera um potencial altamente desordenado. este potencial localiza a função de onda da rede em uma fração muito pequena do seu tamanho total. O sistema é altamente isolante. No antando, o aumento sucessivo do comprimento de correlação aumenta significativamente as amplitudes não nulas da função de onda, que efetivamente participam do canal. E apesar do sistema considerado ainda ser localizado, esta localização abrange uma quantidade relevante de sítios da rede, sendo da ordem do tamanho do sistema. O status de sistema localizado, foi dado graças as equações (2.8) e (2.9) encontradas a partir dos gráficos envolvendo a participação e a entropia da *Shannon* em função do tamanho N do sistema, respectivamente. Encontramos ainda um resultado bastante interessante. A razão da participação $P(N)$ satura para um dado valor do comprimento de correlação. En-

contramos uma equação que nos mostra que, para um sistema de tamanho N , podemos estimar o ponto de saturação da razão de participação. Isso nos possibilita obter melhores resultados, quando ao aumento do comprimento da função de onda do elétron. Este resultado é relevante no estudo da transferência de estados quânticos, como concluiremos mais adiante.

Uma vez estudado as propriedades de localização para o canal de átomos, acrescentamos bordas ao canal, um termo de fonte e um termo receptor com energias potenciais iguais e energias de acoplamento g ajustáveis. Mais uma vez, diagonalizamos o hamiltoniano. Dessa vez considerando o novo canal, acrescido das bordas. Esta modificação nos permitiu estudar algumas propriedades de transporte. nossos esforços foram concentrados no cálculo da máxima fidelidade em uma transferência de estados quânticos e do grau de emaranhamento. Este último através da concorrência. Encontramos que, para comprimentos de correlação fraco tanto a fidelidade quanto a concorrência foram muito baixas, mostrando um resultado que inviabiliza a comunicação quântica. Entretanto o aumento do comprimento de correlação, aumentou significativamente os valores de fidelidade e concorrência. Para alguns valores do comprimento de correlação, a concorrência ficou muito próxima do emaranhamento máximo. Notamos ainda que o enfraquecimento das bordas com o canal, isto é, a diminuição do valor da energia g de acoplamento, melhorou a comunicação quântica, indicando que o sistema é sensível a energias mais altas. Isso nos dá um panorama acerca do regime de saturação que a fidelidade pode sofrer com o aumento expressivo de g . Com isto, conseguimos detectar alguns regimes em que podemos encontrar valores mais otimizados para uma transferência de estados quânticos, seja aumentando o valor do comprimento de correlação ou ajustando o *hopping* das bordas com o canal.

Uma perspectiva futura é dar continuidade ao estudo da transferência de estados quânticos com correlações na desordem, aumentando a dimensão do sistema. Por exemplo, tratando de um sistema bidimensional. Passaríamos a considerar o canal em um regime planar, como uma fita. Esta é uma maneira de aproximar o modelo estudado cada vez mais da realidade, e compreender de maneira

mais geral como o corre a transferência de estados quânticos.

REFERÊNCIAS

- ABRAHAMAS, Elihu et al. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. **Physical Review Letters**, APS, v. 42, n. 10, p. 673, 1979. Citado 3 vezes nas páginas 24, 26.
- ALMEIDA, Guilherme MA et al. Disorder-assisted distribution of entanglement in X Y spin chains. **Physical Review A**, APS, v. 96, n. 3, p. 032315, 2017. Citado 1 vez na página 43.
- ANDERSON, Philip W. Absence of diffusion in certain random lattices. **Physical review**, APS, v. 109, n. 5, p. 1492, 1958. Citado 1 vez na página 24.
- ARUTE, Frank et al. Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 574, n. 7779, p. 505–510, 2019. Citado 1 vez na página 12.
- ASHCROFT, Neil W; MERMIN, N David et al. **Solid state physics**. [S.l.]: holt, rinehart e winston, new york London, 1976. Citado 2 vezes nas páginas 16, 17.
- BOSE, Sougato. Quantum communication through an unmodulated spin chain. **Physical review letters**, APS, v. 91, n. 20, p. 207901, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 35, 41, 42.
- _____. Quantum communication through spin chain dynamics: an introductory overview. **Contemporary Physics**, Taylor & Francis, v. 48, n. 1, p. 13–30, 2007. Citado 1 vez na página 35.
- DE WOLF, Ronald. The potential impact of quantum computers on society. **Ethics and Information Technology**, Springer, v. 19, n. 4, p. 271–276, 2017. Citado 1 vez na página 12.
- DOS SANTOS, IF et al. Critical behavior of the two-dimensional Anderson model with long-range correlated disorder. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 19, n. 47, p. 476213, 2007. Citado 1 vez na página 34.

DRUDE, Paul. Zur elektronentheorie der metalle. **Annalen der physik**, Wiley Online Library, v. 306, n. 3, p. 566–613, 1900.

Citado 1 vez na página 15.

KRAMER, Bernhard; MACKINNON, Angus. Localization: theory and experiment. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, v. 56, n. 12, p. 1469, 1993. Citado 2 vezes nas páginas 24, 33.

LAPACK. [S.l.: s.n.], 2021. Disponível em:

<http://www.netlib.org/lapack/>. Acesso em: 13 dezembro 2021. Citado 1 vez na página 52.

MOTT, Nevill F. Metal-insulator transition. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 40, n. 4, p. 677, 1968. Citado 1 vez na página 22.

WAHAB, Mohammad Abdul. **Solid state physics: structure and properties of materials**. [S.l.]: Alpha Science Int'l Ltd., 2005.

Citado 2 vezes nas páginas 17, 21.

WOOTTERS, William K. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. **Physical Review Letters**, APS, v. 80, n. 10, p. 2245, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 43, 44.

ZALLEN, Richard. **The physics of amorphous solids**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2008. Citado 3 vezes nas páginas 21, 22, 24.

ZWICK, Analia E. **Quantum State Transfer in Spin Chains**. 2012. Tese (Doutorado) – Universidad Nacional de Córdoba. Citado 1 vez na página 42.