

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS  
INSTITUTO DE FÍSICA  
PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA

FRANCISCO JOSÉ DE ARAÚJO FILHO

TRANSFERÊNCIA DE ESTADOS QUÂNTICOS EM  
SISTEMAS COM *HOPPING* DECAINDO  
EXPONENCIALMENTE

Maceió

2021

FRANCISCO JOSÉ DE ARAÚJO FILHO

TRANSFERÊNCIA DE ESTADOS QUÂNTICOS EM  
SISTEMAS COM *HOPPING* DECAINDO  
EXPONENCIALMENTE

Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas como parte dos créditos para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

Maceió

2021

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

Bibliotecário: Marcelino de Carvalho Freitas Neto – CRB-4 – 1767

- A663t Araújo Filho, Francisco José de.  
Transferência de estados quânticos em sistemas como *hopping* decaindo exponencialmente / Francisco José de Araújo Filho. – 2021.  
39 f. : il. color.
- Orientador: Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura.  
Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2021.
- Bibliografia: f. 36-39.
1. Transferência de estados quânticos. 2. Sólidos quânticos. 3. Participação. 4. Fidelidade. I. Título.

CDU: 538.94

**PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE  
DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

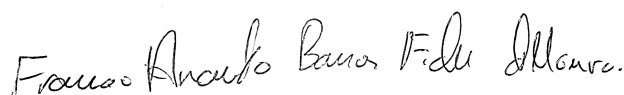
**“Transferência de estados quânticos em sistemas com *hopping*  
decaindo exponencialmente”**

**por**

**Francisco José de Araújo Filho**

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 Samuel Silva de Albuquerque, da Universidade Federal de Alagoas, Campus Arapiraca, consideram o candidato aprovado com grau “B”.

Maceió, 02 de agosto de 2021.



Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura



Prof. Dr. Guilherme Martins Alves de Almeida



Documento assinado digitalmente

Samuel Silva de Albuquerque

Data: 03/08/2021 07:58:12-0300

Verifique em <https://verificador.itl.br>

Prof. Dr. Samuel Silva de Albuquerque

“O sucesso nasce do querer, da determinação e persistência em se chegar a um objetivo. Mesmo não atingindo o alvo, quem busca e vence obstáculos, no mínimo fará coisas admiráveis.”

José de Alencar

# AGRADECIMENTOS

- Neste espaço, irei citar o nome de algumas pessoas que contribuíram, de forma especial, para a obtenção deste título (mestre em Física).
- Agradeço primeiramente a Deus, pela vida e saúde, por dar-me forças e sabedoria para encarar as adversidades e vencê-las.
- Agradeço à minha família, em especial, aos meus pais Francisco José de Araújo e Maria Izileuda Leal de Araújo, por nunca terem medido esforços para verem a minha felicidade e realizações pessoais. À minha irmã Antônia Maria Leal Araújo, pelo incentivo e apoio na vida acadêmica e aos meus irmãos José e Simplício.
- Agradeço a uma pessoa muito especial em minha vida: minha esposa, M. Genaiana pela compreensão, confiança e dedicação em todos os momentos que se fizeram necessário.
- Agradeço ao meu orientador/colaborador e amigo Francisco Fidelis, por ser uma pessoa admirável, pelos ensinamentos, atenção, paciência, dedicação e por sempre deixar claro que a vida não é constituída apenas de coisas boas e momentos bons. Agradeço, também, por sempre ter mostrado as ferramentas necessárias para vencer os obstáculos que eventualmente surgiram e surgem.
- Agradeço aos meus companheiros de estudo da sala 4, Rubbens, Carlos, Jonathan, Daniel, Douglas (*in memoriam*) e Ricardo por sempre compartilharem aprendizados, por serem pessoas alegres e boas. E por terem proporcionado momentos de muito aprendizado, distração e alegria.
- Agradeço a Rubbens Anttonio (meu irmão de coração) e ao Renato Dutra, por sempre terem se disponibilizado a ajudar-me nas mais diversas situações.
- Agradeço aos meus amigos Givanildo e Jamerson, pela forte amizade e companheirismo, pelos momentos de distrações e conversas paralelas. E a todos os meus amigos(as) do IF-UFAL.
- Agradeço também, de forma especial, à Maria do Socorro Cezar Coelho, por quem tenho profundo respeito e admiração. Por sempre ter estado disposta a ajudar-

me nos mais diversos momentos que precisei. Esta conquista, tem uma parcela de contribuição da mesma, disto não tenho dúvidas.

- Agradeço à minha prima Josilany, por sempre ter encorajado-me a seguir fazendo o que gosto, por sempre dar conselhos positivos que foram e são de grande valia, tanto na minha trajetória acadêmica, como fora dela.
- Agradeço à CAPES pelo incentivo e apoio financeiro durante quase todo o período do mestrado.
- Por fim, agradeço a todos que de forma indireta contribuíram para a obtenção deste título.

# RESUMO

Existem, na literatura, vários experimentos computacionais de Transferência de Estados Quânticos (*TEQ*). Estes experimentos funcionam como um espécie de laboratório que permite fazer um estudo mais detalhado acerca da *TEQ* bem como incluir diversas propriedades físicas presentes em sistemas sólidos. Algumas fenomenologias importantes dentro do contexto de sistemas sólidos são os efeitos de desordem bem como os termos de interações de longo alcance. Nesta dissertação, fizemos uma análise da *TEQ* em um sistema unidimensional, constituído por um total de  $N + 2$  átomos. O sistema, em estudo, possui um canal com  $N$  átomos, o qual está conectado a uma fonte  $S$  e um receptor  $R$ . A fonte ( $S$ ) e o receptor ( $R$ ) estão ligados ao canal por meio da energia de *hopping*  $g$ . Em nosso modelo, o canal tem uma distribuição de desordem não correlacionada nos termos diagonais e um decaimento exponencial nos termos de energia de *hopping*  $T$  (dentro do canal) da forma  $T_{n,m} = \exp[-\nu|1 - d_{n,m}|]$ . Onde  $d_{n,m} = |n - m|$ , com  $n \neq m$ . Os termos da diagonal (dentro do canal) possuem desordem não correlacionada, distribuída uniformemente no intervalo  $[-W/2, W/2]$ , onde  $W$  é a largura de desordem. Em posse deste sistema, utilizamos o método de diagonalização exata do Hamiltoniano de Anderson, para obter os autovalores e os autovetores, e calcular numericamente algumas medidas pertinentes para a análise da *TEQ* que foram: Densidade de Estados (*DOS*), Número Médio de Participação ( $P(E)$ ), Participação Média Máxima ( $P_{max}$ ), Fidelidade Máxima ( $F_{max}$ ) e Máximo Valor de Fidelidade ( $\langle F \rangle_{max}$ ). Com base nos resultados destas medidas, concluímos que, para valores em que  $\nu$  é pequeno, a (*TEQ*) ocorreu com boa fidelidade.

**Palavras-chave:** Transferência de Estados Quânticos. Participação. Fidelidade



# ABSTRACT

There are in the literature several quantum state transfer experiments (*QST*) done through computational simulations. Experiments like these work as a kind of laboratory, and it is through them, we can do the study (more detailed) of the effects of some interesting phenomenologies that exists in solid systems. Some relevants effects are the presence of intrinsical disorder and also long-range interactions. In this dissertation, we did a *QST* analysis on a one-dimensional system, consisting of a total of  $N+$  atoms. The study system has a channel with  $n$  atomos, interconnected to a  $S$  source and a  $R$  receiver. The links between the channel, source and receiver occur through the energy of *hopping*  $G$ . In our model, the channel has a non-correlated dismissal distribution in diagonal terms, and exponential decay in the terms of *hopping*  $T$  (within the channel) of the form  $T_{n,m} = exp[-\nu|1 - d_{n,m}]$ . Where  $d_{n,m} = |n - m|$ , with  $n \neq m$ . Diagonal terms (within the channel) have uniformly correlated disorder distributed evenly in the  $[-W/2$  to  $W/2]$  range, where  $W$  is the width of disorder. In possession of this system, we used the exact diagonalization method of Anderson's Hamiltonian to obtain the autovables and autoboretors and numerically calculate some pertinent measures for the analysis of the transfer of quantum states (*QST*), which were: Density of States (*DOS*), Average Number of Participation ( $P(E)$ ), Maximum Average Participation ( $P_{max}$ ), Maximum Loyalty ( $F_{max}$ ) and Maximum Loyalty Value ( $\langle F \rangle_{max}$ ). Based on the results of these measurements, we conclude that a *QST*, for some values of  $\nu$ , occurred with good reliability.

**Keywords:** Quantum States Transfer. Participation. Loyalty

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>2</b>
1.1	O Modelo de Anderson . . . . .	2
1.2	O Hamiltoniano de Anderson . . . . .	4
1.3	<i>hopping</i> de Longo Alcance . . . . .	10
<b>2</b>	<b>Desenvolvimento</b>	<b>13</b>
2.1	Transferência de Estados Quânticos . . . . .	13
2.2	Representação do Modelo . . . . .	15
2.3	Participação e Fidelidade . . . . .	17
2.4	Resultados . . . . .	23
<b>3</b>	<b>Conclusão e Perspectivas</b>	<b>33</b>

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 O Modelo de Anderson

Até meados da década de cinquenta, boa parte dos estudos em sólidos não levavam-se em conta as características naturais dos sistemas como, por exemplo, a desordem e a aperiodicidade. Sendo estas comuns em materiais encontrados na natureza (como vidros e alguns tipos de cristais) e até mesmo nos produzidos em laboratórios [1]. O estudo destes tipos de materiais, onde é considerado o sistema com invariância translacional já é bem estabelecido pela teoria de bandas [2]. Mas, quando o sistema contém variâncias, desordens ou não é periódico, a teoria de bandas não é mais convincente. Aqui entra uma nova teoria de estudo, que leva em conta as imperfeições dos materiais. Conhecida como Teoria da Localização de Anderson.

Na mesma década (em 1958), o físico estadunidense Philip Warren Anderson desenvolveu um modelo [1,3,4] no qual as desordens dos sistemas passaram a ser consideradas. Pode-se entender como sistemas desordenados aqueles que não possuem estruturas cristalinas perfeitas. Isto é, são compostos por vários tipos de átomos diferentes posicionados com distâncias irregulares ou que apresentam defeitos, como a vacância (vazio pontual causado pela ausência de átomos) dentre outros.

Uma forma simples, que possibilita a compreensão da dinâmica eletrônica em sistemas como o descrito acima (desordenado), é fazermos uma analogia com a mecânica quântica. Para isso, vamos considerar um caso comum já bastante conhecido na área, que é o de uma partícula atravessando uma barreira de potencial [5]. Para nossa análise, vamos considerar um sistema que dispõe de mais de uma barreira de potencial. Sabemos que, uma função

de onda ao “colidir” em uma barreira de potencial, terá uma parte refletida e outra parte transmitida. Ou seja, a função de onda incidente ao “colidir” com a barreira, é dividida da seguinte forma: uma parte é recocheteada pela barreira, e outra parte ultrapassa ela.

Inserindo uma nova barreira de potencial, o fenômeno descrito anteriormente se repete. Isto é, uma nova parte da onda é refletida e outra parte é transmitida. A segunda onda refletida encontra a primeira onda transmitida e disso ocorre uma interferência. Essa interferência pode ser construtiva ou destrutiva, a depender da fase. Colocando em seguida mais barreiras de potenciais, de forma completamente arbitrária, ou seja, em posições aleatórias com intensidades aleatórias com relação as duas primeiras barreiras, o processo descrito anteriormente se repete novamente. Por isso, vai haver várias reflexões sucessivas causando assim novas interferências, que em decorrência da aleatoriedade dos potenciais são interferências destrutivas.

Essas interferências destrutivas fazem com que a função de onda efetiva seja nula em boa parte do sistema, exceto em uma pequena região. A esse fenômeno (das interferências destrutivas induzirem a função de onda a uma pequena região e ter um valor desprezível nas demais regiões do material) denomina-se de Teoria da Localização de Anderson, neste caso, onde os estados são localizados, diz-se que o sistema está na fase isolante. De forma elementar, isso nada mais é do que o movimento dos elétrons sob a influência de potenciais aleatórios. Como foi visto, estes potenciais aleatórios tem um papel fundamental no modelo, pois configuram-se como uma forma eficiente de estudar as “consequências” provocadas por eles, nas propriedades de transporte eletrônico.

Além disso, Anderson conseguiu mostrar que existe uma dependência entre os estados eletrônicos e o grau de desordem do sistema [6, 7]. Essa dependência pode ser caracterizada da seguinte forma: grau de desordem fraco, o sistema tem comportamento metálico; grau de desordem forte, o sistema tem comportamento isolante; grau de desordem intermediário, o sistema tem comportamento metal-isolante.

Em suma, Anderson estudou sistemas desordenados e mostrou que, em tais sistemas, a desordem promove o espalhamento da função de onda. As funções de ondas na presença de potenciais acabam sofrendo reflexões sucessivas e em decorrência da aleatoriedade destes potenciais, as interferências (causadas pelas reflexões sucessivas) são do tipo destrutivas que acabam induzindo a localização exponencial da função de onda em uma pequena região do material.

Disso, a probabilidade de encontrar um elétron a uma distância  $r$  do centro da função de onda é  $\Psi(r) \propto e^{r/\lambda}$ , onde  $\lambda$  é o comprimento de localização. Existem vários tipos de medidas que podem indicar se os estados do sistema são estendidos e/ou localizados, como por exemplo a Participação, a Densidade de Estados, o Expoente de Lyapunov, dentre outros.

## 1.2 O Hamiltoniano de Anderson

Os auto-estados do Hamiltoniano de Anderson podem apresentar natureza estendida e/ou localizada a depender do sistema em estudo. Em geral, ele contém um termo cinético, que representa o *hopping* do elétron entre sítios e um termo de potencial aleatório, o termo de potencial aleatório pode ser compreendido bem, levando-se em conta o processo descrito anteriormente (onde foram consideradas as características e comportamento de uma função de onda ao encontrar barreiras de potenciais).

Para uma compreensão mais clara acerca do Hamiltoniano de Anderson, torna-se eficaz fazer o estudo primeiramente do termo cinético e depois do termo correspondente ao potencial. Evidentemente o termo cinético pode ser representado como:

$$H_c = T \sum_n |n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n| \quad (1.1)$$

onde cada átomo possui um orbital para receber os elétrons, representados aqui por  $|n\rangle$

A Eq.(1.1) nada mais é do que o Hamiltoniano do modelo de Bloch, isto é, contém apenas o termo de *hopping* (energia de movimento do elétron de um átomo para outro). É importante notar que, para o caso em que a energia cinética ( $T$ ) tem um valor muito pequeno o elétron é localizado, para  $T$  muito grande, tem-se um sistema mais propício a ser condutor. A função de onda do sistema pode ser escrita como:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle, \quad (1.2)$$

ou seja, fizemos a expansão do estado na base dos orbitais. Da equação de Schrödinger independente do tempo,

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (1.3)$$

substituindo as Eq's.(1.1) e (1.2) na Eq.(1.3), resulta em:

$$T \sum_n [|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|] \sum_m c_m |m\rangle = \sum_n E c_n |n\rangle \quad (1.4)$$

que pode ser reescrita na forma:

$$T \left[ \sum_{n,m} |n\rangle \langle n+1|m\rangle c_n + |n+1\rangle \langle n|m\rangle c_m \right] = \sum_n E c_n |n\rangle \quad (1.5)$$

escrevendo os termos nas bases iguais, ou seja, fazendo  $m \rightarrow n+1$  no primeiro vetor, e  $m \rightarrow n-1$  no segundo vetor e usando as propriedades da função delta, encontramos:

$$T c_{n+1} + T c_{n-1} = E c_n. \quad (1.6)$$

Uma possível solução para a Eq.(1.6) é fazer:

$$c_n = A e^{ikn} \quad (1.7)$$

substituindo a Eq.(1.7) em (1.6), obtém-se:

$$T A e^{ik(n+1)} + T A e^{ik(n-1)} = E A e^{ikn}. \quad (1.8)$$

ou ainda:

$$T e^{ik(n+1)} + T e^{ik(n-1)} = E e^{ikn} \quad (1.9)$$

que visivelmente torna-se:

$$T e^{ik} + T e^{-ik} = E \quad (1.10)$$

usando a relação de Euler, resulta em:

$$2T \cos(k) = E \Rightarrow E(k) = 2T \cos k \quad (1.11)$$

onde  $k$  é o número de ondas. A Eq.(1.11) é a relação de dispersão. É importante notar que, o modelo de Anderson considerando o Hamiltoniano apenas com o termo cinético, como já era esperado, nada mais é do que o modelo de Bloch com potencial periódico (sem desordem).

Desta forma, temos que o Hamiltoniano completo de Anderson (composto por um termo cinética ( $H_c$ ) e por uma termo de potencial ( $H_p$ )), fica:

$$H = H_p + H_c \quad (1.12)$$

onde  $H_p$  é a projeção em um único sítio, ou seja, representa o elétron em um orbital  $n$  e pode ser definido como a soma de todos os potenciais locais, matematicamente tem-se:

$$H_p = \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n| \quad (1.13)$$

onde  $\epsilon_n$  é a energia local que representa o potencial de ionização. De maneira mais simples,  $\epsilon_n$  é a energia que prende o elétron no orbital  $n$ ; ou seja, cada átomo tem um valor específico, portanto em materiais amorfos,  $\epsilon_n$  é representado em geral por uma sequência aleatória. Desta forma, nota-se que a sequência de valores  $\epsilon_n$  em geral representa a desordem do sistema. Se todos os valores de  $\epsilon_n$  são nulos recuperamos o chamado modelo de Bloch (modelo de um elétron sob a influência de um potencial periódico, ou seja, na ausência de desordem). Em linhas gerais, a desordem no modelo de Anderson (ou seja, a sequência de valores  $\epsilon_n$ ) é escolhida dentro do intervalo  $[-W/2, W/2]$ . A quantidade  $W$  é então definida como sendo a largura da desordem do sistema. Dentro da teoria de localização o papel de  $W$  é bem relevante. Em linhas gerais se  $W < T$  (onde  $T$  representa o termo de *hopping*) temos que o elétron tem mobilidade alta (em geral estados estendidos). Por outro lado, se  $W > T$  temos apenas estados localizados. Entretanto, a existência real de estados estendidos ou localizados não depende apenas da intensidade  $W$  da desordem; existe também uma forte dependência com a dimensão do sistema. Anderson e colaboradores mostraram que para  $d \leq 2$  qualquer valor de  $W > 0$  temos apenas estados localizados. Pode-se, agora, reescrever a Eq.(1.12) da seguinte forma:

$$H = \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n| + T \sum_n |n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n| \quad (1.14)$$

a Eq.(1.14) é o Hamiltoniano completo de Anderson, isto é, o primeiro e o segundo termo representam as energias potencial e cinética, respectivamente. Seguindo a mesma linha de raciocínio, utilizada para o termo cinético, ou seja, substituir as Eq's. (1.2) e (1.14) em (1.3), obtemos:

$$(\epsilon_n - E) c_n + T c_{n+1} + T c_{n-1} = 0. \quad (1.15)$$

A Eq.(1.15) é a Eq. de Schrödinger independente do tempo para as componentes da função de onda. Resolvê-la para todo  $n$ , onde  $n = 1, 2, 3, \dots, N$  implica diretamente, na diagonalização de uma matriz  $N \times N$ . Para diagonalizar numericamente uma matriz dessa magnitude, faz-se necessário apropriar-se de métodos computacionais afim de que se obtenha resultados em um tempo consideravelmente pequeno, caso contrário, o tempo pode

ter um crescimento exponencial, a depender do tamanho da matriz. Como mencionado anteriormente, é possível escrever a representação matricial de (1.15) para  $N$  pequeno, como exemplo, pode-se considerar  $N = 6$ , e o resultado é:

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & T & 0 & 0 & 0 & 0 \\ T & \epsilon_2 & T & 0 & 0 & 0 \\ 0 & T & \epsilon_3 & T & 0 & 0 \\ 0 & 0 & T & \epsilon_4 & T & 0 \\ 0 & 0 & 0 & T & \epsilon_5 & T \\ 0 & 0 & 0 & 0 & T & \epsilon_6 \end{pmatrix} \quad (1.16)$$

essa é a representação matricial do hamiltoniano de Anderson. Note que, tem-se uma matriz tridiagonal, isso advém do fato, de que no modelo considerado, só existe interação entre os primeiros vizinhos. A diagonal principal representa a energia potencial (do elétron na rede) e as subdiagonais representam a energia cinética do elétron (note que, a Eq.(1.16) trata-se de uma matriz hermitiana, ou seja, é igual a sua transposta conjugada). A priori, esse tipo de matriz é mais simples de diagonalizar, uma vez que, grande parte dos elementos são nulos.

Salientamos novamente que o modelo de Anderson  $1d$ , cuja representação matricial é a matriz tridiagonal acima é um modelo com diversos resultados bem estabelecidos na literatura; em dimensões  $d \leq 2$  sabemos que para qualquer valor de  $W > 0$  todos os estados eletrônicos são localizados. Este é um dos principais resultados da teoria de localização de Anderson [3]. Existem diversas formas de obter estes resultados. A maneira mais tradicional é a chamada teoria de escala da localização. Anderson e colaboradores mostraram que a condutância do modelo de Anderson em dimensão  $d$  é proporcional a  $N^{d-2}$ . Portanto apenas para  $d > 2$  temos uma condutância finita no limite termodinâmico [8]. Vamos descrever de forma resumida a teoria de escala para localização de Anderson. Este formalismo foi aplicado na reformulação do modelo de *Anderson* feita por *Thouless* [9]. Na abordagem de *Thouless*, as unidades básicas são agora caixas de volume  $l^D$  que contêm muitos sítios. O sólido é formado de várias caixas acopladas umas às outras. As energias características do modelo de *Anderson*  $W$  e  $T$  são mapeadas respectivamente no espaçamento médio entre os níveis  $\Delta E$  e no deslocamento  $\delta E$  causado por mudanças nas condições de contorno. Um elegante argumento heurístico, baseado no princípio da incerteza, conecta  $\delta E$  com a condutividade  $\sigma$  no limite macroscópico. Através do princípio



da incerteza pode-se estabelecer:

$$\delta E = \hbar/t_{D_f}, \quad (1.17)$$

onde  $t_{D_f}$  é o tempo necessário para um pacote de onda eletrônico difundir até os contornos de uma caixa de lado  $L$ . Considerando que o elétron realiza um movimento Browniano dentro da caixa podemos escrever

$$t_{D_f} = L^2/D_f, \quad (1.18)$$

onde  $D_f$  é a constante de difusão. Usando a relação de Einstein entre a condutividade e as propriedades de difusão:

$$\sigma = e^2 D n(E), \quad (1.19)$$

onde  $D n(E)$  é a Densidade de Estados. Combinando as Eqs.(1.17),(1.18) e (1.19), temos

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2 (L^2 n(E))}. \quad (1.20)$$

A densidade de estados média pode ser escrita como função do espaçamento médio entre os níveis:

$$n(E) = 1/(L^D \Delta E). \quad (1.21)$$

A razão  $\Delta E/\delta E$  é agora adotada como sendo uma medida de “força” da desordem no sistema, análoga à razão  $W/T$  no modelo de *Anderson* tradicional. Estados estendidos são sensíveis à mudanças nas condições de contorno ( $\delta E > \Delta E$ ). Por outro lado, estados localizados não apresentam tal sensibilidade (ou seja,  $\delta E < \Delta E$ ). O parâmetro de desordem  $g^{-1}$  é definido por

$$\frac{1}{g(L)} \equiv \frac{\Delta E}{\delta E}. \quad (1.22)$$

Substituindo as Eq.(1.20), (1.21) na Eq.(1.22), podemos observar a dependência de escala do parâmetro  $g$ :

$$g(L) = (\hbar/e^2) \sigma L^{D-2}. \quad (1.23)$$

A Eq.(1.23) se aplica apenas a estados estendidos no limite macroscópico. O termo  $L^{D-2} \sigma$  é a condutância de um cubo (D-dimensional) de lado  $L$  e condutividade  $\sigma$ . Logo, a função  $g(L)$  pode ser vista como uma condutância generalizada expressa em unidades de  $e^2/\hbar$ . O comportamento de escala da função  $g$  pode ser obtido a partir da função  $\beta(g)$ , dada por

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L}. \quad (1.24)$$

Para  $\beta$  positivo,  $g$  cresce com o crescimento de  $N$  (estados estendidos); para  $\beta$  negativo,  $g$  decresce com o crescimento de  $N$  (estados localizados).

Entretanto, é importante salientar que os principais resultados acerca de localização para dimensões baixas também podem ser obtidos através da diagonalização exata do Hamiltoniano e a posterior obtenção de medidas do grau de localização, como a participação ou desvio médio quadrático. Uma análise de escala destas funções também pode demonstrar numericamente a fenomenologia de localização de Anderson.

Existem diversas variantes do modelo de Anderson, inclusive algumas delas foram investigadas pelo próprio Anderson nos seus primeiros trabalhos. Uma dessas variantes é o modelo com *hopping* aleatório. Neste modelo a distribuição dos termos de *hopping* pode apresentar variâncias na rede (ou seja, pode mudar ao longo da rede atômica). Para casos como este, o Hamiltoniano de Anderson pode ser reescrito da seguinte forma:

$$H = \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n| + \sum_{n,m} (T_{n,m} |n\rangle \langle m| + c.c) \quad (1.25)$$

o termo de *hopping*, neste caso, tem dependência com  $n$  e  $m$  com  $n \neq m$ . Lembrando que o termo  $T_{n,m}$  representa *hopping* de primeiros vizinhos ou seja :  $T_{n,m} \rightarrow T_{n,n+1} = T_n$ , onde  $T_n$  é uma sequência aleatória. A matriz para do Hamiltoniano (1.25) é da forma:

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & T_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ T_1 & \epsilon_2 & T_2 & 0 & \cdots & \vdots \\ 0 & T_2 & \epsilon_3 & T_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & T_3 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & 0 & \ddots & \ddots & T_{n-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & T_{n-1} & \epsilon_n \end{pmatrix} \quad (1.26)$$

Existem diversas formas de construir a sequência de *hopping* aleatórios  $T_n$ . Podemos citar, por exemplo, o caso em que a energia cinética  $T_n$  é escrita da forma:

$$T_n = \nu_n + \tau \quad (1.27)$$

aqui,  $\nu_n$  representa um conjunto de números aleatórios com distribuição uniforme compreendida no intervalo  $[-W/2, W/2]$ . Note que  $\tau$  é escolhido de tal forma a garantir que  $T_n$  não seja zero com  $\nu_n$  distribuído de forma arbitrária e uniforme no sistema. O motivo pelo qual  $T_n \neq 0$  é logicamente para que se tenha mobilidade eletrônica.

Um outro caso, bastante relevante e encontrado na literatura é o seguinte [10]:

$$T_n = e^{-\nu_n} \quad (1.28)$$

e mais uma vez,  $\nu_n$  fica compreendido no intervalo  $[-W/2, W/2]$ . Observe que a exponencial da Eq. (1.28) num intervalo finito, resulta sempre em  $T_n \neq 0$  por esta razão, o termo que tinha essa utilidade na Eq. (1.27) não se faz mais necessário aqui.

Os modelos com *hopping* aleatório, a depender do tipo e da forma de como eles são introduzidos, apresentam algumas especificidades. Entretanto, de uma forma geral, a maioria deles continuam mantendo os auto-estados localizados para qualquer quantidade de desordem. Outro aspecto interessante é que boa parte dos modelos com *hopping* aleatório apresentam, no centro da banda, uma anomalia no comprimento de localização. Os modos com  $E = 0$  têm um forte crescimento no comprimento de localização. Este crescimento é devido ao fato que a função de onda no centro da banda passa a ter um comportamento do tipo exponencial alongada (são exponenciais que decaem mais lentamente, é uma “assinatura” deste modelo). Este comportamento difere do comportamento usual dos estados eletrônicos em sistemas de baixa dimensionalidade (que seria um envelope tipo exponencial) [9].

### 1.3 *hopping* de Longo Alcance

Modelos contendo *hopping* de longo alcance, são bem comuns na literatura [11–15]. Em linhas gerais, estes modelos contêm na maioria das vezes, termos de *hopping* que decaem com uma função da distância. Ou seja, o *hopping* de primeiros vizinhos do modelo de Anderson tradicional é então substituído por um termo de *hopping*  $T(|i - j|)$ . Disto, o Hamiltoniano pode ser escrito como:

$$H = \sum_i |i\rangle\langle i| \epsilon_i + \sum_{i,j} T(|i - j|) |i\rangle\langle j| \quad (1.29)$$

O termo  $T(|i - j|)$  é, em geral, uma função que apresenta decaimento com a distância  $|i - j|$  (enfatizamos que, a última soma é feita para  $|i - j| > 0$ ). Este tipo de modelagem teórica está presente em diversos exemplos na natureza, um deles são os sistemas com interações tipo dipolo-dipolo (onde existem um decaimento tipo lei de potencia  $1/r^3$  para os termos de interação). Neste tipo de Hamiltoniano, descrito acima, um dos modelos

mais famosos é o modelo com *hopping* seguindo a lei  $T(|i-j|) \propto (|i-j|)^{-\alpha}$ . Nesta classe de modelos, o termo de *hopping* formalmente sempre “existe” (mesmo que a distância entre  $i$  e  $j$  seja grande, desta forma vem o nome *hopping* de longo alcance). Foi mostrado por diversos autores [16] que se  $\alpha > 1.5$  este modelo, em dimensão  $d = 1$ , tem propriedades semelhantes ao modelo de Anderson com *hopping* de primeiros vizinhos. Se  $1 < \alpha < 1.5$  este modelo apresenta um estado estendido em um dos extremos da banda de estados permitidos.

Em linhas gerais, existem diversas classes de sistemas onde interações de longo-alcance são relevantes e/ou presentes. Podemos citar, por exemplos, o efeito de blindagem eletrostática da lei de Coulomb em sistemas sólidos. Quando temos duas cargas fixas, a interação entre elas é coulombiana (lei de potência). Mas, em sistemas sólidos (principalmente metálicos) a presença de muitas partículas carregadas interagindo entre si promove o efeito da blindagem local da interação coulombiana. Neste caso, não é mais possível observar o decaimento com lei de potência; mas, um decaimento aproximadamente exponencial. Isso ocorre porque os portadores de cargas (por exemplo, os elétrons) acabam criando uma pequena região próxima a eles com menos elétrons. Esta região pode ser compreendida como um “buraco” (visto de uma grande distância) este buraco de blindagem tem efeito de uma carga positiva sobreposta, que acaba cancelando o campo elétrico produzido pelo elétron [17–19]

Neste trabalho de mestrado, nosso foco foi estudar a fenomenologia de Transferência de Estados Quânticos em sistemas contendo desordem diagonal e *hopping* com decaimento exponencial com a distância. Nosso interesse é entender o papel desempenhado pelo *hopping* com decaimento exponencial, dentro do contexto de protocolos de Transferência de Estados Quânticos (*TEQ*), entre uma fonte  $S$  e um receptor  $R$ . Vamos construir um modelo teórico onde  $S$  e  $R$  estejam fracamente acoplados por um canal, contendo *hopping* de longo-alcance. O resto desta dissertação está organizada da seguinte forma: No capítulo dois, no primeiro momento, iremos fazer uma breve revisão da literatura de Transferência de Estados Quânticos; vamos apresentar uma breve revisão de alguns artigos recentes, e assim, mostrar que este tema vem ganhando destaque nos estudos atuais. Em seguida, descreveremos detalhadamente o modelo teórico de interesse. Vamos apresentar o modelo considerado e o seu Hamiltoniano contendo o termo de desordem diagonal não correlacionada, bem como o termo de *hopping* com decaimento exponencial.

Também apresentaremos a formulação matemática e a representação matricial do mesmo. Vamos apresentar a análise da *TEQ* seguindo o formalismo proposto por S. Bose [20]. Depois, ainda no capítulo dois, através do método de diagonalização exata, obteremos os autovalores e autovetores do Hamiltoniano do problema e deles calcularemos algumas medidas pertinentes para complementar a análise da Transferência de Estados Quânticos (*TEQ*), que serão: Densidade de Estados (*DOS*), Número Médios de Participação ( $P_E$ ), Participação Média Máxima ( $P_{max}$ ) (bem como a Fidelidade Máxima ( $F_{max}$ ) à luz da teoria proposta por Bose). E por fim, no capítulo três, vamos apresentar uma revisão geral dos resultados bem como nossas conclusões e perspectivas.

# Capítulo 2

## Desenvolvimento

### 2.1 Transferência de Estados Quânticos

As pesquisas teóricas e experimentais em processamentos de informação quântica têm se tornado cada vez mais presentes em diversos estudos na Física. Essas pesquisas têm como objetivo principal a superação do poder de processamento convencional para um processamento mais moderno. Para isso, é necessário o desenvolvimento de dispositivos quânticos, além da implementação de um protocolo de *TEQ* que seja capaz de transferir este estado de um local para outro [21, 22].

Em grande parte, os protocolos de comunicação são feitos pelos fótons, devido à sua fraca interação com o meio ambiente. Isto tornou-se comum devido ao avanço da tecnologia nas fibras ópticas atuais (configurando um meio ideal para o seu transporte). Mas, nem sempre é viável o uso de fótons para comunicação, pois quando se trata de processadores quânticos não é trivial converter um *qubit* estacionário em um *qubit flying* e vice-versa [23].

O termo *qubit* vem do inglês (“*quantum bit*”), diferentemente do *bit* (variável que pode assumir os valores 0 ou 1 para representar uma informação) o *qubit* pode ser representado por um sistema de dois níveis e pode ser expresso como uma combinação linear (superposição) dos estados 0 e 1. As amplitudes dos coeficientes que multiplicam estes vetores tem que ser tal que este *qubit* esteja no espaço de Hilbert de duas dimensões. Para descrevê-lo de uma forma geral é necessário que a soma dos módulos dos quadrados das probabilidades seja igual a unidade. Isso implica dizer, que o *qubit* precisa ter um vetor estado normalizado. Assim, um *qubit* pode ser expresso como

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle, \quad (2.1)$$

Onde o  $|0\rangle$  e o  $|1\rangle$  são as bases em que o *qubit* é expresso. Ademais  $\theta$  e  $\phi$  são variáveis reais compreendidas nos seguintes intervalos,  $0 \leq \theta \leq \pi$  e  $0 \leq \phi \leq 2\pi$ .

Partindo de (2.1) é possível representar os estados de um *qubit* geometricamente, fazendo uso de coordenadas esféricas para uma esfera de raio  $r = 1$ . Nessa interpretação, cada ponto na superfície da esfera representa um *qubit*, esta representação é chamada de esfera de Bloch.

Um dos meios de se obter a *TEQ* é pela dinâmica de um canal quântico, este canal tem uma de suas extremidades conectada a um emissor onde a informação é codificada em um *qubit* estacionário em sua localização e outra extremidade conectada a um receptor, disso, pode-se investigar se a evolução temporal recupera a informação (colocada no emissor) no receptor.

As cadeias de spins  $-1/2$  são extensivamente investigadas para realizar este tipo de protocolo da *TEQ* com bom desempenho [24, 25]. S. Bose (Físico Indiano) foi um dos primeiros a propor o uso de uma cadeia de spins para servir como um canal e alcançar a transferência de estados através da dinâmica, sob um Hamiltoniano adequado para a comunicação em distâncias relativamente curtas [20, 26, 27]. Esse modelo tem uma proeminência com relação aos demais, uma vez que, apropria-se da dinâmica natural do canal para a realização do transporte da informação, portanto, existe uma redução na necessidade de controlar o sistema. Para que isso seja efetivado usa-se o *qubits* estacionário.

É sabido que, a complexidade da dinâmica de um sistema é proporcional ao seu tamanho quando o acoplamento entre os spins ocorre de forma natural [27]. Uma forma de resolver este “problema” é projetar os acoplamentos da cadeia de spin de forma que sua dinâmica alcance a *TEQ* e a geração de emaranhamento de forma a não depender do tamanho do sistema [27, 28].

Alguns autores propuseram uma maneira relativamente simples de obter a *TEQ* de forma perfeita (ou quase perfeita) em uma cadeia de spin finita com interação de longo alcance. A ideia é criar um esquema de otimização que se aproxime do comportamento ideal e que mantenha a força de interação ainda razoavelmente alta, onde emissor e receptor são destacados do resto da cadeia [23, 29]. Este procedimento é escalonável com o tamanho do sistema. Os resultados mostraram que a fidelidade se torna invariante na

escala do sistema e o tempo de transferência independe do número de spins e ambos se aproximam dos valores ideais [23, 29]. É importante notar que há um grande esforço no meio científico com relação as pesquisas na investigação de novos protocolos que aumentem a qualidade da *TEQ* [29]. Recentemente, a *TEQ* de um *qubit* foi investigada em um modelo anisotrópico Heisenberg *XXZ*, em redes  $1d$ ,  $2d$  e  $3d$ , onde os acoplamentos seguem a lei de potência com um expoente variável e com emissor e receptor simetricamente acoplados [22]. Para o caso de redes regulares, verifica-se que a fidelidade aumenta com o aumento da dimensionalidade da rede para sistemas suficientemente grandes e o aumento da fidelidade é mais claro para sistemas com interações de longo alcance em redes unidimensionais [22]. Também foi demonstrado que as interações de longo alcance sofrem menos com o distúrbio induzido pela temperatura do que aquelas com interação de curto alcance [22].

Além disso, outros autores [30] sugerem um método de *TEQ* rápido em uma cadeia Su-Schrieffer-Heeger (SSH). A proposta do protocolo consiste basicamente em fazer uma mudança rápida no estado da fronteira topológica com o ajuste fino das interações com os vizinhos mais próximos. A robustez deste protocolo contra distúrbios não correlacionados e correlacionados é investigada. Os resultados mostraram que ao inserir uma desordem espacial de correlação há um aumento na robustez do protocolo [30].

O papel do transtorno em protocolos de *TEQ* tem grande importância e tem sido extensivamente investigado por vários pesquisadores. Um dos estudos mostra que o distúrbio correlacionado melhora a transmissão de forma bastante significativa, quando comparado ao distúrbio não correlacionado, desde que o grau de correlação seja forte o suficiente. Em contraste, os tempos de transferência são longos [15, 24]. No geral, a maioria dos estudos nesta perspectiva têm mostrado que alguns protocolos de comunicação são robustos, desde que a perturbação não ultrapasse um determinado limite [24, 31].

## 2.2 Representação do Modelo

O modelo considerado nesta dissertação, para a análise da *TEQ* é um modelo unidimensional que possui ao total  $N + 2$  sites, constituído por um emissor  $S$  conectado a um receptor  $R$  através de um canal com  $N$  sites. Em nosso modelo, o canal tem uma distribuição de desordem não correlacionada nos termos diagonais e um decaimento ex-



ponencial nos termos de energia de *hopping*. Fenômenos semelhantes ao abordado nesta dissertação frequentemente estão presentes em sistemas físicos. Um exemplo disso foi citado no final da seção 1.3, quando falamos das interações mútuas de partículas em sistemas sólidos e/ou metálicos. No nosso modelo, o sítio  $S$  (1) e o sítio  $R$  ( $N + 2$ ) não participam do decaimento exponencial, eles estão conectados apenas aos sítios 2 e  $N + 1$ , respectivamente, como mostra a fig.(2.1).

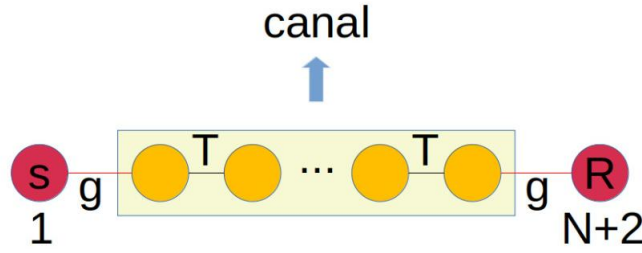


Figura 2.1: Fonte  $S$  e Receptor  $R$  Ligados ao Canal Pela Energia  $g$ . A energia Dentro do Canal é  $T$

As energias nos sites que representam a fonte  $S$  e o receptor  $R$  são  $\epsilon_S = \epsilon_R = \omega$ . O  $g$  é o termo de *hopping* que liga a fonte e o receptor ao canal. E  $T$  é o termo de *hopping* dentro do canal. É importante saber que  $g < T$ . Agora, podemos escrever o Hamiltoniano completo deste sistema, que toma a seguinte forma:

$$H = \epsilon_S |1\rangle\langle 1| + \epsilon_R |N + 2\rangle\langle N + 2| + g(|1\rangle\langle 2| + |N + 2\rangle\langle N + 1| + c.c) + \sum_{n=2}^{N+1} \epsilon_n |n\rangle\langle n| + \sum_{\substack{n=2 \\ m=3 \\ n \neq m}}^{N+1} (T_{n,m} |n\rangle\langle m| + c.c) \quad (2.2)$$

Os dois últimos termos do segundo membro da Eq.(2.2) é o Hamiltoniano do canal. Observe que as energias on-sites  $\epsilon_n$  no canal são números aleatórios não correlacionados distribuídos uniformemente dentro do intervalo  $[-W/2, W/2]$  e os termos de energia de *hopping*  $T_{n,m}$  no canal decaem exponencialmente com

$$T_{n,m} = \exp[-\nu|1 - d_{n,m}|], \quad (2.3)$$

onde  $d_{n,m} = |n - m|$  com  $n \neq m$  são as distâncias entre os sítios vizinhos e  $\nu$  é o fator de decaimento. Em particular, os termos de *hopping* para os primeiros vizinhos

são  $T_{n+1,m} = T_{n,m+1} = 1$ . Temos também que  $g \ll 1$ , isto é, o emissor e o receptor estão fracamente ligados ao canal. A Eq.(2.2) pode ser reescrita analiticamente na forma matricial. Por razões de simplificação, vamos considerar  $N = 4$  ( $N$  representa apenas o número de sítios do canal, o número total de sítios do sistema é dado por  $N + 2$ ), logo teremos uma matriz  $6 \times 6$ , neste exemplo fez-se  $\nu = 1$ , assim temos:

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_s & g & 0 & 0 & 0 & 0 \\ g & \epsilon_2 & 1 & e^{-1} & e^{-2} & 0 \\ 0 & 1 & \epsilon_3 & 1 & e^{-1} & 0 \\ 0 & e^{-1} & 1 & \epsilon_4 & 1 & 0 \\ 0 & e^{-2} & e^{-1} & 1 & \epsilon_5 & g \\ 0 & 0 & 0 & 0 & g & \epsilon_R \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

A Eq.(2.4) representa de forma mais clara o problema em questão. Trata-se de uma matriz quadrada e Hermitiana. Observe que o decaimento exponencial na energia cinética (*hopping*) não se limita aos primeiros vizinhos. Note também que quando o fator de decaimento  $\nu$  é pequeno a função exponencial decai lentamente, mas quando  $\nu$  é grande há um decaimento muito rápido.

## 2.3 Participação e Fidelidade

Usando o método de diagonalização exata do Hamiltoniano do problema, descrito anteriormente (2.2), é possível obter os autovetores e os autovalores correspondentes, e a partir deles torna-se factível calcular duas medidas importantes para a análise da *TEQ*, que são a *Participação* e a *Fidelidade*.

Como dito, é possível analisar as propriedades de localização do canal através do número de Participação, que pode ser compreendido como algo da ordem do número de átomos que participa do pacote de onda, matematicamente,  $P(E)$  pode ser definida como:

$$P(E_j) = \left[ \sum_k (z_k^j)^4 \right]^{-1}, \quad (2.5)$$

onde  $\{z_k^j\}$  representa o autovetor associado ao autovalor  $E_j$ .

É importante salientar que para estados estendidos o número de participação diverge proporcional a  $N$ . Podemos mostrar isso de forma bem simples: Considere um estado

estendido cuja as amplitudes  $z_k^j$  sejam todas idênticas ( $z_k^j = z_0$ ); desta feita, sabendo que  $\sum_k |z_k^j|^2 = 1$  e temos que,  $\sum_{k=1}^N |z_k^j|^2 = \sum_{k=1}^N |z_0|^2 = 1$ , ou seja,  $z_0 = 1/\sqrt{N}$ ; substituindo  $z_k^j = z_0 = 1/\sqrt{N}$  na Eq.(2.5) temos que  $P(E_j) = \sum_{k=1}^N (1/\sqrt{N})^4$ , isto é,  $P(E_j) = N$ . Por outro lado, para os estados localizados,  $P(E_j)$  é uma constante, cujo valor é menor que o tamanho do sistema. Outro ponto importante a ser analisado é a dinâmica eletrônica dependente do tempo ao longos da cadeia, já que o nosso principal interesse neste trabalho é avaliar a eficiência da *TEQ* ao longo do canal, ou seja, da fonte  $S$  ao receptor  $R$ .

Outra medida importante é a Fidelidade média da transferência de estados, que para ser calculada é necessário conhecermos o módulo da função de onda no sítio  $N + 2$ . Para encontrarmos este valor numérico, precisamos resolver numericamente a equação de Schrödinger dependente do tempo. Ou seja, a medida da Fidelidade exige o conhecimento da dinâmica de um pacote de onda inicialmente localizado na fonte (sítio  $S$ ) do modelo. A evolução deve ocorrer para um tempo longo e aferir o estado quântico que consegue “chegar” no sítio  $R$  (no receptor). Com base nisto, a solução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo representa o passo fundamental para o cálculo da Fidelidade da *TEQ*.

Uma forma elegante para se resolver numericamente a equação de Schrödinger é encontrar numericamente a dinâmica de um estado quântico e calcular o operador de evolução temporal [32]. Uma de suas vantagens é a precisão numérica, uma vez que o processo é formalmente exato, entretanto, uma das dificuldades é a limitação computacional, pois o cálculo exige a diagonalização total do Hamiltoniano do problema. Portanto, como já discutimos anteriormente, este procedimento é bastante limitado. Vamos construir a teoria de maneira geral, considerando um problema geral em Mecânica Quântica com Hamiltoniano  $H$ . Formalmente, a evolução temporal do estado quântico deste sistema é dada por:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iH\frac{t}{\hbar}} |\Psi(0)\rangle, \quad (2.6)$$

onde  $|\Psi(0)\rangle$  é o estado no tempo  $t = 0$  e  $e^{-iH\frac{t}{\hbar}}$  é o operador de evolução temporal do problema. Considere que os estados  $|\Psi(t)\rangle$  e  $|\Psi(0)\rangle$  podem ser expandidos na base de orbitais  $|n\rangle$  como:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n\rangle \quad (2.7)$$

e

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_n c_n(0) |n\rangle \quad (2.8)$$

podemos então encontrar uma relação simples entre  $c_n(t)$  e  $c_n(0)$ , para isso, façamos a substituição da Eq.(2.7) e (2.8) na Eq.(2.6), ficando com:

$$\sum_n c_n(t) |n\rangle = e^{-iH\frac{t}{\hbar}} \sum_n c_n(0) |n\rangle. \quad (2.9)$$

Salientamos que  $\{|n\rangle\}$  é uma base do espaço de Hilbert do sistema de interesse, assim, podemos usar  $\{|n\rangle\}$  para escrever uma representação matricial de  $H$  e/ou expandir os seus autovetores. Seja então  $|E\rangle$  um autovetor de  $H$  (e portanto,  $H|E\rangle = E|E\rangle$ ), podemos escrever

$$|E\rangle = \sum_n z_n^E |n\rangle. \quad (2.10)$$

Usando  $\{|E\rangle\}$  para expandir o estado inicial, ou seja,

$$|\psi(0)\rangle = \sum_E \langle E|\psi_0\rangle |E\rangle \quad (2.11)$$

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{\substack{n,m \\ E}} [z_m^{E*} c_n(0)] (\langle m|n\rangle) |E\rangle.$$

Admitindo que  $H$  é real e Hermitiano e que  $\langle m|n\rangle = \delta_{m,n}$ , temos

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n,E} z_n^E c_n(0) |E\rangle \quad (2.12)$$

$$|\psi_0(0)\rangle = \sum_E \left[ \sum_n z_n^E c_n(0) \right] |E\rangle. \quad (2.13)$$

Assim, podemos usar  $|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |\psi(0)\rangle$  para fazer a evolução temporal:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \sum_E \left[ \sum_n z_n^E c_n(0) \right] |E\rangle \quad (2.14)$$

e lembrando que  $e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |E\rangle = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} |E\rangle$ , a evolução temporal fica

$$|\psi(t)\rangle = \sum_E \left[ \sum_n z_n^E c_n(0) \right] e^{-\frac{iEt}{\hbar}} |E\rangle. \quad (2.15)$$

Sabendo que  $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n\rangle$  e que  $|E\rangle = \sum_m z_m^E |m\rangle$ , temos

$$\sum_n c_n(t) |n\rangle = \sum_E \left[ \sum_n z_n^E c_n(0) \right] e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \sum_m z_m^E |m\rangle. \quad (2.16)$$

Fazendo  $Z(E) = \sum_n z_n^E c_n(0)$ , temos

$$\sum_n c_n(t) |n\rangle = \sum_{E,m} Z(E) z_m^E e^{-\frac{iEt}{\hbar}} |m\rangle. \quad (2.17)$$

No lado direito, podemos eliminar um somatório fazendo a mudança de variáveis  $m \rightarrow n$ . Logo, a função de onda eletrônica dependente do tempo  $t$  no site  $n$  pode ser obtida usando a seguinte equação:

$$c_n(t) = \sum_E Z(E) z_n^E e^{-\frac{iEt}{\hbar}}, \quad (2.18)$$

como já foi mencionado anteriormente, este procedimento tem uma grande precisão numérica dentro do contexto da conservação da norma da função de onda. Por outro lado, o procedimento exige a diagonalização total do Hamiltoniano e este procedimento tem um custo computacional em geral um pouco “caro”. Dentro do contexto do modelo de *Anderson 1D* este formalismo é interessante considerando cadeias pequenas com  $N \ll 10000$  por exemplo.

Como já mencionamos, o módulo da função de onda no receptor ( $R = N + 2$ ) pode ser usado para obtermos uma função de grande interesse, que é a Fidelidade. É a partir desta função que conseguimos identificar o quanto o arraste do estado “colocado” em  $S$  ocorreu com boa fidelidade em  $R$ , isto é, o quanto o estado em  $S$  é compatível com o estado em  $R$ .

Para chegarmos na expressão matemática da Fidelidade, vamos considerar o seguinte caso, Alice (emissor) coloca um estado desconhecido no sítio localizado em uma das extremidade de uma cadeia de spin, como:

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle, \quad (2.19)$$

Bob (receptor) quer recuperar este estado na outra extremidade da cadeia, de forma a ser o mais próximo possível do estado inicial. Para isso, deve-se esperar um tempo específico até que o estado inicial evolua para um estado final. O estado na extremidade de Bob, em geral, é misto e pode ser obtido aplicando o traço dos estados de todos os outros spins

de  $|\psi\rangle$ .

$$\rho_{out}(t) = P(t) |\psi_{out}(t)\rangle \langle \psi_{out}(t)| + [1 - P(t)] |0\rangle \langle 0|, \quad (2.20)$$

sendo

$$\psi_{out}(t) = \frac{1}{\sqrt{P(t)}} \left( \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} f_{s,r}^N(t) |1\rangle \right), \quad (2.21)$$

e

$$P(t) = \cos^2 \frac{\theta}{2} + \sin^2 \frac{\theta}{2} |f_{s,r}^N(t)|^2 \quad (2.22)$$

e também

$$f_{s,r}^N(t) = \langle r | \exp \{-iH_G t\} | s \rangle. \quad (2.23)$$

Vamos supor agora que Bob vai pegar o r-ésimo spin em um tempo predeterminado  $t = t_0$ . A Fidelidade de comunicação quântica através da média sob todo o estado de entrada pura ( $|\psi_{in}\rangle$ ) na esfera de Bloch é dada por:

$$F = \frac{1}{4\pi} \int \langle \psi_{in} | \rho_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle d\Omega \quad (2.24)$$

Resolvendo:

$$\langle \psi_{in} | \rho_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle = P(t_0) \langle \psi_{in} | \psi_{out}(t_0) \rangle \langle \psi_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle + \langle \psi_{in} | [1 - P(t_0)] | 0 \rangle \langle 0 | \psi_{in} \rangle$$

$$\langle \psi_{in} | \rho_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle = P(t_0) \langle \psi_{in} | \psi_{out}(t_0) \rangle \langle \psi_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle + \langle \psi_{in} | 0 \rangle \langle 0 | \psi_{in} \rangle - P(t_0) \langle \psi_{in} | 0 \rangle \langle 0 | \psi_{in} \rangle.$$

Podemos agora, separa esse último termo em três partes, da seguinte forma:

$$(1) = P(t_0) \langle \psi_{in} | \psi_{out}(t_0) \rangle \langle \psi_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle \quad (2.25)$$

$$(2) = \langle \psi_{in} | 0 \rangle \langle 0 | \psi_{in} \rangle \quad (2.26)$$

$$(3) = -P(t_0) \langle \psi_{in} | 0 \rangle \langle 0 | \psi_{in} \rangle \quad (2.27)$$

calculando cada termo separadamente, ou seja:

$$\langle \psi_{in} | \psi_{out}(t_0) \rangle = \left[ \cos \frac{\theta}{2} \langle 0 | + e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \langle 1 | \right] \frac{1}{\sqrt{P(t_0)}} \left( \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} f_{r,s}^N(t_0) |1\rangle \right), \quad (2.28)$$

que fica:

$$\langle \psi_{in} | \psi_{out}(t_0) \rangle = \left[ \cos^2 \frac{\theta}{2} + \sin^2 \frac{\theta}{2} f_{r,s}^N(t_0) \right] \frac{1}{\sqrt{P(t_0)}}, \quad (2.29)$$

temos também que:

$$\langle \psi_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle = \frac{1}{\sqrt{P(t_0)}} \left[ \cos^2 \frac{\theta}{2} + \sin^2 \frac{\theta}{2} (f_{r,s}^N(t_0))^* \right]. \quad (2.30)$$

Agora podemos reescrever (1), (2) e (3) como se segue:

$$(1) = \cos^4 \frac{\theta}{2} + \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} (f_{r,s}^N(t_0))^* + \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} f_{r,s}^N(t_0) + \sin^4 \frac{\theta}{2} |f_{r,s}^N(t_0)|^2, \quad (2.31)$$

$$(2) = \cos^2 \frac{\theta}{2} \quad (2.32)$$

e

$$(3) = -P(t_0) \cos^2 \frac{\theta}{2} = -\cos^4 \frac{\theta}{2} - \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} |f_{r,s}^N(t_0)|^2. \quad (2.33)$$

Com essas expressões, podemos agora obter uma relação matemática para a Fidelidade, vejamos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi} \int \langle \psi_{in} | \rho_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle d\Omega &= \frac{1}{4\pi} \int \cos^4 \frac{\theta}{2} + \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} (f_{r,s}^N(t_0))^* + \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} f_{r,s}^N(t_0) + \\ &+ \sin^4 \frac{\theta}{2} |f_{r,s}^N(t_0)|^2 + \cos^2 \frac{\theta}{2} - \cos^4 \frac{\theta}{2} - \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} |f_{r,s}^N(t_0)|^2 d\Omega \end{aligned} \quad (2.34)$$

como  $\int d\Omega = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin \theta d\theta d\phi$ , e na expressão acima só existe dependência com  $\theta$ , temos que a integral em  $\phi = 2\pi$ , logo temos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi} \int \langle \psi_{in} | \rho_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle d\Omega &= \frac{2\pi}{4\pi} \int_0^\pi \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \sin \theta (f_{r,s}^N(t_0))^* + \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \sin \theta f_{r,s}^N(t_0) + \\ &+ \sin^4 \frac{\theta}{2} \sin \theta |f_{r,s}^N(t_0)|^2 + \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin \theta - \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \sin \theta |f_{r,s}^N(t_0)|^2 d\theta \end{aligned} \quad (2.35)$$

resolvendo as integrais acima, temos que:

$$\frac{1}{4\pi} \int \langle \psi_{in} | \rho_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle d\Omega = \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{3} (f_{r,s}^N(t_0))^* + \frac{1}{3} f_{r,s}^N(t_0) + \frac{2}{3} |f_{r,s}^N(t_0)|^2 + 1 - \frac{1}{3} |f_{r,s}^N(t_0)|^2 \right] \quad (2.36)$$

ou ainda

$$\frac{1}{4\pi} \int \langle \psi_{in} | \rho_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle d\Omega = \frac{1}{6} [f_{r,s}^N + (f_{r,s}^N(t_0))^*] + \frac{1}{2} + \frac{1}{6} |f_{r,s}^N(t_0)|^2. \quad (2.37)$$

Agora vamos dar ênfase ao primeiro termo da Eq.(2.37)

$$\Delta = |f_{r,s}^N(t_0)|^2 e^{i*\arg(f_{r,s}^N(t_0))} + |f_{r,s}^N(t_0)| e^{-i*\arg(f_{r,s}^N(t_0))} \quad (2.38)$$

$$\Delta = |f_{r,s}^N(t_0)| \left[ e^{i*\arg(f_{r,s}^N(t_0))} + e^{-i*\arg(f_{r,s}^N(t_0))} \right] \quad (2.39)$$

$$\Delta = 2|f_{r,s}^N(t_0)| \cos(\arg(f_{r,s}^N(t_0))) \quad (2.40)$$

e enfim reescrever a Eq.(2.37) na forma:

$$\frac{1}{4\pi} \int \langle \psi_{in} | \rho_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle d\Omega = F = \frac{1}{3} |f_{r,s}^N(t_0)| \cos(\arg(f_{r,s}^N(t_0))) + \frac{1}{2} + \frac{1}{6} |f_{r,s}^N(t_0)|^2 \quad (2.41)$$

ou ainda,

$$F = \frac{1}{3} |f_{r,s}^N(t_0)| \cos \gamma + \frac{1}{2} + \frac{1}{6} |f_{r,s}^N(t_0)|^2, \quad (2.42)$$

note que fizemos  $\gamma = \arg[f_{r,s}^N(t_0)]$  na Eq.(2.41) para obtermos a Eq.(2.42).

Para o modelo em estudo neste trabalho,  $|f_{r,s}^N(t_0)| \equiv |c_{N+1}(t)|$  que é o módulo da função de onda no sítio  $N + 2$  (receptor). Outra observação importante é que em uma média temporal o  $\cos \gamma$  não é relevante, por isso ele pode ser desconsiderado, e ficamos apenas com:

$$F(t) = \frac{1}{2} + \frac{|c_{N+2}(t)|}{3} + \frac{|c_{N+2}(t)|^2}{6}, \quad (2.43)$$

Vamos nos concentrar na fidelidade máxima  $F_{max} = \max\{F(t)\}$  alcançada em um determinado intervalo, pois a escala de tempo da dinâmica do sistema varia de forma significativa de amostra para amostra. No nosso cálculo, usamos um intervalo de tempo  $t > 5 \times 10^5$  unidades e cerca de 100 realizações de desordens distintas para calcular  $F_{max}$ . Sempre que a *TEQ* ocorre com boa eficiência a função  $F_{max}$  torna-se próxima da unidade  $F_{max} \approx 1$ . No entanto, se a *TEQ* não ocorre temos  $F_{max} = 0.5$ .

## 2.4 Resultados

Começamos nossos cálculos medindo a Densidade de Estados (*DOS*), que pode ser compreendida, basicamente como sendo um histograma da quantidade de estados em



torno de cada região de energia. A importância de calcular a (*DOS*) vem do fato de que tradicionalmente ela nos dá algumas informações importantes do sistema em estudo. Uma das informações relevantes, por exemplo, é a largura do espectro de energias possíveis (ou seja, a largura da Banda de estados permitidos). Se a Densidade de Estados for zero para uma dada energia, isso implica que, nesta energia, em particular, não temos estados físicos reais mensuráveis; por outro lado, se a (*DOS*) é grande, isso implica que naquela região existe uma grande quantidade de estados. Disso, extraímos que, o Hamiltoniano pode ter muitos estados em uma determinada energia e poucos estados em outra.

Outra informação importante que ela nos fornece é que quando os estados são localizados, a *DOS* apresenta um comportamento ruidoso (há presença de rugosidade); já quando os estados são estendidos essa rugosidade diminui. Assim, essa é outra medida indireta que podemos obter do cálculo da Densidade de Estados. Entretanto, esta abordagem de aferir a rugosidade da densidade de estados e assim caracterizar a natureza dos estados nem sempre é possível. Principalmente em sistemas com desordem forte e/ou baixa dimensionalidade. A expressão matemática para Densidade de Estados é definida da seguinte forma:

$$DOS = \sum_{E_j} \delta(E - E_j). \quad (2.44)$$

Salientamos que o cálculo da *DOS* representado na fig. (2.2) é obtido seguindo a seguinte estratégia: para cada valor específico de  $\nu$  diagonaliza-se o Hamiltoniano do canal para  $N = 500$  com um grande número de médias; em seguida guardamos as auto-energias (todos os autovalores). Depois, é feito um histograma dessas energias, que é um tipo de contagem de estados em janelas de energia, ou seja: dividimos um dado intervalo de energias (por exemplo uma região de  $-6$  à  $6$ ) em pequenos intervalos (“janelinhas” de valor  $\Delta E = 0.1$ ) e contamos quantos daqueles autovalores caíam em cada “janelinha”. Feito isso, basta normalizar este histograma e tem-se a *DOS*. Em nossos cálculos, consideramos  $\nu = 0.5, 1, 2, 4, 8, 16, W = 1$ . Em nossos resultados para a *DOS* (fig.2.2), em linhas gerais, podemos detectar a largura do espectro, entretanto, não foi possível observar grandes diferenças no grau de rugosidade ao longo do espectro. Note que, quando fazemos  $\nu = 0.5$  o espectro de  $E$  fica contido aproximadamente no intervalo  $[-2, 6]$ . Quando escolhemos  $\nu = 16$  o espectro de  $E$  fica contido dentro do intervalo  $[-2, 2]$  (aproximadamente). Nossa conclusão deste resultado é que a medida que  $\nu$  cresce recuperamos a *DOS* de um modelo

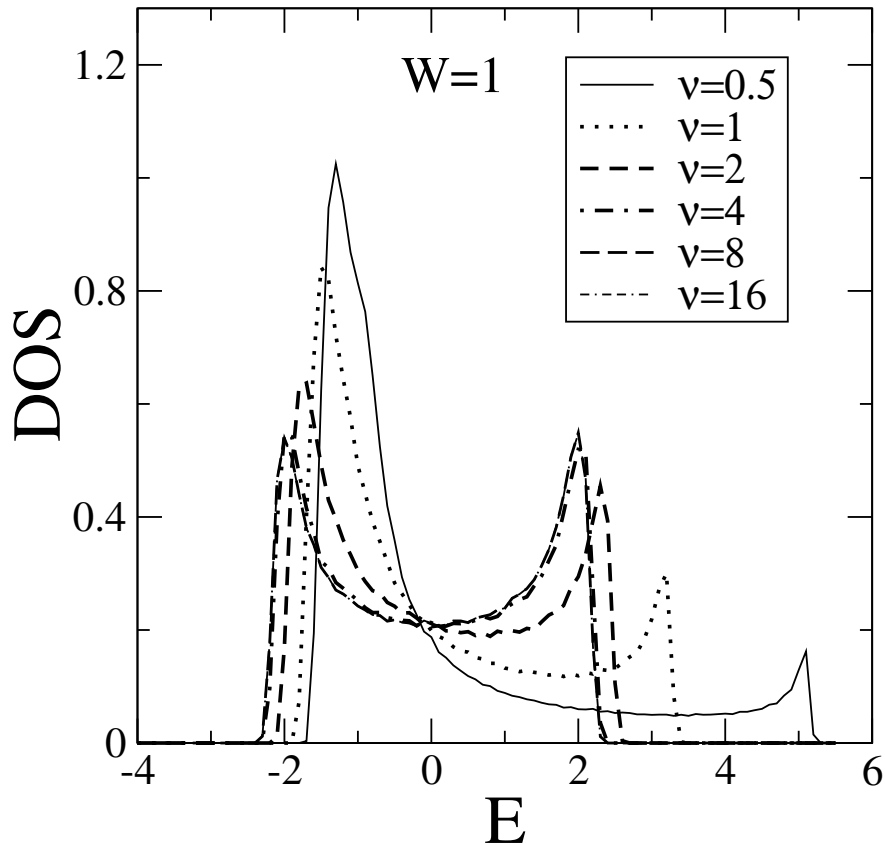


Figura 2.2: Densidade de Estados (DOS) *versus* Energia (E) para  $\nu=0.5,1,2,4,8,16$  e  $W = 1$

de Anderson tradicional com *hopping* de primeiros vizinhos. Em resumo, os resultados mostrados na fig.(2.2) indicam que, para  $\nu$  grande, isto é  $\nu \gg 1$ , o canal se torna uma cadeia unidimensional padrão com *hopping* de primeiros vizinhos; por outro lado, para pequenos valores de  $\nu$ , a *DOS* exibe um perfil assimétrico semelhante ao obtido em modelos com decaimento em lei de potência, nos termos de *hopping*.

Uma vez que compreendemos quais são os espectros de energias permitidos neste modelo, bem como sua dependência com o parâmetro  $\nu$  vamos agora mostrar nossos resultados à cerca da participação. A participação, definida na Eq.(2.5), é obtida para cada auto-estado (ou seja, cada auto-energia  $E_j$  terá sua participação  $P_j$ ). Um estudo mais detalhado acerca do comportamento da participação pode ser feito usando a chamada Participação Média ( $P(E)$ ). O cálculo desta grandeza pode ser feito através do seguinte procedimento: para um dado valor de  $N$  e  $\nu$  calculamos o conjunto de valores  $P_j$  (para  $j = 1, \dots, N$ ) associado com os respectivos autovalores  $E_j$  (para  $j = 1, \dots, N$ ). Para calcular a participação média é importante calcular o conjunto  $P_j$  para diversas amostras distintas (ou seja usar diversas médias  $M$ ); desta feita, a quantidade de dados então, será

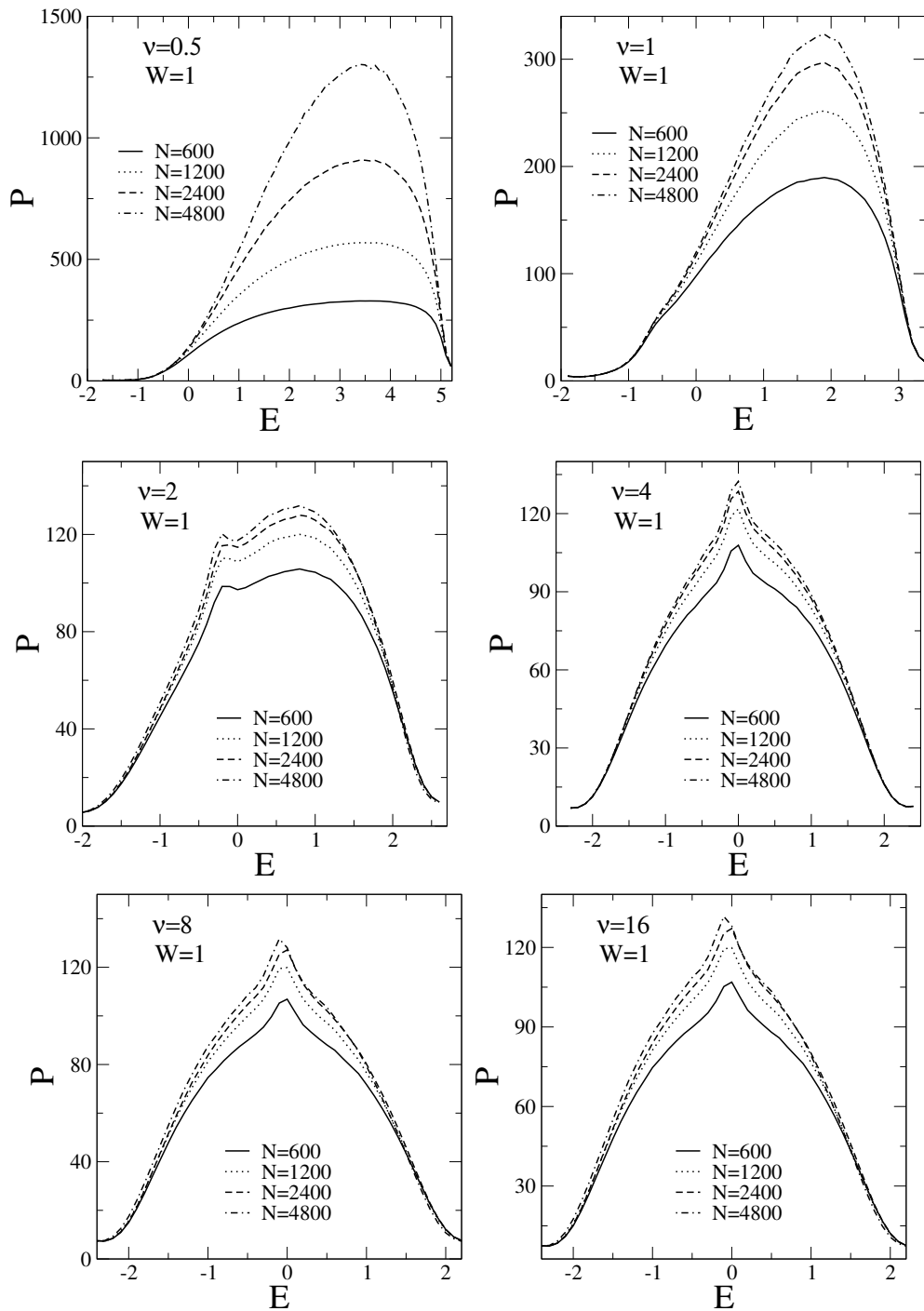


Figura 2.3: Número Médio de Participação ( $P(E)$ ) versus Energia ( $E$ ) Para  $\nu = 0.5, 1, 2, 4, 8$  e  $16$  Com  $W = 1$ .

um grande conjunto contendo  $N * M$  dados de  $P_j$ . A participação média é então calculada usando a seguinte fórmula(2.45):

$$P(E) = \sum_{|E-E_j| < \Delta E} \frac{P_j(E_j)}{N_E} \quad (2.45)$$

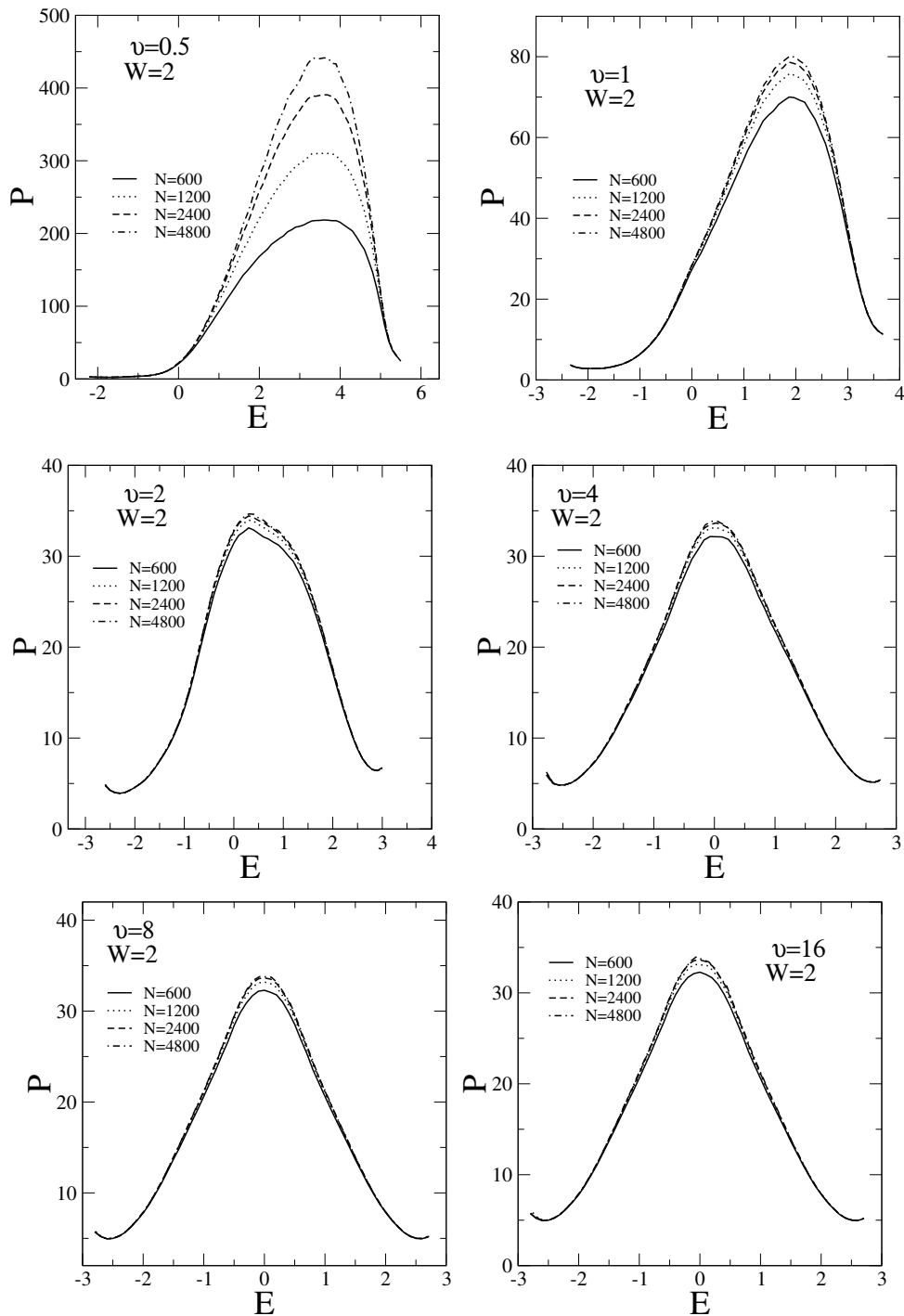


Figura 2.4: Número Médio de Participação ( $P(E)$ ) versus Energia ( $E$ ), para  $\nu = 0.5, 1, 2, 4, 8$  e  $16$  Com  $W = 2$ .

Em geral usamos  $\Delta E = 0.1$ , onde  $N_E$  é número de estados com energia entre  $E - \Delta E$  e  $E + \Delta E$ . Essa definição de  $P(E)$  representa o comportamento médio da participação para os auto-estados com energia em torno de uma energia  $E$ . A ideia é pegar uma dada “janelinha” de energia em torno de  $E$  e calcular a  $P(E)$  dos auto-estados que ficam nas

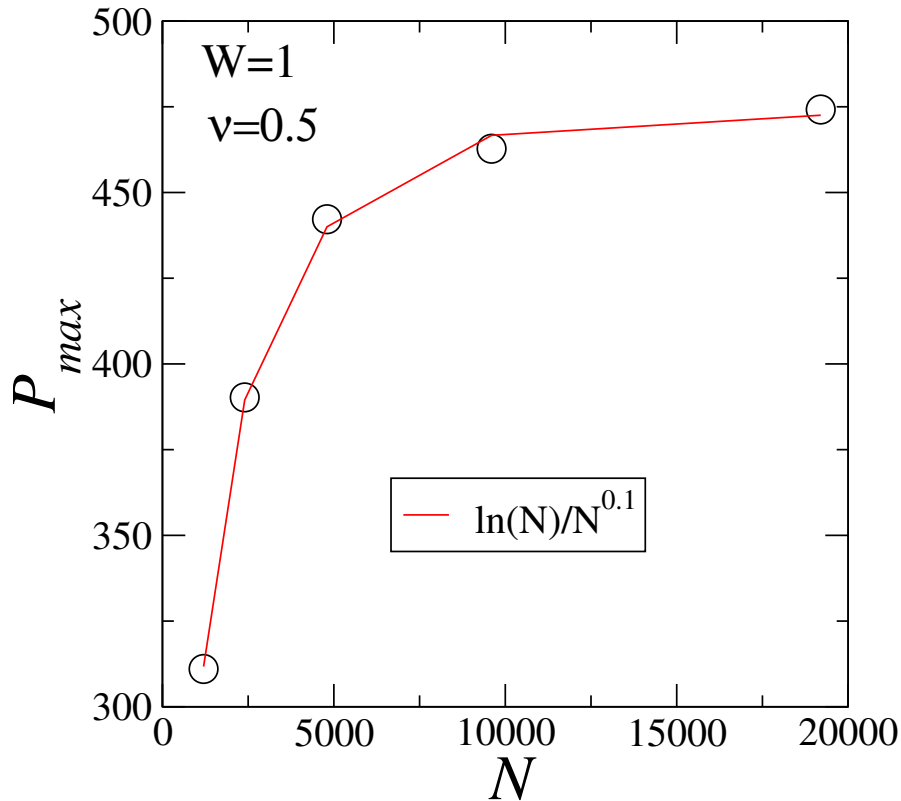


Figura 2.5: Participação Média Máxima ( $P_{max}$ ) versus  $N$  Para  $\nu = 0.5$  e  $W = 1$

proximidades. Isso é uma maneira de conhecermos efetivamente qual é o valor médio da participação em torno de uma dada energia. Fazer isso torna-se vantajoso, pois a medida calculada é uma função suave, além disso, torna a análise de escala mais simples. Nos experimentos computacionais, foi possível calcular o número de Participação sobre uma média de mais de 300 experimentos distintos de desordem.

Nossos cálculos foram feitos para  $N = 600, 1200, 2400, 4800$  com  $\nu = 0.5, 1, 2, 4, 8, 16$ ,  $W = 1$  (fig.2.3) e  $W = 2$  (fig.2.4),  $\epsilon_S = \epsilon_R = 0$  e  $g = 0.01$  (ver fig. (2.3)). A priori, nossos resultados sugerem que para  $\nu$  grande, o número de participação exibe um comportamento semelhante ao observado em modelos desordenados de um elétron em um sistema unidimensional, ou seja, apresentam resultados compatíveis com a teoria de localização de Anderson [8]. Nesta situação, onde  $\nu$  é grande, podemos observar que  $P(E)$  tem uma dependência com  $N$  bem fraca (é praticamente independente de  $N$ ). Este resultado ( $P(E) \propto N^0$ ) é uma clara assinatura da localização de Anderson em sistemas desordenados de baixa dimensionalidade. No limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ) o sistema tem estados com comprimento de localização finito, ou seja, estados localizados. No entanto, para  $\nu$  pequeno ( $\nu = 0.5, 1.0$ ), podemos observar que o número de Participação, além de

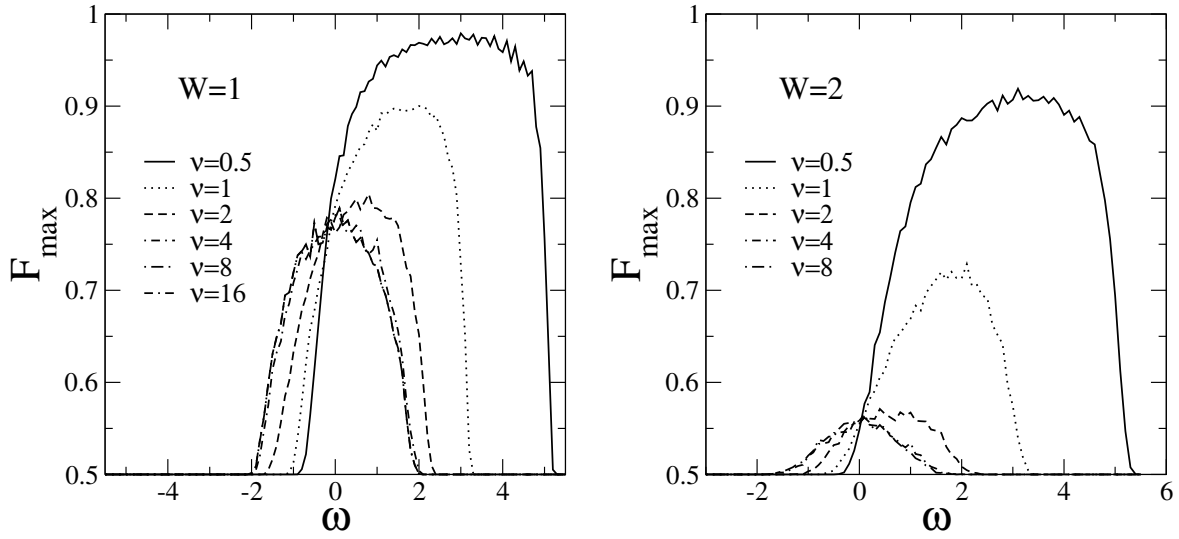


Figura 2.6: Fidelidade Máxima *versus* Energia na Fonte e no Receptor ( $\omega$ ) para  $N = 100$ , com  $\nu = 0.5, 1, 2, 4, 8$  e  $g = 0.01$

apresentar agora um perfil assimétrico, também se torna um pouco mais dependente de  $N$ . Podemos analisar, por exemplo, para  $W = 1$ , a região de energias em torno de  $E = 3.5$  (observando o caso  $\nu = 0.5$  por exemplo). Podemos observar que  $P(E)$  cresce a medida que  $N$  cresce. Este resultado claro, tem que ser avaliado com certos cuidados. O crescimento de  $P(E)$  para alguns tamanhos, em geral, não é conclusivo acerca da natureza dos auto-estados. Ou seja, este crescimento observado não é um diagnóstico definitivo acerca da natureza (estendida ou localizada) dos estados em torno de  $E = 3.5$ . Para fazer este diagnóstico e classificar os estados de forma correta é necessário fazer um estudo mais detalhado. Uma avaliação inicial deste comportamento pode ser feita através da análise de tamanho finito de  $P(E)$  em torno de  $E = 3.5$  (ou seja, vamos focar na dependência da participação máxima ( $P_{max} = P(E \approx 3.5)$ ) com o tamanho da cadeia). Esta análise foi feita considerando, inclusive tamanhos maiores do que os tamanhos usados na figura (2.3). A figura (2.5) mostra nossa análise considerando  $N = 600$  até 19200. Para obter esta figura fizemos uma diagonalização parcial do Hamiltoniano do canal em torno de  $E = 3.5$ . O procedimento de diagonalização parcial foi interessante, pois apressou o cálculo e também possibilitou chegar em tamanhos maiores. Usamos o pacote de álgebra linear (LAPACK) para fazer esta diagonalização parcial. Dentro de nossos cálculos podemos ver, por meio da fig. (2.5), que a participação máxima cresce com  $N$  seguindo a tendência  $P_{max} \approx \log(N)/N^{0.1}$ . Com base nesta análise, podemos concluir que este

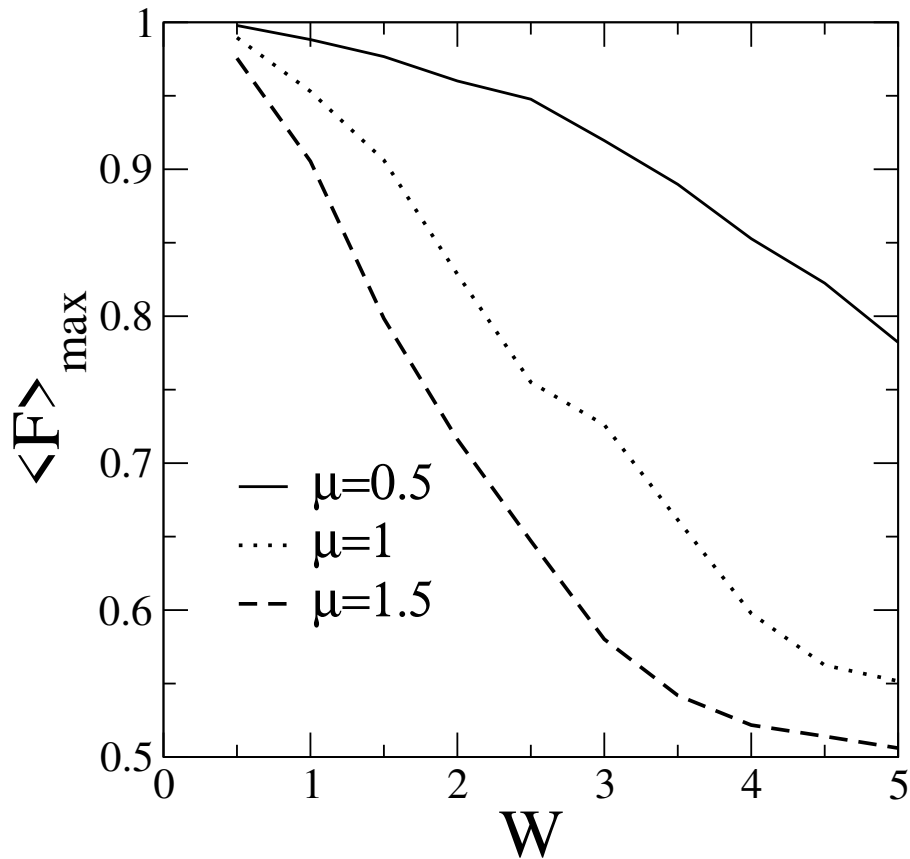


Figura 2.7: Máximo Valor de Fidelidade para cada valor de desordem  $W$ .

modelo não contém estados estendidos no limite termodinâmico. Nossa análise revela que, devido ao efeito do decaimento exponencial do *hopping* no limite de  $\nu$  pequeno, o número de participação exibe um pequeno aumento, indicando um enfraquecimento da localização. Entretanto, no limite termodinâmico  $P_{max}/N$  tende a zero quando  $N \rightarrow \infty$ . Este comportamento é uma clara assinatura de estados localizados. Entretanto, o comprimento de localização cresce se comparado com o caso com *hopping* de primeiros vizinhos. Este crescimento, mesmo que lento, pode ser relevante dentro do contexto de transferência de estados quânticos.

Uma vez que entendemos as propriedades de localização do canal desordenado com *hopping* exponencial vamos iniciar nossos estudos acerca da Transferência de Estados Quânticos. Salientamos novamente que a Fidelidade é calculada através da evolução temporal do pacote de onda inicialmente localizado no site  $S$  ( $n = 1$ ). A fidelidade máxima é então obtida para tempos longo utilizando a intensidade da função de onda no sítio  $R$ . Na fig. (2.6), mostramos nossos resultados para a fidelidade máxima  $F_{max}$  versus  $\omega$  (lembrando que  $\omega$  é a energia dos sítios  $S$  e  $R$ ). Os cálculos foram feitos considerando

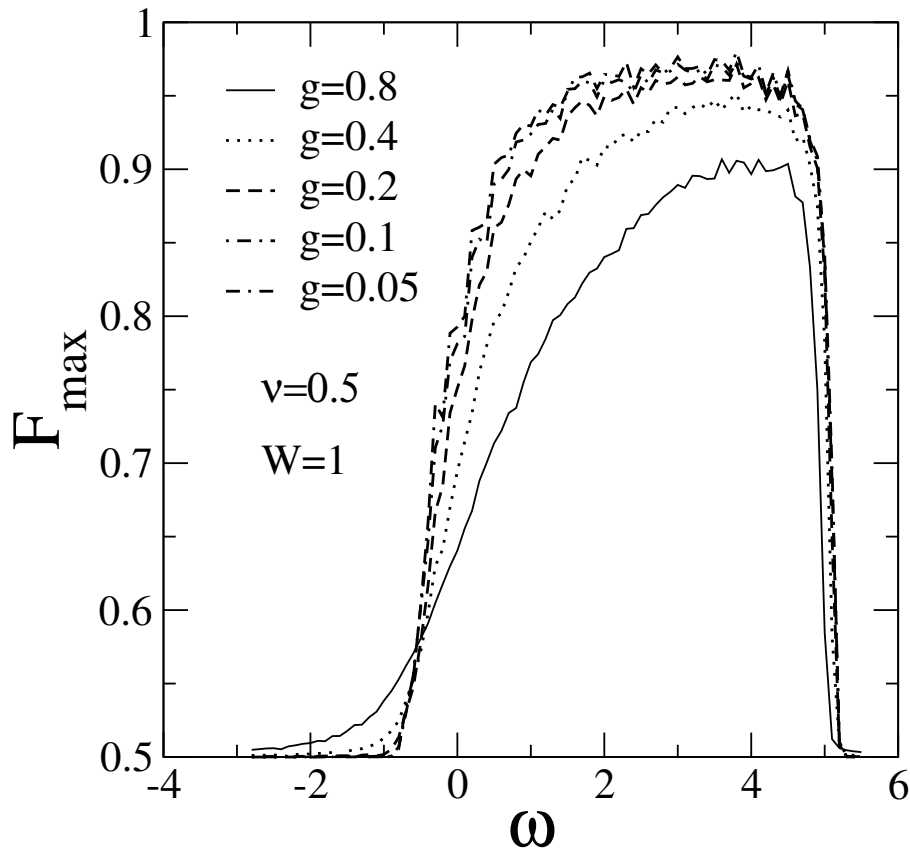


Figura 2.8: Fidelidade Máxima *versus* Energia na Fonte e no Receptor ( $\omega$ ) para  $N = 100$ ,  $W = 1$ ,  $\nu = 0.5$  e  $g = 0.8, 0.4, 0.2, 0.1, 0.05$

$N = 100$ ,  $g = 0.01$ ,  $\nu = 0.5, 1, 2, 4, 8$ ,  $W = 1$  e  $W = 2$ . Nossos cálculos indicam que para  $\nu$  grande, a transferência de estados quânticos ao longo deste canal está completamente ausente. A fidelidade máxima é apenas um pouco maior que 0.5, indicando a ausência total de *TEQ*. Para  $\nu$  com valores em torno de 0.5 e 1, nossos cálculos indicam  $F_{max} \geq 0,9$  em torno de  $\omega \approx 3,5$ . Este resultado sugere a possibilidade de transferência de estado quântico dentro desta região. Podemos observar que nesta região de energias ( $E \approx 3.5$ ) e  $\nu \leq 1$ , nossos cálculos da participação média indicaram um aumento do número de participação em torno desta mesma energia ( $\omega \approx 3,5$ ). Ou seja, esta região do espectro onde o sistema apresenta grau de localização um pouco mais fraco também apresenta uma *TEQ* com boa fidelidade. Observamos também que este resultado foi obtido na região de desordem fraca ( $W = 1$  e  $2$ ). Para desordem forte ( $W \gg 1$ ), a fidelidade máxima obtida foi baixa. Na figura 2.7 nós tratamos a máxima fidelidade ao longo da banda  $\langle F \rangle_{max}$  versus  $W$  para  $\nu = 0.5, 1, 1.5$ . A quantidade  $\langle F \rangle_{max}$  foi calculada da seguinte forma: Para cada valor de  $\nu$  e  $W$  calculamos a curva  $F_{max} \times \omega$ . O valor  $\langle F \rangle_{max}$  corresponde



ao máximo valor de  $F_{max}$  dentro os valores de  $\omega$  utilizados. Podemos observar que para  $W \leq 1.5$  a fidelidade tem valores próximos de 0.9 (boa fidelidade). Para  $W \gg 1$  a fidelidade cai bastante impossibilitando a Transferência de Estados Quânticos (*TEQ*). Uma última análise que precisamos apresentar tem relação com o acoplamento entre a fonte  $S$  e o receptor  $R$  e o canal (ou seja, o valor de  $g$ ). Na figura 2.8 temos o gráfico da fidelidade máxima ( $F_{max}$ ) versus  $\omega$  para  $\nu = 0.5$ ,  $W = 1$  e diversos valores de  $g$ . Podemos observar claramente que a medida que crescemos o valor de  $g$  a fidelidade tende a diminuir. Este resultado está em boa concordância com os resultados obtidos nas referências [24,33]. O crescimento de  $g$  de fato dificulta o protocolo de transferência de estados entre  $S$  e  $R$  pois efetivamente acaba misturando os estados em  $S$  e  $R$  com os estados no canal [24].

Estes resultados sugerem que canais com termos de *hopping* típicos de longo alcance, mesmo contendo decaimento exponencial, podem apresentar transporte de estados quânticos com boa fidelidade. A grande dificuldade neste protocolo de transferência de estados quânticos é a sensibilidade para a desordem. Em nossos resultados observamos que para valores de desordem  $W$  pequenos (ou seja, bem menores que a largura típica de banda ) o sistema pode ter fidelidade próxima de 0.9 (boa transferência); entretanto, para desordem intermediária ou forte a fidelidade cai absurdamente.

# Capítulo 3

## Conclusão e Perspectivas

Nesta dissertação, nosso principal objetivo foi analisar a eficiência da Transferência de Estados Quânticos (*TEQ*) em um sistema desordenado com *hopping* decaindo exponencialmente. Para isso, consideramos um sistema unidimensional constituído por um total de  $N + 2$  átomos. Em nossa abordagem, temos uma fonte  $S$  e um receptor  $R$  acoplados por um canal com  $N$  átomos. O canal possui uma distribuição de desordem diagonal não correlacionada, como mostra a Eq.(2.4), e um decaimento exponencial nos termos de *hopping*, definido pela Eq.(2.3). Utilizamos o método de diagonalização exata para diagonalizar o Hamiltoniano (2.2) e calculamos: Densidade de Estados ( $DOS$ ), Número Médios de Participação ( $P_E$ ), Participação Média Máxima ( $P_{max}$ ), Fidelidade Máxima ( $F_{max}$ ) e Máximo Valor de Fidelidade ( $\langle F \rangle_{max}$ ).

Em nossos resultados para a  $DOS$  (fig.2.2) foi possível detectar a largura do espectro. Entretanto, não foi possível observar grandes diferenças no grau de rugosidade ao longo do espectro (ou seja, não foi possível detectar estados localizados e/ou estendidos no canal usando o cálculo da  $DOS$ ). Nossa conclusão deste resultado é que a medida que  $\nu$  cresce recuperamos a  $DOS$  de um modelo de Anderson tradicional com *hopping* de primeiros vizinhos. Por outro lado, para  $\nu$  pequeno, a  $DOS$  exibe um perfil assimétrico semelhante ao obtido em modelos com decaimento em lei de potência nos termos de *hopping* [16, 34]. Nossos resultados para a participação sugerem que para  $\nu$  grande, o número de participação exibe um comportamento semelhante ao observado em modelos desordenados de um elétrons em um sistema unidimensional. Ou seja, para  $\nu$  grande, nossos resultados indicam que os auto-estados são localizados seguindo uma tendência semelhante aos resultados encontrados dentro do formalismo proposto por Anderson [3, 8]. Para  $\nu$  pe-

queno, concluímos que o número de participação apresentou um perfil mais assimétrico, e mostrou-se mais dependente de  $N$  (cresce a medida que  $N$  cresce). Esse crescimento não é algo 100% conclusivo sobre a natureza dos estados serem ou não estendidos, ou localizados em torno de uma determinada energia (em nosso caso ( $E = 3.5$ )). Para isso, fizemos a medida de  $P_{max}$  (fig.(2.5)), dentro dos nossos cálculos, houve um crescimento da participação máxima da forma:  $P_{max} \approx \log(N)/N^{0.1}$ . E assim, concluímos que este modelo não contém estados estendidos no limite termodinâmico. Devido ao efeito de decaimento exponencial no limite de  $\nu$  pequeno o número de participação exibiu um pequeno aumento indicando um enfraquecimento da localização. Mas no limite termodinâmico,  $P_{max}/N$  tende a zero quando  $N \rightarrow \infty$  logo, este comportamento sugere que os estados sejam localizados. Entretanto, apesar dos estados serem de fato localizados, podemos observar que, para desordem fraca e decaimento exponencial lendo no termo de hopping, o comprimento de localização apresentou um pequeno crescimento. Este crescimento favoreceu a transferência de estados quânticos em sistemas com dimensões próximas do comprimento de localização.

No cálculo da fidelidade (fig.(2.6)), concluímos que para  $\nu$  grande a *TEQ* através do canal está completamente ausente, no entanto, para  $\nu$  com valores em torno de 0.5 e 1.0, nossos cálculos indicaram  $F_{max} \geq 0.9$  para energias em torno de  $\omega \approx 3, 5$ ; este resultado nos diz que existe *TEQ* dentro desta região. Por fim, na fig(2.7) avaliamos a dependência desta fenomenologia de *TEQ* com a intensidade  $W$  da desordem. Calculamos a máxima fidelidade dentro da banda em função de  $W$ . Nossos resultados indicam que para  $W \leq 1.5$  a fidelidade máxima possível teve um valor próximo de 0.9 (que indica uma boa *TEQ*); por outro lado, para  $W \gg 1$  a fidelidade cai bastante, impossibilitando a *TEQ* ao longo do canal.

Em linhas gerais, nossos resultados indicam que, para desordem próxima do *hopping* de primeiros vizinhos do canal, é possível ter uma boa fidelidade no processo de transferência se o decaimento exponencial for bem fraco. Nossos resultados indicam que modelos com *hopping* de longo alcance e/ou *hopping* maiores do que primeiros vizinhos, podem ser bons candidatos para experimentos/protocolos de transferência de estados quânticos, em sistemas com fraca desordem. Um ponto relevante dentro das perspectivas para esta modelagem é entender o papel de correlações na desordem e sua co-existência com *hopping* de longo alcance. Outro aspecto relevante é entender o papel da dimensionalidade do

canal.

# Referências Bibliográficas

- [1] E. Abrahams, P. Anderson, D. Licciardello, and T. Ramakrishnan, “Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions,” *Physical Review Letters*, vol. 42, no. 10, p. 673, 1979.
- [2] R. Dalven, *Introduction to applied solid state physics: topics in the applications of semiconductors, superconductors, ferromagnetism, and the nonlinear optical properties of solids*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [3] P. W. Anderson, “Absence of diffusion in certain random lattices,” *Physical review*, vol. 109, no. 5, p. 1492, 1958.
- [4] R. Zallen, *The physics of amorphous solids*. John Wiley & Sons, 2008.
- [5] D. J. GRIFFITHS, *Mecânica Quântica*, vol. único. Pearson Universidade; 2<sup>a</sup> edição, 2011.
- [6] I. Lifshitz, S. Gredeskul, and L. Pastur, “Introduction to the theory of disordered systems, wiley,” *New York*, 1988.
- [7] B. Kramer and A. MacKinnon, “Localization: theory and experiment,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 56, no. 12, p. 1469, 1993.
- [8] F. A. B. F. de Moura, “Transição metal-isolante em cadeias com desordem correlacionada,” Master’s thesis, Universidade Federal de Alagoas, Instituto de Física, Curso de Pós-Graduação em Física, Maceió, 1999.
- [9] F. A. B. F. de Moura, *Transição de Anderson em sistemas de baixa dimensionalidade com desordem correlacionada*. PhD thesis, Universidade Federal de Alagoas, Instituto de Física, Curso de Pós-Graduação em Física, Maceió, 2003.

- [10] C. V. C. Mendes, “Caminhada e transferência de estados quânticos em meios desordenados,” 2021.
- [11] A. Rodríguez, V. Malyshev, G. Sierra, M. Martín-Delgado, J. Rodríguez-Laguna, and F. Domínguez-Adame, “Anderson transition in low-dimensional disordered systems driven by long-range nonrandom hopping,” *Physical review letters*, vol. 90, no. 2, p. 027404, 2003.
- [12] A. Malyshev, V. Malyshev, and F. Domínguez-Adame, “Monitoring the localization-delocalization transition within a one-dimensional model with nonrandom long-range interaction,” *Physical Review B*, vol. 70, no. 17, p. 172202, 2004.
- [13] A. Malyshev, V. Malyshev, F. Dominguez-Adame, and A. Rodriguez, “Universal parameter at the anderson transition on a one-dimensional lattice with non-random long-range coupling,” *Journal of luminescence*, vol. 108, no. 1-4, pp. 269–272, 2004.
- [14] B. Santos, L. Viana, M. L. Lyra, and F. A. B. F. de Moura, “Diffusive, super-diffusive and ballistic transport in the long-range correlated 1d anderson model,” *Solid state communications*, vol. 138, no. 12, pp. 585–589, 2006.
- [15] G. M. A. Almeida, F. A. B. F. de Moura, and M. L. Lyra, “Quantum-state transfer through long-range correlated disordered channels,” *Physics Letters A*, vol. 382, no. 20, pp. 1335–1340, 2018.
- [16] F. A. B. F. de Moura, A. Malyshev, M. L. Lyra, V. Malyshev, and F. Domínguez-Adame, “Localization properties of a one-dimensional tight-binding model with nonrandom long-range intersite interactions,” *Physical Review B*, vol. 71, no. 17, p. 174203, 2005.
- [17] E. Hückel and P. Debye, “The theory of electrolytes: I. lowering of freezing point and related phenomena,” *Phys. Z*, vol. 24, no. 185-206, p. 1, 1923.
- [18] D. Escande, F. Doveil, and Y. Elskens, “N-body description of debye shielding and landau damping,” *Plasma Physics and Controlled Fusion*, vol. 58, no. 1, p. 014040, 2015.
- [19] J. Fuhr, V. Ponce, F. G. de Abajo, and P. Echenique, “Dynamic screening of fast ions moving in solids,” *Physical Review B*, vol. 57, no. 15, p. 9329, 1998.

- [20] S. Bose, “Quantum communication through an unmodulated spin chain,” *Physical review letters*, vol. 91, no. 20, p. 207901, 2003.
- [21] Y. Matsuzaki, V. M. Bastidas, Y. Takeuchi, W. J. Munro, and S. Saito, “One-way transfer of quantum states via decoherence,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 89, no. 4, p. 044003, 2020.
- [22] S. Hermes, T. J. Apollaro, S. Paganelli, and T. Macrì, “Dimensionality-enhanced quantum state transfer in long-range-interacting spin systems,” *Physical Review A*, vol. 101, no. 5, p. 053607, 2020.
- [23] G. Gualdi, V. Kostak, I. Marzoli, and P. Tombesi, “Perfect state transfer in long-range interacting spin chains,” *Physical Review A*, vol. 78, no. 2, p. 022325, 2008.
- [24] “Transmissão de estados quânticos através de canais desordenados com defeitos dimerizados,” *Quantum Information Processing*, vol. 18.
- [25] T. J. Apollaro, G. M. A. Almeida, S. Lorenzo, A. Ferraro, and S. Paganelli, “Spin chains for two-qubit teleportation,” *Physical Review A*, vol. 100, no. 5, p. 052308, 2019.
- [26] F.-H. Ren, Z.-M. Wang, and Y.-J. Gu, “Quantum state transfer through a spin chain in two non-markovian baths,” *Quantum Information Processing*, vol. 18, no. 6, pp. 1–11, 2019.
- [27] D. Wanisch and S. Fritzsche, “Driven spin chains as high-quality quantum routers,” *Physical Review A*, vol. 102, no. 3, p. 032624, 2020.
- [28] A. Kay, “Perfect, efficient, state transfer and its application as a constructive tool,” *International Journal of Quantum Information*, vol. 8, no. 04, pp. 641–676, 2010.
- [29] S. Lorenzo, T. J. Apollaro, A. Trombettoni, and S. Paganelli, “2-qubit quantum state transfer in spin chains and cold atoms with weak links,” *International Journal of Quantum Information*, vol. 15, no. 05, p. 1750037, 2017.
- [30] F. M. D’Angelis, F. A. Pinheiro, D. Guéry-Odelin, S. Longhi, and F. Impens, “Fast and robust quantum state transfer in a topological su-schrieffer-heeger chain

- with next-to-nearest-neighbor interactions,” *Physical Review Research*, vol. 2, no. 3, p. 033475, 2020.
- [31] G. M. A. Almeida, F. A. B. F. de Moura, T. J. Apollaro, and M. L. Lyra, “Disorder-assisted distribution of entanglement in x y spin chains,” *Physical Review A*, vol. 96, no. 3, p. 032315, 2017.
- [32] D. Nunes, A. R. Neto, and F. A. B. F. de Moura, “Coherent magnon dynamics in ferromagnetic models with nonuniform magnetic field and correlated disorder,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 410, pp. 165–170, 2016.
- [33] G. M. A. Almeida, C. Mendes, M. L. Lyra, and F. A. B. F. de Moura, “Localization properties and high-fidelity state transfer in hopping models with correlated disorder,” *Annals of Physics*, vol. 398, pp. 180–189, 2018.
- [34] F. A. B. F. d. Moura, A. Malyshev, M. L. Lyra, V. Malyshev, and F. Dominguez-Adame, “Inhomogeneous, disordered, and partially ordered systems-localization properties of a one-dimensional tight-binding model with nonrandom long-range intersite interactions,” *Physical Review-Section B-Condensed Matter*, vol. 71, no. 17, pp. 174203–174203, 2005.