

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS  
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

CÁSSIO MACÊDO MACIEL

**CAMINHADAS QUÂNTICAS DE TEMPO CONTÍNUO: UM  
TRATAMENTO NA REDE DENDRÍMERO MODIFICADO**

Manaus - AM  
2018

Suporte Financeiro:



**CÁSSIO MACÊDO MACIEL**

**CAMINHADAS QUÂNTICAS DE TEMPO CONTÍNUO: UM  
TRATAMENTO NA REDE DENDRÍMERO MODIFICADO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Amazonas (UFAM) como quesito necessário para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Mircea Daniel Galiceanu

Manaus - AM  
Fevereiro, 2018

© *Todos os direitos autorais reservados.*

## Ficha Catalográfica

Ficha catalográfica elaborada automaticamente de acordo com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

M152c Maciel, Cássio Macêdo  
Caminhadas Quânticas de Tempo Contínuo: Um Tratamento na Rede Dendrímico Modificado / Cássio Macêdo Maciel. 2018  
78 f.: il. color; 31 cm.

Orientador: Mircea Daniel Galiceanu  
Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal do Amazonas.

1. Caminhadas Quânticas. 2. Caminhadas Quânticas de Tempo Contínuo. 3. Dendrímico. 4. Spidernets. I. Galiceanu, Mircea Daniel II. Universidade Federal do Amazonas III. Título

---

CÁSSIO MACÊDO MACIEL

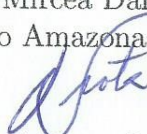
**CAMINHADAS QUÂNTICAS DE TEMPO CONTÍNUO: UM  
TRATAMENTO NA REDE DENDRÍMERO MODIFICADO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Amazonas (UFAM) como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física avaliada pela Comissão Julgadora composta pelos membros:

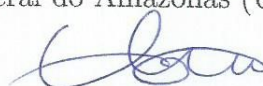
COMISSÃO JULGADORA



Professor Dr. Mircea Daniel Galiceanu  
Universidade Federal do Amazonas (UFAM) - Presidente



Professor Dr. Hidembergue Ordozgoith da Frota  
Universidade Federal do Amazonas (UFAM)- Membro



Professor Dr. Octavio Daniel Rodriguez Salmon  
Universidade Federal do Amazonas (UFAM)- Membro

Aprovado em 16 de Fevereiro de 2018.

Local da defesa: Auditório Prof. José Leitão, Bloco do Departamento de Física, Setor Norte, *Campus* da Universidade Federal do Amazonas - Manaus.

*Ao meu pai e minha mãe, com amor.*

---

# AGRADECIMENTOS

---

À Deus Pai, que possibilitou a realização deste trabalho.

Ao Professor Dr. Mircea Daniel Galiceanu, pela valiosa orientação neste trabalho, assim como, pela atenção e dedicação exemplares. E também, agradeço os Professores Octavio Rodriguez, Hidembergue Frota e Igor Padilha, por todo conhecimento compartilhado; e expresso meu obrigado a todos os demais professores do Departamento de Física.

Aos meus familiares por tudo, em especial:

Aos meus pais: **Carlos Jorge F. Maciel** e **Rosângela M. Maciel**, por todo Amor, pelos conselhos e motivações, carinho, confiança e ajuda incondicional.

Aos meus irmãos: **Carlos César M. Maciel** e **Kelly M. Maciel**, pelas discussões científicas, pelo Amor, companhia, gargalhadas, fé e por sempre acreditarem em um futuro melhor para nossa família.

Aos meus avós paternos (*in memoriam*): **Sulpício da S. Maciel** e **Ana F. Maciel**, pelo Amor concedido a todos os filhos e netos, que desde a infância moldou-nos o caráter e a coragem de seguir em frente, por mais custosa que seja a vida.

Aos meus tios: Eudes Maciel, Marcele Sousa e Rosiney Macêdo, pelo generoso acolhimento, confiança e por todas as risadas e descontrações. Deus os colocou em meu caminho, espero um dia poder lhes dar em dobro tudo aquilo feito, de coração, para o meu benefício.

Meus sinceros agradecimentos aos amigos da Pós: Adriane Reis, Adriano Carolino, Joziano Miranda (“O Chefe”), Henrique Pecinato, Douglas Gonçalves, Marcos Kelvin, Paola Araújo, Cláudio Natálio, Paulo Roberto, Ítalo Serrão e à todos os demais que também escolheram esse caminho.

Aos amigos que sempre lembrarei, apesar do convívio habitual ter mudado: Paloma Brito (“Palominha”), Maurício Mesquita, João do Nascimento e Caio Monteiro, agradeço pela companhia e amizade, desde o início desta longa jornada. Obrigado.

Em especial, quero agradecer a Rosilene Reis (“Luh”), por sempre acreditar que poderia alcançar meus objetivos, pela companhia encantadora e amizade verdadeira. Você, Luh, com essa coragem e fé imensas, também motivou que eu seguisse firme nesta pesquisa. Muito Obrigado!

Agradeço a CAPES, pelo auxílio financeiro e a Instituição pela infra estrutura na qual foi de grande importância no desenvolver dessa pesquisa.

---

---

# RESUMO

---

As Caminhadas Aleatórias encontram, em diversas áreas da ciência, uma gama de problemas em que podem ser aplicadas. Elas servem como base para a modelagem de variados fenômenos aleatórios que ocorrem no mundo real. Em 1993, Aharonov *et al.* propuseram um modelo quântico para tais caminhadas, as chamadas *Caminhadas Quânticas de Tempo Discreto*, ou *Modelo de Moeda*, pois a dinâmica quântica nesta abordagem requer a introdução de um grau de liberdade interno (*coin*), que serve de orientação para a caminhada. Outra forma de encarar o problema foi proposta em 1998 por Farhi e Gutmann, as chamadas *Caminhadas Quânticas de Tempo Contínuo* (CTQW, sigla do inglês). Neste modelo o tempo é considerado como uma variável contínua, apesar da caminhada ocorrer em um espaço de posição discreto.

Nosso trabalho tem como foco o modelo de tempo contínuo (CTQW), aplicado na rede do tipo Dendrímero (ou Árvores de Cayley), feita algumas modificações; ou seja, através de um parâmetro de probabilidade  $p$ , iremos adicionar novas ligações entre os nós de mesma geração. As novas estruturas que surgirão serão chamadas de Dendrímeros Modificados ou Redes Teia-de-aranha Modificadas (*Spidernets*). Nosso objetivo é conhecer o comportamento do transporte quântico nestas novas estruturas. Para isso, iremos medir a eficiência no transporte quântico nestas redes através das probabilidades de retorno exatas e suas médias. Ao fazê-lo, observamos um aumento na eficiência quântica e observamos que, para quase todos os números de geração, seu maior valor é encontrado para  $p \approx 0.9$ .

Palavras-chave: **Caminhadas Quânticas. Caminhadas Quânticas de Tempo Contínuo. Dendrímero. Spidernets.**

---

---

# ABSTRACT

---

Quantum Random Walks find, in various areas of science, a range of problems in which they can be applied. They establish the basis for modeling different random phenomena that occur in the real world. In 1993, Aharonov *et al.* propose a model for these quantum walks, the so-called *Discrete Quantum Random Walks*, or *Coin Model*, due to the fact that the dynamics in this framework requires the introduction of an internal degree of freedom (*coin*), which serves as orientation parameter for the walk. Another way of dealing with the problem was proposed by Farhi and Gutmann in 1998, the so-called *Continuous-time Quantum Walks* (CTQW, in English). In this model the time is considered as a continuous variable, although the walk occurs in the discrete position space.

In our work we focus on the continuous-time model (CTQW), applied to dendrimers (or Cayley tree), with some modifications; more precisely, by using a probability parameter  $p$ , we add new links between nodes from the same generation. The newly created networks will be called Modified Dendrimers or Modified Spiderweb Networks (*Spidernets*). Our main interest is to study the quantum transport on these new networks. To do this, we will calculate the efficiency of quantum transport on these networks using the exact quantum probabilities to return and their averages. By doing this, we notice an increase of the quantum efficiency and we observe that for almost all the generation numbers the maximum value is encountered for  $p \approx 0.9$ .

Keywords: **Quantum Walks. Continuous-time Quantum Walks. Dendrimer. Spidernets.**



---

# LISTA DE FIGURAS

---

1.1	Ilustração dos cinco primeiros passos de um caminhante (esfera em cor preta) clássico e quântico em uma rede. Observamos que para o caso clássico a trajetória seguida pelo caminhante é bem definida. Já no caso quântico, devido ao comportamento ondulatório, o que temos é um espalhamento do caminhante por toda a rede. . . . .	1
1.2	Representação esquemática da evolução de um passo de uma caminhada quântica de tempo discreto em um grafo. (a) representa o estado do sistema no passo de tempo $n$ e dado por $ \Psi_n\rangle =  \sigma_1\rangle_C \otimes  v_0\rangle_P$ , onde o conjunto de estados $\{ \sigma_i\rangle_C\}$ descrevem os graus de liberdade interno do sistema e constituem uma base para $\mathcal{H}_C$ , e $\{ v_i\rangle_P\}$ descrevem as posições dos vértices e formam uma base para $\mathcal{H}_P$ . (b) representa a ação do operador moeda, $C$ , sobre os estados associados ao subespaço vetorial $\mathcal{H}_C$ , cujo resultado é $C \sigma_1\rangle_C = \sum_{i=1}^4 c_i  \sigma_i\rangle_C$ , tal que $\sum_{i=1}^4  c_i ^2 = 1$ . (c) representa o estado do sistema no passo de tempo $n + 1$ , após a ação do operador posição $S$ , isto é, $ \Psi_{n+1}\rangle = S((C \sigma_1\rangle_C) \otimes  v_0\rangle_P) = \sum_{i=1}^4 c_i  \sigma_i\rangle_C \otimes  v_i\rangle_P$ . Figura adaptada. . . . .	2
2.1	Exemplo de estrutura que apresenta características de árvore. Em (a) temos a rede aranjada de forma aleatória, com os nós em diferentes posições. Ao olharmos para (b) percebemos que, ao organizarmos as posições dos nós, a estrutura exibe ainda mais a característica de árvore, com um nó raiz acima e as folhas abaixo, representadas pelos vértices em amarelo. Figura adaptada. . . . .	4
2.2	<i>Árvore de Cayley</i> ou rede do tipo Dendrímero. Esta imagem ilustra a característica do tipo árvore de nossa rede, que será objeto de estudo neste trabalho. As linhas pontilhadas demarcam as gerações da rede, nas quais novos vértices são adicionados; sempre seguindo a regra de três ligações para cada novo nó, exceto para os da última geração, que possuem apenas uma. . . . .	5
2.3	Um parque na cidade de Königsberg (atual Kalinigrado), 1736. Este esquema das pontes serviu para Leonhard Euler desenvolver a teoria que hoje conhecemos como <i>Teoria dos Grafos</i> . . . . .	6
2.4	O grafo do problema das Pontes de Königsberg. . . . .	6
2.5	Exemplo de grafo com número de vértices igual a $V = 5$ e arestas igual a $X = 7$ . . . . .	7
2.6	Utilizamos a Fig. 2.1 (a) como exemplo para a construção da matriz de adjacência. Cada vértice recebe uma identificação, desta forma, os elementos $A_{ij}$ da matriz podem ser definidos. Não utilizamos vértices com auto-ligação, apenas vértices com ligações diretas a seus vizinhos mais próximos. . . . .	8
2.7	Quantidade física que se desloca entre as ligações existentes na rede, indo de um vértice para outro, como em um processo de difusão. Os vértices representam os estados $\psi$ 's em que se encontra esta quantidade e as setas a sua direção de propagação. . . . .	10

2.8	Representação de uma rede dendrímero com funcionalidade $f_D = 3$ . A partir de um nó central (1) três ligações são adicionadas, dando origem a 3 novos nós que correspondem à primeira geração ( $g = 1$ ). Seguindo a regra explicada nesta seção, a rede pode ser aumentada até a geração desejada. As linhas pontilhadas demarcam as gerações da rede. . . . .	13
2.9	Em (a) temos uma rede dendrímero puro de geração dois. Seguindo um certo parâmetro de probabilidade $p$ , novas ligações são adicionadas entre nós de mesma geração. Em (b) podemos ver a rede para qual $p = 0.4$ , ou seja, há novas ligações; esta rede será chamada de rede dendrímero modificado ou <i>spidernet</i> . Esta é uma possível representação, há outras, óbvio. . . . .	14
3.1	Exemplificação de uma possível caminhada aleatória clássica dada em cinco passos. A cada sorteio da face de uma moeda o caminhante é levado a dar um passo para a direita ou esquerda, com igual probabilidade. A contagem para os passos de tempo $t$ está representada à direita da figura. Para um grande número de passos o caminhante terá elevada probabilidade de estar próximo à origem de seu movimento. . . . .	17
3.2	Esquema de moedas onde K representa a face “cara” e C a face “corôa”. Se, na segunda linha, por exemplo, trocarmos de posição as duas moedas com face K, não estaremos alterando a sequência de faces obtidas. . . . .	19
3.3	Exemplo da evolução temporal de três caminhadas aleatórias clássicas unidimensionais, para 100 passos, com probabilidades iguais de o caminhante ir para a direita ou esquerda. O caminhante afasta-se de seu ponto de partida mas tende sempre a voltar para o mesmo, ou estar próximo a ele. . . . .	21
3.4	Gráfico contendo a distribuição de probabilidades, representada pela Eq. 3.9, para a caminhada aleatória clássica após 100 passos de tempo. Com probabilidades iguais de o caminhante ir para a direita ou esquerda. O formato da distribuição é o que esperávamos, pois trata-se de uma <i>gaussiana</i> com pico centrado na origem, que é o ponto de partida para a caminhada. . . . .	21
3.5	Em passos de tempo discreto, a caminhada quântica espalha-se através da linha, propagando-se com intensidades arbitrárias para a direita e esquerda ao mesmo tempo. Sua direção de propagação é regida por um operador de moeda ( <i>coin</i> ) $C$ , que atua no espaço $\mathcal{H}_C$ ; seu deslocamento efetivo ocorre após a atuação do operador posição $S$ . . . . .	25
3.6	Comparação entre uma caminhada aleatória clássica (pontos) e uma caminhada quântica (cruz), onde o estado de moeda inicial é $ 0\rangle$ e atua-se com o operador de moeda Hadamard em uma linha após 100 etapas. Somente pontos pares são exibidos, pois os pontos ímpares estão desocupados em etapas de tempo par (ou vice-versa). . . . .	27
3.7	Uma caminhada clássica iniciada no vértice 1 tem suas possíveis trajetórias indicadas pelas setas. A constante $\gamma$ representa a taxa de transição do caminhante ir de um nó a outro em um intervalo de tempo infinitesimal $\varepsilon$ . Com o tempo contínuo é como se a probabilidade “escoasse” de um vértice a outro. . . . .	28
4.1	Dendrímero com funcionalidade $f_D = 3$ , $N_D = 46$ nós e geração $G = 4$ . Esta rede servirá de análise para as subseções 4.1.1, 4.1.2 e 4.1.3. Nas duas últimas utilizaremos o parâmetro $p$ para a adição de novas ligações entre os nós de mesma geração. As linhas pontilhadas demarcam as gerações da rede, elas não devem ser confundidas com ligações. . . . .	39
4.2	Estruturas espaço-tempo para a probabilidade $\pi_{j,23}(t)$ . Em (a) temos o comportamento da caminhada para um dendrímero puro; em (b) para uma <i>spidernet</i> com $p = 0.5$ ; em (c) para uma <i>spidernet</i> completa ( $p = 1.0$ ). Todas as estruturas possuem geração $G = 4$ e 100 passos de tempo com incrementos de 0.1. . . . .	42

4.3	Estruturas espaço-tempo para a probabilidade $\pi_{g,1}(t)$ , em que $g$ representa a geração. Em (d) temos o comportamento da caminhada para um dendrúmero puro; em (e) para uma <i>spidernet</i> com $p = 0.5$ ; em (f) para uma <i>spidernet</i> completa ( $p = 1.0$ ). Todas as estruturas possuem geração $G = 4$ e 40 passos de tempo com incrementos de 0.1. . . . .	43
4.4	Estruturas espaço-tempo para a probabilidade $\pi_{j,k}(10)$ . Em (g) temos o comportamento da caminhada para um dendrúmero puro; em (h) para uma <i>spidernet</i> com $p = 0.5$ ; em (i) para uma <i>spidernet</i> completa ( $p = 1.0$ ). Todas as estruturas possuem geração $G = 4$ e foram verificadas para o tempo $t = 10$ . . . . .	44
4.5	Espectro de autovalores de um dendrúmero puro ( $p = 0.0$ ) (círculos pretos), e das <i>spidernets</i> com $p = 0.1, \dots, 1.0$ (demais cores). A estrutura considerada consiste de $G = 8$ gerações e $N = 766$ nós. Podemos notar o comportamento discreto dos autovalores do dendrúmero puro e, para o caso em que $p$ é ativado, observamos um comportamento contínuo no espectro. Este comportamento será responsável pelo aumento da eficiência quântica. . . .	46
4.6	Probabilidade média de retorno $\bar{p}(t)$ para uma CTRW. Mantivemos a geração fixa em $G = 8$ e variamos o parâmetro $p$ de 0.0 até 1.0. Observa-se um lento decaimento de $\bar{p}(t)$ para $p = 0.0$ , devido a conectividade da rede. Ao ligarmos o parâmetro $p$ , $\bar{p}(t)$ decai mais rapidamente, atingindo o equilíbrio em menor tempo, melhorando assim o transporte clássico. . . . .	48
4.7	Probabilidade média de retorno $ \bar{\alpha}(t) ^2$ para uma CTQW. Mantivemos a geração fixa em $G = 8$ e variamos o parâmetro $p$ de 0.0 até 1.0. Observa-se um forte comportamento oscilatório de $ \bar{\alpha}(t) ^2$ para $p \leq 0.3$ e $p = 1.0$ . Ao aumentarmos o parâmetro $p$ , $ \bar{\alpha}(t) ^2$ oscila mais fracamente, melhorando assim o transporte quântico na rede. . . . .	48
4.8	Probabilidade média de retorno $\bar{p}(t)$ para uma CTRW. Variamos o número de geração de 2 até 10, e mantivemos fixo o parâmetro $p$ em $p = 0.5$ . Nota-se que, para quanto maior o número de gerações, mais longo é o tempo para a caminhada alcançar o valor de equilíbrio. Isto é devido a quantidade elevada de nós que o caminhante clássico visita na rede. . . . .	49
4.9	Probabilidade média de retorno $ \bar{\alpha}(t) ^2$ para uma CTQW. Variamos o número de geração de 2 até 10, e mantivemos fixo o parâmetro $p$ em $p = 0.5$ . Nota-se que, para quanto maior o número de gerações, menor a oscilação de $ \bar{\alpha}(t) ^2$ em torno de um valor médio. . . . .	50
4.10	Em (a) temos a probabilidade média de longo tempo $\chi$ , e sua aproximação $\chi^*$ em (b), para redes de dendrúmeros modificadas. A cor vermelho em maior contraste indica um pequeno valor de $\chi$ , apontando para uma forte eficiência de transporte quântico na rede. . . . .	51
4.11	Rede dendrúmero modificado em (a), com $G = 2$ e $p \approx 0.9$ . Descobrimos que, para círculos fechados, como mostrada em (b), o valor da eficiência $\chi$ aumenta, mas caso a adição de novas ligações formem uma linha, como em (c), então o valor de $\chi$ será o menor, apontando para uma melhor eficiência na rede. Isto era de se esperar, pois a eficiência do transporte quântico é maior em uma linha do que em um anel com $N$ vértices. . . . .	52

---

---

# LISTA DE TABELAS

---

- 4.1 Amplitudes de probabilidades  $\pi_{j,23}(t)$  para uma CTQW, que inicia no nó 23 e propaga-se pela rede apresentada na figura 4.1. O valor de  $p$  é mantido constante e igual a  $p = 0.0$ , ou seja, temos um dendrímero puro. A variação de tempo,  $\Delta t$ , está representada na primeira coluna e o nó alcançado pela caminhada,  $j$ , ocupa a primeira linha. Foram dados 100 passos de tempo com incrementos de 0.1. . . . . . 40
- 4.2 Amplitudes de probabilidades  $\pi_{j,23}(t)$  para uma CTQW, que inicia no nó 23 e propaga-se pela rede apresentada na figura 4.1. O valor de  $p$  é mantido constante e igual a  $p = 0.5$ , ou seja, temos um dendrímero modificado (*spidernet*). A variação de tempo,  $\Delta t$ , está representada na primeira coluna e o nó alcançado pela caminhada,  $j$ , ocupa a primeira linha. Foram dados 100 passos de tempo com incrementos de 0.1. . . . . . 41
- 4.3 Amplitudes de probabilidades  $\pi_{j,23}(t)$  para uma CTQW, que inicia no nó 23 e propaga-se pela rede apresentada na figura 4.1. O valor de  $p$  é mantido constante e igual a  $p = 1.0$ , ou seja, temos uma *spidernet* completa. A variação de tempo,  $\Delta t$ , está representada na primeira coluna e o nó alcançado pela caminhada,  $j$ , ocupa a primeira linha. Foram dados 100 passos de tempo com incrementos de 0.1. . . . . . 42

---

---

# SUMÁRIO

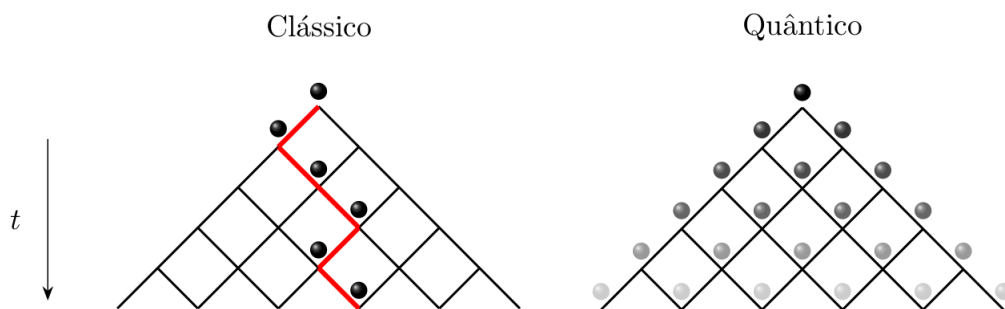
---

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>A Rede</b>	<b>4</b>
2.1	Árvores . . . . .	4
2.2	Grafos . . . . .	5
2.2.1	O Laplaciano . . . . .	7
2.3	Rede Dendrímero . . . . .	12
2.3.1	Rede Dendrímero Modificado . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Caminhada Quântica: Modelos</b>	<b>16</b>
3.1	Caminhadas Aleatórias Clássicas . . . . .	16
3.2	Caminhada Quântica de Tempo Discreto . . . . .	22
3.2.1	Definindo a Caminhada Quântica . . . . .	22
3.2.2	Caminhada Quântica de Tempo Discreto na Linha . . . . .	23
3.3	Caminhada Quântica de Tempo Contínuo . . . . .	28
3.3.1	Limite de Longo Tempo . . . . .	31
3.3.2	Eficiência da CTQW e CTRW . . . . .	33
3.3.3	Densidade de estados e Degenerescência de autovalores . . . . .	36
<b>4</b>	<b>Resultados e Discussões</b>	<b>38</b>
4.1	Contornos da Probabilidade $\pi_{j,k}(t)$ . . . . .	38
4.1.1	Probabilidade $\pi_{j,23}(t)$ . . . . .	39
4.1.2	Probabilidade $\pi_{j,k}(t)$ correlacionada à geração $g$ . . . . .	42
4.1.3	Contornos de probabilidade $\pi_{j,k}(10)$ . . . . .	44
4.2	Espectro de Autovalores . . . . .	45
4.3	Probabilidades Médias de Retorno Clássica e Quântica . . . . .	47
4.4	Medida da Eficiência de Transporte $\chi$ . . . . .	50

<b>5</b>	<b>Considerações Finais</b>	<b>53</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>54</b>

# Introdução

O conceito de caminhadas ou passeios aleatórios, encontra na Física e em diversas outras áreas de estudo, um enorme potencial de aplicação para a solução dos mais variados problemas [1, 2]. Seja na Biologia, com aplicações em genética populacional [3], ou na Economia, com uma nova ciência, a Econofísica [4], as caminhadas aleatórias possuem um papel de destaque para a modelagem de diversos fenômenos no mundo real. Mas a natureza apresenta, em suas menores escalas, comportamentos que fogem ao nosso senso comum, havendo a necessidade de reformulações de muitas ideias. É nesta nova forma de encarar a natureza que surge o análogo quântico para as caminhadas aleatórias, com características divergentes das encontradas no mundo clássico. Para maior clareza nas explicações mostramos, na figura 1.1, uma das diferenças fundamentais entre a caminhada clássica e a caminhada quântica; enquanto a primeira possui o caminho bem definido, a segunda espalha-se pela rede, podendo estar em mais de um lugar ao mesmo tempo. Isto ocorre devido ao comportamento ondulatório das funções de onda que em regiões distintas da rede interferem-se de forma construtiva ou destrutiva, originando diferentes amplitudes de probabilidade.

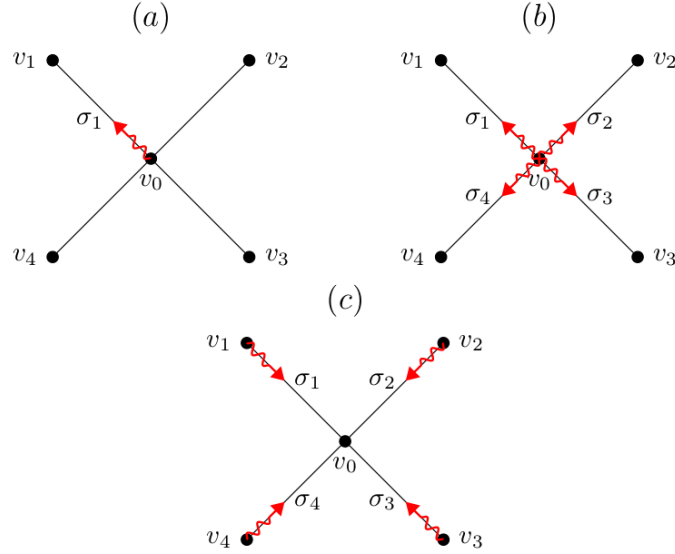


**Figura 1.1** - Ilustração dos cinco primeiros passos de um caminhante (esfera em cor preta) clássico e quântico em uma rede. Observamos que para o caso clássico a trajetória seguida pelo caminhante é bem definida. Já no caso quântico, devido ao comportamento ondulatório, o que temos é um espalhamento do caminhante por toda a rede.

As caminhadas quânticas (inicialmente, caminhadas aleatórias quânticas) podem ser encontradas, como uma primeira tentativa de formular o problema, no trabalho de Feynman de 1982 [5] que lançou bases para a construção de computadores que operassem através dos princípios da mecânica quântica. Estudos, relacionados à dinâmica quântica, que datam do final dos anos 1980, sugerem a utilização do termo “passeios aleatórios quânticos”; entre eles destacam-se os estudos de Gundder, com a publicação de seu livro *Quantum Probability*, e Grossing & Zeilinger, que desenvolveram trabalhos com autômatos celulares [6–8].

A extensão das ideias de caminhadas aleatórias clássicas para o domínio da física quântica não é única [9]. Existem variantes, das quais dois modelos captam maior interesse: o *modelo de tempo discreto*

e o de tempo contínuo. O modelo de tempo discreto foi inicialmente desenvolvido por Aharonov *et al.* em 1993 [10]; sua abordagem do problema introduz um grau de liberdade interno chamado *espaço de “moeda”* (*coin*, em inglês),  $\mathcal{H}_C$ , responsável pela dinâmica quântica da caminhada, junto ao *espaço de posição*  $\mathcal{H}_P$ . Por exemplo, podemos utilizar um sistema de partículas de spin 1/2 no qual, os sentidos *up* ( $\uparrow$ ) e *down* ( $\downarrow$ ) do spin, representariam o estado de moeda; uma vez “invertida” a moeda, o resultado determina a direção à qual o caminhante deve seguir [8, 11]. Abaixo, na figura 1.2, ilustramos o comportamento de uma caminhada quântica de tempo discreto [12].



**Figura 1.2** - Representação esquemática da evolução de um passo de uma caminhada quântica de tempo discreto em um grafo. (a) representa o estado do sistema no passo de tempo  $n$  e dado por  $|\Psi_n\rangle = |\sigma_1\rangle_C \otimes |v_0\rangle_P$ , onde o conjunto de estados  $\{|\sigma_i\rangle_C\}$  descrevem os graus de liberdade interno do sistema e constituem uma base para  $\mathcal{H}_C$ , e  $\{|v_i\rangle_P\}$  descrevem as posições dos vértices e formam uma base para  $\mathcal{H}_P$ . (b) representa a ação do operador moeda,  $C$ , sobre os estados associados ao subespaço vetorial  $\mathcal{H}_C$ , cujo resultado é  $C|\sigma_1\rangle_C = \sum_{i=1}^4 c_i |\sigma_i\rangle_C$ , tal que  $\sum_{i=1}^4 |c_i|^2 = 1$ . (c) representa o estado do sistema no passo de tempo  $n+1$ , após a ação do operador posição  $S$ , isto é,  $|\Psi_{n+1}\rangle = S((C|\sigma_1\rangle_C) \otimes |v_0\rangle_P) = \sum_{i=1}^4 c_i |\sigma_i\rangle_C \otimes |v_i\rangle_P$ . Figura adaptada.

Em 1998, Farhi e Gutmann [13], propuseram uma abordagem de tempo contínuo para as caminhadas quânticas (modelo CTQW, sigla em inglês de *Continuous-time Quantum Walks*). A ideia chave deste modelo é a conexão feita entre a matriz de transferência clássica ( $\mathbf{T}$ ) e o Hamiltoniano quântico ( $\mathbf{H}$ ); mantém-se o espaço de posição  $\mathcal{H}_P$  discreto e transforma-se o tempo em uma variável contínua; este modelo não necessita de um espaço de moeda. Sua base está nas cadeias de Markov de tempo contínuo, onde os vértices (ou nós) da rede são considerados como estados quânticos, que formam uma base para o espaço de Hilbert [13]. Os elementos que constituirão a matriz  $\mathbf{H}$  deverão ser determinados a partir das conexões, existentes ou não, entre os vértices. Desta forma, o sistema quântico evolui no tempo através do operador de evolução temporal  $U(t) = e^{-i\mathbf{H}t}$ . Ao decorrer deste trabalho iremos fazer uma discussão mais detalhada sobre os dois modelos.

As caminhadas quânticas têm sido nos últimos anos utilizadas em diversas implementações experimentais; para os dois modelos, de tempo discreto e contínuo, podem ser encontrados trabalhos baseados em: redes ópticas ou em cavidades ópticas [14]; em átomos de Rydberg [15]; fótons em arranjos de guia de ondas [16, 17], entre outras várias aplicações. Em teoria da informação quântica, estas caminhadas são ferramentas usadas extensivamente para a construção de novos algoritmos, os chamados



---

*algoritmos quânticos*. Como dois importantes exemplos destacam-se o algoritmo de P. Shor [18], utilizado na fatoração de números, ou seja, na decomposição do número  $N$  em fatores primos (o problema de fatoração é extremamente importante para métodos modernos de criptografia de mensagens; ele está na base das comunicações entre bancos e clientes, por exemplo) e o algoritmo de L. Grover [19], importante para encontrar um determinado item em um banco de dados (não classificados) de *qubits* [9].

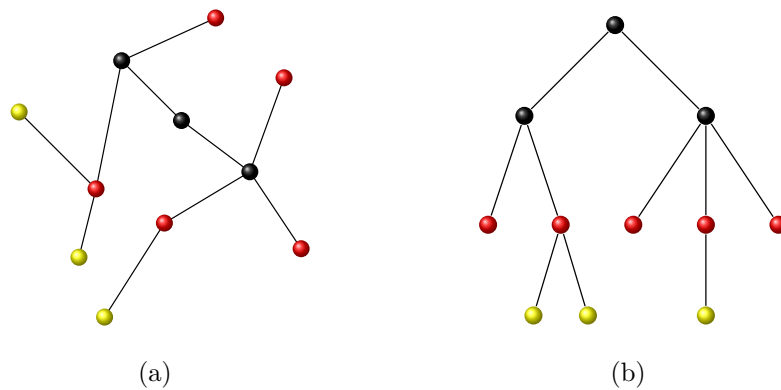
Desta forma, dada a importância e aplicabilidade das caminhadas quânticas, iremos neste trabalho investigar o comportamento da caminhada quântica de tempo contínuo em redes complexas do tipo *Dendrímero* ou *Árvores de Cayley* de funcionalidade  $f_D = 3$ , isto é, cada nó da rede possui três ligações com os vizinhos mais próximos, exceto os nós da última geração, que possuem apenas um *link* (ver figura 2.2). Nossa análise é nova em certo aspecto: com a introdução de um parâmetro  $p$ , que representa um valor de *probabilidade*, iremos adicionar em nossa rede novas ligações entre vértices de mesma geração. Estas novas estruturas serão chamadas de *Redes Dendrímeros Modificados*, comumente chamadas de *Spidernets* (abreviação do inglês *spiderweb networks*, que em tradução livre significa *redes teia de aranha*). A partir da criação de novas ligações, averiguamos qual será a mudança no transporte quântico nesta nova estrutura, se há melhora ou não na propagação da caminhada. Desta forma, a presente dissertação está dividida da seguinte maneira: no capítulo 2, apresentamos as características básicas de nossa rede, assim como o processo de sua construção. No capítulo 3, um pouco mais extenso, abordamos os modelos de caminhadas quânticas, aprofundando o que foi comentado no início deste capítulo. Antes, fazemos uma breve revisão da caminhada aleatória clássica. No capítulo 4 discutiremos os resultados obtidos nesta pesquisa, e por fim, no capítulo 5 faremos nossas considerações finais acerca do trabalho desenvolvido.

# A Rede

Neste capítulo abordaremos as propriedades e características da rede utilizada em nosso trabalho, voltando-nos de início aos conceitos básicos de sua estrutura. Procuramos seguir as definições e metodologia muito bem estabelecidos na literatura, da qual a principal fonte encontra-se no livro de M. Newman [20]. Ao final, explicaremos os passos necessários para a construção da rede dendrímico, e também, as devidas modificações que deverão ser realizadas nesta, para a criação das topologias do tipo *spidernets*.

## 2.1 Árvores

Uma árvore é uma rede conectada, não direcionada e que não apresenta laços fechados em sua estrutura (os chamados *loops*) - figura 2.1 [20]. O termo “conectado” representa a possibilidade de qualquer vértice (ou nó) da rede ser acessível por qualquer outro vértice através de um determinado caminho. Há também a possibilidade de uma rede ser constituída de duas ou mais partes, desconectadas uma da outra, e caso essa parte, que está desconectada, não possua *loops*, ela será chamada de árvore. Caso todas as partes da rede sejam árvores, então a rede como um todo poderá ser chamada de *floresta*.

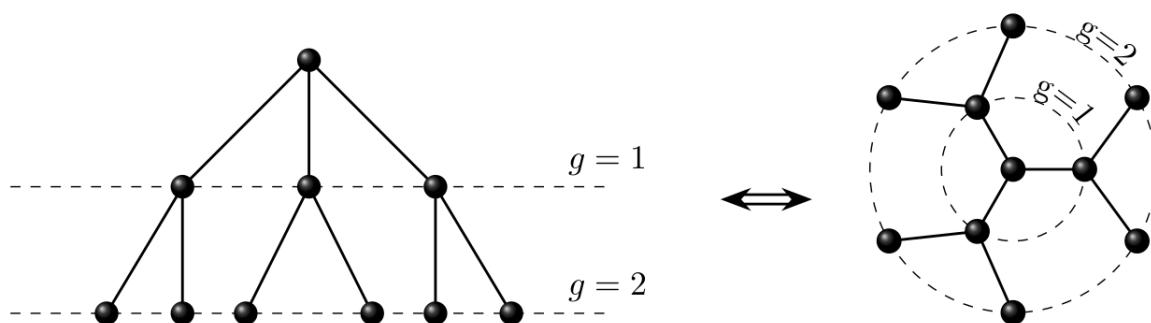


**Figura 2.1** - Exemplo de estrutura que apresenta características de árvore. Em (a) temos a rede arranjada de forma aleatória, com os nós em diferentes posições. Ao olharmos para (b) percebemos que, ao organizarmos as posições dos nós, a estrutura exhibe ainda mais a característica de árvore, com um nó raiz acima e as folhas abaixo, representadas pelos vértices em amarelo. Figura adaptada.

Na grande maioria dos casos uma árvore é desenhada de forma *enraizada*, como mostrado na Fig. 2.1 (b), onde há um nó na parte superior, chamado de *raiz*, e a partir dele a estrutura se desenvolve com ramificações para baixo. Os nós inferiores que possuem apenas uma ligação com um outro nó da rede são chamados de *folhas*. Do ponto de vista topológico, uma árvore não possui nenhuma raiz preferencial – a mesma árvore pode ser desenhada com qualquer outro nó, incluindo os nós designados como folha;

mas há aplicações em que deve-se levar em consideração algumas preferências, quando da escolha de uma raiz, um exemplo desta preferência é o *dendrograma* (ver [20] p. 384), que possui uma decomposição, em sua topologia, útil para se estabelecer ordem hierárquica.

Neste trabalho estudaremos o tipo de árvore chamado de *Árvore de Cayley* (ou *Dendrímtero*) figura 2.2; uma vez que a rede tem a característica de árvore, existe a facilidade para proceder com certos cálculos, como por exemplo, o diâmetro da rede, a centralidade de interação de um vértice entre outros. Nossa análise não recairá sobre estes aspectos, estamos interessados apenas em como se comporta o transporte quântico na topologia da rede dendrímtero e da rede dendrímtero modificado (*spidernets*). Ao final deste capítulo falaremos mais sobre estas duas últimas estruturas.



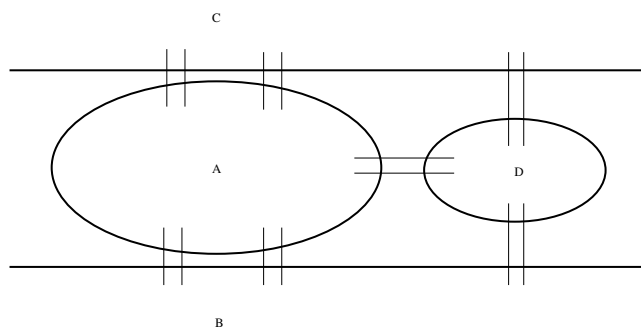
**Figura 2.2** - *Árvore de Cayley* ou rede do tipo Dendrímtero. Esta imagem ilustra a característica do tipo árvore de nossa rede, que será objeto de estudo neste trabalho. As linhas pontilhadas demarcam as gerações da rede, nas quais novos vértices são adicionados; sempre seguindo a regra de três ligações para cada novo nó, exceto para os da última geração, que possuem apenas uma.

Uma outra propriedade útil das árvores é a de que para uma quantidade  $N$  de nós, sempre haverá uma quantidade  $N - 1$  de ligações. Como exemplo, podemos observar a figura 2.2, nela há exatamente  $N = 10$  nós, e se contarmos o número de ligações, obtemos 9 ligações, ou seja,  $N - 1 = 9$ ; em termos matemáticos, podemos considerar a quantidade  $N - 1$  como um limite inferior no número de conexões [20], mas não apenas inferior. Caso seja adicionada uma nova conexão entre dois nós de mesma geração  $g$ , na figura 2.2, haverá a criação de um *loop*, quebrando a característica de árvore que a rede possui. Podemos concluir então que, a quantidade  $N - 1$  também possui o caráter de limite superior para o número de ligações existentes em uma árvore. Dessa forma, o número de ligações em uma árvore não poderá ser maior ou menor que  $N - 1$  e, portanto, deverá ser sempre igual a  $N - 1$ . Em nosso estudo, haverá justamente a quebra nesta propriedade ao adicionarmos novas ligações entre nós de mesma geração. Ao fazermos esta mudança, teremos o que chamamos de *dendrímteros modificados* (ou *árvores de Cayley modificadas*).

## 2.2 Grafos

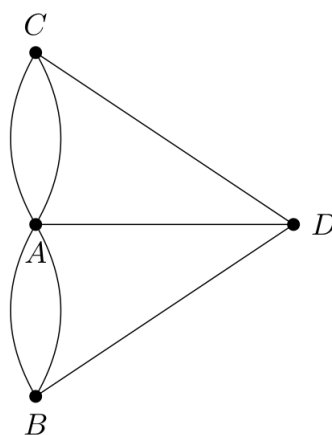
Por diversas vezes o mundo da física teórica utilizou-se da teoria dos grafos para o desenvolvimento de seus propósitos. No estudo da mecânica estatística de G. E. Uhlenbeck [21], por exemplo, os pontos indicam moléculas e dois pontos adjacentes indicam a interação vizinha mais próxima de algum tipo físico, que pode ser, por exemplo, atração ou repulsão magnética. Mas os grafos encontram, em diversas áreas de estudos, aplicações das mais variadas: na engenharia elétrica podem ser utilizados para a análise de circuitos [22], na química para o estudo de compostos químicos [23] entre outros.

Em 1736, Leonhard Euler introduziu o conceito de grafo ao resolver o problema das pontes de Königsberg. O problema consistia no desafio de realizar um trajeto atravessando apenas uma vez as sete pontes que, ligavam duas ilhas e as margens do rio, e retornar ao ponto de partida [24]. Na figura 2.3 temos um esquema das pontes e das ilhas (A e D); C e B representam as margens.



**Figura 2.3** - Um parque na cidade de Königsberg (atual Kalinigrado), 1736. Este esquema das pontes serviu para Leonhard Euler desenvolver a teoria que hoje conhecemos como *Teoria dos Grafos*.

Para solucionar o problema, Euler substituiu cada área de terra por um ponto e cada ponte por uma linha que juntou os pontos correspondentes, produzindo assim um grafo (figura 2.4). Dessa forma, Euler mostrou que o problema possui resposta negativa, ou seja, não há um caminho que cruze todas as pontes passando apenas uma única vez por cada uma delas.



**Figura 2.4** - O grafo do problema das Pontes de Königsberg.

**Definição 2.1 (Grafo)** Um grafo  $G$  consiste de um conjunto não vazio  $V$ , de  $p$  vértices, e do conjunto  $X$  de  $q$  pares (arestas) não ordenados de vértices distintos de  $V$ .

Representaremos um grafo  $G$  por

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

onde

$$V = (p_1, p_2, \dots, p_P) \quad (2.2)$$

$$X = (q_1, q_2, \dots, q_Q) \quad (2.3)$$

com

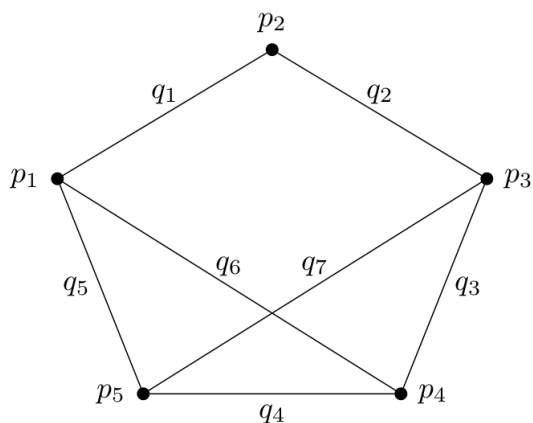
$$q_k = (p_i, p_j). \quad (2.4)$$

O grafo da figura 2.5 é formado por um conjunto de 5 vértices e por 7 arestas, ou seja,

$$V = \{p_1, p_2, p_3, p_4, p_5\} \quad (2.5)$$

e

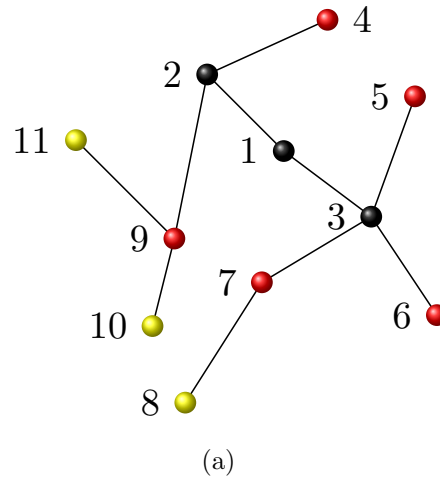
$$X = \{q_1 = (p_1, p_2), q_2 = (p_2, p_3), q_3 = (p_3, p_4), q_4 = (p_4, p_5), q_5 = (p_5, p_1), \\ q_6 = (p_1, p_4), q_7 = (p_3, p_5)\}. \quad (2.6)$$



**Figura 2.5** - Exemplo de grafo com número de vértices igual a  $V = 5$  e arestas igual a  $X = 7$ .

### 2.2.1 O Laplaciano

Podemos saber muito sobre uma rede ao escolhermos a forma matemática pela qual conseguimos representá-la; a representação em forma matricial é uma das mais vantajosas, pois através das propriedades da matriz é possível identificar uma variedade de propriedades sobre a rede. Uma representação matricial importante é a chamada *matriz de adjacência*, que apreende, em sua forma, toda a estrutura de uma rede. Em Eq. 2.8, mostramos a forma da matriz de adjacência da rede contida na Fig. 2.1 (a), onde procuramos identificar cada um dos nós.



**Figura 2.6** - Utilizamos a Fig. 2.1 (a) como exemplo para a construção da matriz de adjacência. Cada vértice recebe uma identificação, desta forma, os elementos  $A_{ij}$  da matriz podem ser definidos. Não utilizamos vértices com auto-ligação, apenas vértices com ligações diretas a seus vizinhos mais próximos.

A matriz de adjacência  $\mathbf{A}_{adj}$  de uma determinada rede é simplesmente a matriz com elementos  $A_{ij}$  tais que [20]

$$A_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se existe uma ligação entre os nós } i \text{ e } j, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.7)$$

Desta forma, para a rede da figura 2.6, a matriz de adjacência será

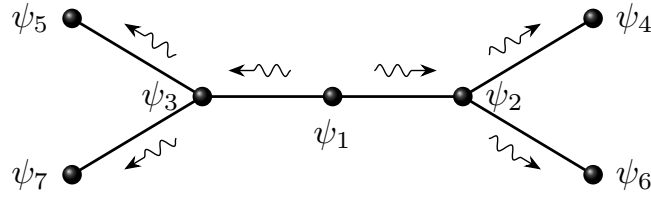
$$\mathbf{A}_{adj} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Há uma outra matriz, relacionada com a matriz de adjacência, que nos permite conhecer outras propriedades sobre a estrutura da rede. Ela é chamada de *Laplaciano* ( $\mathbf{L}$ ), devido à sua relação com o operador Laplaciano  $\nabla^2$ . Para introduzirmos a ideia da matriz Laplaciano, nos reportaremos ao fenômeno da difusão, muito utilizado na física para modelar diversos sistemas. Nesta subseção, seguiremos os passos desenvolvidos por M. Newman em [20].

O processo de difusão é, entre outras coisas, o fenômeno pelo qual o gás move-se de regiões de alta densidade para regiões de baixa densidade, impulsionado pela pressão relativa (ou pressão parcial) das diferentes regiões [20]. Podemos utilizar as características deste processo como uma difusão que ocorre nas redes de um determinado sistema, como por exemplo, a disseminação de uma ideia ou a propagação de uma doença. Consideremos que há alguma quantidade física nos vértices de uma rede e esta quantidade pode ser representada por  $\psi_i$  localizada no vértice  $i$ . Agora, supomos que esta quantidade

---

física se desloque através dos vértices da rede como representada na figura 2.7 abaixo, indo de um vértice  $j$  para um vértice adjacente  $i$  a uma taxa  $C(\psi_j - \psi_i)$ , onde  $C$  é chamado de *constante de difusão*. Desta forma, em um pequeno intervalo de tempo, a quantidade que flui de  $j$  para  $i$  é  $C(\psi_j - \psi_i)dt$ .



**Figura 2.7** - Quantidade física que se desloca entre as ligações existentes na rede, indo de um vértice para outro, como em um processo de difusão. Os vértices representam os estados  $\psi$ 's em que se encontra esta quantidade e as setas a sua direção de propagação.

Então para o primeiro nó a taxa na qual  $\psi_1$  está mudando será dada por

$$\frac{d\psi_1}{dt} = C[(\psi_2 - \psi_1) + (\psi_3 - \psi_1)] \quad (2.9)$$

e da mesma maneira podemos escrever as taxas para os demais nós. Em geral, podemos reescrever, em termos dos elementos da matriz adjacência, como

$$\frac{d\psi_i}{dt} = C \sum_j A_{ij}(\psi_j - \psi_i). \quad (2.10)$$

Os elementos da matriz adjacência,  $A_{ij}$ , aparecem em Eq. 2.10 para garantir que os únicos termos que aparecerão na soma são aqueles que correspondem a pares de vértices que realmente estão conectados por uma ligação. Separando os dois termos na Eq. 2.10, podemos escrever

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_i}{dt} &= C \sum_j A_{ij}\psi_j - C\psi_i \sum_j A_{ij} \\ &= C \sum_j A_{ij}\psi_j - C\psi_i k_i \\ &= C \sum_j (A_{ij} - \delta_{ij}k_i)\psi_j, \end{aligned} \quad (2.11)$$

onde  $k_i$  é o grau do vértice  $i$  e fizemos uso do resultado  $k_i = \sum_j A_{ij}$ , ou seja, o grau do nó  $i$  é simplesmente a soma dos termos contidos na linha  $i$  da matriz  $A_{ij}$  (o fator  $\delta_{ij}$  é o delta de Kronecker).

A Eq. 2.11 pode ser escrita na forma matricial como

$$\frac{d\boldsymbol{\psi}}{dt} = C(\mathbf{A}_{adj} - \mathbf{D})\boldsymbol{\psi}, \quad (2.12)$$

onde  $\boldsymbol{\psi}$  é o vetor cujos componentes são números  $\psi_i$ ,  $\mathbf{A}_{adj}$  é a matriz adjacência, e  $\mathbf{D}$  é a *matriz diagonal*, que possui, em sua diagonal principal, o grau dos vértices, isto é,



$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} k_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & k_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & k_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

É comum definirmos uma nova matriz a partir da diferença contida no parênteses em Eq. 2.12, dada como

$$\mathbf{L} \equiv \mathbf{D} - \mathbf{A}_{adj}, \quad (2.14)$$

de modo que a Eq. 2.12 assume a forma

$$\frac{d\psi}{dt} + C\mathbf{L}\psi = 0, \quad (2.15)$$

que tem o mesmo formato que a equação de difusão para um gás, exceto que o operador Laplaciano  $\nabla^2$  que aparece nessa equação foi substituído pela matriz  $\mathbf{L}$ . A matriz  $\mathbf{L}$  é, por essa razão, chamada *matriz Laplaciano* (alguns outros autores [20, 25] também costumam chamá-la de *grafo Laplaciano*); sua importância se estende muito além dos processos de difusão. A matriz  $\mathbf{L}$  se encaixa em vários locais diferentes, incluindo caminhadas aleatórias em redes, redes de resistências, particionamento de grafos e conectividade de rede [20].

Por extenso, os elementos da matriz Laplaciano são

$$L_{ij} = \begin{cases} k_i, & \text{se } i = j, \\ -1, & \text{se } i \neq j \text{ e existe uma ligação } (i, j), \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (2.16)$$

de modo que os graus dos vértices encontram-se em sua diagonal principal e o elemento  $-1$  é adicionado para cada ligação. Como exemplo, montamos a matriz  $L_{ij}$  para a rede contida na figura 2.7, ela tem a forma:

$$L_{ij} = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} & L_{13} & L_{14} & L_{15} & L_{16} & L_{17} \\ L_{21} & L_{22} & L_{23} & L_{24} & L_{25} & L_{26} & L_{27} \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} & L_{34} & L_{35} & L_{36} & L_{37} \\ L_{41} & L_{42} & L_{43} & L_{44} & L_{45} & L_{46} & L_{47} \\ L_{51} & L_{52} & L_{53} & L_{54} & L_{55} & L_{56} & L_{57} \\ L_{61} & L_{62} & L_{63} & L_{64} & L_{65} & L_{66} & L_{67} \\ L_{71} & L_{72} & L_{73} & L_{74} & L_{75} & L_{76} & L_{77} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 3 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

Podemos resolver a equação de difusão Eq. 2.15 escrevendo o vetor  $\psi$  como uma combinação

linear dos autovetores  $\mathbf{q}_i$  do Laplaciano, assim:

$$\boldsymbol{\psi}(t) = \sum_i a_i(t) \mathbf{q}_i, \quad (2.18)$$

com os coeficientes  $a_i(t)$  variando ao longo do tempo. Substituindo esta forma em Eq. 2.15 e fazendo uso do problema de autovalor,  $\mathbf{L}\mathbf{q}_i = \lambda_i \mathbf{q}_i$ , onde  $\lambda_i$  é o autovalor correspondente ao autovetor  $\mathbf{q}_i$ , obtemos

$$\sum_i \left( \frac{da_i(t)}{dt} + C\lambda_i a_i(t) \right) \mathbf{q}_i = 0. \quad (2.19)$$

Mas os autovetores de uma matriz simétrica, como o Laplaciano, são ortogonais, e assim, tomando o produto escalar dessa equação com qualquer autovetor  $\mathbf{q}_j$ , obtemos

$$\frac{da_i(t)}{dt} + C\lambda_i a_i(t) = 0, \quad (2.20)$$

para todo  $i$ , que tem a solução

$$a_i(t) = a_i(0)e^{-C\lambda_i t}. \quad (2.21)$$

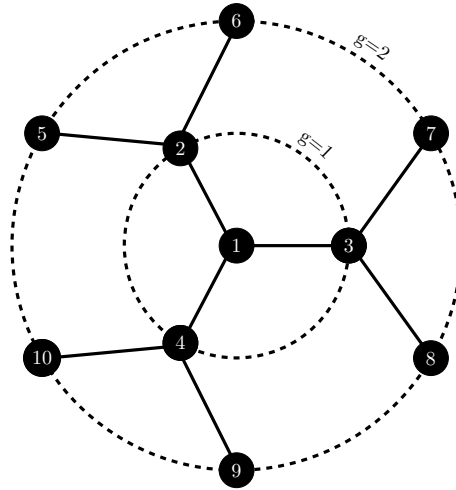
Dada uma condição inicial do sistema, conforme especificado pelas quantidades  $a_i(0)$ , podemos resolver o estado em qualquer momento posterior, desde que conheçamos os autovalores e os autovetores da matriz Laplaciano. Adiante, na seção 3.3, faremos uso dessas definições, pois as semelhanças com estas ideias serão enormes.

## 2.3 Rede Dendrímoro

Nesta seção iremos descrever os detalhes da rede utilizada neste trabalho, abordando aspectos de sua topologia e o processo para sua construção, que seguem o método já estabelecido na literatura [26–28]. Também iremos explicar o processo pelo qual novas ligações são adicionadas na rede, dando origem à rede dendrímoro modificado, que chamaremos de *spidernets*.

A rede dendrímoro está representada na figura 2.8. Podemos notar que nossa rede é constituída de um nó central (geração  $g = 0$ ), do qual surgem três ligações que o conectam aos nós da geração seguinte (primeira geração,  $g = 1$ ). A cada nova geração  $g$  há o aparecimento de 2 novas ligações que conectam os nós da geração anterior com os nós da geração seguinte. Assim, podemos observar na figura 2.8 que, a cada nova geração os nós da rede possuirão, cada um, três ligações, exceto os nós da última geração, ou periferia. Este processo, de adição de novas gerações, pode ser repetido o número de vezes que for desejado, até se alcançar a geração esperada  $G$ . Como mostrado na figura 2.8, nossa construção está estabelecida para dendrímoros com funcionalidade  $f_D = 3$ , onde funcionalidade representa a quantidade de ligações que cada nó possui. Para todos os nós internos, a funcionalidade é igual a  $f_D = 3$ , para os nós periféricos temos  $f_D = 1$ . Há, em outros trabalhos, a presença de dendrímoros com funcionalidade acima de 3, mas nesta dissertação, só serão consideradas redes de dendrímoros com funcionalidade  $f_D = 3$ .

A cada geração  $1 \leq g \leq G$ , a quantidade de nós adicionados é dada por  $3 \cdot 2^{g-1}$ , ou seja, cresce exponencialmente com  $g$  [9], logo, podemos encontrar a seguinte relação



**Figura 2.8** - Representação de uma rede dendrímtero com funcionalidade  $f_D = 3$ . A partir de um nó central (1) três ligações são adicionadas, dando origem a 3 novos nós que correspondem à primeira geração ( $g = 1$ ). Seguindo a regra explicada nesta seção, a rede pode ser aumentada até a geração desejada. As linhas pontilhadas demarcam as gerações da rede.

$$\begin{aligned}
 g = 1 &\longrightarrow 3 \cdot 2^0 = 3 \text{ nós} \\
 g = 2 &\longrightarrow 3 \cdot 2^1 = 6 \\
 g = 3 &\longrightarrow 3 \cdot 2^2 = 12 \\
 g = 4 &\longrightarrow 3 \cdot 2^3 = 24 \\
 &\vdots \\
 g = G &\longrightarrow 3 \cdot 2^{G-1} = f_D \cdot (f_D - 1)^{G-1}.
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

De forma geral, podemos escrever a Eq. 2.22 da seguinte maneira

$$N_D = \sum_{g=1}^G f_D \cdot (f_D - 1)^{g-1}, \tag{2.23}$$

onde  $N_D$  representa a quantidade de nós contidos a partir da primeira geração. Uma vez que o número de nós cresce conforme uma progressão geométrica (P.G.) de razão  $(f_D - 1)$ , podemos utilizar a soma dos termos de uma P.G. para avaliar a soma em Eq. 2.23, assim, encontramos

$$N_D = f_D \cdot \sum_{g=1}^G (f_D - 1)^{g-1} = f_D \cdot \frac{1 - (f_D - 1)^G}{1 - (f_D - 1)} = f_D \cdot \frac{[(f_D - 1)^G - 1]}{f_D - 2}, \tag{2.24}$$

que para nosso dendrímtero de funcionalidade  $f_D = 3$ , será

$$N_D = 3 \cdot (2^G - 1). \quad (2.25)$$

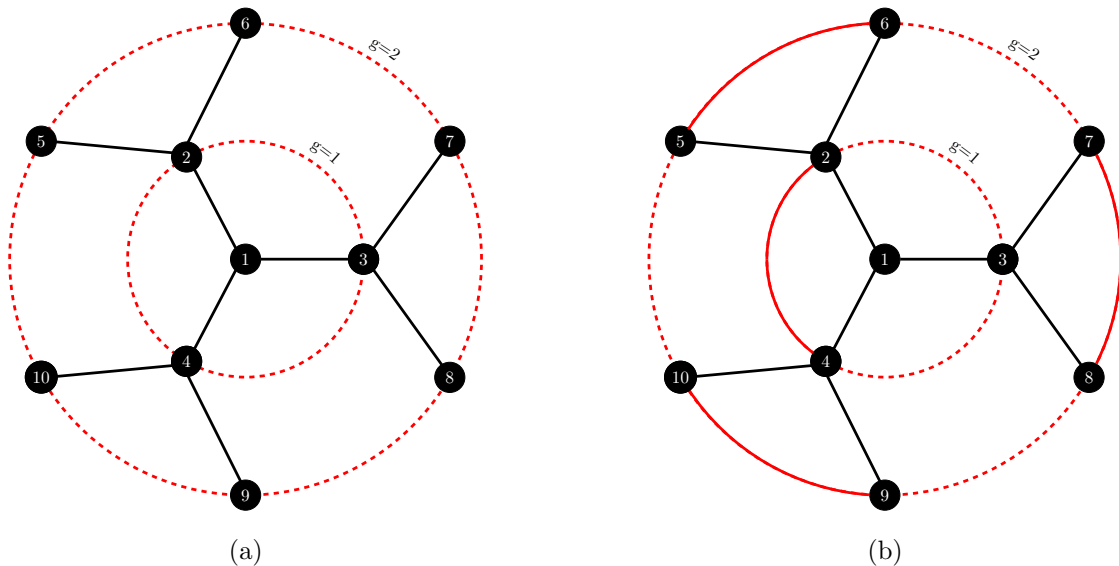
Assim sendo, o número total de nós na rede dendrímoro será dado por Eq. 2.25 mais o nó contido no centro ( $g = 0$ ). Portanto, o número total de nós da rede, com número de geração  $G$ , e funcionalidade  $f_D = 3$  é igual a

$$N_D = 3 \cdot (2^G - 1) + 1. \quad (2.26)$$

Estabelecida a construção da rede utilizada em nosso trabalho e conhecida algumas de suas características, na subseção a seguir iremos abordar o processo pelo qual novas ligações são adicionadas à rede original de dendrímoro, dando origem às *spidernets*.

### 2.3.1 Rede Dendrímoro Modificado

Como apresentado anteriormente, a construção de nossa rede de dendrímoro consiste da adição de novas gerações que surgem com a presença de novos nós, oriundos, por sua vez, do acréscimo de ligações com os nós da geração anterior. Agora, faremos algumas modificações na rede original, chamada de dendrímoro puro; as mudanças consistem na adição de novas ligações, que serão inseridas entre nós de *mesma* geração  $g$ .



**Figura 2.9** - Em (a) temos uma rede dendrímoro puro de geração dois. Seguindo um certo parâmetro de probabilidade  $p$ , novas ligações são adicionadas entre nós de mesma geração. Em (b) podemos ver a rede para qual  $p = 0.4$ , ou seja, há novas ligações; esta rede será chamada de rede dendrímoro modificado ou *spidernet*. Esta é uma possível representação, há outras, óbvio.

A forma como serão inseridas essas novas ligações, dar-se-á da seguinte maneira: com uma dada probabilidade  $p$ , nosso algoritmo sorteia possíveis pares de novas ligações entre primeiros vizinhos da mesma geração. Deve-se notar que, independente do valor do parâmetro  $p$ , a quantidade de nós da rede permanece a mesma; apenas haverá mudança quanto às ligações. Para o valor de  $p = 0.0$ , temos um dendrímoro puro, enquanto que para  $p = 1.0$ , haverá uma rede *spidernet* completa (ou seja, todos os

nós da mesma geração irão conectar-se). Na figura 2.9, temos a comparação entre um dendrímtero puro (Fig. 2.9 (a)) e uma *spidernet* (Fig. 2.9 (b)), ambos com geração  $g = 2$ . Em Fig. 2.9 (a), há um total de 9 novas possíveis ligações; 3 correspondentes à geração 1 e outras 6 correspondentes à geração 2. Todas essas possíveis novas ligações estão representadas pelas linhas pontilhadas em vermelho. Ao considerarmos o valor de  $p = 0.4$ , nosso algoritmo pode, por exemplo, criar 4 novas ligações que estão representadas em Fig. 2.9 (b) pelas linhas sólidas em vermelho. Ou seja, temos a adição de ligações entre os pares de nós (2, 4), (5, 6), (7, 8) e (9, 10).

As estruturas mostradas na figura 2.9 são, portanto, os objetos de estudo deste trabalho. Através da criação de novas ligações, da forma estabelecida anteriormente, e com redes de gerações superiores, iremos aplicar o método das Caminhadas Quânticas de Tempo Contínuo para avaliarmos como comporta-se o transporte quântico nestas novas estruturas.

# Caminhada Quântica: Modelos

Neste capítulo, iremos desenvolver as ferramentas matemáticas que formam a base metodológica para o desenvolvimento deste trabalho. No início há uma breve explanação das Caminhadas Aleatórias Clássicas (CAC) que representam um importante modelo para a explicação de diversos sistemas físicos. Logo em seguida, iremos estudar o primeiro modelo de Caminhadas Quânticas, o Modelo Discreto, proposto inicialmente por Aharonov *et al.* [10] que utiliza uma “moeda” quântica para a dinâmica do caminhante. E ao final, abordaremos o modelo de caminhada no qual nosso trabalho está baseado, o Modelo de Tempo Contínuo, que foi proposto em 1998 por Farhi e Gutmann [13].

## 3.1 Caminhadas Aleatórias Clássicas

Nesta seção temos por objetivo discutir sobre as propriedades da caminhada aleatória em uma dimensão, o que é equivalente ao problema do caminhante aleatório em uma linha. A definição mais simples que temos de uma caminhada aleatória é aquela na qual a caminhada é a soma de um número de variáveis aleatórias [1]. Seja  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n$   $n$  variáveis aleatórias  $D$ -dimensionais. Temos como terminologia “caminhada aleatória de  $n$ -passos” a identificação do vetor soma  $\mathbf{R}$  como

$$\mathbf{R}_n = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 + \dots + \mathbf{r}_n. \quad (3.1)$$

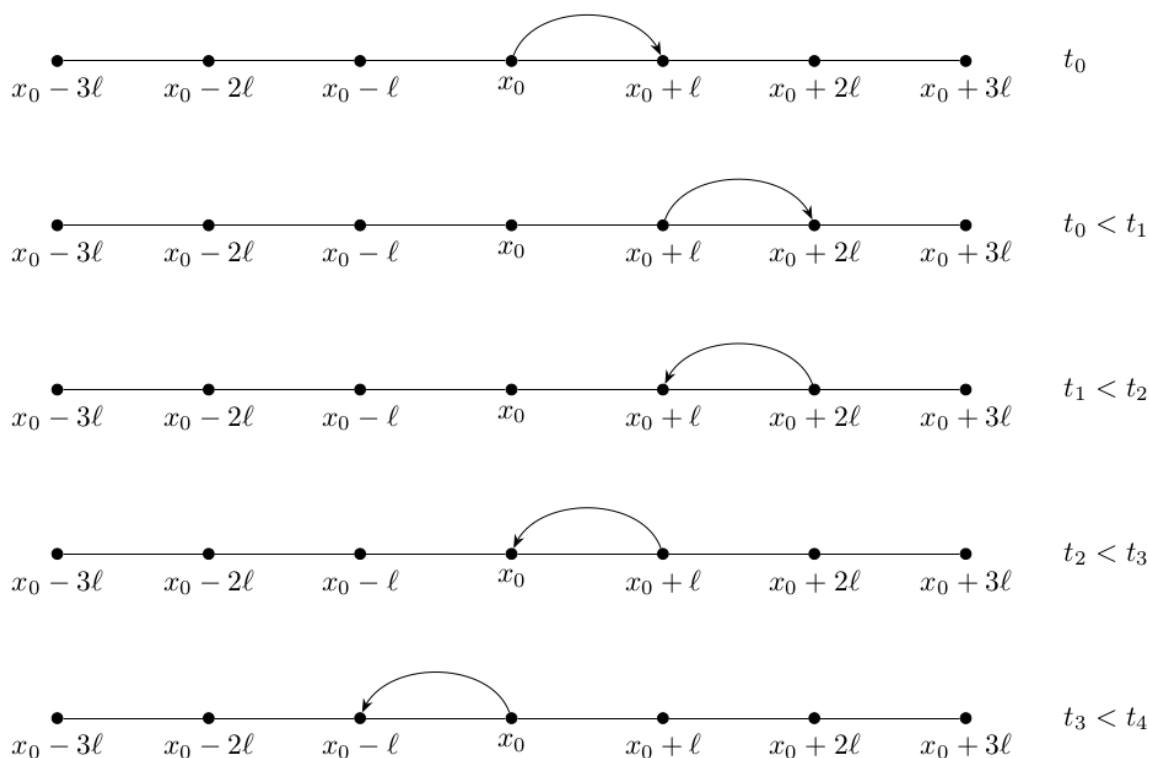
Na qual o vetor  $\mathbf{R}$  será referido como o vetor de “ponta a ponta” da caminhada aleatória. Há outras variações na forma de escrever a Eq. 3.1, das quais cabem aplicações não apenas no campo da física, mas também em fenômenos biológicos e químicos [1].

Diversos problemas relacionados às propriedades de somas de variáveis aleatórias foram analisados e estudados no campo da matemática e da física a partir do século XVII até o século XIX [1]. Acredita-se que o termo “caminhada aleatória” seja devido a Karl Pearson, que em seu artigo publicado na revista *Nature*, em 1905, com o título “*The Problem of the Random Walker*” [29], colocou em questão a seguinte indagação: “*Um homem parte de um ponto  $O$  e caminha  $\ell$  jardas em uma linha reta: ele então gira através de qualquer ângulo e anda outras  $\ell$  jardas em uma segunda linha reta. Ele repete este processo  $n$  vezes. Procuo a probabilidade de que, depois destes  $n$  passos, dele estar a uma distância entre  $r$  e  $r + \delta r$  do ponto de partida  $O$ .*”

Pouco depois de publicada a questão do caminhante aleatório, Pearson recebeu uma resposta dada por Lord Rayleigh, em agosto de 1905 [30]. Segundo ele: “*O problema proposto pelo Prof. Karl Pearson no número atual da Nature é o mesmo que a composição de  $n$  vibrações isoperiódicas de amplitude unitária e com as fases distribuídas de forma aleatória. [...] Se  $n$  for muito grande a probabilidade procurada será*”

$$2n^{-1}e^{-r^2/n}r dr. \quad (3.2)$$

Consideremos o caso de um caminhante que esteja confinado a se deslocar sobre uma linha (figura 3.1). Esta caminhada é chamada, apropriadamente, de caminhada unidimensional. A dinâmica é descrita por etapas que fazem com que o caminhante ande em uma direção ou outra, às quais chamaremos de *direita* e *esquerda*. Supomos que para decidir para qual posição o caminhante irá basta que ele jogue uma moeda. Se nesse lançamento a moeda apresenta a face cara (K), então o caminhante se desloca para a direita; caso a face seja corôa (C) então ele irá para a esquerda. O resultado de jogar a moeda será considerado equiprovável, ou seja, não há preferências em ir para a direita ou esquerda, logo temos uma caminhada imparcial.



**Figura 3.1** - Exemplificação de uma possível caminhada aleatória clássica dada em cinco passos. A cada sorteio da face de uma moeda o caminhante é levado a dar um passo para a direita ou esquerda, com igual probabilidade. A contagem para os passos de tempo  $t$  está representada à direita da figura. Para um grande número de passos o caminhante terá elevada probabilidade de estar próximo à origem de seu movimento.

Seja  $N$  o número total de passos, dado pela soma de passos para a direita ( $N_d$ ) e passos para a esquerda ( $N_e$ ), ou seja,  $N = N_d + N_e$ . Imaginemos que a separação entre dois pontos adjacentes da linha, na qual o caminhante se desloca, seja  $\ell$ . Então, ele irá se mover uma distância

$$d = N_d\ell - N_e\ell = N_d\ell - (N - N_d)\ell = (2N_d - N)\ell \quad (3.3)$$

para a direita. Desta forma, o caminhante terá parado  $N\ell$  unidades de comprimento à direita ou  $N\ell$

unidades de comprimento à esquerda de onde começou, ou em algum lugar intermediário.

Estamos, agora, interessados em determinar qual a probabilidade  $P(N, d)$  de o caminhante ter percorrido uma certa distância à direita de sua posição inicial, dada uma quantidade total  $N$  de passos. Em termos de  $d$ , que é a distância líquida percorrida, o número de passos à direita é igual ao número de faces “cara”  $K$ , sendo dado por

$$N_d = \frac{1}{2} \left( \frac{d}{\ell} + N \right) \quad (3.4)$$

e o número de passos para a esquerda, igual à face “corôa”  $C$ , é

$$N_e = N - N_d = N - \frac{1}{2} \left( \frac{d}{\ell} + N \right) = \frac{1}{2} \left( N - \frac{d}{\ell} \right). \quad (3.5)$$

No lançamento de uma moeda a probabilidade de se obter  $K$  ou  $C$  é de 50% para cada uma, dessa forma, ao lançarmos uma moeda  $N$  vezes a probabilidade total será da forma  $\frac{1}{2^N}$ . Especificar a sequência exata de  $K$  e  $C$  significa especificar a sequência de resultados possíveis em um conjunto de  $N$  lançamentos, onde cada lançamento tem apenas dois possíveis resultados. Assim sendo, obtemos a probabilidade, de uma determinada sequência de lançamentos, multiplicando as probabilidades de cada resultado na sequência. Isso só é feito devido ao fato de que cada lance da moeda é estatisticamente independente de todas as outras jogadas da moeda. Ou seja, a probabilidade de um dado lançamento produzir um  $K$  é  $\frac{1}{2}$  (50%), independentemente de quais foram todos os outros lançamentos anteriores.

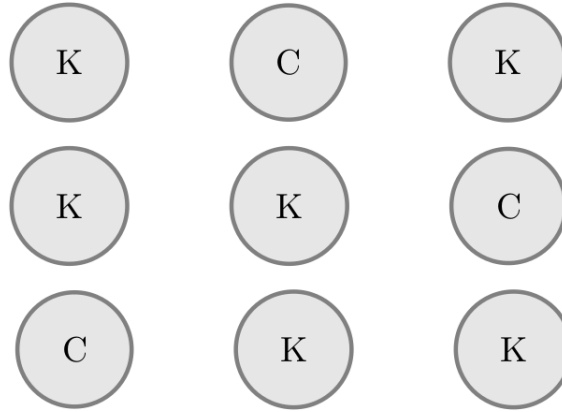
A probabilidade de obtermos  $N_d$  caras e  $N - N_d$  corôas, em qualquer ordem, é de  $\frac{1}{2^N}$  multiplicada pelo número de sequências possíveis de  $N_d$  caras e  $N - N_d$  corôas. Por sua vez, o número de sequências é dado pelo coeficiente binomial

$$\binom{N}{N_d} = \frac{N!}{N_d!(N - N_d)!}. \quad (3.6)$$

Para explicarmos a presença do fator combinatório em Eq. 3.6 nos reportaremos à figura 3.2. Temos três sequências de faces de uma moeda, as quais são todas as possíveis formas que dispomos para embaralhá-las. É evidente que mudando de posição a moeda mais à esquerda com a moeda mais à direita, a sequência permanecerá a mesma (primeira linha), uma vez que as duas representam  $K$ . Caso isso não seja levado em consideração, teríamos  $3 \times 2 \times 1 = 3!$  maneiras de arrumá-las. Para compensarmos o excesso de contagem, devemos dividir todas essas formas de sequências, por  $2!$ , que é o número de maneiras de permutar as duas caras ( $K$ ). Sendo assim, as únicas possibilidades de sequências do lançamento de uma moeda são as mostradas na figura 3.2. De maneira geral, calcula-se o número de formas com que se pode acabar com  $N_d$  caras e  $N - N_d$  corôas em  $N$  lançamentos de uma moeda. Em seguida, encontra-se todas as maneiras possíveis de embaralho das moedas, ocasionando o fator  $N!$  que, por conseguinte, deverá ser dividido pelo número de maneiras de se permutar as  $N_d$  caras entre si, assim como feito com as  $N - N_d$  corôas. Sendo assim, o fator combinatório em Eq. 3.6 é igual ao número de caminhadas que consistem em  $N_d$  passos para a direita e  $N - N_d$  passos à esquerda.

Desta forma, a lógica acima nos leva à probabilidade  $P(N, d)$  de o caminhante unidimensional ter dado  $N_d$  passos à direita e  $N - N_d$  passos à esquerda, que é da forma





**Figura 3.2** - Esquema de moedas onde K representa a face “cara” e C a face “corôa”. Se, na segunda linha, por exemplo, trocarmos de posição as duas moedas com face K, não estaremos alterando a sequência de faces obtidas.

$$P(N, d) = \frac{1}{2^N} \frac{N!}{N_d!(N - N_d)!}, \quad (3.7)$$

que pode ser reescrita, utilizando a Eq. 3.4 e Eq. 3.5, como

$$P(N, d) = \frac{1}{2^N} \frac{N!}{\left(\frac{N+d}{2}\right)! \left(\frac{N-d}{2}\right)!} \quad (3.8)$$

onde  $\ell \equiv 1$ . De forma mais geral, se fizermos  $p$  como a probabilidade de o caminhante dar um passo para a direita e  $q = 1 - p$  de dar um passo à esquerda, com  $p + q = 1$ , então a Eq. 3.8 ficará

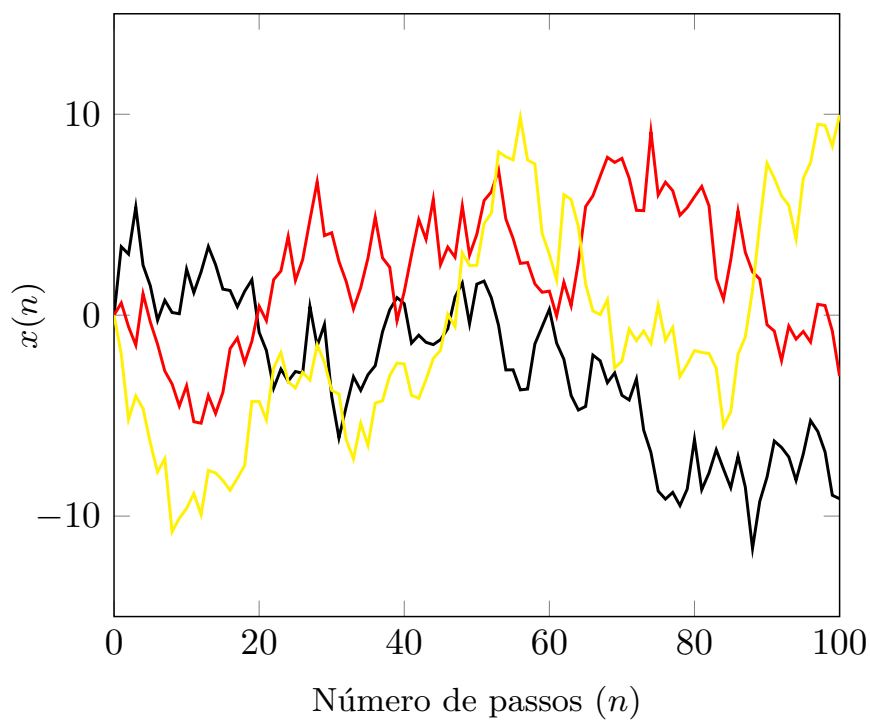
$$P(N, d) = \frac{N!}{\left(\frac{N+d}{2}\right)! \left(\frac{N-d}{2}\right)!} p^{\frac{N+d}{2}} q^{\frac{N-d}{2}}, \quad (3.9)$$

que é a forma para  $P(N, d)$  mais encontrada na literatura [31, 32].

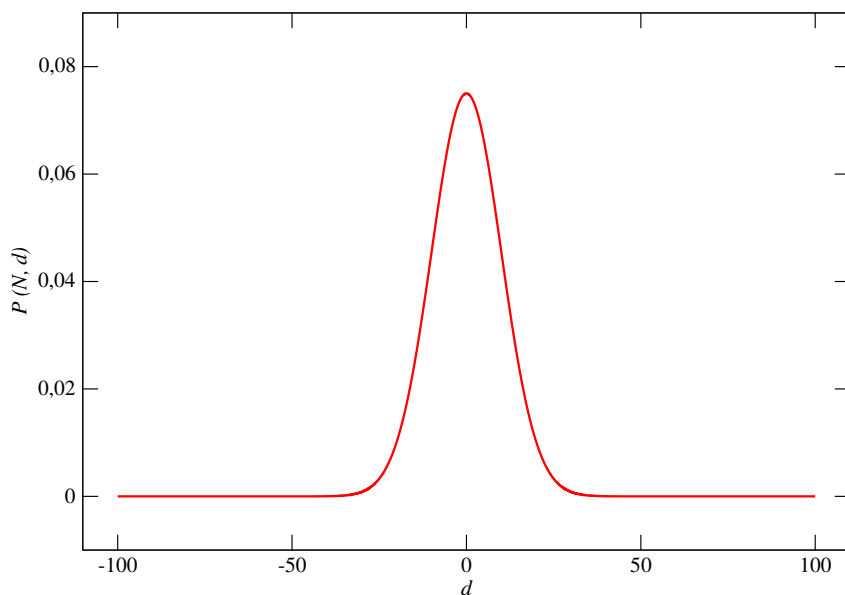
As ideias contidas na caminhada aleatória unidimensional, estudada acima, consistem em importantes ferramentas para modelos que simulam o comportamento do mundo real. Um exemplo é o espalhamento difuso, em uma dimensão, de um grupo de moléculas ou pequenas partículas [33]. A caminhada em uma linha também pode representar um polímero em cadeia cujas unidades monoméricas podem assumir movimentos para a esquerda ou direita. Além de aplicações em sistemas biológicos, como o de deriva genética [3, 24].

No gráfico da figura 3.3 apresentamos o comportamento de três diferentes caminhantes aleatórios, em função do número de passos  $n$ , que podem deslocar-se para a direita ou esquerda (com probabilidades iguais) em uma linha reta, como a que representada pela figura 3.1. Já no gráfico da figura 3.4 temos o comportamento da distribuição de probabilidades representada pela Eq. 3.9, após 100 passos de tempo em função das posições  $d$  do caminhante. Como esperado, o formato da distribuição representa uma distribuição *normal* ou *gaussiana* centrada em  $x_0 = 0$  que representa a posição inicial do caminhante.

Podemos concluir que há uma enorme justificativa quanto ao uso das caminhadas aleatórias clássicas para a modelagem de diversos sistemas do mundo real, dessa forma surge a tentativa de propor uma contra partida sob o viés da mecânica quântica para o problema do caminhante aleatório sobre uma linha. Na seção seguinte mostraremos o primeiro modelo desenvolvido como tentativa para uma abordagem quântica do problema, a Caminhada Quântica de Tempo Discreto, ou Caminhada Quântica de Moeda.



**Figura 3.3** - Exemplo da evolução temporal de três caminhadas aleatórias clássicas unidimensionais, para 100 passos, com probabilidades iguais de o caminhante ir para a direita ou esquerda. O caminhante afasta-se de seu ponto de partida mas tende sempre a voltar para o mesmo, ou estar próximo a ele.



**Figura 3.4** - Gráfico contendo a distribuição de probabilidades, representada pela Eq. 3.9, para a caminhada aleatória clássica após 100 passos de tempo. Com probabilidades iguais de o caminhante ir para a direita ou esquerda. O formato da distribuição é o que esperávamos, pois trata-se de uma *gaussiana* com pico centrado na origem, que é o ponto de partida para a caminhada.

## 3.2 Caminhada Quântica de Tempo Discreto

Como estudado na seção anterior, caminhadas aleatórias clássicas constituem um excelente modelo para o estudo de diversos fenômenos no campo da física, da biologia, matemática entre outros. Nossa atenção agora volta-se para a idealização quântica de tal caminhada. Dada a importância, deste primeiro passo em direção ao entendimento quântico, iremos apresentar nesta seção as ideias básicas da caminhada quântica de tempo discreto, sem aprofundamentos matemáticos nos tópicos, uma vez que o objetivo deste trabalho concentra-se no modelo de tempo contínuo. Há diferentes métodos de abordagem da caminhada quântica de tempo discreto, nossa ênfase será dada ao primeiro modelo, que foi desenvolvido por Aharonov *et al.* [10], conhecido como *modelo de moeda*.

Constata-se, em trabalhos anteriores, a presença do elemento “caminhada aleatória quântica”, encontrados em artigos como de Feynman (1986) [34] sobre as primeiras ideias da computação quântica, em Gudder (1988) [6], Grossing e Zeilinger (1988) [7] que estudaram dinâmicas quânticas com passos de tempo discreto. Mas o termo *caminhada aleatória quântica* surgiu primeiramente no trabalho de Aharonov *et al.* [10] em 1993, com interesse em aplicações ópticas quânticas, que serviu de precursor para os vários outros que surgiram posteriormente. Neste artigo, Aharonov estabelece a ideia de uma “moeda” quântica que seria a responsável pela dinâmica da caminhada. Ou seja, no sorteio de uma “moeda” quântica o resultado da face correspondente à “cara” leva uma partícula, caracterizada pelo estado  $|n\rangle$ , a um outro estado descrito por  $|n+1\rangle$ , e a face “corôa” leva a partícula ao estado  $|n-1\rangle$  [32].

Podemos, de forma ingênua, imaginar uma caminhada quântica, tomando por modelo a caminhada clássica unidimensional, da seguinte maneira: em cada passo de tempo, uma determinada partícula movimenta-se para a esquerda ou direita (em superposição de estados) com amplitudes iguais ou com uma diferença de fase  $e^{i\phi}$ . Todavia, esta suposição está fisicamente errada, devido ao fato que o processo global é necessariamente não unitário [35]. Em mecânica quântica o estado de um determinado sistema é caracterizado por um vetor pertencente ao espaço conhecido como espaço de Hilbert, e dado que este sistema esteja isolado de interações externas com o mundo macroscópico, então dizemos que a evolução quântica é de caráter unitário [32]. De maneira que temos aqui uma ambiguidade, pois uma vez que o sistema é isolado, ocasionando dessa forma evoluções unitárias, não haverá espaço para a aleatoriedade. Para contornar tal problema, cria-se um grau de liberdade extra que auxilia no movimento da partícula quântica, que no caso mais simples, chama-se de espaço de moeda  $\mathcal{H}_c$  [35].

Nas subseções seguintes procuraremos mostrar algumas características da caminhada quântica de tempo discreto em uma linha (caso unidimensional), as quais tem por objetivo tornar evidente as grandes diferenças existentes em relação à caminhada aleatória clássica. Como sugestão de leitura, para um maior aprofundamento no tema, indicamos os excelentes trabalhos de Kempe [11], Ambainis [35], Kendon [8] e Aharonov [36].

### 3.2.1 Definindo a Caminhada Quântica

As bases para a definição contida nesta subseção encontram-se na formulação das Cadeias de Markov Clássicas Discretas, que descrevem a evolução de processos estocásticos. Uma cadeia de Markov obedece a seguinte propriedade: a próxima configuração de um dado estado da cadeia possui dependência apenas com o estado atual em que ela se encontra, ou seja, não há influência dos estados anteriores. Como exemplo, podemos imaginar uma cadeia de Markov como um grafo cujos estados são representados pelos vértices e as ligações indicam os possíveis estados seguintes [32]. Em uma cadeia de Markov, o estado futuro de um caminhante não pode ser determinado com precisão, no entanto, podemos determinar

a distribuição de probabilidade se conhecermos a *matriz de transição*  $\mathbf{M}$ , também chamada *matriz de probabilidade* ou *matriz estocástica*.

Para determinarmos a distribuição de probabilidade posterior  $p'$  relacionada ao tempo  $t + 1$ , uma vez conhecida a distribuição de probabilidade inicial  $p$  (tempo inicial  $t$ ), basta utilizarmos

$$p'_i(t + 1) = \sum_{j=1}^n M_{ij} p_j(t). \quad (3.10)$$

Que pode ser resolvida e reescrita como [32]

$$\vec{p}'(t) = M\vec{p}(0). \quad (3.11)$$

A matriz  $\mathbf{M}$  pode ser utilizada em cada passo na evolução dos estados do caminhante. Neste ponto, podemos notar em Eq. 3.11, uma semelhança com relação à evolução temporal de um determinado estado  $|\alpha, t_0\rangle$  sujeito à ação de um operador de evolução temporal  $\mathcal{U}(t, t_0)$ , de forma que [37]

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \mathcal{U}(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle; \quad (3.12)$$

onde  $\mathcal{U}(t, t_0)$  é considerado unitário (conservação de probabilidade), e vale a condição de normalização do estado  $|\alpha, t_0\rangle$ , ou seja,  $\langle\alpha, t_0|\alpha, t_0\rangle = 1$ . Dessa forma, a repetição da aplicação do operador  $\mathcal{U}(t, t_0)$  no estado  $|\alpha, t_0\rangle$  fornecerá resultados de caráter estocástico. Esse comportamento, segundo Andrade [38], poderá ser descrito por uma cadeia de Markov, cujos elementos de transição podem ser definidos como

$$M_{ij} = \mathcal{U}_{ij}^* \mathcal{U}_{ij} = |\mathcal{U}_{ij}|^2. \quad (3.13)$$

Na caminhada quântica a preocupação não será com a medição dos estados intermediários, mas sim com as correlações quânticas entre as diferentes posições; após uma evolução considerável dos estados é que a operação realizada exhibe o caráter de uma caminhada quântica [11].

Como exemplo bastante estudado em diversos trabalhos, a próxima subseção apresentará uma aplicação da caminhada quântica discreta relacionada à linha, ou seja, o caso unidimensional estudado na seção 3.1.

### 3.2.2 Caminhada Quântica de Tempo Discreto na Linha

A caminhada quântica em uma linha é o mais simples dos exemplos que, como resultado da análise, mostra as enormes diferenças entre as propriedades das caminhadas quântica e clássica. A ideia para o desenvolvimento de tal caminhada segue às contidas na seção 3.1, isto é, há um caminhante localizado em um estado  $x_0$  que pode, com igual probabilidade, dar passos para a direita ou esquerda conforme o tempo evolui. Do ponto de vista quântico, agora haverá uma diferença quanto a localização do caminhante, que devido à sobreposição das funções de onda que o caracterizam, poderá estar à direita ou à esquerda no mesmo intervalo de tempo.

Assim sendo, podemos estabelecer alguns elementos quânticos. Seja  $|n\rangle$  o estado que descreve a *posição*  $n$  da partícula na linha. O conjunto de estados  $\{|n\rangle : n \in \mathbb{Z}\}$  formam um espaço vetorial,  $\mathcal{H}_P$ ,

pertencente ao espaço de Hilbert de dimensão infinita. Este representa todas as possíveis posições que a partícula pode visitar durante a caminhada. Para o espaço  $\mathcal{H}_P$  devem ser válidas as relações

$$\langle n_i | n_j \rangle = \delta_{n_i, n_j}, \quad (3.14)$$

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = 1_P. \quad (3.15)$$

(Em Eq. 3.15,  $1_P$  deve ser entendido como o *operador identidade*).

A evolução da caminhada deve depender do que Aharonov *et al.* [10] definiram como “moeda” quântica, que representa um grau de liberdade auxiliar, também chamado de *quiralidade*. Uma vez estabelecido este grau de liberdade extra, podemos construir processos unitários de deslocamento para a partícula. Desta forma, associamos à “moeda” quântica um espaço vetorial bidimensional,  $\mathcal{H}_C$ , chamado de *espaço de moeda*, que corresponde à base  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ , correspondentes a duas possíveis direções de movimento, para a direita ou esquerda. Ou seja, o espaço de Hilbert  $\mathcal{H}_C$  será o responsável pelo caráter estocástico da caminhada, podendo levar a partícula para uma direção ou outra, assim como feito com a caminhada aleatória clássica. Para este espaço, também serão válidas as relações

$$\langle \sigma_i | \sigma_j \rangle = \delta_{\sigma_i, \sigma_j}, \quad (3.16)$$

$$\sum_{\sigma} |\sigma\rangle \langle \sigma| = 1_C. \quad (3.17)$$

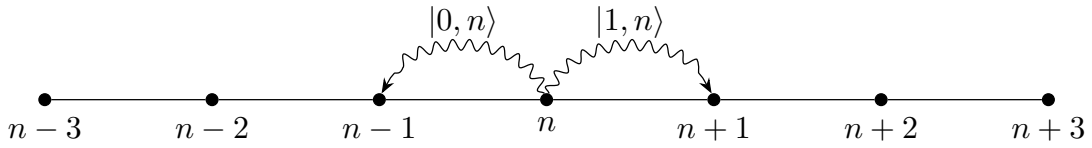
Assim, o espaço de Hilbert que descreve a caminhada por completa, o sistema inteiro, será dado por  $\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_P$ , cuja base corresponde a  $\{|\sigma, n\rangle, \sigma \in \{0, 1\}, -\infty \leq n \leq \infty\}$  [32]. Onde  $\otimes$  representa o produto tensorial dos dois espaços de Hilbert, e a notação  $|\sigma, n\rangle$  é equivalente a  $|\sigma\rangle \otimes |n\rangle$  (ver figura 3.5). Para o espaço  $\mathcal{H}$  serão válidas, também, as relações de ortonormalidade e completeza, dadas por

$$\langle \sigma_i, n_i | \sigma_j, n_j \rangle = \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \delta_{n_i, n_j}, \quad (3.18)$$

$$\sum_n \sum_{\sigma} |\sigma, n\rangle \langle \sigma, n| = 1_C \otimes 1_P = 1. \quad (3.19)$$

Uma vez definidos os espaços  $\mathcal{H}_P$  e  $\mathcal{H}_C$ , cada qual terá um operador associado. No espaço das posições atuará nos estados de base o operador unitário  $S$ , chamado de *operador posição*, que levará a partícula do estado  $|n\rangle$  para o estado  $|n+1\rangle$  ou  $|n-1\rangle$ . O operador  $S$  deverá atuar da seguinte maneira [32, 39]:

$$\begin{aligned} S|0, n\rangle &= |0, n-1\rangle \\ S|1, n\rangle &= |1, n+1\rangle. \end{aligned} \quad (3.20)$$



**Figura 3.5** - Em passos de tempo discreto, a caminhada quântica espalha-se através da linha, propagando-se com intensidades arbitrárias para a direita e esquerda ao mesmo tempo. Sua direção de propagação é regida por um operador de moeda (*coin*)  $C$ , que atua no espaço  $\mathcal{H}_C$ ; seu deslocamento efetivo ocorre após a atuação do operador posição  $S$ .

Da mesma forma, no espaço de moeda, atuará nos estados de base o operador unitário  $C$ , chamado de *operador moeda*. Sua função é atuar nos estados  $\mathcal{H}_C$  causando assim uma rotação nos estados  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  [24]. Ou seja, seu papel é determinar a escolha do sentido ao qual a partícula irá seguir, a cada passo de tempo. Podemos também definir o operador moeda como uma matriz unitária  $2 \times 2$ , que atuará nos estados de  $\mathcal{H}_C$  da seguinte maneira [32, 39]:

$$\begin{aligned} C|0, n\rangle &= a|0, n\rangle + b|1, n\rangle \\ C|1, n\rangle &= c|0, n\rangle + d|1, n\rangle. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Uma vez conhecida a forma de atuação dos operadores  $S$  e  $C$ , podemos escrevê-los, respectivamente, como da forma [24, 32, 38]:

$$S = |1\rangle\langle 1| \otimes \sum_n |n+1\rangle\langle n| + |0\rangle\langle 0| \otimes \sum_n |n-1\rangle\langle n| \quad (3.22)$$

e [24]

$$C = \sum_{\sigma_i} \sum_{\sigma_j} \alpha_{\sigma_i, \sigma_j} |\sigma_i\rangle\langle \sigma_j|, \quad (3.23)$$

onde os coeficientes  $\alpha_{\sigma_i, \sigma_j}$  representam os elementos da matriz unitária que representa o operador  $C$ , dados por

$$C = \begin{pmatrix} \langle 1|C|1\rangle & \langle 1|C|0\rangle \\ \langle 0|C|1\rangle & \langle 0|C|0\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{10} \\ \alpha_{01} & \alpha_{00} \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

A caminhada, portanto, ocorrerá da seguinte maneira: primeiramente aplicamos o operador moeda  $C$  ao estado inicial do caminhante, que irá produzir uma rotação no estado de moeda. Caso o estado inicial seja representado por apenas um dos estados de base,  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ , após a aplicação de  $C$  poderemos ter como resultado uma superposição desses dois estados. Isto garantirá a escolha na direção à qual o caminhante deverá seguir [32]. Em seguida, devemos atuar com o operador posição  $S$ , definido na Eq. 3.22, que nos fornecerá a localização do caminhante na linha. Portanto, um passo na caminhada

quântica consiste na aplicação (várias vezes seguidas, sem medições intermediárias) do operador unitário  $U \equiv S \cdot (1_P \otimes C)$ , onde o operador  $(1_P \otimes C)$  [38] representa a operação de identidade no subespaço de posição e operação de  $C$  no subespaço de moeda. Um único passo na caminhada é assim representado por

$$|\psi(t+1)\rangle = U|\psi(t)\rangle, \quad (3.25)$$

onde  $|\psi(t)\rangle$  poderá ser expandido como uma superposição dos estados de base, ou seja,  $|\psi(t)\rangle = \sum_{\sigma,n} \beta_{\sigma,n} |\sigma, n\rangle$ , com os coeficientes complexos  $\beta_{\sigma,n}$  satisfazendo a condição de que  $\sum_{\sigma,n} |\beta_{\sigma,n}|^2 = 1$  [8].

Considerando  $|\psi(0)\rangle$  como o estado inicial, após a aplicação de  $U$ , em  $t$  passos de tempo, teremos o estado

$$|\psi(t)\rangle = U^t |\psi(0)\rangle. \quad (3.26)$$

Façamos o cálculo rápido da aplicação de  $U$  em um dado estado inicial de um caminhante. Através deste procedimento poderemos mostrar algumas diferenças existentes entre a caminhada quântica e a caminhada aleatória clássica. Mas antes, devemos definir a forma do operador moeda  $C$ ; o mais comum, utilizado em diversos trabalhos, é o *operador de Hadamard*,  $C^H$ , (ou *moeda de Hadamard*) [8, 11, 32, 39] dado por

$$C^H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

Seja o estado inicial de uma caminhada quântica na linha dado por  $|1, 0\rangle$ . Aplicando o operador  $U$ , teremos (seguindo as definições contidas nas Eq.'s 3.20, 3.21, 3.22 e 3.23):

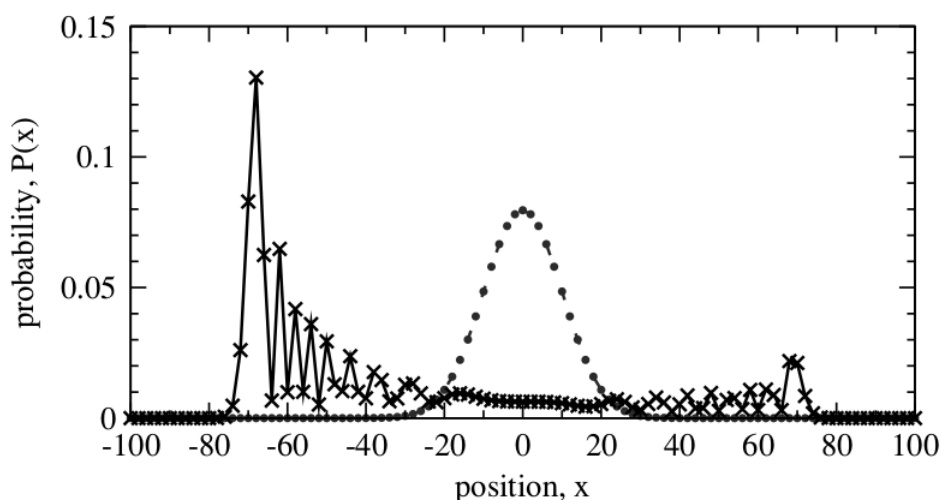
$$\begin{aligned} t = 0 & \longrightarrow |1, 0\rangle \\ t = 1 & \xrightarrow{C^H} \frac{1}{\sqrt{2}} |0, 0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1, 0\rangle \\ & \xrightarrow{S} \frac{1}{\sqrt{2}} |0, -1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1, 1\rangle \\ t = 2 & \xrightarrow{C^H} \frac{1}{2} |0, -1\rangle + \frac{1}{2} |1, -1\rangle - \frac{1}{2} |0, 1\rangle + \frac{1}{2} |1, 1\rangle \\ & \xrightarrow{S} \frac{1}{2} |0, -2\rangle + \frac{1}{2} |1, 0\rangle - \frac{1}{2} |0, 0\rangle + \frac{1}{2} |1, 2\rangle \\ t = 3 & \xrightarrow{C^H} \frac{1}{2\sqrt{2}} |0, -2\rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}} |1, -2\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1, 0\rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}} |0, 2\rangle - \frac{1}{2\sqrt{2}} |1, 2\rangle \\ & \xrightarrow{S} \frac{1}{2\sqrt{2}} |0, -3\rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}} |1, -1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1, 1\rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}} |0, 1\rangle - \frac{1}{2\sqrt{2}} |1, 3\rangle. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Agora, podemos observar que na Eq. 3.28, até o tempo  $t = 2$ , a partícula executa uma caminhada parecida com o caso clássico. Após o primeiro passo de tempo a partícula tem probabilidade



de 50% de estar à esquerda ou à direita do estado inicial, igual ao caminhante que na caminhada clássica pode deslocar-se com mesma probabilidade para um dos lados. Em seguida, após o segundo passo de tempo, constata-se comportamento semelhante ao do caso clássico, onde o caminhante possui 25% de probabilidade de ir à esquerda do estado de posição  $| - 1 \rangle$ , 50% de retornar ao estado  $|0\rangle$  e 25% de ir à direita do estado  $|1\rangle$ ; tal comportamento também é verificado no caso clássico. As diferenças surgem a partir do terceiro passo de tempo; após a aplicação do operador de Hadamard percebemos que o estado  $|0, 0\rangle$  sofre interferência destrutiva enquanto o estado  $|1, 0\rangle$  apresenta interferência construtiva. Este comportamento de natureza quântica faz com que a partir do passo  $t = 3$  a caminhada comece a diferir do caso clássico. Na figura 3.6, retirada da referência [8], podemos constatar o padrão da distribuição de probabilidades, que é bem mais complicado que o obtido para a caminhada clássica (figura 3.4). Em nosso exemplo, utilizamos como estado inicial  $|1, 0\rangle$ , na figura 3.6, o autor utiliza como ponto de partida o estado  $|0, 0\rangle$ .

Podemos notar que esta distribuição é assimétrica, com tendência de deslocamento para a esquerda. Segundo [38], esta assimetria deve-se ao fato de que o operador de Hadamard trata os estados de moeda,  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ , de maneira diferente, utilizando uma fase de valor  $-1$  apenas para o estado  $|1\rangle$ . Outro fator que leva à assimetria deve-se à escolha do estado inicial. Deve-se notar que existem modelos que corrigem essa assimetria, escolhendo um estado inicial conveniente ou outro operador “moeda” [32]. Por fim, ao compararmos a caminhada clássica com a caminhada quântica na linha, podemos perceber uma diferença importante no que diz respeito ao desvio padrão de ambos os casos. Dada uma caminhada quântica cuja distribuição de probabilidades seja simétrica, o valor esperado da posição do caminhante deverá ser zero, ou seja,  $\langle n \rangle = 0$  [32]; quanto ao desvio padrão  $\sigma(t)$ , pode-se mostrar que para a caminhada clássica seu valor é da ordem de  $\sigma(t) \sim \sqrt{t}$ , enquanto que para o caso quântico,  $\sigma(t)$  é da ordem de  $\sim t$ . O que isso nós diz? Acabamos de estabelecer que a caminhada quântica na linha se propaga quadraticamente mais rápida que a caminhada clássica [32, 38]. Enquanto no caso clássico o caminhante tende a ficar próximo da origem, para a caminhada quântica o caminhante tende a afastar-se do ponto de partida.



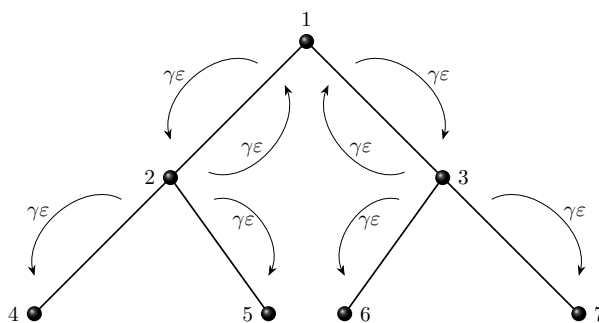
**Figura 3.6** - Comparação entre uma caminhada aleatória clássica (pontos) e uma caminhada quântica (cruz), onde o estado de moeda inicial é  $|0\rangle$  e atua-se com o operador de moeda Hadamard em uma linha após 100 etapas. Somente pontos pares são exibidos, pois os pontos ímpares estão desocupados em etapas de tempo par (ou vice-versa).

### 3.3 Caminhada Quântica de Tempo Contínuo

Aharonov *et al.* [10] propuseram seu modelo quântico, para as caminhadas aleatórias (modelo de moeda, explicado na seção anterior), o qual foi o precursor para os demais que vieram após a publicação do trabalho. Em 1998, porém, E. Farhi e S. Gutmann [13] propuseram uma maneira diferente de encarar o problema das caminhadas aleatórias. Abandonando a necessidade de um espaço de moeda ( $\mathcal{H}_C$ ), eles estabeleceram que a dinâmica quântica da caminhada aleatória, CTQW, deve ser governada pelo operador evolução temporal

$$U(t) = e^{-i\mathbf{H}t}. \quad (3.29)$$

Esta é uma abordagem pioneira, pois substitui a matriz de transferência  $\mathbf{T}$ , utilizada em transportes clássicos, pelo Hamiltoniano  $\mathbf{H}$  que deverá ser utilizado na solução da equação de Schrödinger [8,9,13,28]. A ideia principal, na qual fundamenta-se a caminhada quântica contínua, refere-se às cadeias clássicas de Markov de tempo contínuo [11,32]. Portanto, temos de fazer a seguinte alteração: o vetor que descreve a distribuição de probabilidades (Eq. 3.11) será agora um vetor de estado e a matriz de transição ( $\mathbf{M}$ ) deverá ser substituída por um operador unitário equivalente [32].



**Figura 3.7** - Uma caminhada clássica iniciada no vértice 1 tem suas possíveis trajetórias indicadas pelas setas. A constante  $\gamma$  representa a taxa de transição do caminhante ir de um nó a outro em um intervalo de tempo infinitesimal  $\epsilon$ . Com o tempo contínuo é como se a probabilidade “escoasse” de um vértice a outro.

Vamos agora ilustrar a construção que dá origem à equação diferencial que rege a dinâmica do modelo quântico de tempo contínuo. Consideremos a figura 3.7 acima, que representa uma rede qualquer com 7 nós e 6 ligações; uma vez iniciada uma caminhada *clássica* nesta rede, partindo do vértice 1, o caminhante só poderá ir ao vértice 2 ou 3, pois somente com eles há ligação direta. Devido ao fato desta dinâmica ser um processo contínuo de Markov [13] devemos levar em consideração que, para se deslocar de um nó ao outro na rede a probabilidade será dada como uma constante  $\gamma$  por unidade de tempo, onde  $\gamma$  representa a taxa de transição entre dois vértices adjacentes e é considerada a mesma para todos os vértices e todos os tempos. Ao se deslocar, o caminhante o faz em um intervalo de tempo infinitesimal  $\epsilon$ , desta forma, a probabilidade será da ordem de  $\gamma\epsilon$  (no limite em que  $\epsilon \rightarrow 0$ ). Seja  $k_i$  o grau do nó  $i$ , ou seja, a quantidade de ligações que  $i$  possui, a probabilidade de um caminhante ir ao nó vizinho após um tempo  $\epsilon$  será  $k_i\gamma\epsilon$  [32]. O que nos leva a concluir que a probabilidade para ele permanecer em  $i$  é  $1 - k_i\gamma\epsilon$ . Logo, podemos definir a matriz de transição  $M_{ji}(t)$ , que representa a probabilidade de um caminhante na rede ir de um vértice  $i$  ao vértice  $j$ , em um intervalo de tempo  $t$ ; no caso contínuo, isto pode ser representado como

$$M_{ji}(\varepsilon) = \begin{cases} 1 - k_i\gamma\varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2), & \text{se } i = j; \\ \gamma\varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2), & \text{se } i \neq j. \end{cases} \quad (3.30)$$

Seguindo as mesmas ideias desenvolvidas em [13], vamos definir os passos para a construção de um formalismo quântico que servirá na descrição dos processos clássicos de Markov. Esta caminhada será chamada de CTRW, sigla em inglês de *Continuous-time Random Walks*. Supomos que os vértices da figura 3.7 representem uma base no espaço de Hilbert  $N$ -dimensional, ou seja, caso o número de vértices seja  $N$ , teremos que  $\{|i\rangle\}$  representa uma base ortonormal, com  $i = 1, \dots, N$ , e portanto,  $\langle j|i\rangle = \delta_{j,i}$ . Desta forma, podemos definir o Hamiltoniano  $\mathbf{H}$  através de seus elementos de matriz nesta base. Fazemos:

$$\langle j|\mathbf{H}|i\rangle \equiv H_{ji} = \begin{pmatrix} \langle j_1|\mathbf{H}|i_1\rangle & \langle j_1|\mathbf{H}|i_2\rangle & \cdots \\ \langle j_2|\mathbf{H}|i_1\rangle & \langle j_2|\mathbf{H}|i_2\rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

Onde os elementos de matriz,  $\langle j|\mathbf{H}|i\rangle$ , são definidos da seguinte maneira:

$$\langle j|\mathbf{H}|i\rangle = \begin{cases} -\gamma, & \text{se } i \neq j \text{ e há uma ligação direta entre } i \text{ e } j; \\ 0, & \text{se } i \neq j \text{ e não há ligação direta entre } i \text{ e } j; \\ k_i\gamma, & \text{se } i = j. \end{cases} \quad (3.32)$$

A matriz em Eq. 3.32 é conhecida como *matriz geradora* [32]. Podemos notar que ela é semelhante à matriz Laplaciano, em Eq. 2.16. De fato, o que fazemos é relacionar a matriz de transição  $\mathbf{M}$  com a matriz Laplaciano, que iremos, a partir de agora, chamar de *matriz de conectividade*  $\mathbf{A}$  [9].

A matriz de conectividade  $\mathbf{A}$  é uma matriz  $N \times N$  que possui elementos  $A_{ij}$  definidos como

$$A_{ij} = \begin{cases} -1, & \text{se } i \neq j \text{ e há uma ligação direta entre } i \text{ e } j; \\ 0, & \text{se } i \neq j \text{ e não há ligação direta entre } i \text{ e } j; \\ f_i, & \text{se } i = j, \end{cases} \quad (3.33)$$

onde  $f_i$  é a funcionalidade do nó  $i$ , isto é, a quantidade de ligações que ele possui. A matriz de conectividade possui propriedades importantes: (a)  $\mathbf{A}$  é real e simétrica, (b) todos os seus autovalores ( $\lambda_n$ ) são reais e  $\lambda_n \geq 0$ , e (c)  $\mathbf{A}$  tem um único autovalor que é  $\lambda_{min} = 0$  [9]. A dinâmica CTRW (e como veremos adiante para o caso quântico, CTQW) depende da conexão direta entre os nós e pode ser resolvida sabendo-se o conjunto completo de autovalores e autovetores da matriz de conectividade  $\mathbf{A}$ . Desta forma, teremos de relacionar  $\mathbf{A}$  com a matriz de transição  $\mathbf{M}$ , o que será feito posteriormente.

Uma vez que estamos trabalhando com processos Markovianos, a probabilidade de movermos o caminhante da posição  $i$  para a posição  $j$ , não depende do histórico de movimento do caminhante em tempos anteriores; apenas levamos em consideração o estado atual no qual ele se encontra. Assim, podemos voltar para a matriz  $M_{ji}$ , definida em Eq. 3.30, que representa a probabilidade da caminhada ir de um nó  $i$  até o nó  $j$  em um tempo  $t$ , que para qualquer  $t_1$  e  $t_2$ , ficará

$$M_{ji}(t_1 + t_2) = \sum_k M_{jk}(t_2)M_{ki}(t_1). \quad (3.34)$$

Portanto, em um intervalo de tempo infinitesimal  $\varepsilon$ , teremos

$$M_{ji}(t + \varepsilon) = \sum_k M_{jk}(\varepsilon)M_{ki}(t), \quad (3.35)$$

que pode ser reescrita, com o auxílio da Eq. 3.32, como

$$\begin{aligned} M_{ji}(t + \varepsilon) &= M_{ji}(t)M_{jj}(\varepsilon) + \sum_{k \neq j} M_{jk}(\varepsilon)M_{ki}(t) \\ &= M_{ji}(t)[1 - k_i \gamma \varepsilon] + \sum_{k \neq j} M_{ki}(t) \gamma \varepsilon \\ &= M_{ji}(t)[1 - \varepsilon H_{jj}] - \varepsilon \sum_{k \neq j} M_{ki}(t) H_{jk} \\ &= M_{ji}(t) - \varepsilon M_{ji}(t) H_{jj} - \varepsilon \sum_{k \neq j} M_{ki}(t) H_{jk} \\ M_{ji}(t + \varepsilon) - M_{ji}(t) &= -\varepsilon M_{ji}(t) H_{jj} - \varepsilon \sum_{k \neq j} M_{ki}(t) H_{jk} \\ \frac{M_{ji}(t + \varepsilon) - M_{ji}(t)}{\varepsilon} &= -M_{ji}(t) H_{jj} - \sum_{k \neq j} M_{ki}(t) H_{jk}, \end{aligned}$$

tomando o limite de  $\varepsilon \rightarrow 0$ , em ambos os lados, teremos, portanto

$$\frac{d}{dt} M_{ji}(t) = - \sum_k H_{jk} M_{ki}(t). \quad (3.36)$$

A Eq. 3.36 representa a probabilidade clássica da caminhada ir de um nó  $i$  até um nó  $j$  no tempo  $t$ , com probabilidade por unidade de tempo  $\gamma$ . A partir de agora, para deixarmos a notação como encontrada nos diversos trabalhos sobre o assunto, escreveremos a Eq. 3.36 da seguinte forma

$$\frac{d}{dt} p_{jk}(t) = - \sum_l T_{jl} p_{lk}(t), \quad (3.37)$$

onde  $p_{jk}(t)$  é a probabilidade de transição de encontrar o caminhante clássico no tempo  $t$  no nó  $j$  quando se inicia no nó  $k$  e deve satisfazer a relação  $\sum_j p_{jk}(t) = 1$ . Também consideramos  $H_{jk} \equiv T_{jl}$  e  $M_{ki}(t) \equiv p_{lk}(t)$ . Sendo  $|k\rangle$  o estado inicial do sistema localizado no nó  $k$ , devemos ter como condição inicial que  $\langle j|k\rangle \equiv p_{jk}(0) = \delta_{j,k}$ , onde  $\delta_{j,k} = 1$  para  $k = j$  e 0 de outra forma. Isto nos leva a formular que, após um tempo qualquer  $t$ , o caminhante deverá estar em algum estado  $|k; t\rangle$ , de modo que a sobreposição deste estado em relação ao nó de chegada  $j$  deverá ser  $\langle j|k; t\rangle \equiv p_{jk}(t)$ .

A dinâmica da caminhada clássica (CTRW), que leva o sistema ao estado  $|k; t\rangle$ , resulta das taxas de transição por unidade de tempo entre dois nós. Essas taxas de transição são os elementos da

chamada *matriz de transferência*  $\mathbf{T}$ , ou seja,  $T_{jk} \equiv \langle j|T|k\rangle$ , que está relacionada com o ganho ou a perda espacial [9] e foi introduzida na Eq. 3.37. A matriz de transferência relaciona-se com a matriz de conectividade através de  $\mathbf{T} \equiv -\gamma\mathbf{A}$ , onde assume-se  $\gamma \equiv 1$ , para todas as ligações, por questão de simplicidade.

A solução da Eq. 3.37 é dada por [1, 2]

$$p_{jk}(t) = \langle j|e^{\mathbf{T}t}|k\rangle = \langle j|e^{-\gamma\mathbf{A}t}|k\rangle = \sum_n e^{-\gamma\lambda_n t} \langle j|q_n\rangle \langle q_n|k\rangle, \quad (3.38)$$

onde escrevemos os autoestados de  $\mathbf{A}$  como  $|q_n\rangle$ .

Feito todo o tratamento anterior para uma CTRW, agora iremos, portanto, desenvolver a equação diferencial para o caso quântico (CTQW), nosso objetivo inicial. A ideia foi primeiramente implementada por Farhi e Gutmann [13], onde eles propuseram que a matriz de transferência clássica,  $\mathbf{T}$ , tem de ser o análogo clássico do Hamiltoniano quântico  $\mathbf{H}$ , estabelecendo-se, desta forma, que  $\mathbf{H} \equiv -\mathbf{T}$ ; uma vez que já sabemos a relação de  $\mathbf{T}$  e  $\mathbf{A}$ , podemos escrever  $\mathbf{H} \equiv \gamma\mathbf{A}$ . A dinâmica quântica para a caminhada aleatória é formulada no espaço de Hilbert  $N$ -dimensional; uma vez definida e construída a matriz de conectividade  $\mathbf{A}$  (que é real e simétrica, portanto Hermitiana), a identificamos com o Hamiltoniano quântico; a evolução da CTQW deverá obedecer a equação de Schrödinger, que é dada como [40]

$$i \frac{d}{dt} |k\rangle = \mathbf{H}|k\rangle, \quad (3.39)$$

com  $m \equiv 1$  e  $\hbar \equiv 1$ . Assumindo-se que os estados são ortonormais e completos, isto é,  $\langle j|k\rangle = \delta_{j,k}$  e  $\sum_k |k\rangle \langle k| = \mathbf{1}$ , teremos as amplitudes de transição  $\alpha_{jk}(t) \equiv \langle j|k;t\rangle$ , da seguinte forma

$$\frac{d}{dt} \alpha_{jk}(t) = -i \sum_l H_{jl} \alpha_{lk}(t). \quad (3.40)$$

A Eq. 3.40 é similar à Eq. 3.37 para uma CTRW, exceto pelo termo imaginário. A solução da Eq. 3.40 será

$$\alpha_{jk}(t) = \langle j|e^{-i\mathbf{H}t}|k\rangle = \langle j|e^{-i\gamma\mathbf{A}t}|k\rangle, \quad (3.41)$$

onde identificamos o termo  $e^{-i\mathbf{H}t}$  (Eq. 3.29) como sendo o operador evolução temporal da mecânica quântica. Desta forma, definimos a probabilidade de transição quântica como

$$\pi_{jk}(t) \equiv |\alpha_{jk}(t)|^2, \quad (3.42)$$

uma vez que a equação de Schrödinger preserva a probabilidade como uma soma das amplitudes ao quadrado, a Eq. 3.42 deve satisfazer  $\sum_j |\langle j|k;t\rangle|^2 = 1$ .

### 3.3.1 Limite de Longo Tempo

As probabilidades de transição para a CTQW e CTRW podem ser analisadas fazendo o tempo evoluir para um limite de longo tempo ( $t \rightarrow \infty$ ), desta forma, a partir da Eq. 3.38, teremos que para

$t \gg 1$  no somatório os termos exponenciais irão para 0. Os autovalores de  $\mathbf{A}$ , já mencionados, são reais e positivos e existe um único  $\lambda_{min} = 0$  ( $\lambda_1 = 0$ ), quando a estrutura é conectada. Escrevendo o autoestado relativo a  $\lambda_1$  como  $|q_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l |l\rangle$ , teremos [41]

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} p_{jk}(t) &= \lim_{t \rightarrow \infty} \left\{ \sum_n e^{-\lambda_n t} \langle j|q_n\rangle \langle q_n|k\rangle \right\} \\ &= \langle j|q_1\rangle \langle q_1|k\rangle \\ &= \frac{1}{N}. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Isto significa que para uma CTRW, cuja matriz de transferência  $\mathbf{T}$  segue diretamente da matriz de conectividade  $\mathbf{A}$ , a caminhada irá eventualmente decair para o valor de equipartição  $\frac{1}{N}$  [9].

Para o caso quântico (CTQW), a evolução temporal unitária impede que  $\pi_{jk}(t)$  tenha um limite definido para quando  $t \rightarrow \infty$ . Desta forma, para compararmos o limite de longo tempo da CTRW com o da CTQW, utilizamos a probabilidade limitante [36], ou seja, a média do limite de longo tempo de  $\pi_{jk}(t)$  [28, 41, 42]. Assim, teremos

$$\chi_{jk} \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \pi_{jk}(t') dt'. \quad (3.44)$$

Sendo os autoestados de  $\mathbf{H}$  denotados por  $|\Psi_n\rangle$  e válida a relação de completeza, fazemos

$$\begin{aligned} \chi_{jk} &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \left| \sum_n e^{-i\lambda_n t'} \langle j|\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|k\rangle \right|^2 dt' \\ &= \sum_{n,m} \langle j|\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|k\rangle \langle k|\Psi_m\rangle \langle \Psi_m|j\rangle \left( \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t e^{-i(\lambda_n - \lambda_m)t'} dt' \right) \\ &= \sum_{n,m} \delta_{\lambda_n, \lambda_m} \langle j|\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|k\rangle \langle k|\Psi_m\rangle \langle \Psi_m|j\rangle, \end{aligned} \quad (3.45)$$

onde  $\delta_{\lambda_n, \lambda_m} = 1$  se  $\lambda_n = \lambda_m$  e  $\delta_{\lambda_n, \lambda_m} = 0$  caso contrário. Devido à degenerescência de alguns autovalores de  $\mathbf{H}$ , a soma em Eq. 3.45 pode conter termos pertencentes a diferentes autoestados,  $|\Psi_n\rangle$  e  $|\Psi_m\rangle$ . Agora, podemos usar a desigualdade de Cauchy-Schwarz [43, 44]

$$\left| \int_0^t f(t)g(t) dt \right|^2 \leq \left( \int_0^t |f(t)|^2 dt \right) \left( \int_0^t |g(t)|^2 dt \right) \quad (3.46)$$

para obtermos um limite inferior da média de longo tempo. Com  $f(t) \equiv \alpha_{jk}(t)$  e  $g(t) \equiv 1$ , a Eq. 3.44 satisfaz a desigualdade da forma [41, 44]

$$\int_0^t |\alpha_{jk}(t)|^2 dt \geq \frac{1}{t} \left| \int_0^t \alpha_{jk}(t) dt \right|^2. \quad (3.47)$$

Substituindo este resultado em Eq. 3.44, teremos

$$\chi_{jk} \geq \lim_{t \rightarrow \infty} \left| \frac{1}{t} \int_0^t \sum_n e^{-i\lambda_n t'} \langle j | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | k \rangle dt' \right|^2. \quad (3.48)$$

O único termo da soma sobre  $n$  em Eq. 3.48 que sobrevive após a integração e a aplicação do limite de  $t \rightarrow \infty$ , é aquele com  $\lambda_1 = 0$ . O autoestado correspondente a  $\lambda_1$  pode ser escrito como  $|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N |l\rangle$  [44]. Com  $\langle j | \Psi_1 \rangle = \langle \Psi_1 | k \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}$ , a Eq. 3.48 torna-se

$$\begin{aligned} \chi_{jk} &\geq \lim_{t \rightarrow \infty} \left| \frac{1}{t} \int_0^t e^{-i\lambda_1 t'} \langle j | \Psi_1 \rangle \langle \Psi_1 | k \rangle dt' \right|^2 \\ &\geq \lim_{t \rightarrow \infty} \left| \frac{1}{t} \int_0^t \{ \langle j | \Psi_1 \rangle \langle \Psi_1 | k \rangle \} dt' \right|^2 \\ &\geq |\langle j | \Psi_1 \rangle \langle \Psi_1 | k \rangle|^2 \\ &= \frac{1}{N^2}. \end{aligned} \quad (3.49)$$

### 3.3.2 Eficiência da CTQW e CTRW

Uma dada rede é considerada eficiente quando uma excitação se espalha rapidamente por todos os seus nós, de modo que o caminhante visita cada vértice em um tempo relativamente curto [45]. Essa eficiência pode ser determinada usando diferentes aproximações, como por exemplo, através da densidade de estados e degenerescência de autovalores, processos de absorção, número de Pólya entre outros [45] (ver referências dentro).

A probabilidade para uma CTRW ir do nó  $k$  ao nó  $j$  em um dado tempo  $t$  é escrita como na Eq. 3.38. Para uma CTQW assume-se que todos os estados  $|k\rangle$ , que representam os nós da rede, são ortonormais e é válida a relação de completeza [9, 41, 45], com a dinâmica descrita pelo Hamiltoniano quântico, identificado como  $\mathbf{H} = -\mathbf{T} = \mathbf{A}$  ( $\gamma \equiv 1$ ) [9]. Identificando os autovalores do Hamiltoniano  $\mathbf{H}$  por  $\lambda_n$  ( $n = 1, \dots, N$ ) e os autoestados ortonormalizados por  $|\Psi_n\rangle$ , podemos escrever a *probabilidade de transição* para a CTRW como

$$\begin{aligned} p_{jk}(t) &= \langle j | e^{\mathbf{T}t} | k \rangle \\ &= e^{-\lambda_n t} \langle j | k \rangle \\ &= e^{-\lambda_n t} \langle j | \left\{ \sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n| \right\} | k \rangle \\ &= \sum_n e^{-\lambda_n t} \langle j | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | k \rangle \end{aligned} \quad (3.50)$$

e para a CTQW, teremos

$$\begin{aligned}
\pi_{jk}(t) &= |\alpha_{jk}(t)|^2 \\
&= |\langle j|e^{-i\mathbf{H}t}|k\rangle|^2 \\
&= |e^{-i\lambda_n t}\langle j|k\rangle|^2 \\
&= \left| \sum_n e^{-i\lambda_n t} \langle j|\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|k\rangle \right|^2.
\end{aligned} \tag{3.51}$$

Nosso trabalho irá investigar, também, a *probabilidade média de retorno* como uma medida da eficiência do transporte clássico e quântico nas redes consideradas. Esta probabilidade é definida como a probabilidade do caminhante permanecer ou retornar ao nó inicial  $k$  passado um certo tempo  $t$ , como média sobre todos os nós [28]. Para a CTRW ela pode ser escrita como

$$\bar{p}(t) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N p_{kk}(t) \tag{3.52}$$

e para a CTQW escrevemos

$$\bar{\pi}(t) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \pi_{kk}(t). \tag{3.53}$$

Uma queda rápida de  $\bar{p}(t)$  ou  $\bar{\pi}(t)$  implica uma propagação rápida do caminhante na rede e uma queda lenta implica uma propagação lenta [28]. Podemos escrever as duas probabilidades médias de retorno de uma forma mais simples como função apenas dos autovalores da matriz de conectividade  $\mathbf{A}$ . Desta forma, encontramos para o caso clássico

$$\begin{aligned}
\bar{p}(t) &= \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \left\{ \sum_n e^{-\lambda_n t} \langle k|\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|k\rangle \right\} \\
&= \frac{1}{N} \sum_n e^{-\lambda_n t} \langle \Psi_n| \left\{ \sum_{k=1}^N |k\rangle \langle k| \right\} |\Psi_n\rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{-\lambda_n t},
\end{aligned} \tag{3.54}$$

e para o caso quântico podemos escrever

$$\bar{\pi}(t) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N |\alpha_{kk}(t)|^2, \tag{3.55}$$

onde, usando a desigualdade de Cauchy-Schwarz [43],  $|\sum_{k=1}^n a_k b_k|^2 \leq \sum_{k=1}^n |a_k|^2 \sum_{k=1}^n |b_k|^2$ , encontramos um limite inferior da forma



$$\begin{aligned}
\bar{\pi}(t) &= \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N |\alpha_{kk}(t)|^2 \left\{ \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N 1 \right\} \\
&\geq \left| \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \alpha_{kk} \right|^2 \\
&\geq \left| \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{-i\lambda_n t} \right|^2,
\end{aligned} \tag{3.56}$$

uma vez que  $\alpha_{kk} = \frac{1}{N} \sum_n e^{-i\lambda_n t}$  e  $\bar{\alpha}(t) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \alpha_{kk}(t)$ . Desta forma

$$\bar{\pi}(t) \geq \left| \frac{1}{N} \sum_n e^{-i\lambda_n t} \right|^2 = |\bar{\alpha}(t)|^2. \tag{3.57}$$

Uma vez encontradas as médias das probabilidades de transição para as CTRW e CTQW, estas grandezas podem ser usadas para quantificar a eficiência no processo de transporte [9, 28, 41]. Classicamente, uma rápida diminuição de  $\bar{p}(t)$  deve resultar - em média - num rápido aumento da probabilidade do caminhante estar em qualquer outro nó da rede, mas não no nó inicial  $j$ , onde a excitação teve origem. Assim, o transporte para fora do nó inicial  $j$  será mais eficiente quanto mais rápida for a diminuição de  $\bar{p}(t)$  [41, 45]. Quanticamente, temos que  $\bar{\pi}(t)$  e  $|\bar{\alpha}(t)|^2$  oscilam em torno de um certo valor médio. Há vantagem de se calcular  $|\bar{\alpha}(t)|^2$  em vez de  $\bar{\pi}(t)$ , uma vez que esta quantidade depende apenas dos autovalores de  $\mathbf{H}$ . Desta maneira podemos resolver o processo de transporte, em alguns tipos de rede, de forma analítica [45] ou de uma maneira mais rápida.

Para a CTQW, nem  $\bar{\pi}(t)$  nem  $|\bar{\alpha}(t)|^2$  diminuem para um determinado valor em longos períodos, mas sim oscilam em torno da média de longo tempo, que para  $\bar{\pi}(t)$  é dada por [9, 28, 41]

$$\bar{\chi} \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \bar{\pi}(t') dt', \tag{3.58}$$

utilizando a Eq. 3.53, teremos

$$\begin{aligned}
\bar{\chi} &= \frac{1}{N} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \left\{ \sum_{k=1}^N \left| \sum_n e^{-i\lambda_n t'} \langle k | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | k \rangle \right|^2 \right\} dt' \\
&= \frac{1}{N} \sum_{n,m} \delta_{\lambda_n, \lambda_m} |\langle k | \Psi_n \rangle|^2 |\langle k | \Psi_m \rangle|^2.
\end{aligned} \tag{3.59}$$

E, utilizando a desigualdade de Cauchy-Schwarz para obter o limite inferior de  $\bar{\chi}$ , independente dos autoestados, escrevemos

$$\bar{\chi} \geq \frac{1}{N^2} \sum_{n,m} \delta_{\lambda_n, \lambda_m}. \tag{3.60}$$

Essas médias de longo tempo nos fornecem indicações sobre o desempenho geral das caminhadas quânticas:

se elas forem maior que o valor de equipartição  $\frac{1}{N}$ , em média, maior parte da probabilidade será de encontrar o caminhante na origem de seu movimento.

### 3.3.3 Densidade de estados e Degenerescência de autovalores

Como havíamos mencionado no início da subseção anterior, a densidade de estados e degenerescência de autovalores podem ser consideradas boas aproximações para a medida de eficiência das caminhadas quânticas e clássicas. A densidade de estados contém informações essenciais sobre o sistema e permite que façamos uma análise das características que dependem apenas da topologia da rede [45]. Uma dessas características é a probabilidade média de retorno, que foi desenvolvida para a CTRW e CTQW, anteriormente (Eq. 3.52 e Eq. 3.53, respectivamente). Iremos, portanto, relacionar essas quantidades com a densidade de estados (ou densidade espectral), que é definida como

$$\rho(\lambda) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \delta(\lambda - \lambda_n), \quad (3.61)$$

onde  $\delta(\lambda - \lambda_n)$  é a “função” delta de Dirac.

Agora, tomando o limite inferior de  $\bar{\pi}(t)$ , com auxílio da Eq. 3.57, escrevemos

$$\begin{aligned} \bar{\pi}(t) &\geq |\bar{\alpha}(t)|^2 \\ \bar{\chi} \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \bar{\pi}(t') dt' &\geq \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t |\bar{\alpha}(t')|^2 dt' \equiv \chi. \end{aligned} \quad (3.62)$$

Geralmente, os valores da probabilidade média quântica de retorno de ordem  $\bar{\pi}(t) = \mathcal{O}(1)$ , para quase todos os  $t$ 's - em média - indicam uma alta probabilidade de uma excitação permanecer no nó inicial, mostrando ineficiência no transporte quântico. Porém, valores de  $\bar{\pi}(t) \ll 1$ , para quase todos os  $t$ 's indicam o contrário [46]. Desta forma, como um limite inferior,  $\chi$  é mais instrutivo se for de ordem  $\chi = \mathcal{O}(1)$ , que, por sua vez, implica que o valor exato  $\bar{\chi}$  também é de ordem  $\bar{\chi} = \mathcal{O}(1)$ . Mantendo-se o transporte quântico ineficiente. Mas, para  $\chi \ll \mathcal{O}(1)$ , não há implicação estrita em  $\bar{\chi}$ . No entanto, os resultados anteriores de nossa análise mostram que os máximos de  $\bar{\pi}(t)$  são bem reproduzidos pelo limite inferior  $|\bar{\alpha}(t)|^2$ , indicando, portanto, que os valores de  $\bar{\chi}$  estão próximos dos valores de  $\chi$  [9, 46].

Podemos, então, combinar as Eq.'s 3.62 e 3.61, para encontrarmos uma estimativa do valor de  $\chi$ , conhecendo apenas a densidade de estados. Teremos, com o auxílio de 3.57,

$$\begin{aligned}
\chi &\equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \left| \frac{1}{N} \sum_n e^{-i\lambda_n t'} \right|^2 dt' \\
&= \frac{1}{N^2} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \sum_{n,n'} e^{-i(\lambda_n - \lambda_{n'})t'} dt' \\
&= \frac{1}{N^2} \sum_{n,n'} \delta(\lambda_n - \lambda_{n'}) \\
&= \frac{1}{N} \sum_n \rho(\lambda_n) \\
&= \sum_{\lambda_n} \rho^2(\lambda_n), \tag{3.63}
\end{aligned}$$

onde  $\sum_{\lambda_n} \rho(\lambda_n) = 1$ .

Assim, para uma estrutura que possui um autovalor arbitrário  $\lambda^*$ , altamente degenerado, podemos aproximar  $\chi$  da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
\chi = \sum_{\lambda_n = \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N} \rho^2(\lambda_n) &\geq \rho^2(\lambda^*) + \sum_{\lambda_n \neq \lambda^*}^{\lambda_N} \rho^2(\lambda_n) \\
&\geq \rho^2(\lambda^*) + \frac{1}{N} \sum_n \rho(\lambda_n) \\
&\geq \rho^2(\lambda^*) + \frac{1}{N} [1 - \rho(\lambda^*)] \equiv \chi^*. \tag{3.64}
\end{aligned}$$

Ao analisarmos o valor de  $\chi$ , constatamos que para um transporte eficiente perfeito, isto ocorre para  $\chi = 0$ , enquanto que para  $\chi = 1$  o transporte é completamente ineficiente. Encontra-se em [46] que  $\chi^*$  fornece uma boa aproximação de  $\chi$  em duas situações extremas. A primeira corresponde ao caso de  $\lambda^*$  ser o único autovalor altamente degenerado, como acontece em uma rede estrela (*star*) com  $N - 1$  braços (ligações), para a qual é possível mostrar de forma direta que  $\chi = \chi^* = [2 + (N - 2)^2]/N^2$ , sugerindo um transporte ineficiente no limite de estruturas muito grandes, ou seja,  $\chi_\infty = 1$ . A segunda situação ocorre quando todos os autovalores são não-degenerados, como acontece com uma cadeia linear. Nesse caso, todos os autovalores possuem degenerescência  $\rho(\lambda) = \frac{1}{N}$ , que produz  $\chi = \chi^* = \frac{1}{N}$ . Desta forma, para cadeias lineares extremamente longas obtemos um transporte eficiente, isto é,  $\chi_\infty = 0$ . Há situações em que  $\chi^*$  não fornece uma boa aproximação para  $\chi$ , como foi mostrado para redes de dendrímeros multicamadas em [28].

---

# Resultados e Discussões

---

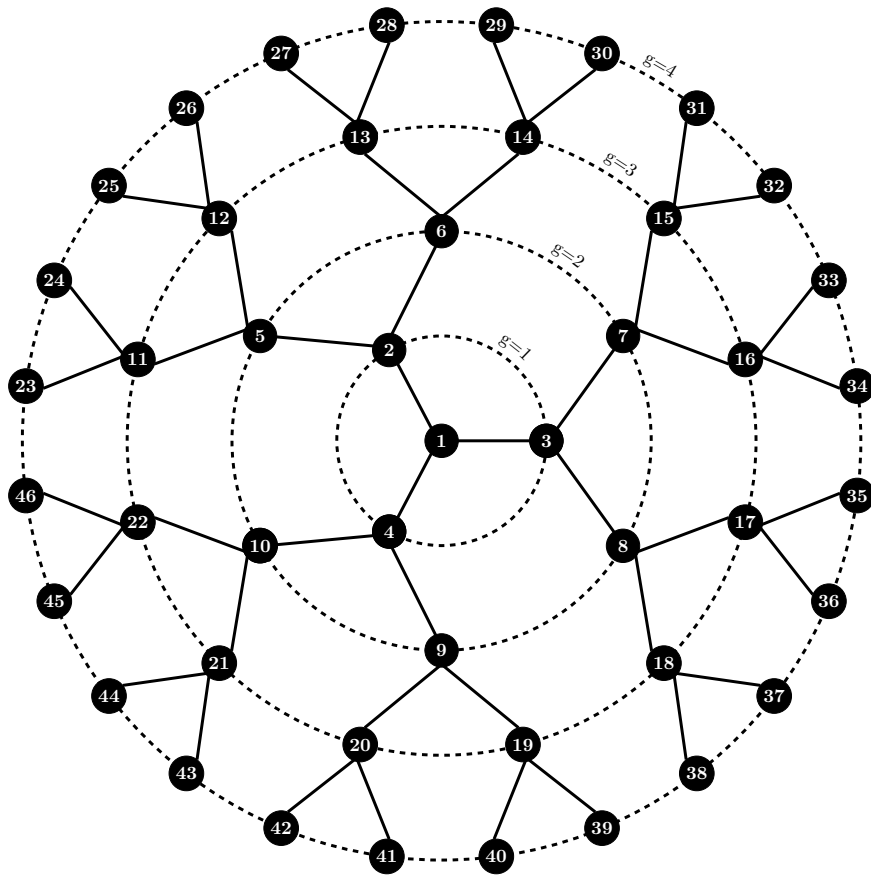
Neste capítulo serão apresentados os comportamentos encontrados da caminhada quântica de tempo contínuo na rede Dendrímero Modificado (Árvore de Cayley) que possuem apenas uma camada. Como descrito no capítulo 2, seção 2.3, a rede dendrímero modificado consiste da adição, com uma dada probabilidade  $p$ , de novas ligações entre nós vizinhos da mesma geração; uma vez conectadas novas ligações, a rede passará a ser chamada de *Spidernet*.

## 4.1 Contornos da Probabilidade $\pi_{j,k}(t)$

O primeiro resultado que apresentamos neste capítulo refere-se aos valores encontrados para a probabilidade de transição  $\pi_{j,k}(t)$  (Eq. 3.51), de uma caminhada quântica de tempo contínuo, que representa a probabilidade de um caminhante começar seu movimento no nó  $k$  e alcançar o nó  $j$  após um certo tempo  $t$ . As redes escolhidas para a obtenção desses valores correspondem à rede de dendrímero puro e modificado, ambas contendo o número de geração igual a  $G = 4$ , que corresponde a  $N = 46$  nós (figura 4.1).

O algoritmo desenvolvido neste trabalho, utilizado para a obtenção dos valores numéricos de  $\pi_{j,k}(t)$ , foi rodado para vários valores do parâmetro  $p$ , que estabelece a probabilidade de novas ligações serem adicionadas entre nós de mesma geração. Preferimos apresentar, nesta seção, apenas os resultados para os valores de  $p$  iguais a  $p = 0.0, 0.5$  e  $1.0$ .

Abaixo, em cada subseção, iremos mostrar como comporta-se a probabilidade  $\pi_{j,k}(t)$  (i) quando escolhido um nó inicial pertencente à periferia da rede, em seguida (ii) a relação dessa probabilidade com as quatro gerações de nossa rede e por fim (iii) mostramos os gráficos do contorno de  $\pi_{j,k}(t)$ .



**Figura 4.1** - Dendrômero com funcionalidade  $f_D = 3$ ,  $N_D = 46$  nós e geração  $G = 4$ . Esta rede servirá de análise para as subseções 4.1.1, 4.1.2 e 4.1.3. Nas duas últimas utilizaremos o parâmetro  $p$  para a adição de novas ligações entre os nós de mesma geração. As linhas pontilhadas demarcam as gerações da rede, elas não devem ser confundidas com ligações.

#### 4.1.1 Probabilidade $\pi_{j,23}(t)$

Na figura 4.2, apresentamos a probabilidade  $\pi_{j,23}(t)$  de um caminhante, que desloca-se a partir de um nó inicial e periférico, que escolhemos como sendo o nó 23, de estar localizado em um vértice  $j$  após um intervalo de tempo que varia entre 0 e 100, com passos de tempo 0.1.

No gráfico à esquerda (Fig. 4.2 (a)) plotamos o contorno de probabilidade da caminhada para uma *rede dendrômero puro*, ou seja, todos os nós possuem grau igual a 3 exceto os nós periféricos (da última geração) que possuem grau 1. A probabilidade de adição de novas ligações é mantida igual a  $p = 0.0$ . O que percebemos é uma caminhada pouco distribuída na rede, isto é, o caminhante tende a permanecer próximo de seus primeiros vizinhos, visitando os demais nós com baixa probabilidade. Na tabela 4.1 apresentamos os valores das probabilidades de localizarmos o caminhante em: nó 11, primeiro vizinho, nós 5 e 24, segundos vizinhos e nós 2 e 12, terceiros vizinhos. Estes nós estão presentes em um ramo da rede que tem início no vértice 2 e continuidade com o vértice 5. Há uma alta probabilidade de a caminhada estar no segundo vizinho, vértice 24, e no vértice inicial, 23. Tal comportamento deve-se ao fato das amplitudes de probabilidades deslocarem-se menos ao chegarem aos nós periféricos (24, 25 e 26, por exemplo) o que ocasiona uma maior concentração de probabilidade nessas regiões; ao alcançarem os nós 25 e 26, estas amplitudes tendem a retornar ao nó 12 que também recebe o retorno da caminhada vinda dos outros ramos da rede. Ao alcançar o nó 2, onde a caminhada encontra mais opções para seu

deslocamento, as amplitudes de probabilidades tendem a apresentar uma diminuição no seu valor. Desta forma, em um dendrúmero puro, a caminhada estará mais confinada em seus primeiros vizinhos.

**Tabela 4.1** - Amplitudes de probabilidades  $\pi_{j,23}(t)$  para uma CTQW, que inicia no nó 23 e propaga-se pela rede apresentada na figura 4.1. O valor de  $p$  é mantido constante e igual a  $p = 0.0$ , ou seja, temos um dendrúmero puro. A variação de tempo,  $\Delta t$ , está representada na primeira coluna e o nó alcançado pela caminhada,  $j$ , ocupa a primeira linha. Foram dados 100 passos de tempo com incrementos de 0.1.

$\Delta t \downarrow   j \rightarrow$	2	5	11	12	23	24
0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0
20 - 21	0.04	0.02	0.09	0.01	0.31	0.31
40 - 41	0.01	0.04	0.11	0.07	0.37	0.47
60 - 61	0.01	0.01	0.05	0.12	0.47	0.17
80 - 81	0.02	0.02	0.10	0.07	0.15	0.61
99 - 100	0.01	0.01	0.04	0.12	0.16	0.44

No gráfico à direita (Fig. 4.2 (b)) apresentamos novamente os contornos de probabilidade, mas dessa vez trata-se de uma *rede dendrúmero modificado*, no qual utilizamos o parâmetro  $p$  com valor igual a  $p = 0.5$ , isto é, adicionamos entre nós de mesma geração, 25 novas possíveis ligações de um total de 45. Entre estas novas ligações temos, por exemplo, os pares (23, 46), (11, 22), (11, 12) e (45, 46). Com estas novas ligações o caminhante percorre toda rede com amplitudes de probabilidade maiores. Na tabela 4.2 mostramos o mesmo tratamento realizado na tabela 4.1; nela colocamos os primeiros vizinhos para o nó 23 e suas respectivas probabilidades em cada intervalo de tempo considerado. Constatase uma alta probabilidade de localizarmos a caminhada no vértice 45, segundo vizinho, no vértice inicial e seu primeiro vizinho, nó 46. Com menor probabilidade para os demais vizinhos e vértices restantes da rede. Este comportamento ocorre devido ao fato dos três nós (com maior intensidade de probabilidade) possuírem mais ligações, estarem conectados diretamente com o vértice 23 e localizarem-se na periferia da rede, o que possibilita um maior retorno e permanência da caminhada. Assim, para uma rede dendrúmero modificado com parâmetro  $p$  igual a  $p = 0.5$ , o caminhante propaga-se em toda a rede, mas tem maior preferência de estar próximo ao nó de partida.

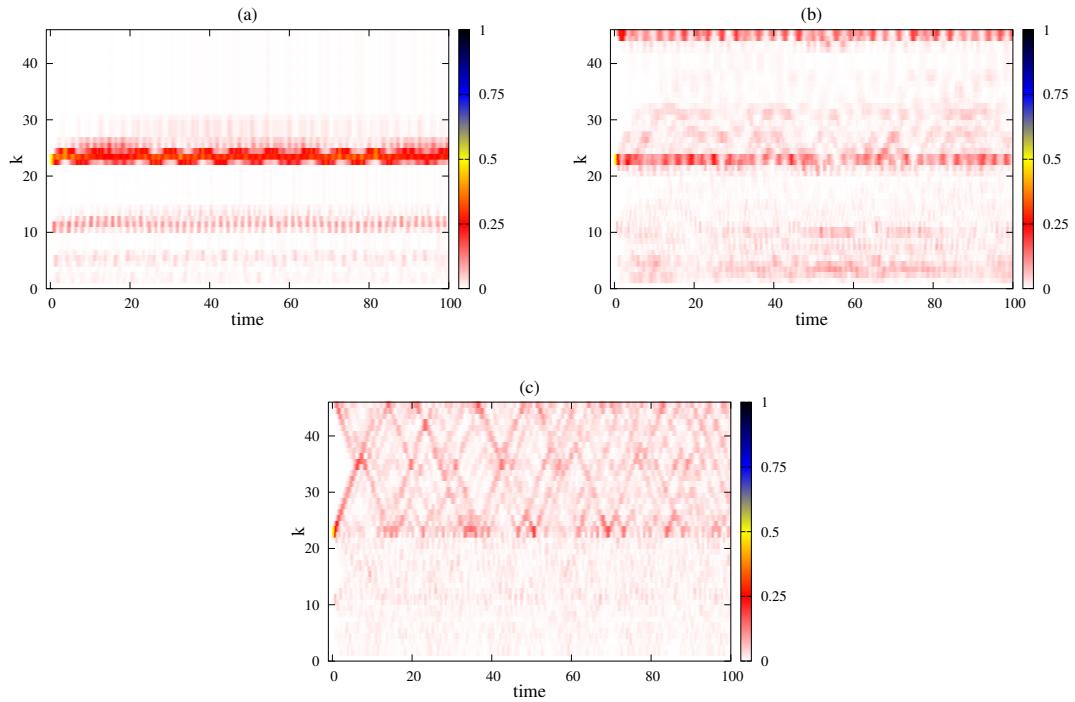
**Tabela 4.2** - Amplitudes de probabilidades  $\pi_{j,23}(t)$  para uma CTQW, que inicia no nó 23 e propaga-se pela rede apresentada na figura 4.1. O valor de  $p$  é mantido constante e igual a  $p = 0.5$ , ou seja, temos um dendrímero modificado (*spidernet*). A variação de tempo,  $\Delta t$ , está representada na primeira coluna e o nó alcançado pela caminhada,  $j$ , ocupa a primeira linha. Foram dados 100 passos de tempo com incrementos de 0.1.

$\Delta t \downarrow   j \rightarrow$	11	12	22	23	45	46
0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0
20 - 21	0.03	0.03	0.0	0.23	0.23	0.14
40 - 41	0.03	0.03	0.02	0.25	0.18	0.05
60 - 61	0.03	0.0	0.05	0.22	0.17	0.14
80 - 81	0.0	0.01	0.02	0.12	0.32	0.13
99 - 100	0.05	0.02	0.03	0.19	0.30	0.06

Por fim, no último gráfico (Fig. 4.2 (c)) apresentamos a evolução da probabilidade  $\pi_{j,23}(t)$  para uma rede do tipo *spidernet* completa, ou seja, com o valor de  $p$  igual a  $p = 1.0$  (valor máximo); todas as 45 possíveis ligações entre nós de mesma geração são adicionadas. Como podemos perceber, neste caso há uma maior propagação do caminhante por toda a rede, espalhando-se com maior rapidez, o que nos permite encontrá-lo com maior probabilidade em vértices mais distantes do inicial. Na tabela 4.3 mostramos os valores das probabilidades para nós próximo ao nó 23; a escolha foi feita com critérios de compararmos as probabilidades dos vizinhos mais próximos 24 e 46 (que estão na última geração) e o primeiro vizinho da geração anterior (11), com os segundos vizinhos (12 e 22) que também estão na geração anterior à última. Notamos que a caminhada tende a concentrar-se nos nós da periferia, mas visita, com probabilidade maior, vértices periféricos mais distantes. Outro aspecto importante deste caso refere-se ao tempo de renascimento (TR) (*revival times*), isto é, o tempo necessário para que o caminhante retorne à origem. Devido aos efeitos quânticos, isto ocorre em momentos diferentes e com intensidades diferentes. Podemos estabelecer duas categorias de TR: renascimento completo e parcial. Devido à complexidade da rede, não obteremos nenhum TR completo, mas apenas renascimentos parciais. Os tempos para um renascimento completo  $\bar{\tau}$  podem ser determinados a partir da resolução da equação  $\alpha_{j,k}(\bar{\tau}) = \alpha_{j,k}(0)$ , onde  $\alpha_{j,k}$  é a amplitude de transição entre dois nós, dada pela Eq. 3.57; mas uma solução analítica desta equação só é possível para anéis muito pequenos [9]. Neste trabalho, compreendemos por TR parcial (ou incompleto)  $\tau$ , calculado numericamente, aquele para o qual  $\pi_{j,k}(t)$  é superior a 0.5. Para uma rede dendrímero puro ( $p = 0.0$ ), Fig. 4.2 (a), descobrimos a maior probabilidade, de retorno à origem, sendo  $\pi_{23,23} \approx 0.64$  medida no tempo  $\tau = 78.0$ . Já para uma rede dendrímero modificado, com  $p = 0.5$ , mostrada na Fig. 4.2 (b), a probabilidade  $\pi_{23,23}$  tem seu maior valor igual a 0.42 encontrada no tempo  $\tau = 24.8$ . Agora, para uma *spidernet* completa, a maior probabilidade  $\pi_{j,k}(t)$  é obtida no tempo  $\tau = 50.5$  e seu valor é 0.37, que é menor que o nosso valor de corte 0.5. Lembramos que a análise é baseada no intervalo de tempo entre 0 e 100, com passos de tempo de tamanho 0.1. Considerando-se passos de tempo menores, outros valores para as probabilidades mais altas podem ser encontrados, mas a imagem geral é mantida. Portanto, conforme o valor de  $p$  aumenta, a caminhada tende a espalhar-se de forma mais eficiente pela rede considerada.

**Tabela 4.3** - Amplitudes de probabilidades  $\pi_{j,23}(t)$  para uma CTQW, que inicia no nó 23 e propaga-se pela rede apresentada na figura 4.1. O valor de  $p$  é mantido constante e igual a  $p = 1.0$ , ou seja, temos uma *spidernet* completa. A variação de tempo,  $\Delta t$ , está representada na primeira coluna e o nó alcançado pela caminhada,  $j$ , ocupa a primeira linha. Foram dados 100 passos de tempo com incrementos de 0.1.

$\Delta t \downarrow   j \rightarrow$	11	12	22	23	24	46
0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0
20 - 21	0.04	0.01	0.02	0.08	0.02	0.18
40 - 41	0.01	0.02	0.0	0.05	0.05	0.04
60 - 61	0.02	0.03	0.01	0.08	0.04	0.03
80 - 81	0.02	0.05	0.03	0.07	0.03	0.05
99 - 100	0.03	0.03	0.01	0.13	0.08	0.07



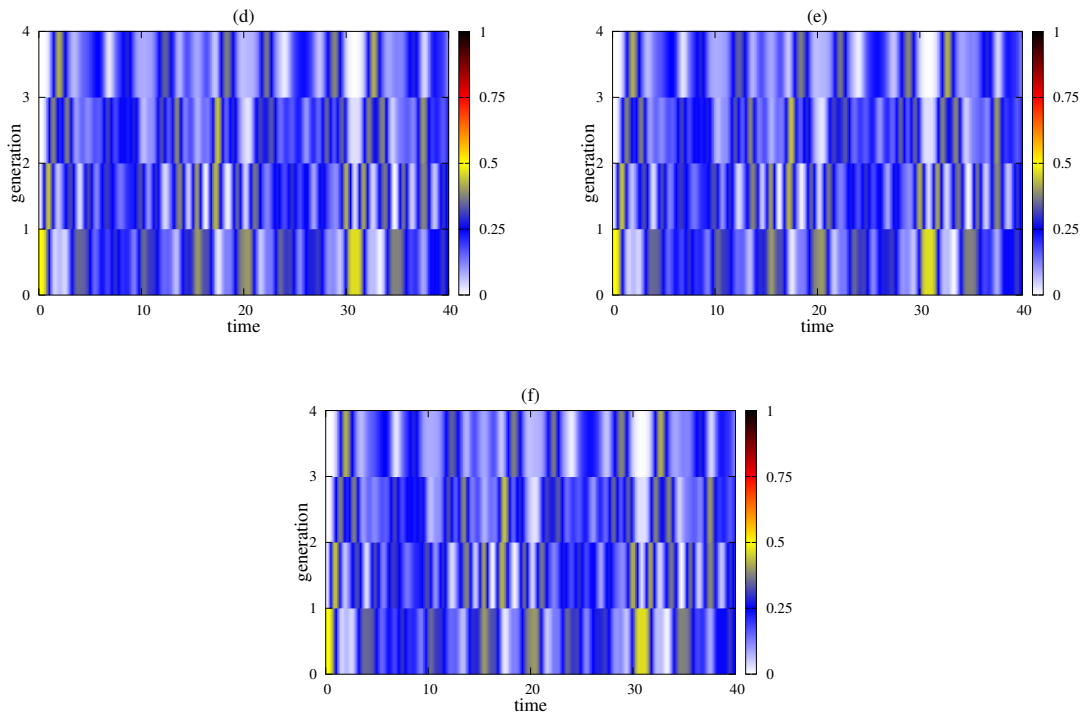
**Figura 4.2** - Estruturas espaço-tempo para a probabilidade  $\pi_{j,23}(t)$ . Em (a) temos o comportamento da caminhada para um dendrímtero puro; em (b) para uma *spidernet* com  $p = 0.5$ ; em (c) para uma *spidernet* completa ( $p = 1.0$ ). Todas as estruturas possuem geração  $G = 4$  e 100 passos de tempo com incrementos de 0.1.

#### 4.1.2 Probabilidade $\pi_{j,k}(t)$ correlacionada à geração $g$

Na figura 4.3 monitoramos a probabilidade de uma caminhada ser localizada em qualquer nó das quatro gerações a partir do nó central, nó 1 (ver figura 4.1). Podemos constatar que há poucas diferenças no comportamento da caminhada, dadas as redes geradas a partir da escolha do parâmetro  $p$ . Em nossa escolha apresentamos o comportamento para  $p = 0.0$ ,  $p = 0.5$  e  $p = 1.0$ , que correspondem à figura 4.3 (d), (e) e (f), respectivamente. Aqui, fazemos uma mudança no índice  $j$  da Eq. 3.51 para o considerarmos



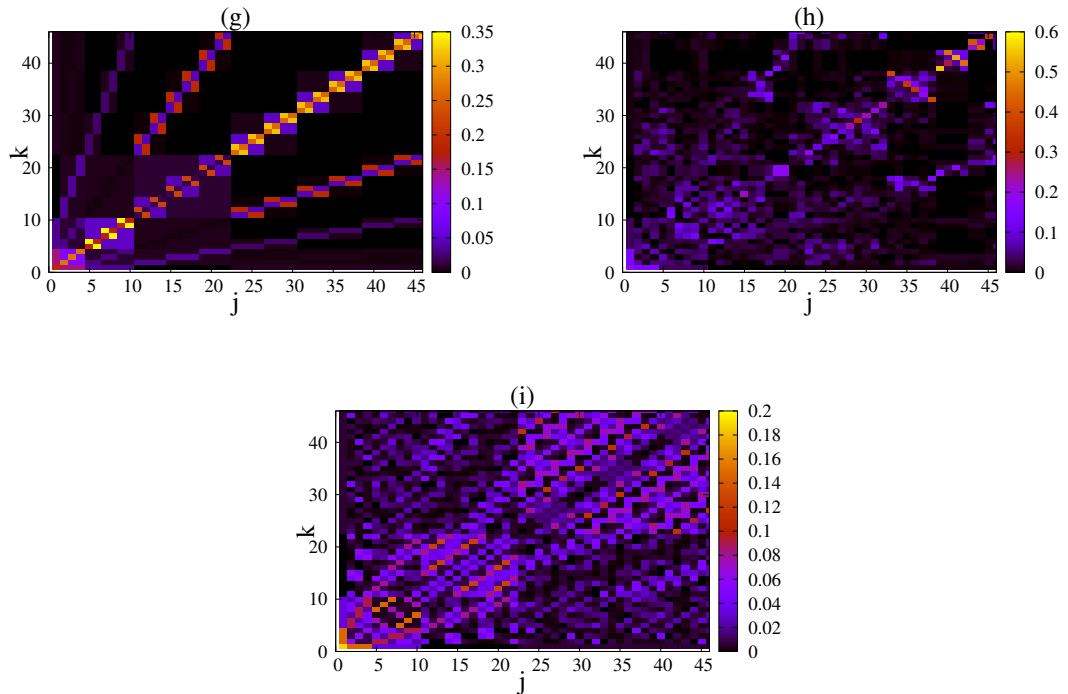
agora como sendo a geração  $g$  a qual pertencem os nós  $j$ 's. O valor para a probabilidade de o caminhante estar na geração  $g = 1$ , que compreende os nós 2, 3 e 4, é maior para  $\pi_{g=1,1}(t = 15.2) \approx 0.65$ , seguida de perto por  $\pi_{g=1,1}(t = 35.5) \approx 0.64$ . A probabilidade de estar localizado na geração  $g = 2$  é a maior para  $\pi_{g=2,1}(t = 17.3) \approx 0.77$  e para a geração  $g = 3$  é de  $\pi_{g=3,1}(t = 12.0) \approx 0.58$ . Já a probabilidade do caminhante situar-se em qualquer nó periférico, partindo do nó central, tem seu máximo igual a  $\pi_{g=4,1}(t = 28.8) \approx 0.44$ . Todos estes resultados são independentes do valor de  $p$ . Isto se deve ao fato de que as ligações adicionais conectam os nós de mesma geração, desta forma, a probabilidade  $\pi_{g,1}(t)$  de encontrar o caminhante na mesma geração deve ser praticamente inalterada.



**Figura 4.3** - Estruturas espaço-tempo para a probabilidade  $\pi_{g,1}(t)$ , em que  $g$  representa a geração. Em (d) temos o comportamento da caminhada para um dendrímoro puro; em (e) para uma *spidernet* com  $p = 0.5$ ; em (f) para uma *spidernet* completa ( $p = 1.0$ ). Todas as estruturas possuem geração  $G = 4$  e 40 passos de tempo com incrementos de 0.1.

### 4.1.3 Contornos de probabilidade $\pi_{j,k}(10)$

Por fim, na figura 4.4, mostramos os contornos da probabilidade  $\pi_{j,k}(t)$ , medida em  $t = 10$ , para uma CTQW sobre as mesmas estruturas analisadas anteriormente: dendrímoro puro ( $p = 0.0$ ), dendrímoro modificado ( $p = 0.5$ ) e *spidernet* completa ( $p = 1.0$ ), figura 4.4 (g), (h) e (i), respectivamente. Para uma rede dendrímoro puro podemos notar claramente fortes efeitos de localização: a caminhada tende a manter-se no nó inicial e visita, com maior probabilidade, nós mais próximos. Por exemplo, caso a caminhada encontre-se no vértice 25 ela terá maior probabilidade e permanecer em 25 ou deslocar-se para os nós 26, 11 e 12 que são seus primeiros vizinhos.



**Figura 4.4** - Estruturas espaço-tempo para a probabilidade  $\pi_{j,k}(10)$ . Em (g) temos o comportamento da caminhada para um dendrímoro puro; em (h) para uma *spidernet* com  $p = 0.5$ ; em (i) para uma *spidernet* completa ( $p = 1.0$ ). Todas as estruturas possuem geração  $G = 4$  e foram verificadas para o tempo  $t = 10$ .

Ao ativarmos o parâmetro  $p$  novas ligações são adicionadas, aumentando o comprimento dos segmentos lineares que unem os nós da rede, e desta forma a caminhada tende a espalhar-se mais. Este aspecto é mais visível para quando  $p = 1.0$ , pois todos os nós de mesma geração estão ligados através de uma cadeia linear. No entanto, o efeito de localização ainda é predominante para as gerações internas, isto se deve ao fato de que os segmentos lineares são menos pronunciados. Para CTQW's que começam a partir do nó central, há maior concentração de probabilidade em nós que são vizinhos mais próximos, por exemplo:  $\pi_{1,1} \approx 0.18$  ( $g = 0$ ),  $\pi_{2,-4,1} \approx 0.14$  ( $g = 1$ ) e  $\pi_{5,-10,1} \approx 0.03$  ( $g = 2$ ). Para nós periféricos observamos uma melhor distribuição da probabilidade total.

## 4.2 Espectro de Autovalores

Na figura 4.5, mostramos o espectro de autovalores para a rede dendrímico puro ( $p = 0.0$ ) e para as *spidernets* com o parâmetro  $p$  contido no intervalo  $0.1 \leq p \leq 1.0$ . Podemos observar em Eq. 3.54 e Eq. 3.57 que precisamos determinar todo o espectro de autovalores da matriz de conectividade  $\mathbf{A}$ , relacionada às nossas estruturas. Escolhemos o número de geração igual a  $G = 8$  e  $S = 40$  realizações diferentes. No que se segue, não apresentaremos os detalhes da avaliação dos autovalores, pois o foco de nossa pesquisa é analisarmos a influência destes autovalores nas propriedades das caminhadas quânticas. De imediato, é possível observarmos o espectro completamente discreto do dendrímico puro, no qual o autovalor mais degenerado é o de valor 1, que possui multiplicidade igual a  $3 \cdot 2^{G-2}$  [26,27]. Ao ativarmos o parâmetro  $p$  percebemos que este espectro discreto desaparece, o que é devido à adição de novas ligações na rede. Para  $p \geq 0.6$  o espectro de autovalores torna-se praticamente contínuo. Isto é importante, pois foi encontrado para cadeias lineares o mesmo comportamento quanto aos autovalores, indicando um aumento na eficiência quântica. Notamos também, na figura 4.5, que para autovalores muito pequenos (abaixo de 0.1) o comportamento discreto desaparece logo a partir de  $p = 0.1$ , mas para  $p = 1.0$  (*spidernet* completa) encontramos uma coleção de vários autovalores duplamente degenerados. Para a determinação dos autovalores da matriz de conectividade  $\mathbf{A}$ , foram feitos cálculos numéricos, mas para o caso de um dendrímico puro, estes autovalores podem ser determinados de forma analítica [26,27]. Faremos um resumo de como é obtido o espectro de autovalores para um dendrímico puro ( $p = 0.0$ ) com funcionalidade  $f_D = 3$  e de geração  $G$ . Para o dendrímico puro existem duas classes de autovalores: os autovalores *simétricos*, que são não degenerados, e os *anti-simétricos*, que apresentam degenerescência [28]. Em primeiro lugar, o grupo simétrico é formado por  $G$  autovalores não degenerados, que possuem a forma

$$\lambda_k^{(s)} = 3 - 2\sqrt{2} \cos\left(\frac{\pi k}{G+1}\right), \text{ com } k = 1, \dots, G. \quad (4.1)$$

Além disso, temos o autovalor totalmente simétrico  $\lambda_{G+1}^{(s)} = 0$ . Em segundo lugar, para o caso geral, os grupos de autovalores anti-simétricos são determinados pela resolução do sistema de duas equações:

$$\lambda_k^{(n)} = 3 - 2\sqrt{2} \cos \psi_k \quad (4.2)$$

e

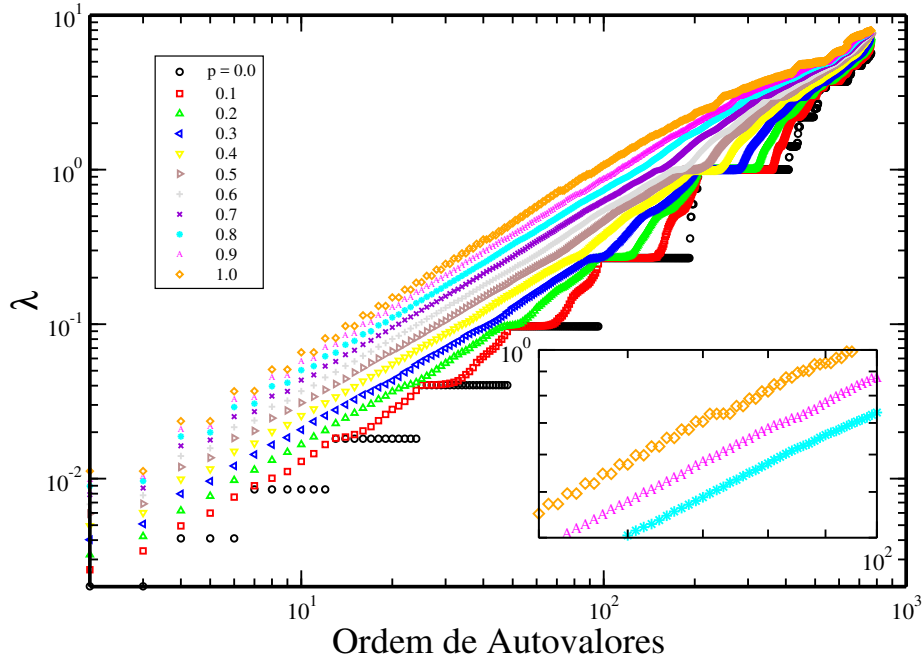
$$\sin(G+1-m)\psi_k = \sqrt{2} \sin(G-m)\psi_k, \quad (4.3)$$

onde  $m$  (com  $0 \leq m < G-1$ ) denota o número da última geração em que todos os nós estão imóveis. A partir destas equações, obtemos  $(G-m)$  soluções distintas se  $(G-m+1) > \sqrt{2}(G-m)$ . Caso contrário, existem  $(G-m-1)$  autovalores distintos da forma como mostrado em Eq. 4.3 e um autovalor adicional da forma hiperbólica, dado por

$$\Lambda^{(n)} = 3 - 2\sqrt{2} \cosh \psi, \quad (4.4)$$

onde  $\psi$  satisfaz a seguinte equação

$$\sinh(G - m + 1)\psi = \sqrt{2} \sinh(G - m)\psi. \quad (4.5)$$



**Figura 4.5** - Espectro de autovalores de um dendrímtero puro ( $p = 0.0$ ) (círculos pretos), e das *spidernets* com  $p = 0.1, \dots, 1.0$  (demais cores). A estrutura considerada consiste de  $G = 8$  gerações e  $N = 766$  nós. Podemos notar o comportamento discreto dos autovalores do dendrímtero puro e, para o caso em que  $p$  é ativado, observamos um comportamento contínuo no espectro. Este comportamento será responsável pelo aumento da eficiência quântica.

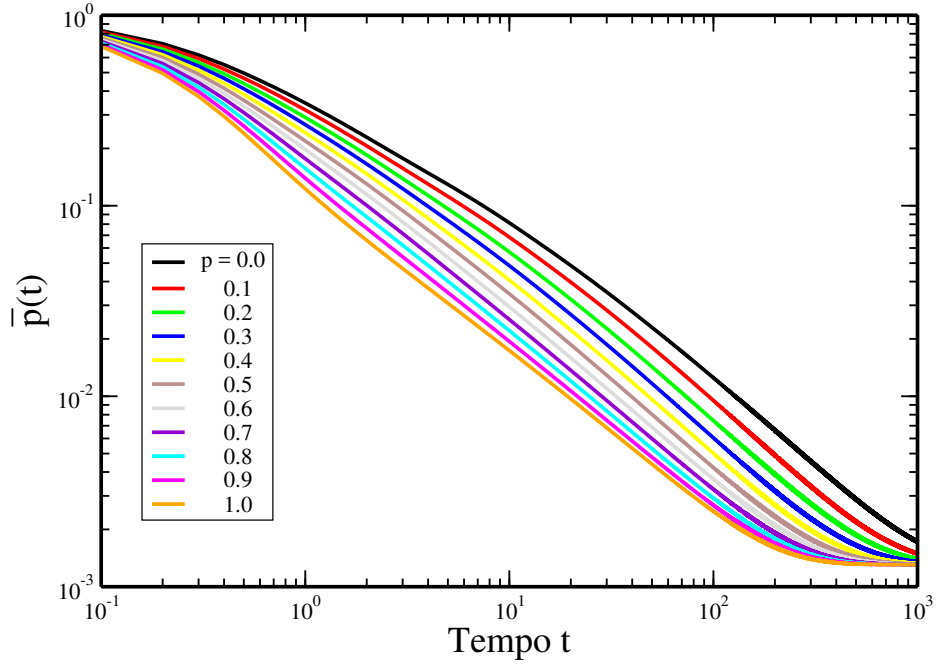
Assim, podemos resumir que, para cada  $m$ , temos  $(G - m)$  autovalores distintos, que são  $3 \cdot 2^{m-1}$  degenerados, exceto para  $m = 0$ , que são duplamente degenerados. O caso especial de  $m = G - 1$  dá origem a um autovalor  $3 \cdot 2^{G-2}$  degenerado  $\lambda = 1$ .

### 4.3 Probabilidades Médias de Retorno Clássica e Quântica

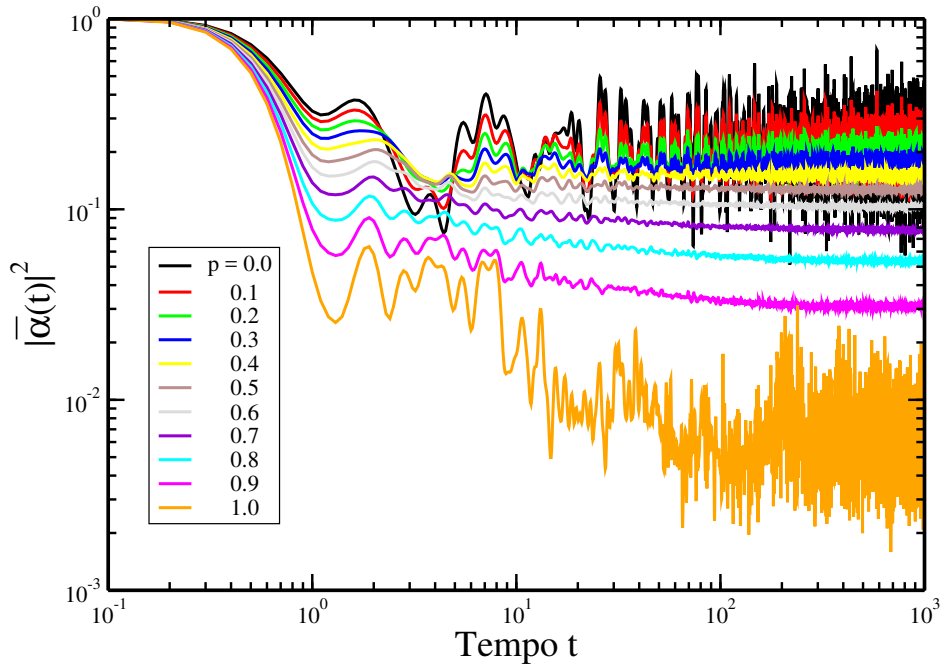
Nesta seção iremos apresentar o comportamento das probabilidades médias, clássica  $\bar{p}(t)$  (CTRW) e quântica  $|\bar{\alpha}(t)|^2$  (CTQW), da caminhada retornar ao seu ponto de partida inicial; estas são representadas pelas Eq.'s 3.54 e 3.57, respectivamente.

Na figura 4.6 mostramos o comportamento de  $\bar{p}(t)$  para uma rede de geração  $G = 8$ ,  $S = 40$  realizações e com o parâmetro  $p$  variando de 0.0 até 1.0, com passos de 0.1. Podemos constatar que para todos os valores de  $p$  o comportamento da probabilidade média clássica em tempos muito longos é bem recuperado; seu comportamento assintótico tende para o valor de equipartição  $\frac{1}{N}$ . Para o caso de um dendrímero puro ( $p = 0.0$ ) este valor começa a ser alcançado com tempo  $t > 1000$  passos, com passos de tamanho 0.1; enquanto que para uma *spidernet* completa ( $p = 1.0$ ) a caminhada alcança este resultado próximo a  $t = 400$  passos. Este decaimento mais rápido de  $\bar{p}(t)$  ocorre devido ao fato que para uma *spidernet* a funcionalidade dos vértices aumenta conforme o parâmetro  $p$  tem seu valor elevado, resultando assim em um melhor transporte do caminhante na rede.

A figura 4.7 apresenta o análogo quântico do caso clássico, a probabilidade média  $|\bar{\alpha}(t)|^2$ . A análise é feita para o mesmo conjunto de parâmetros anteriores ( $G$ ,  $S$  e  $p$ ). Notamos que para um dendrímero puro ( $p = 0.0$ ) a caminhada permanece próxima ao ponto de partida, o que significa que o transporte quântico para vértices mais afastados é altamente improvável. Já havíamos observado este comportamento ao estudarmos o transporte em uma rede com número de gerações menor (subseção 4.1.1). Mas, ao adicionarmos novas ligações entre nós da mesma geração, aumentamos a probabilidade da caminhada alcançar vértices mais distantes. Quando o valor de  $p$  é máximo ( $p = 1.0$ ), o transporte quântico é reforçado por quase duas ordens de grandeza. Neste caso, a probabilidade média desaparece suavemente até atingir o equilíbrio, parecido com o comportamento de uma única cadeia linear [28]. Observa-se que para valores de  $p$  compreendidos no intervalo  $0.0 \leq p \leq 0.3$  e para  $p = 1.0$ , a oscilação de  $|\bar{\alpha}(t)|^2$  é fortemente presente, diminuindo drasticamente para  $0.5 \leq p \leq 0.9$ , alcançando dessa forma um comportamento mais estável.

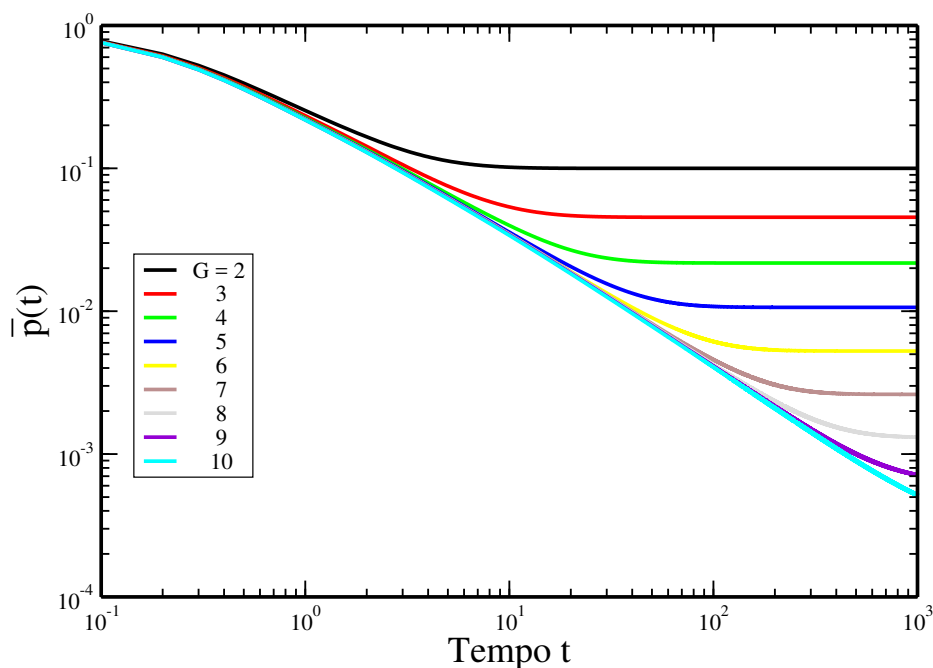


**Figura 4.6** - Probabilidade média de retorno  $\bar{p}(t)$  para uma CTRW. Mantivemos a geração fixa em  $G = 8$  e variamos o parâmetro  $p$  de 0.0 até 1.0. Observa-se um lento decaimento de  $\bar{p}(t)$  para  $p = 0.0$ , devido a conectividade da rede. Ao ligarmos o parâmetro  $p$ ,  $\bar{p}(t)$  decai mais rapidamente, atingindo o equilíbrio em menor tempo, melhorando assim o transporte clássico.

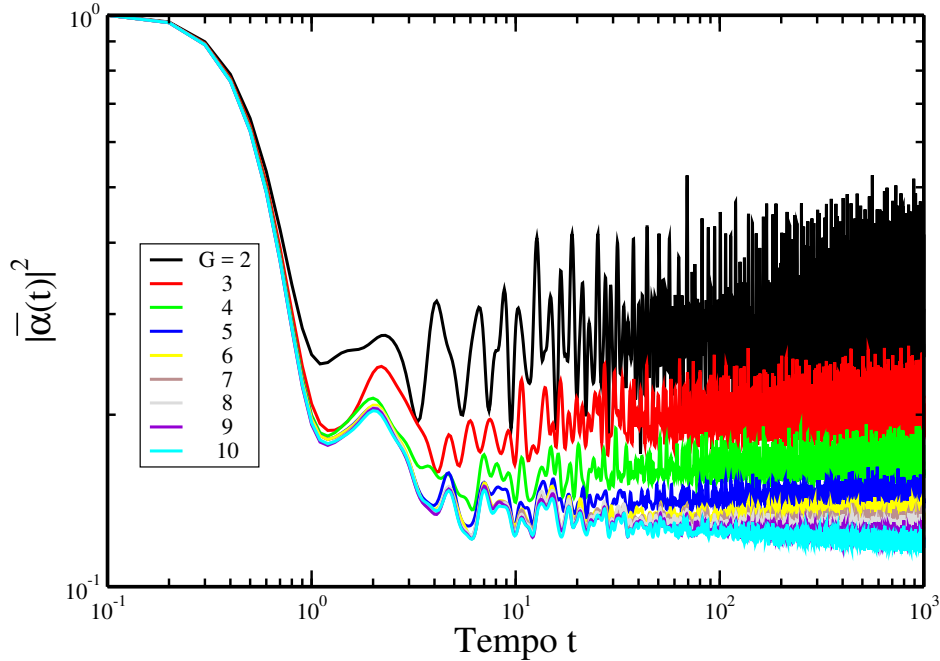


**Figura 4.7** - Probabilidade média de retorno  $|\bar{\alpha}(t)|^2$  para uma CTQW. Mantivemos a geração fixa em  $G = 8$  e variamos o parâmetro  $p$  de 0.0 até 1.0. Observa-se um forte comportamento oscilatório de  $|\bar{\alpha}(t)|^2$  para  $p \leq 0.3$  e  $p = 1.0$ . Ao aumentarmos o parâmetro  $p$ ,  $|\bar{\alpha}(t)|^2$  oscila mais fracamente, melhorando assim o transporte quântico na rede.

Agora, nas figuras 4.8 e 4.9, mantivemos o parâmetro  $p$  fixo em  $p = 0.5$  e variamos o número de geração  $G$ , indo de 2 até 10. Para cada valor de  $G$ , escolhemos o número de realizações tais que  $S \cdot N_D \approx 30700$ , isto é, procuramos melhorar a estatística de nossos resultados, a partir de uma referência que é a quantidade de nós presentes em nossa rede de maior geração (para  $G = 10$  temos  $N_D = 3070$  nós). Para  $G = 10$ , por exemplo, o número de realizações será igual a  $S = 10$ , para  $G = 9$  será  $S = 20$ , para  $G = 8$  será  $S = 40$ , assim por diante. Para uma CTRW, com redes de baixa geração, o transporte da caminhada ocorre mais rapidamente devido à pequena quantidade de nós. Para  $G = 2$ , por exemplo, com adição de algumas ligações entre vértices de mesma geração, a caminhada tende a ir para o valor de equilíbrio muito mais rápido, diferentemente do que ocorre para  $G = 10$ , que com um total de 3070 vértices, leva mais tempo para ser percorrida, daí seu comportamento assintótico ocorrer acima de  $10^3$  passos de tempo. Já para uma CTQW, em redes pequenas,  $G \leq 4$ , o comportamento oscilatório é mais pronunciado do que para *spidernets* com número de geração mais elevado. De imediato notamos que a probabilidade média diminui quando  $G$  é maior, sugerindo um melhor transporte quântico. No entanto, essa diminuição da probabilidade ocorre até que um determinado número de geração seja atingido, para nossa escolha de parâmetros isto ocorre em  $G = 7$ . Para uma *spidernet* com  $G = 10$  obtivemos, no limite de longo tempo,  $|\bar{\alpha}(t)|^2 \approx 0.12$ , que é apenas 0.005 inferior à probabilidade média de uma *spidernet* com  $G = 7$ .



**Figura 4.8** - Probabilidade média de retorno  $\bar{p}(t)$  para uma CTRW. Variamos o número de geração de 2 até 10, e mantivemos fixo o parâmetro  $p$  em  $p = 0.5$ . Nota-se que, para quanto maior o número de gerações, mais longo é o tempo para a caminhada alcançar o valor de equilíbrio. Isto é devido a quantidade elevada de nós que o caminhante clássico visita na rede.



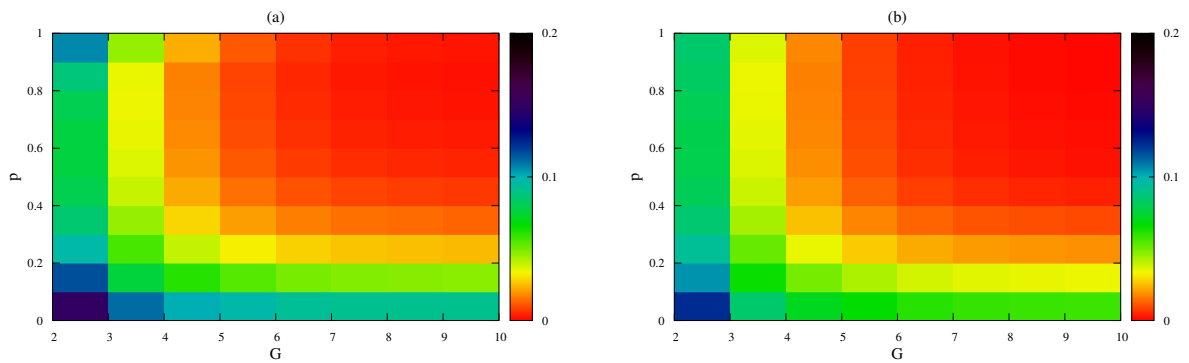
**Figura 4.9** - Probabilidade média de retorno  $|\bar{\alpha}(t)|^2$  para uma CTQW. Variamos o número de geração de 2 até 10, e mantivemos fixo o parâmetro  $p$  em  $p = 0.5$ . Nota-se que, para quanto maior o número de gerações, menor a oscilação de  $|\bar{\alpha}(t)|^2$  em torno de um valor médio.

## 4.4 Medida da Eficiência de Transporte $\chi$

Como último resultado, apresentamos na Fig. 4.10 (a) a medida da eficiência de transporte  $\chi$  e sua aproximação  $\chi^*$ , Fig. 4.10 (b). A expressão para as duas quantidades está representada em Eq. 3.64, ambas em função do número de geração  $G$  e do parâmetro  $p$ . Este resultado está representado através de um mapa bidimensional, no qual as cores fornecem a qualidade da eficiência. Devemos ter em mente que, o transporte quântico é mais eficiente quanto menor for o valor de  $\chi$ , ou seja, para  $\chi = 0$  temos um máximo de eficiência. Por sua vez, quanto maior o valor de  $\chi$  menor será a eficiência de transporte na rede, no qual o máximo é igual a  $\chi = 1$ . A região em vermelho, com maior contraste, na Fig. 4.10 (a) nos indica claramente um aumento no transporte quântico, que ocorre para número de gerações maiores. Todavia, como observado na figura 4.9,  $\chi$  diminui drasticamente o seu valor para redes com  $G \geq 7$ . Analisando a figura 4.10 percebemos que, uma vez fixado o valor de  $G$  e aumentado o parâmetro  $p$ , o transporte quântico é melhor obtido. Esse aumento é bastante relevante, com quase três ordens de grandeza. Por exemplo, ao analisarmos uma rede dendrítico puro ( $p = 0.0$ ), com  $G = 10$ , encontramos  $\chi \approx 0.119$  e para uma *spidernet* ( $p = 0.9$ ) o valor obtido é  $\chi \approx 0.0018$ . Já quando a *spidernet* está completa ( $p = 1.0$ ), o valor de  $\chi$  tem um aumento, e seu valor é dado por  $\chi \approx 0.003$ . Na Fig. 4.10 (a), a cada geração, aumentando-se o valor de  $p$ , observamos que  $\chi$  diminui até certo valor de  $p$  e depois volta a aumentar; isto está melhor visível para redes de geração baixa. Além disso, para *spidernets* com  $G < 4$  o valor mínimo de  $\chi$  é encontrado quando  $p = 0.8$ .

Esta descoberta pode ser explicada pelo fato de que o transporte quântico em uma linha é mais eficiente do que o transporte em um anel com o mesmo número de nós. Para uma melhor visualização do problema, ver figura 4.11. Para  $p = 1.0$ , as ligações possíveis entre todos os nós da mesma geração são adicionadas, o que leva à criação de círculos, enquanto que para  $p \approx 0.9$  construímos linhas longas, quando analisamos redes com gerações elevadas. O que encontramos é um valor cada vez menor para

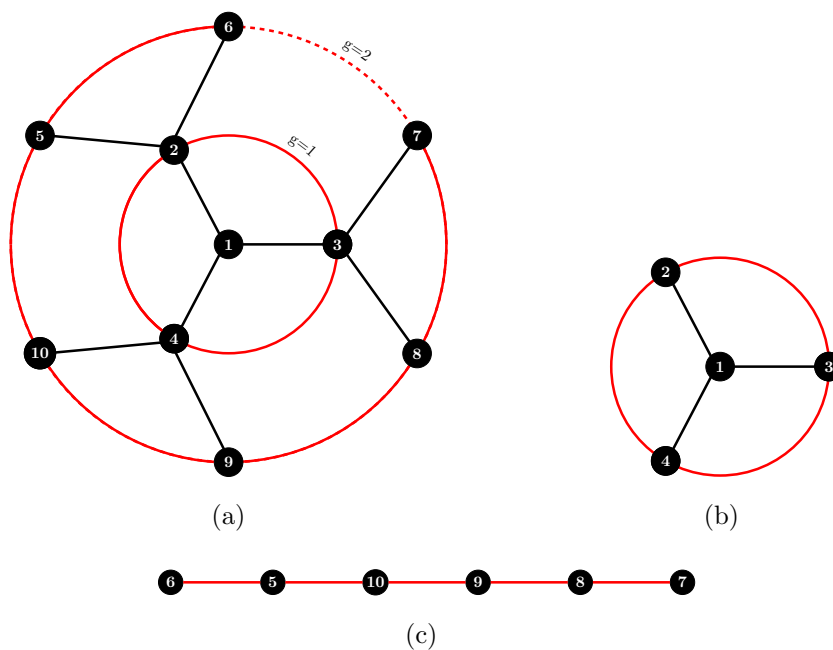




**Figura 4.10** - Em (a) temos a probabilidade média de longo tempo  $\chi$ , e sua aproximação  $\chi^*$  em (b), para redes de dendrimeros modificadas. A cor vermelho em maior contraste indica um pequeno valor de  $\chi$ , apontando para uma forte eficiência de transporte quântico na rede.

$\chi$  conforme vamos aumentando o tamanho da linha criada entre os nós de mesma geração, até próximo de completarmos o círculo. O valor de  $\chi$  correspondente a um dendrimer puro aproxima-se do valor assintótico de um dendrimer, que vale  $\chi_D^\infty \approx 0.111$ , enquanto o valor mínimo,  $\chi(p = 0.9, G = 10) \approx 0.0018$ , é inferior a uma ordem de grandeza maior que a do valor correspondente a uma linha com  $N$  vértices:  $\chi_{linha}^N \approx \frac{1}{N}$ .

Quanto aos valores aproximados de  $\chi$ , observamos que  $\chi^*$  (Fig. 4.10 (b)) possui o mesmo comportamento dos valores exatos, mas a aproximação não é válida: existem diferenças de quase uma ordem de magnitude entre esses valores. Esta descoberta está relacionada com o espectro de autovalores, que para nossas redes não é tão discreto como no caso de algumas estruturas do tipo árvore (*treelike*) [46].



**Figura 4.11** - Rede dendrímico modificado em (a), com  $G = 2$  e  $p \approx 0.9$ . Descobrimos que, para círculos fechados, como mostrada em (b), o valor da eficiência  $\chi$  aumenta, mas caso a adição de novas ligações formem uma linha, como em (c), então o valor de  $\chi$  será o menor, apontando para uma melhor eficiência na rede. Isto era de se esperar, pois a eficiência do transporte quântico é maior em uma linha do que em um anel com  $N$  vértices.

# Considerações Finais

Pretendíamos, com este trabalho, analisar o comportamento das caminhadas quânticas de tempo contínuo na rede dendrímico modificado, isto é, as *spidernets*. Começamos com o estudo de tais caminhadas na rede dendrímico puro (ou Árvores de Cayley), com todos os nós possuindo funcionalidade  $f_D = 3$ , exceto os nós periféricos (última geração). Depois, ao ativarmos o parâmetro  $p$ , que representa a probabilidade de adicionarmos novas ligações entre nós da mesma geração, fizemos a análise da caminhada, com o intuito de conhecermos a eficiência do transporte clássico e quântico em nossa estrutura.

Constatou-se que para um dendrímico puro, a caminhada quântica possui dificuldades para se propagar pela rede, concentrando-se com maior probabilidade  $\pi_{j,k}(t)$  nos primeiros vizinhos. Mas, ao ligarmos o parâmetro  $p$ , variando-o de 0.1 à 1.0, com incremento de 0.1, notamos uma melhor propagação do caminhante quântico através da rede. Nós mais distantes são visitados com intensidades maiores de probabilidade. Para o caso em que  $p = 1.0$  (*spidernet* completa) o caminhante espalha-se pela rede visitando todos os nós com maior probabilidade. Nos diagramas espaço-tempo, figura 4.2, notamos que há uma forte tendência da caminhada de encontrar-se nos vértices periféricos. Ao verificarmos a evolução das caminhadas em relação às gerações (lembrando que utilizamos  $G = 4$ ) encontra-se o comportamento muito semelhante para um dendrímico puro ( $p = 0.0$ ), *spidernets* incompletas  $0.1 \leq p \leq 0.9$  e *spidernet* completa  $p = 1.0$ , pois os vértices adicionais só conectam vértices de mesma geração. Em relação aos contornos da probabilidade  $\pi_{j,k}(t)$ , percebemos fortes efeitos de localização para  $p = 0.0$ , enquanto que para  $p$  variando a caminhada espalha-se mais, permanecendo efeitos de localização apenas para gerações internas da rede.

Ao avaliarmos o comportamento das probabilidades médias de retorno clássica  $\bar{p}(t)$  (CTRW) e quântica  $|\bar{\alpha}(t)|^2$  (CTQW), verificamos que para valores maiores do parâmetro  $p$ , o decaimento de  $\bar{p}(t)$  é mais rápido, sugerindo um melhor transporte clássico. Para  $|\bar{\alpha}(t)|^2$  o comportamento oscilatório é reduzido conforme aumenta-se o valor de  $p$ , sugerindo, também, um melhor transporte quântico em nossa estrutura. Fizemos a comparação para vários valores de  $G$  e  $p$  fixo em 0.5, constatando-se decaimentos rápidos de  $\bar{p}(t)$  para gerações pequenas; e pequenas oscilações para  $|\bar{\alpha}(t)|^2$  conforme aumenta-se o número de gerações.

Estudamos o comportamento da eficiência de transporte  $\chi$ , e sua aproximação  $\chi^*$ . Verificamos uma melhor eficiência quanto maior for a rede e o valor do parâmetro  $p$ . Nesta análise descobrimos que o transporte quântico é mais eficiente para valores de  $p \approx 0.9$ , isto é, quando adicionamos novas ligações entre os nós de mesma geração e não fechamos o círculo com todas elas, a estrutura existente é comparada com longa linha. Como sabemos de outros trabalhos, a eficiência em uma linha longa é maior que em um anel de  $N$  vértices. Os valores de  $\chi^*$  possuem o mesmo comportamento dos valores exatos, mas existem diferenças de quase uma ordem de magnitude, indicando alterações no espectro de autovalores, que para nossa rede não é tão discreto.

Desta forma, nossa pesquisa encontrou que para uma estrutura dendrímico modificado (*spider-*

*nets*), tendo como base o dendrímero, o transporte quântico é mais eficiente quanto maior for o número de ligações adicionadas entre nós de mesma geração. Para todas as formas de medidas de eficiência os resultados apontam para esta direção. Assim, concluímos que caminhadas quânticas de tempo contínuo são extremamente úteis na análise do transporte quântico em redes complexas.

---

# REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

---

- [1] G. H. Weiss. *Aspects and Applications of the Random Walk*. North-Holland, Amsterdam, 1994.
- [2] N. G. van Kampen. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. North-Holland, Amsterdam, 1990.
- [3] J. E. Neigel and J. C. Avise. Application of a random walk model to geographic distributions of animal mitochondrial dna variation. *Genetics*, 135:1209–1220, 1993.
- [4] R. Mantegna and H. Stanley. *Introduction to Econophysics: Correlations and Complexity in Finance*. Cambridge University Press, 1999.
- [5] R. P. Feynman. Simulating physics with computers. *International Journal of Theoretical Physics*, 21(6/7), 1982.
- [6] S. Gudder. *Quantum Probability*. Academic Press, 1988.
- [7] G. Grossing and A. Zeilinger. Quantum cellular automata. *Complex Systems*, 2:197–208, 1988.
- [8] V. Kendon. Decoherence in quantum walks - a review. *Mathematical Structures in Computer Science*, 17:1169–1220, 2007.
- [9] O. Mülken and A. Blumen. Continuous-time quantum walks: Models for coherent transport on complex networks. *Physics Reports*, 502:37–87, 2011.
- [10] Y. Aharonov, L. Davidovich, and N. Zagury. Quantum random walks. *Physics Review A*, 48(2), 1993.
- [11] J. Kempe. Quantum random walks - an introductory overview. *Contemporary Physics*, 44(4):307–327, 2003.
- [12] B. F. Venancio. *Caminhadas Quânticas na Rede Hexagonal*. PhD thesis, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2016.
- [13] E. Farhi and S. Gutmann. Quantum computation and decision trees. *Physics Review A*, 58(2), 1998.
- [14] P. L. Knight, E. Roldán, and J. E. Sipe. Optical cavity implementations of the quantum walk. *Optics Communications*, 227:147–157, 2003.
- [15] R. Côté, A. Russel, E. E. Eyler, and P. L. Gould. Quantum random walk with rydberg atoms in an optical lattice. *New Journal of Physics*, 8(156), 2006.

- [16] H. B. Perets, Y. Lahini, F. Pozzi, M. Sorel, R. Morandotti, and Y. Silberberg. Realization of quantum walks with negligible decoherence in waveguide lattices. *Physical Review Letters*, 100(170506), 2008.
- [17] M. Tillmann, B. Dakic, R. Heilmann, S. Nolte, A. Szameit, and P. Walther. Experimental boson sampling. *Nature Photonics*, 7:540–544, 2013.
- [18] P. W. Shor. *35th IEEE Symposium on Foundations of Computer Science*, page 124, 1994.
- [19] L. K. Grover. Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack. *Physical Review Letters*, 79(2), 1997.
- [20] M. E. J. Newman. *Networks: An Introduction*. Oxford University Press, Oxford, 2010.
- [21] G. E. Uhlenbeck. Successive approximation methods in classical statistical mechanics. *Physica*, 26:17–27, 1960.
- [22] R. Dorf. *The Electrical Engineering Handbook: Circuits, Signals, and Speech and Image Processing*. CRC Press INC, 2006.
- [23] N. Biggs and R. Wilson. *Graph Theory 1736 - 1936*. Clarendon Press, 1976.
- [24] B. F. Venancio. Caminhadas quânticas em redes regulares 2d, um tratamento geral. Master's thesis, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2013.
- [25] E. Estrada. *The Structure of Complex Networks: Theory and Applications*. Oxford University Press, 2011.
- [26] A. A. Gurtovenko, D. A. Markelov, Yu. Ya. Gotlib, and A. Blumen. Dynamics of dendrimer-based polymer networks. *The Journal of Chemical Physical*, 119(7579), 2003.
- [27] C. Cai and Z. Yu Chen. Rouse dynamics of a dendrimer model in the  $\theta$  condition. *Macromolecules*, 30:5104–5117, 1997.
- [28] M. D. Galiceanu and W. T. Strunz. Continuous-time quantum walks on multilayer dendrimer networks. *Physical Review E*, 94(022307), 2016.
- [29] K. Pearson. The problem of the random walk. *Nature*, 72(1865):294, 1905.
- [30] L. Rayleigh. The problem of the random walk. *Nature*, 72(1866):318, 1905.
- [31] S. R. A. Salinas. *Introdução à Física Estatística*. Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2005.
- [32] R. Portugal. *Quantum Walks and Search Algorithms*. Springer, 2013.
- [33] J. Rudnick and G. Gaspari. *Elements of the Random Walk: An Introduction for Advanced Students and Researchers*. Cambridge University Press, 2004.
- [34] R. P. Feynman. Quantum mechanical computers. *Found. Phys.*, 16(157), 1986.
- [35] A. Ambainis, A. Bach, A. Nayak, A. Vishwanath, and J. Watrous. One-dimensional quantum walks. *Proc. 33rd Annual ACM STOC*, pages 60–69, 2001.
- [36] D. Aharonov, A. K. J. Ambainis, and U. Vazirani. Quantum walks on graphs. 2001.

- 
- [37] J. J. Sakurai and J. Napolitano. *Mecânica Quântica Moderna*. Bookman, 2 edition, 2013.
- [38] F. M. de Andrade. *Métodos de Função de Green na Análise de Grafos Quânticos e Caminhadas Quânticas*. PhD thesis, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2009.
- [39] A. Ambainis. Quantum walks and their algorithmic applications. *International Journal of Quantum Information*, 1(4):507–518, 2003.
- [40] O. Mülken and A. Blumen. Spacetime structures of continuous-time quantum walks. *Physical Review E*, 71(036128), 2005.
- [41] O. Mülken. Inefficient quantum walks on networks: the role of the density of states. *arxiv.org*, 2013.
- [42] O. Mülken, A. Volta, and A. Blumen. Asymmetries in symmetric quantum walks on two-dimensional networks. *Physical Review A*, 72(042334), 2005.
- [43] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. 1964.
- [44] O. Mülken, V. Bierbaum, and A. Blumen. Coherent exciton transport in dendrimers and continuous-time quantum walks. *The Journal of Chemical Physics*, 124(124905), 2006.
- [45] A. Anishchenko. *Efficiency of continuous-time quantum walks: from networks with disorder to deterministic fractals*. PhD thesis, Universität Freiburg, Freiburg, 2015.
- [46] N. Kulvelis, M. Dolgushev, and O. Mülken. Universality at breakdown of quantum transport on complex networks. *Physical Review Letters*, 115(120602), 2015.