



**Universidade Federal Rural de Pernambuco**  
**Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação**  
**Departamento de Física**

**Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada**

**TRANSFERÊNCIA DE ESTADOS QUÂNTICOS EM SISTEMAS COM  
DESORDEM CORRELACIONADA DO TIPO TRÍMERO**

*Veronica Alves Teixeira*

Dissertação de Mestrado

Recife - PE

20 de Julho de 2023

**UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO**  
**PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA APLICADA**

**TRANSFERÊNCIA DE ESTADOS QUÂNTICOS EM SISTEMAS COM DESORDEM  
CORRELACIONADA DO TIPO TRÍMERO**

*Veronica Alves Teixeira*

Dissertação julgada adequada para obtenção  
do título de mestre em Física, defendida e  
aprovada por unanimidade em 20/07/2023  
pela Comissão Examinadora.

Orientador:

---

Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes

Sede - UFRPE

Banca Examinadora:

---

Dr. ADAUTO JOSE FERREIRA DE SOUZA

Sede - UFRPE

---

Dr. FRANCISCO ANACLETO BARROS FIDELIS DE MOURA

Membro externo - UFAL

---

Dr. GUILHERME MARTINS ALVES DE ALMEIDA

Membro externo - UFAL

*“Na Natureza, nada se cria, nada se perde, tudo se transforma.”*

*(Antoine-Laurent de Lavoisier)*

# Agradecimentos

Agradeço a Fundação de Amparo à Ciência e Tecnologia do Estado de Pernambuco (FACEPE) pelo suporte financeiro. Ao Prof. Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes por ter me incluído em seu grupo de pesquisa, pois sem isso este trabalho não seria possível, e por todo apoio prestado.

Ao Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura, por todos os ensinamentos, e toda a paciência.

Ao professor e coordenador Anderson Barbosa, por todo o apoio prestado, e a todo o corpo docente e administrativo da UFRPE que fizeram parte dessa caminhada.

Aos meus pais, meus irmãos e irmãs, meu namorado, e a todos os amigos e amigas que estiveram presente nesta caminhada.

# Resumo

Investigamos uma cadeia quântica de Heisenberg com desordem correlacionada para acoplamento spin-spin. Em nosso modelo, os termos spin-spin foram escolhidos como uma distribuição binária. Para introduzir correlações locais consideramos que um dos valores de nossa distribuição de desordem binária aparece sempre em sequências ternárias. Usando diagonalização numérica, investigaremos o papel desempenhado por essas correlações de curto alcance na transferência de estados quânticos entre as extremidades da cadeia de mágnons. A qualidade da transferência é observada por meio do uso de ferramentas padrão como fidelidade e concorrência e outras que confirmam tais características da cadeia dentro e fora do canal. Nossos cálculos demonstram numericamente a existência de transferência de mágnon com boa fidelidade para algumas ressonâncias especiais. Também mostramos qual tipo de interação de exchange entre as extremidades é necessária para que o sistema tenha transferência de mágnon.

**Palavras-chave:** Transferência. Desordem. Trímeros. Mágnon.

# Abstract

We investigate a Heisenberg quantum chain with correlated disorder for spin-spin coupling. In our model, the spin-spin terms were chosen as a binary distribution. To introduce local correlations we assume that one of the values of our binary disorder distribution always appears in ternary sequences. Using numerical diagonalization, we will investigate the role played by these short-range correlations in the transfer of quantum states between the ends of the magnon chain. The quality of the transfer is observed through the use of standard tools such as fidelity and concurrency and others that confirm such characteristics of the chain inside and outside the channel. Our calculations numerically demonstrate the existence of magnon transfer with good fidelity for some special resonances. We also show what kind of "exchange" interaction between the ends is required for the system to have magnon transfer.

**Keywords:** Transfer. Disorder. Trimers. Magnon.

# Lista de Figuras

2.1	Representação do sistema quântico estudado composto por fonte (F) e receptor (R) ligados ao canal por uma energia $g$ e conectados ao canal por uma energia $j$ [18]. . . . .	11
2.2	Esfera de Bloch.[25] . . . . .	26
3.1	Curvas comparativas entre as densidades de estados ( $DOS$ ), ( $Dist$ ) e condutância ( $G$ ) em relação a energia do canal ( $E$ ) para uma concentração de trímeros com $c = 0.1, 0.2$ , número de amostras ( $N$ ) e tamanho de cada amostras na seguinte ordem: 1000, 500, 250. . . . .	35
3.2	Curvas comparativas entre as densidades de estados ( $DOS$ ), ( $Dist$ ) e a condutância ( $G$ ) em relação a energia no canal ( $E$ ) para amostras sem correlação, com número de amostras ( $N$ ) e tamanho de cada amostras na seguinte ordem: 1000, 500, 250. . . . .	36
3.3	Concorrência máxima ( $C_{max}$ ) e fidelidade máxima ( $F_{max}$ ) em função da energia ( $E^{FR}$ ) para uma amostra de 4500, $N = 50$ e valores de concentração de trímeros variando de $c = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2$ . . . . .	38
3.4	Concorrência máxima ( $F_{max}$ ) e Fidelidade máxima ( $C_{max}$ ) em função da energia ( $E^{FR}$ ) para uma amostra de 1000 e $N = 50$ no para o modelo sem correlação. . . . .	39
3.5	Funções $f_{N1}$ , $f_c$ e Participação em relação a energia de exchange das extremidades do sistema ( $g$ ). Fixamos a energia da diagonal nas extremidades em $E^{FR} = 0.5$ . Consideramos 4000 amostras e $N= 50$ . Nesta figura abordamos o caso dos trímeros para uma concentração variando de $c = 0.5, 0.1, 0.15, 0.2$ . . . . .	40
3.6	Distribuição de probabilidade $P(F_{max})$ versus $F_{max}$ considerando modelo com correlações tipo trímeros com $g = 0.01$ , $E^{FR} = 0.5$ , $c = 0.1$ , $N = 50$ e 4000 amostras. . . . .	41



3.7 Distribuição de probabilidade  $P(F_{max})$  versus  $F_{max}$  considerando modelo com correlações tipo trímeros com  $E^{FR} = 0.5$ ,  $c = 0.1$ ,  $N = 50$ , 4000 amostras e  $g = 0.1, 0.2, 0.4$ . . . . . 42

# Sumário

<b>Agradecimentos</b>	<b>IV</b>
<b>Resumo</b>	<b>V</b>
<b>Abstract</b>	<b>VI</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>VIII</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>2</b>
1.1 Computação Quântica . . . . .	2
1.2 Modelo de Anderson . . . . .	4
<b>2 Fundamentação Teórica</b>	<b>10</b>
2.1 Modelo de Heisenberg . . . . .	10
2.1.1 Evolução Temporal . . . . .	19
2.1.2 Quantidades Físicas . . . . .	21
2.1.3 Fidelidade e Concorrência . . . . .	31
<b>3 Resultados</b>	<b>32</b>
<b>4 Conclusões</b>	<b>44</b>
<b>Bibliografia</b>	<b>46</b>

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Computação Quântica

Richard Feynman em 1982, sugeriu que a melhor maneira de simular fenômenos quânticos seria utilizar justamente outros sistemas quânticos uma vez que, classicamente, a quantidade de parâmetros necessários para tal procedimento cresce exponencialmente com a dimensão do sistema em questão [12]. O conceito de computador quântico, ou seja, a possibilidade de processar informações de acordo com os fenômenos da mecânica quântica vem sendo um dos tópicos mais explorados nas últimas décadas. A transferência de estados quânticos desempenha o papel de intermediar nas interações entre os pequenos computadores quânticos [19]. Todavia por se tratar de um sistema na escala quântica a dificuldade de desenvolvimento de um computador quântico é um desafio bastante complexo, e que requer muito mais dispositivos eletrônicos em relação ao computador comum, além disso, os dispositivos devem estar cada vez mais modernos para que isso seja possível. Como é de se esperar, a tendência é chegar ao ponto em que os circuitos irão se comportar de acordo com as leis da mecânica quântica, daí surgindo a necessidade de uma reestruturação na forma de conduzir processos lógicos [2]. Atualmente existem processadores com desempenho significativo em relação aos processadores convencionais como o processador da IBM que trabalha com 127 qubits.

A transferência de estados quânticos é um sistema de transporte de dados que pode ser realizada de duas formas. A primeira delas é menos intuitiva e envolve inicialmente emaranhar dois estados para que depois se faça a transferência de um terceiro por teleporte quântico. A segunda, por outro lado, envolve a criação de um canal quântico, pelo qual os estados podem seguir de um ponto a outro seguindo estratégias diversas para sua criação, que é o método

utilizado neste trabalho, no caso a estratégia utilizada para o estudo em questão foi a aplicação da dinâmica temporal. O canal vai transportar o qubit que é a unidade de informação quântica. O termo qubit vem do inglês (“quantum bit”), diferentemente do bit (variável que pode assumir os valores 0 ou 1 para representar uma informação) o qubit pode ser representado por um sistema de dois níveis e pode ser expresso como uma combinação linear (superposição) dos estados 0 e 1 [5] que pode ser escrito como:

$$|\Psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle \quad (1.1)$$

Onde  $a$  e  $b$  são números complexos, em geral, satisfazendo  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ . Dessa forma, a informação do estado quântico da Eq. (1.1) está contida nos coeficientes  $a$  e  $b$ . Em outras palavras, um qubit é um vetor bidimensional escrito em termos de uma base ortonormal  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$  [2]. Além disso,  $a$  e  $b$  também podem ser entendidas como as amplitudes, mais adiante esses estados de qubit serão representados pela esfera de Bloch. Um qubit pode ser transmitido diretamente com fidelidade melhor do que a clássica em todo o comprimento das cadeias de até 80 spins[4]. A rede quântica consiste na junção de dois ou mais nós que atuam como processadores quânticos, isto é, unidades capazes de armazenar e realizar operações lógicas com qubits, transferir estados quânticos e gerar emaranhamento[23]. Este é um conceito imprescindível na computação quântica pois possibilita a criação de protocolos de comunicação inquebráveis, além de ser um recurso muito importante na transferência de estados quânticos [31]. O emaranhamento quântico é um fenômeno onde dois ou mais sistemas quânticos apresentam correlações não-locais (e não-clássicas) entre si, independentemente da distância em que se encontram [19]. Muitos autores tentaram de alguma forma refutar esse efeito como por exemplo, A. Einstein, B. Podolsky e N. Rosen [15] que cogitaram que a mecânica quântica é uma teoria incompleta no sentido de que alguns elementos da realidade física não estariam sendo considerados [16]. Porém a não-localidade, foi prevista em 1964 pelo físico John Bell [9] e provado experimentalmente, em 1982, por Alain Aspect [7]. A não-localidade vem como uma ferramenta de comunicação mais eficiente na execução de determinadas tarefas, já que o colapso ocorre acima da velocidade da luz [27]. De maneira que quando um estado quântico é preparado em uma ponta da cadeia, a função de onda eletrônica carrega consigo a informação que queremos transferir de um ponto a outro do espaço.

Nesta dissertação o estudo de transferência de qubits é realizado para um sistemas contendo dois tipos de desordem diagonal. O modelo utilizado aqui consiste basicamente por

spins de Heisenberg distribuídos em uma geometria unidimensional (1d). Em nosso sistema os spins são organizados em três classes: existe o spin fonte (que fica localizado na posição  $n = 1$  da geometria); o spin receptor (que fica localizado na posição  $n = N$  de nossa cadeia ; por fim, existem os spins pertencentes ao intervalo  $n = 2$  até  $n = N - 1$ . Estes  $N - 2$  spins representam o canal que conecta a fonte ( $n = 1$ ) ao receptor ( $n = N$ ). A fonte e o receptor estão ligado ao canal por uma energia de acoplamento fraca que chamaremos de  $g$ . Os spins do canal estão conectados por uma energia de *hopping*(ou exchange)  $J_n$ . A distribuição destes spins  $J_n$  em nosso modelo será feita de duas formas: i) modelo desordenado : os termos de exchange  $J_n$  são aleatório e ii) modelo correlacionado: vamos construir uma série de valores de  $J_n$  contendo correlações locais tipo trímeros. No presente estudo será desenvolvido uma rotina de programação em fortran, com o objetivo de observar o comportamento das quantidades físicas presentes no sistema. Em linhas gerais nosso objetivo consiste em investigar a natureza dos estados de mágnons neste modelo, bem como investigar a existência (ou não) de transferência de estados quânticos entre a fonte e o receptor. Para efetuar tal estudo vamos calcular diversas quantidades físicas relevantes tais como : concorrência, fidelidade, participação, densidade de estados (*DOS*) e algumas outras medidas acerca da distribuição especial dos estados quânticos neste modelo. A transferência de estados quânticos será analisada levando em conta as concentrações de trímeros, o número de amostras, e o tamanho de cada amostra.

## 1.2 Modelo de Anderson

Estamos estudando um modelo de transferência de estados quânticos com desordem, portanto, faz-se necessário discutir brevemente o modelo de Anderson, por se tratar das teorias que descrevem o comportamento de um sistemas com tais características. Philip Warren Anderson em 1958 propôs uma teoria que leva em conta a influência de impurezas e defeitos na condutividade assim estabelecendo que a desordem existente em uma rede pode fazer com que um elétron fique localizado em uma região finita da rede[3]. Este modelo considera os elétrons movendo-se sob a influência de um potencial aleatório com parâmetro  $W$  conhecido como largura da desordem ou “força” da desordem. Utilizando o modelo de Anderson foi possível entender algumas transições metal-isolante existentes em diversos sistemas amorfos. Esta localização é o produto da interferência de diversos espalhamentos que as funções de onda do elétron "sofrem" devido a existência de desordem [22]. Anderson mostrou que a natureza dos

estados eletrônicos apresentam forte dependência com o grau de desordem existente bem como a dimensão do sistema [3]. De acordo com o modelo de Anderson todos os estados eletrônicos são exponencialmente localizados para qualquer grau de desordem, em sistemas com dimensão menor ou igual a 2. O caso limite  $D = 2$  pode apresentar uma transição metal-isolante se o termo de acoplamento spin-órbita for considerado [6]. A interação Coulombiana entre os elétrons nesse sistema é desprezada. Porém a possibilidade da ocorrência de uma transição metal-isolante em 3D foi comprovada através de métodos analíticos, numéricos e também diversos experimentos. Considerando o termo de hopping eletrônico igual a unidade (e sendo este a escala de energia utilizada) foi demonstrado que o modelo de Anderson tridimensional apresenta uma transição metal-isolante em  $W = W_c = 16.5$ , onde  $W_c$  é o valor crítico de  $W$  tal que o sistema se torna metálico. Ou seja, em  $D = 3$  se  $W < W_c$  o sistema apresenta uma banda de estados estendidos (metálicos). Assim, podemos descrever o modelo de Anderson matematicamente, como a soma do Hamiltoniano da energia potencial com Hamiltoniano da energia cinética:

$$H = H_p + H_c \quad (1.2)$$

Assim,

$$H_p = \sum_n \varepsilon_n |n\rangle \langle n| \quad (1.3)$$

$\varepsilon_n$  é a energia local que é o potencial de ionização responsável por prender o elétron no orbital. É nesta energia onde pode ser introduzido o fator de desordem do sistema. Se  $\varepsilon_n = 0$  a energia potencial é nula, portanto o sistema não possui desordem e esse modelo passa a ser o modelo de Bloch. Para  $\varepsilon_n \rightarrow [-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}]$ , podemos observar uma distribuição de probabilidade uniforme, logo todos os números terão a mesma probabilidade, que caracteriza um gerador de números aleatórios. Já o termo de energia cinética é caracterizado pelo *hopping*  $T$ .

$$H_c = \sum_n T(|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|) \quad (1.4)$$

O termo de *hopping* ( $T$ ) considera os primeiros vizinhos, caso este termo seja nulo o sistema não tem mobilidade, logo os elétrons ficarão localizados no primeiro estado. Caso esse termo seja alto então, temos um sistema condutor. Portanto, o hamiltoniano de Anderson pode ser escrito como:

$$H = \sum_n \varepsilon_n |n\rangle \langle n| + \sum_n T(|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|) \quad (1.5)$$

Aplicando a equação de Schrödinger independente do tempo vamos ter:

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (1.6)$$

Considerando que  $|\Psi\rangle$  é uma expansão dos estados do sistema na base de orbitais, temos:

$$|\Psi\rangle = \sum_n C_n |n\rangle \quad (1.7)$$

Aplicando a equação 1.7 em 1.5 obtemos

$$(\varepsilon_n - E)C_n + TC_{n+1} + TC_{n-1} = 0 \quad (1.8)$$

Para resolver esta equação com  $n = 1, 2, \dots, N$  números de átomos é necessário diagonalizar uma matriz de tamanho  $N \times N$ . No entanto, quando se trata de uma matriz muito grande torna-se inviável realizar esse cálculo manual e por isso pode-se recorrer a ferramentas computacionais para resolvê-la, como faremos no capítulo 2, mas ainda assim esta diagonalização é um procedimento que vai exigir muito da máquina. Faremos uma representação simples do Hamiltoniano de Anderson para uma matriz de  $N = 5$  nas seguintes bases  $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle, |5\rangle\}$ . Fazendo a projeção dos elétrons nos sítios vamos ter na diagonal principal os termos de energia em cada estado  $\varepsilon_n$  e nas subdiagonais os termos de *hopping* ( $T$ ), os demais termos da matriz vão se anular, pois nesse caso o hamiltoniano de Anderson não possui *hopping* de longo alcance considerando apenas os primeiros vizinhos. Portanto, a representação matricial para este Hamiltoniano de Anderson é a seguinte:

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & T & 0 & 0 & 0 \\ T & \varepsilon_2 & T & 0 & 0 \\ 0 & T & \varepsilon_3 & T & 0 \\ 0 & 0 & T & \varepsilon_4 & T \\ 0 & 0 & 0 & T & \varepsilon_5 \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

Esta é uma representação matricial mais simples e pode ser diagonalizada com mais facilidade,

porém para o estudo em questão é necessária uma amostra muito maior e, portanto, uma matriz bem grande. Uma descrição da natureza dos estados quânticos dentro do modelo de Anderson pode ser feito através da chamada Teoria de escala. vamos apresentar aqui o resumo desta teoria e explicar suas consequências básicas. Em 1979 Abrahams, Anderson, Licciardello, e Ramakrishnan publicaram um trabalho [1] utilizando a teoria de escala com a finalidade de obter a dependência da transição de Anderson com a dimensão. Nossa apresentação será feita com base neste artigo. A hipótese básica desta teoria de escala é que uma única quantidade característica, a condutância generalizada ( $G$ ) controla a transição de estados estendidos para localizados [14]. A condutância é uma quantidade que controla a transição metal-isolante que é caracterizado pelo estado estendido e localizado em temperatura igual ao zero absoluto  $T = 0$ . A condição  $\delta E < \Delta E$  é interpretada no sentido de que a presença de desordem no sistema proporciona a localização da função de onda eletrônica e portanto a ausência de transporte de carga.

Dentro da teoria de escala o modelo de Anderson é então reformulado para um sistema de dimensão  $D$ . O sistema usado é formado de várias hiper caixas acopladas umas às outras. As hiper caixas tem arestas  $L$  e tem dimensão  $D$ . As energias características do modelo de Anderson  $W$  e  $J$  são mapeadas respectivamente no espaçamento médio entre os níveis  $\Delta E$  e no deslocamento  $\delta E$  causado por mudanças nas condições de contorno[14]. Assim considerando que as caixas tem arestas de tamanho  $L$ , contendo níveis de energia com espaçamento  $\delta E$ . Vamos considerar que o elétron percorre os níveis das caixas seguindo um processo de difusão normal realizando um movimento Browniano. Para que o elétron seja difundido ao longo dos níveis de energia é necessário um tempo  $t_{D_f}$  dado por:

$$t_{D_f} = \frac{L^2}{D_f} \quad (1.10)$$

Baseado no princípio da incerteza de Heisenberg, é possível conectar  $\delta E$  com a condutividade  $\sigma$  no limite macroscópico, portanto pode-se estabelecer a seguinte expressão:

$$\delta E = \frac{\hbar}{t_{D_f}} \quad (1.11)$$

$D_f$  é o coeficiente de difusão. Como o elétron executa um movimento Browniano, poderemos utilizar a relação de Einstein para a condutividade:



$$\sigma = e^2 D_f n(E) \quad (1.12)$$

Onde  $e^2$  é a carga do elétron e  $n(E)$  é a função do espaçamento médio entre os níveis de energia. A densidade de estados médio pode ser escrita como função do espaçamento médio entre os níveis:

$$n(E) = \frac{1}{L^D \Delta E} \quad (1.13)$$

Substituindo a equação 1.10, 1.12 e 1.13 em 1.11 temos que  $\delta E$  é:

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar \Delta E L^2}{e^2 L^D} \quad (1.14)$$

Agora vamos usar a razão  $\frac{\Delta E}{\delta E}$  que é adotada como sendo uma medida de “força” da desordem no sistema, análoga a razão  $\frac{W}{J}$  no modelo de Anderson tradicional. O parâmetro de desordem  $G^{-1}$  é definido por:

$$G^{-1} = \frac{1}{G(L)} = \frac{\Delta E}{\delta E} \quad (1.15)$$

Reorganizando a equação 1.14 e substituindo a razão  $\frac{\Delta E}{\delta E}$  por  $G^{-1}$  temos:

$$G(L) = \left(\frac{\hbar}{e^2}\right) \sigma L^{D-2} \quad (1.16)$$

Esta equação aplica-se apenas a estados estendidos no limite macroscópico. O termo  $L^{D-2} \sigma$  é a condutância de um cubo (D-dimensional) de lado L e condutividade  $\sigma$ . A função  $G(L)$  pode ser vista como uma condutância generalizada expressa em unidades de  $\frac{e^2}{h}$ . Quando a condutância é suficientemente pequena ( $G \rightarrow 0$ ), ou seja, no limite de forte desordem e um fraco acoplamento, os estados são localizados e tem um decaimento exponencial com a distância como previsto pelo modelo de Anderson. Desta forma, como os estados tem um envelope exponencial teremos que a condutância no limite de condutividade baixa, terá também um decaimento tipicamente exponencial. Usando estas informações pode-se obter uma relação entre as propriedades de localização e a dimensão do sistema. Podemos calcular a derivada de  $G$  em função de  $L$ ; em linhas gerais vamos calcular a quantidade definida por :  $B = d \ln(G) / d \ln(L)$ . Usando esta definição mostramos que no limite de  $G$  grande temos  $B = D - 2$ . No limite de  $G$  pequeno temos que  $B$  converge para  $-\infty$ . A função  $B$  é chamada de "função de fluxo"; se  $B > 0$

---

temos que  $G$  cresce com  $L$ . Por outro lado, se  $B < 0$  a condutividade diminui a medida que  $L$  cresce. Desta forma podemos concluir que para  $D > 2$  existe a possibilidade da condutância crescer com a dimensão do sistema (isso aponta estados metálicos ou estendidos). Para  $D < 2$  temos que  $B < 0$  e assim a condutância diminui a medida que  $L$  cresce (ou seja, estados isolantes ou localizados).

Em linhas gerais, boa parte dos resultados obtidos através do modelo de Anderson são também válidos para a dinâmica de mágnons em sistemas desordenados descritos pelo modelo de Heisenberg. Inclusive, a representação matricial da cadeia de Heisenberg no subespaço de uma mágnon tem certas semelhanças com versões do modelo de Anderson. Vamos debater em detalhes a aplicabilidade de algumas técnicas de diagonalização e/ou caracterização, originalmente descritas para o Modelo de Anderson, dentro do ambiente do modelo de Heisenberg.

# Capítulo 2

## Fundamentação Teórica

### 2.1 Modelo de Heisenberg

O desenvolvimento de pesquisas na área de transferências de estados quânticos vem sendo realizadas com muita frequência devido a necessidade tecnológica de realizar transferências de dados com mais rapidez e eficiência. Para que esse tipo de transferência seja possível, é necessário que sejam criados dispositivos quânticos e protocolos de transferências de dados eficientes o suficiente para executar esta tarefa. Estes protocolos vem sendo desenvolvidos utilizando fótons, por se tratar de uma partícula com pouca interação com o meio ambiente. Porém, nem sempre é viável o uso de fótons para a comunicação, pois quando se trata de processadores quânticos não é trivial converter um qubit estacionário em um qubit móvel e vice-versa [17, 5]. Bloch verificou que em baixas temperaturas, o estado com um desvio em um único spin são as excitações de mais baixa energia do sistema. Estas excitações são chamadas de ondas de spin e são quantizadas em energia de mágnons. Se os acoplamentos são constantes ( $J_{i,j} = constante$ ) as ondas de spin propagam-se por toda a cadeia, semelhante a funções de Bloch para problemas eletrônicos [14].

Neste trabalho foram realizados experimentos computacionais de transferência de estados quânticos entre uma fonte (F) e um receptor (R). Definiremos mais adiante como essa transferência ocorre utilizando quantidades físicas como fidelidade, concorrência, participação e entre outras que serão mostradas no decorrer desse capítulo. Esse estudo foi realizado abordando sistemas quânticos desordenados, que são caracterizados por não possuir estrutura cristalina perfeita. Os sistemas desordenados são compostos por vários átomos de tipos diferentes posicionados com distâncias irregulares, além de outras características distintas entre as partículas

dentro do sistema. O modelo estudado possui um canal com  $N-2$  átomos, o qual conecta uma fonte (F)(primeiro spins) a um receptor (R)(último spin) ligados ao canal por uma energia de *hopping*  $g$ . O canal inicia a partir do sítio 2 e conclui em  $N-1$ . Todos os sítios no interior do canal estão conectados pela energia de *hopping*  $j$  como mostrado na figura 2.1.

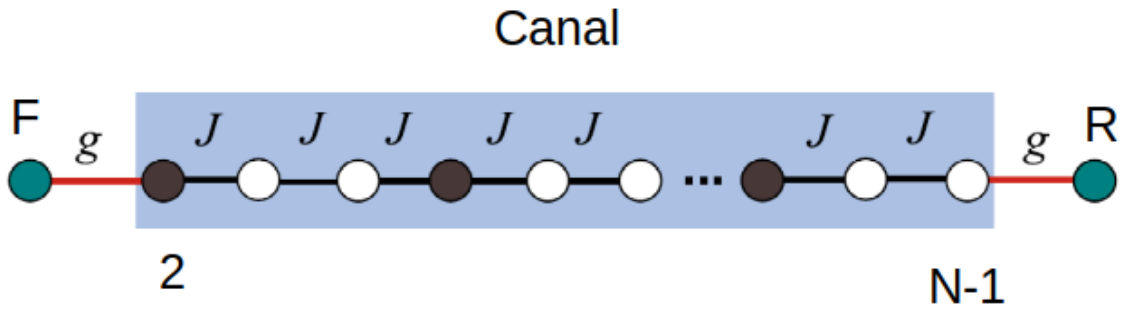


Figura 2.1: Representação do sistema quântico estudado composto por fonte (F) e receptor (R) ligados ao canal por uma energia  $g$  e conectados ao canal por uma energia  $j$  [18].

A fonte e o receptor são mantidos com um campo magnético fixo sobre eles, resultando em uma energia de ligação baixa entre F e o canal, R e o canal. As desordens do sistema são adicionadas no canal. Salientamos novamente que os spins considerados neste modelo vão ser descritos pelo modelo Heisenberg. Em nosso estudo o canal utilizado terá desordem com correlações locais tipo trímeros. Em linhas gerais os valores do termo de exchange dentro do canal vão assumir dois valores  $J_1$  e  $J_2$  (ou seja será uma distribuição binária). A ocorrência destes valores é aleatória. Entretanto, para que o sistema tenha correlações locais tipo trímeros vamos considerar que os valores de  $J_2$  sempre apareçam em segmentos de três valores. Um exemplo de sequência típica seria : ...  $J_1 J_1 J_2 J_2 J_2 J_1 J_2 J_2 J_2 J_1 J_1 J_2 J_2 J_2$  ... Podemos observar claramente que os valores  $J_2$  sempre aparecem em segmentos de três valores seguidos ( $J_2 J_2 J_2$ ). A concentração  $c$  destes trímeros na cadeia será um parâmetro de entrada em nosso sistema.

A distribuição de desordem com correlações tipo trímeros será gerada através do seguinte procedimento: Inicialmente vamos armazenar em um vetor de tamanho  $N-1$  valores idênticos iguais a  $J_1$ . Além disso, o vetor contendo todas os termos de acoplamento spin-spin tem todos seus valores idênticos de início. Em seguida é escolhida uma dada concentração " $c$ " de modo que esta seja sempre menor que um ( $c < 1$ ). O processo será iniciado a partir da primeira posição deste vetor, sorteando um número aleatório com distribuição uniforme entre  $[0,1]$ . Se este número for menor que  $c$ , então esta posição está habilitada para a aplicação do trímero. Lembrando que a aplicação do trímero consiste em colocar três valores do vetor como sendo igual

a  $J_2$ . Supondo que, em linguagem computacional, o vetor definidor para guardar estes valores seja o vetor  $J(i = 1, \dots, N - 1)$  e supomos também que estamos sorteando, por exemplo, uma dada posição  $i$  do vetor, então teremos  $J(i) = J_2, J(i + 1) = J_2$  e  $J(i + 2) = J_2$ . Mas antes de fazer a aplicação do trímero precisamos fazer uma verificação acerca do valor existente nesta posição. Se o valor do vetor for  $J_1$ , então temos que esta posição não foi modificada e pode receber o trímero. Entretanto, se o valor do vetor estiver ocupado por  $J_2$ , então não podemos aplicar o trímero (mesmo que o sorteio do número aleatório seja menor que a concentração). Faremos este procedimento para todas as posições do vetor exceto as duas posições finais, pois não teremos espaço para começar trímeros nas duas últimas posições do vetor de acoplamento. Seguindo este procedimento teremos uma distribuição binária onde os valores  $J_2$  sempre aparecerão em segmentos de tamanho três. Outro ponto que se faz relevante explicar é que não podemos usar  $c$  muito grande pois corremos o risco de ter apenas valores de  $J_2$  (ou seja os trímeros podem "dominar" a distribuição e assim o sistema ficaria sem desordem), logo vamos usar sempre  $c \ll 1$ .

Vamos agora apresentar todo o desenvolvimento matemático, dentro do contexto do modelo de Heisenberg, para estudar o transporte de mágnons neste tipo de sistema. Vamos considerar de forma geral o Hamiltoniano para mágnons em cadeias ferromagnéticas desordenadas com  $N$  spins  $\vec{S}_i$  e  $\vec{S}_j$  acoplados com seus primeiros vizinhos por meio de uma energia de exchange  $J_{i,j}$  [30, 28, 14]. Em nosso modelo o campo magnético externo  $B_n$  vai atuar apenas nos spins  $n = 1$  e  $n = N$ , para os demais spins ele é nulo. O hamiltoniano desse sistema tem o seguinte formato:

$$H = - \sum_{n=1}^N J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_{n=1}^N B_n \vec{S}_i \quad (2.1)$$

Para estudarmos as excitações ou ondas de spin desse sistema é necessário obtermos a equação de *Schrödinger* para um mágnon em uma cadeia eletromagnética. Vamos inicialmente considerar o caso totalmente sem campo ou seja  $B_n = 0$ . O caso com o campo depois será rapidamente generalizado. Os cálculo da equação de Schrödinger são realizados levando em conta que o sistema estudado é uma cadeia linear de  $N$  spins  $\vec{S}_n = S_n^x \vec{x} + S_n^y \vec{y} + S_n^z \vec{z}$ , de modo que podemos introduzir no sistema  $S_n^+$  e  $S_n^-$ . Esses operadores são definidos como [14]:

$$S_n^+ = S_n^x + iS_n^y \quad (2.2)$$

$$S_n^- = S_n^x - iS_n^y. \quad (2.3)$$

Além disso, temos que ter em mente as relações de comutação dos operadores de spins  $[S_k^x, S_l] = iS_k^z \delta_{k,l}$  que são:

$$\begin{aligned} [S_k^+, S_l^+] &= 2S_k^z \delta_{k,l}, & [S_k^z, S_l^+] &= S_k^+ \delta_{k,l}, \\ [S_k^z, S_l^-] &= -S_k^- \delta_{k,l}, & [S_k^+, S_l^+] &= [S_k^-, S_l^-] = 0. \end{aligned}$$

Para desenvolver os cálculos desse hamiltoniano é necessário considerar um desvio do spin no sítio  $n$ , que é equivalente a aplicar o operador  $S_n^-$  ao estado fundamental. Portanto, vamos ter que a equação 2.1 pode ser calculada aplicando o estado  $|\phi_n\rangle$ , descrito por  $|\phi_n\rangle = \vec{S}_n |\phi_0\rangle$  :

$$H |\phi_n\rangle = - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} \vec{S}_l \cdot \vec{S}_{l+1} |\phi_n\rangle = \quad (2.4)$$

Vamos calcular separadamente  $\vec{S}_l \cdot \vec{S}_{l+1}$  e fazer as devidas substituições. Inicialmente podemos substituir  $\vec{S}_n$  e obtemos a seguinte equação:

$$\vec{S}_l \cdot \vec{S}_{l+1} = [(S_l^x \vec{x} + S_l^y \vec{y} + S_l^z \vec{z}) \cdot (S_{l+1}^x \vec{x} + S_{l+1}^y \vec{y} + S_{l+1}^z \vec{z})] \quad (2.5)$$

Como,

$$\vec{x} \cdot \vec{x} = \vec{y} \cdot \vec{y} = \vec{z} \cdot \vec{z} = 1 \quad (2.6)$$

$$\vec{x} \cdot \vec{y} = \vec{x} \cdot \vec{z} = \vec{y} \cdot \vec{z} = 0 \quad (2.7)$$

Então, a equação 2.5 resulta em:

$$= S_l^x \cdot S_{l+1}^x + S_l^y \cdot S_{l+1}^y + S_l^z \cdot S_{l+1}^z \quad (2.8)$$

De acordo com as equações 2.2 e 2.3 podemos chamar  $S_l^x$ ,  $S_l^y$ ,  $S_{l+1}^x$  e  $S_{l+1}^y$  da seguinte forma:

$$S_l^x = \frac{S_l^+ + S_l^-}{2} \quad S_l^y = \frac{S_l^+ - S_l^-}{2} \quad (2.9)$$

$$S_{l+1}^x = \frac{S_{l+1}^+ + S_{l+1}^-}{2} \quad S_{l+1}^y = \frac{S_{l+1}^+ - S_{l+1}^-}{2i} \quad (2.10)$$

Substituindo as equações 2.9 e 2.10 em 2.5

$$\vec{S}_l \cdot \vec{S}_{l+1} = S_l^z \cdot S_{l+1}^z + \frac{1}{2}(S_l^+ \cdot S_{l+1}^- + S_l^- \cdot S_{l+1}^+) \quad (2.11)$$

Então, o hamiltoniano 2.4 fica da seguinte forma:

$$\begin{aligned} H|\phi_n\rangle &= -\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} \vec{S}_l \cdot \vec{S}_{l+1} |\phi_n\rangle = \\ &= -\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} [S_l^z S_{l+1}^z + \frac{1}{2}(S_l^+ S_{l+1}^- + S_l^- S_{l+1}^+)] |\phi_n\rangle = \\ &= -\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\phi_n\rangle - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^+ S_{l+1}^- |\phi_n\rangle \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- S_{l+1}^+ |\phi_n\rangle. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Para resolver este hamiltoniano vamos separá-lo em três somatórias. No primeiro somatório é

$$H_1 = -\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\phi_n\rangle.$$

Fazendo  $l = n - 1$  e  $l = n$ , obtemos

$$\begin{aligned} H_1 &= -\sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\phi_n\rangle - (J_{n-1,n} S_{n-1}^z S_n^z |\phi_n\rangle) \\ &\quad - (J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z |\phi_n\rangle) - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\phi_n\rangle. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Como,  $S_i^z$  aplicado ao estado  $|\phi_n\rangle$  com  $i \neq n$  tem valor máximo  $S$  na direção  $z$ , resulta em:

$$\begin{aligned} H_1 &= -\sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S^2 |\phi_n\rangle - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S^2 |\phi_n\rangle - (J_{n-1,n} S_{n-1}^z S_n^z |\phi_n\rangle) \\ &\quad - (J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z |\phi_n\rangle) \end{aligned} \quad (2.14)$$

Utilizamos as relações de comutação entre  $S^z$  e  $S^-$ , e aplicamos a relação  $S_n^z |\phi_0\rangle = S |\phi_0\rangle$  e obtemos:

$$\begin{aligned}
H_1 &= -\sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S^2 |\phi_n\rangle - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S^2 |\phi_n\rangle - J_{n-1,n} S_{n-1}^z (S_n^- S_n^z |\phi_0\rangle - S_n^- |\phi_0\rangle) \\
&\quad - J_{n,n+1} S_{n+1}^z (S_n^- S_n^z |\phi_0\rangle - S_n^- |\phi_0\rangle) = -\sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S^2 |\phi_n\rangle - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S^2 |\phi_n\rangle \\
&\quad - J_{n-1,n} S_{n-1}^z (S-1) |\phi_n\rangle - J_{n,n+1} S_{n+1}^z (S-1) |\phi_n\rangle.
\end{aligned} \tag{2.15}$$

Aplicando os operadores  $S_{n+1}^z$  e  $S_{n-1}^z$  no estado  $|\phi_n\rangle$ , temos:

$$\begin{aligned}
H_1 &= -\sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S^2 |\phi_n\rangle - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S^2 |\phi_0\rangle - J_{n-1,n} S^2 |\phi_n\rangle \\
&\quad - J_{n,n+1} S^2 |\phi_n\rangle + J_{n-1,n} S |\phi_n\rangle + J_{n,n+1} S |\phi_n\rangle.
\end{aligned} \tag{2.16}$$

Juntando os quatro primeiros termos da equação 2.16 e considerando  $-\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S^2$  é igual a energia ( $E_0$ ) do estado fundamental  $|\phi_0\rangle$  em um único somatório  $H_1$  resulta em:

$$H_1 = E_0 |\phi_n\rangle + S(J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) |\phi_n\rangle. \tag{2.17}$$

No segundo somatório vamos ter  $H_2 = -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^+ S_{l+1}^- |\phi_n\rangle$ .

Como,  $|\phi_n\rangle = S_n^- |\phi_0\rangle$  então podemos substituir na expressão e utilizar as relações de comutação entre os operadores  $S^+$  e  $S^-$  assim,

$$\begin{aligned}
H_2 &= -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_{l+1}^- (2S_l^z \delta_{ln} |\phi_0\rangle) + S_n^- S_l^+ |\phi_0\rangle \\
&= -\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_{l+1}^- (2S_l^z \delta_{ln} |\phi_0\rangle).
\end{aligned} \tag{2.18}$$

O estado  $|\phi_0\rangle$  contém todos os *spins* na direção (+), isso significa que  $S_l^+ |\phi_0\rangle = 0$ , e a função



delta tem  $l = n$  no somatório, portanto,

$$\begin{aligned} H_2 &= -J_{n,n+1} S_{n+1}^- S_n^z |\phi_0\rangle = -J_{n,n+1} S S_{n+1}^- |\phi_0\rangle \\ &= -J_{n,n+1} S |\phi_{n+1}\rangle. \end{aligned} \quad (2.19)$$

E por fim temos o terceiro termo do hamiltoniano  $H_3 = -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- S_{l+1}^+ |\phi_n\rangle$ , que pode ser obtido de mesma forma então,

$$H_3 = -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- [2S_{l+1}^z \delta_{l+1,n} + S_n^- S_{l+1}^+] |\phi_0\rangle. \quad (2.20)$$

Assim como na expressão 2.19 nesse caso  $S_{l+1}^+ |\phi_0\rangle$  também é nulo, pois todos os *spins* estão apontando na direção (+). Portanto,

$$H_3 = -\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- S_{l+1}^z \delta_{l+1,n} |\phi_0\rangle. \quad (2.21)$$

Usando a função delta e lembrando que  $S_{n-1}^- |\phi_0\rangle = |\phi_{n-1}\rangle$ , teremos

$$\begin{aligned} H_3 &= -J_{n-1,n} S_{n-1}^- S_n^z |\phi_0\rangle = -J_{n-1,n} S S_{n-1}^- |\phi_0\rangle \\ &= -J_{n-1,n} S |\phi_{n-1}\rangle. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Juntando os resultados de  $H_1, H_2$  e  $H_3$  obtemos a seguinte expressão

$$H |\phi_n\rangle = E_0 |\phi_n\rangle + S[(J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) |\phi_n\rangle - J_{n,n+1} |\phi_{n+1}\rangle - J_{n-1,n} |\phi_{n-1}\rangle].$$

Note, que para este resultado  $|\phi_n\rangle$  não é auto-estado de  $H$ , então o desvio no sítio  $n$  não está localizado em  $n$ , mas está se propagando ao longo da cadeia por meio dos primeiros vizinhos  $(n+1, n-1)$ . Com base nisso precisamos determinar um estado que possa representar essa

configuração. Essa propagação é responsável por uma excitação coletiva que resulta na onda de spin, assim podemos representar o estado de um mágnon em termos de  $|\Phi\rangle$  na função a seguir

$$|\Phi\rangle = C(S, N) \sum_{n=1}^N f_n |\phi_n\rangle, \quad (2.23)$$

Nesse caso  $f_n$  é a amplitude de probabilidade de ocorrer o desvio no sítio. Assim podemos demonstrar que  $|\Phi\rangle$  é auto-estado de  $H$  por meio da equação de *Schrödinger*

$$H |\Phi\rangle = E |\Phi\rangle. \quad (2.24)$$

Então temos,

$$\begin{aligned} H |\Phi\rangle &= C(S, N) \sum_{n=1}^N f_n H |\phi_n\rangle \\ &= C(S, N) \sum_{n=1}^N \{E_0 + S[(J_{n-1,n} + J_{n,n+1})f_n |\phi_n\rangle \\ &\quad - J_{n,n+1} f_n |\phi_{n+1}\rangle - J_{n-1,n} f_n |\phi_{n-1}\rangle]\} = E |\Phi\rangle \\ &= \sum_{n=1}^N (J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) f_n |\phi_n\rangle - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} f_n |\phi_{n+1}\rangle - \sum_{n=1}^N J_{n-1,n} f_n |\phi_{n-1}\rangle \\ &= \frac{E - E_0}{S} \sum_{n=1}^N f_n |\phi_n\rangle. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Substituindo,  $|\Phi\rangle$  na expressão obtida e fazendo  $n = n + 1$  no segundo somatório e  $n = n - 1$  no terceiro, vamos ter que:

$$\sum_{n=1}^N \{[(J_{n-1,n} + J_{n,n+1})f_n - J_{n,n+1}f_{n+1} - J_{n-1,n}f_{n-1}]\} |\phi_n\rangle = \frac{(E - E_0)}{S} \sum_{n=1}^N f_n |\phi_n\rangle. \quad (2.26)$$

Onde,  $\mathcal{E} = E - E_0$  e  $S = 1/2$  temos a equação de *Schrödinger* em amplitudes de probabilidades.

$$(J_{n-1,n} + J_{n,n+1})f_n - J_{n,n+1}f_{n+1} - J_{n-1,n}f_{n-1} = 2\mathcal{E}f_n. \quad (2.27)$$

Esta expressão tem uma recorrência em  $f_n$  e por meio dela podemos obter a representação matricial do Hamiltoniano  $H$  na base  $|\phi_n\rangle$  para um mágnon em uma cadeia com  $N$  spins  $1/2$ .

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} J_{1,2} + J_{0,1} & -J_{1,2} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -J_{1,2} & J_{1,2} + J_{2,3} & -J_{2,3} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -J_{2,3} & J_{2,3} + J_{3,4} & -J_{3,4} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -J_{3,4} & J_{3,4} + J_{4,5} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & J_{N-2,N-1} + J_{N-1,N} & -J_{N-1,N} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -J_{N-1,N} & J_{N-1,N} + J_{N,N+1} \end{pmatrix}^{N \times N} \quad (2.28)$$

Esta representação consiste em uma matriz tridiagonal, de modo que, todos os termos da matriz são nulos, exceto os termos da diagonal principal ( $H_{n,n} = J_{n-1,n} + J_{n,n+1}$ ) e das subdiagonais ( $H_{n,n+1} = H_{n+1,n} = -J_{n,n+1}$ ). Vamos agora tratar rapidamente o termo de campo magnético. Em linhas gerais a energia de interação de um campo magnético apontando na direção  $z$  com os spins da rede tem valor  $B_n = G_B \mu_B h_n$  onde  $h_n$  é o campo magnético,  $G_B$  é o termo de giromagnético e  $\mu_B$  o magneton de Bohr. Em nosso estudo vamos considerar que o campo magnético dentro do canal é zero. O termo de campo magnético será atuante apenas nas extremidades do sistema, ou seja, em  $n = 1$  e  $n = N$ . Desta forma, podemos rapidamente refazer as contas incluindo o termo de campo  $-\vec{B}_n \vec{S}_n$  e o resultado final é basicamente a inclusão de um termo diagonal em nosso hamiltoniano. A equação de Schrödinger é estática para as ondas de spin com o termo de campo pode ser escrita como:

$$(J_{n-1,n} + J_{n,n+1})/2 f_n - J_{n,n+1}/2 f_{n+1} - J_{n-1,n}/2 f_{n-1} + B_n f_n = \mathcal{E} f_n \quad (2.29)$$

Ou seja, podemos vê claramente que apenas a diagonal principal da matriz terá mudanças. Lembrando que o campo atua apenas nas extremidades, é fácil observar que apenas os termos  $H_{1,1}$  e  $H_{N,N}$  do Hamiltoniano vão ser modificados para  $H_{1,1} = (J_{1,2} + J_{0,1})/2 + B_1$  e

$$H_{N,N} = (J_{N-1,N} + J_{N,N+1})/2 + B_N.$$

Uma vez construído o modelo contendo as informações físicas necessárias podemos iniciar nossos estudos. Se faz importante enfatizar que o foco principal é estudar a transferência de ondas de spin da posição  $n = 1$  para a posição  $n = N$  mantendo o canal com  $N - 2$  spins fracamente acoplado com as extremidades. Em linhas gerais vamos preparar o estado inicial localizado no spin  $n = 1$  (que é a fonte F do problema) e calcular a evolução temporal até que o estado seja totalmente transferido para o spin  $n = N$ . Para avaliar a qualidade desta transferência (ou seja, para "testar" se realmente o estado foi totalmente transferido) vamos utilizar diversas quantidades físicas. Vamos calcular a Fidelidade e concorrência bem como, outras medidas que tratam da distribuição espacial do estado quântico. Para obter a evolução temporal e calcular essas quantidades físicas vamos utilizar a diagonalização numérica do Hamiltoniano. Esta diagonalização será feita através de um programa em fortran e utilizando rotinas de diagonalização do livro "Numerical Recipes"[21]. Podemos observar que a matriz em tela é uma matriz tridiagonal. A diagonalização total desta matriz pode ser feita usando a rotina TQLI [21] que precisa basicamente de duas entradas, a diagonal principal da matriz e a diagonal secundária. A diagonal principal tem  $N$  elementos e a secundária tem  $N - 1$ . Os termos da diagonal secundária são basicamente os termos de exchange entre spins ao longo da cadeia. Uma vez utilizado a rotina TQLI, devidamente adaptada para nossa matriz, então precisamos calcular a evolução temporal de um pacote inicialmente localizado. Esta evolução será feita através do operador de evolução temporal que será explicado na próxima seção.

### 2.1.1 Evolução Temporal

A evolução temporal é um passo muito importante para determinar as quantidades físicas dependentes do tempo, como a fidelidade de transferência de estados quânticos. Esta técnica é aplicada com a finalidade de conhecer o comportamento dinâmico de um sistema quântico desordenado, e pode indicar a existência (ou ausência) de estados estendidos no sistema [20]. A descrição da evolução temporal para um sistema quântico com Hamiltoniano  $H$  pode ser feita da seguinte forma:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\Psi(0)\rangle \quad (2.30)$$

Temos a representação do operador evolução temporal  $e^{-iH\frac{t}{\hbar}}$  no estado  $|\Psi(0)\rangle$  em um tempo  $t = 0$ . Vamos expandir os estados  $|\Psi(t)\rangle$  e  $|\Psi(0)\rangle$  na base de orbitais  $|n\rangle$  podemos obter:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n f_n(t) |n\rangle \quad (2.31)$$

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_n f_n(0) |n\rangle \quad (2.32)$$

Então, podemos substituir as relação acima na equação 2.29 que resulta em:

$$\sum_n f_n(t) |n\rangle = e^{-iH\frac{t}{\hbar}} \sum_n f_n(0) |n\rangle. \quad (2.33)$$

A partir da equação de Schrödinger temos que  $H|E\rangle = E|E\rangle$ , então, poderemos expandir os autovetores de  $H$  na base dos orbitais,  $|n\rangle$  no espaço de Hilbert, deste modo teremos:

$$|E\rangle = \sum_n z_n^E |n\rangle. \quad (2.34)$$

Portanto, vamos expandir o estado inicial na base  $|E\rangle$  temos

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= \sum_E [\langle E|\psi_0\rangle] |E\rangle \\ |\psi(0)\rangle &= \sum_{\substack{n,m \\ E}} \left[ z_m^{E*} f_n(0) \right] (\langle m|n\rangle) |E\rangle. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Supondo  $H$  real e Hermitiano podemos fazer  $\langle m|n\rangle = \delta_{m,n}$ , assim teremos:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n,E} z_n^E f_n(0) |E\rangle \quad (2.36)$$

$$|\psi_0(0)\rangle = \sum_E \left[ \sum_n z_n^E f_n(0) \right] |E\rangle. \quad (2.37)$$

Usando a equação 2.29 para fazer a evolução temporal e teremos:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \sum_E \left[ \sum_n z_n^E f_n(0) \right] |E\rangle \quad (2.38)$$

Como,  $e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |E\rangle = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} |E\rangle$ , da mesma forma,  $|\psi(t)\rangle = \sum_n f_n(t) |n\rangle$  e  $|E\rangle = \sum_m z_m^E |m\rangle$  então, podemos fazer

$$|\psi(t)\rangle = \sum_E \left[ \sum_n z_n^E f_n(0) \right] e^{-\frac{iEt}{\hbar}} |E\rangle. \quad (2.39)$$

e,

$$\sum_n f_n(t) |n\rangle = \sum_E \left[ \sum_n z_n^E f_n(0) \right] e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \sum_m z_m^E |m\rangle. \quad (2.40)$$

Calculando,  $Z(E) = \sum_n z_n^E f_n(0)$  temos,

$$\sum_n f_n(t) |n\rangle = \sum_{E,m} Z(E) z_m^E e^{-\frac{iEt}{\hbar}} |m\rangle. \quad (2.41)$$

Fazendo a mudança de variáveis de  $m \rightarrow n$  e eliminado o somatório do lado direito chegamos a expressão para a evolução temporal deste sistema

$$f_n(t) = \sum_E Z(E) z_n^E e^{-\frac{iEt}{\hbar}}. \quad (2.42)$$

Esta técnica tem uma grande precisão numérica dentro do contexto da conservação da norma da função de onda. Porém, o procedimento exige a diagonalização total do Hamiltoniano, como este procedimento tem um custo computacional em geral bem caro, se considerarmos cadeias unidimensionais com  $N > 10^4$  nem sempre é viável realizá-lo.

### 2.1.2 Quantidades Físicas

Nesta seção trataremos de quantidades Físicas que descrevem as características do sistema quântico desordenado com  $N$  spins. Estas quantidades demonstram características muito importantes do sistema de transferência de estados quânticos compostos por uma fonte F ligada

por um canal ao receptor R. As funções trabalhadas neste tópico são de suma importância para medidas de emaranhamento quântico. Boa parte dessas funções são calculadas utilizando a dinâmica temporal na rotina desenvolvida e descrita anteriormente. Neste tópico vamos demonstrar e explicar as funções de modo geral. Todas essas quantidades serão obtidas em seus valores máximos.

### Participação

A participação é uma medida do grau de localização dos estados que pode ser determinada a partir de uma função de onda dependente do tempo, utilizando evolução temporal ou a partir de cada autoestado do hamiltoniano do sistema. Esta medida é feita na base dos orbitais atômicos dos autoestados e suas respectivas autoenergias. Para exemplificar melhor vamos tratar de uma cadeia pura com todos os autoestados estendidos, onde  $|\phi_n\rangle = \sum_{n=1}^N f_n^{(i)} |n\rangle$  com  $f_n$  constante. Portanto podemos calcular a participação  $P$  da seguinte forma:

$$P = \frac{\sum_j |f_n|^2}{\sum_j |f_n|^4}. \quad (2.43)$$

Normalizando os autoestados do hamiltoniano temos que:

$$|\phi_n\rangle = \sum_n |f_n|^2 = 1. \quad (2.44)$$

Portanto,

$$|f_n| = \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (2.45)$$

Logo, a participação pode ser descrita como

$$P = \frac{1}{\sum_n |f_n|^4} = \frac{1}{\sum_n \frac{1}{N^2}} = N. \quad (2.46)$$

Além disso, esta grandeza pode nos fornecer medidas de amplitudes de onda que diferem significativamente de zero para uma dada faixa de energia [23]. A participação também pode ser entendida como a medida do número de spins que participam do pacotes de onda; quando o

pacote de onda é localizado a participação é pequena; quando o estado é estendido temos que a participação tem valor grande (em geral proporcional ao tamanho do sistema)[29].

### Fração dos Estados nas Bordas do Sistema ( $f_{N1}$ )

Esta função é a soma do módulo da função de onda no sítio 1 (fonte F) com o sítio N (receptor R), ou também a fração dos estados nas bordas do sistema. Esta medida é calculada na rotina através da dinâmica temporal, de modo a obter os valores máximos. Podemos descreve-la matematicamente da seguinte forma:

$$f_{N1} = \langle |f_1|^2 + |f_N|^2 \rangle_{max} \quad (2.47)$$

Quando  $f_{N1} = 1$  significa que o estado quântico está localizado entre a fonte e o receptor; nesta situação existe a possibilidade desse estado ter sido transferido da fonte (F) para o receptor (R).

### Fração de Estados Dentro do Canal ( $f_c$ )

A Função  $f_c$  assim como as demais medidas tratadas neste tópico é obtida a partir da evolução temporal para valores máximos. No entanto, nesta medida é calculado a soma da função de onda apenas dentro do canal. A função  $f_c$  é obtida fazendo o somatório do módulo ao quadrado da função de onda dentro do canal, assim podemos escrever a seguinte expressão:

$$f_c = \langle \sum_{n=2}^{N-1} |f_n|^2 \rangle_{max} \quad (2.48)$$

Esta medida pode ser definida como a fração de estados dentro do canal. Quando temos  $f_c = 1$  (valor máximo) entende-se que não houve a transferência do estados, ou seja o estado esta preso no canal.



### Grau de Localização dos Estados Dentro do Canal ( $Dist$ )

A  $Dist$  é uma função que determina se o estado é localizado ou estendido. Para o sistema localizado temos um valor alto para  $Dist$ , já para o caso estendido esta quantidade é zero. Esta é uma medida estática feita dentro do canal. Nesse caso não será levado em conta o termo de acoplamento  $g$  nem mesmo a dinâmica temporal. Para calcular a  $Dist$  vamos diagonalizar o Hamiltoniano apenas referente ao canal desordenado. Vamos coletar todas as autoenergias e autoestados e fazer o cálculo da função  $Dist$ . Esta função é definida como o módulo da diferença entre os valores máximo e mínimo das componentes da função de onda, como mostrado abaixo:

$$Dist(E) = ||f_{max}^E|^2 - |f_{min}^E|^2| \quad (2.49)$$

Ou seja, para cada autoenergia  $E$  vamos encontrar os valores máximos e mínimos do pacote de onda. Quando temos um estado estendido temos que  $|f_{max}^E| \approx |f_{min}^E|$  logo  $Dist \approx 0$ . Este comportamento sugere que o estado é metálico. Para o caso de um estado localizado temos que  $|f_{max}^E| \gg \gg |f_{min}^E|$  assim a quantidade  $Dist$  é grande. Ou seja, o resultado  $Dist \rightarrow 0$  indica estados estendidos, e o caso  $Dist \gg 0$  indica estados localizados. Em linhas gerais esta função é uma medida do grau de localização dos autoestados dentro do canal desordenado.

### Condutância ( $G$ )

Uma medida interessante que pode ser usada para se caracterizar a natureza dos estados de um mágnon em nosso modelo é a chamada condutância de Kubo-Greenwood. Esta teoria, originalmente proposta para se estudar a dinâmica de cargas em baixa temperatura, foi desenvolvida através do cálculo de componentes do operador momento. A fórmula de Kubo-Greenwood é dada por[24]:

$$G(E) = \sum_{E_a, E_b} |\langle E_a | xH - Hx | E_b \rangle|^2 \delta(E - E_a) \delta(E - E_b) \quad (2.50)$$

Nesta equação temos que  $\langle E_a |, |E_b \rangle$  representam autoestados do Hamiltoniano com seus respectivos autovalores  $E_a$  e  $E_b$ . O termo  $xH - Hx$  representa basicamente o operador momento e  $x$  representa a posição ao longo da cadeia. Esta equação, apesar de ter sido desenvolvida para

elétrons, pode ser usada sem restrições dentro da teoria de onda de spin. Se faz importante salientar que não é simples relacionar a condutividade calculada para mágnons com a condutividade elétrica medida em  $e^2/\hbar$ . No caso magnético a condutividade terá unidades adimensionais e será relacionada com a presença de mobilidade (ou não) das ondas de spin.

### Densidade de Estados (*DOS*)

A Densidade de Estados (*DOS*) é definida como o número de estados do sistema para uma determinado variação de energia. A densidade de estados está normalizada de modo que sua integral resulte em um. A *DOS* obtida no estudo em questão é calculado na rotina em fortran considerando apenas o canal do sistema em função da energia  $E$ . Este cálculo é realizado por meio da seguinte equação:

$$DOS = \sum_j \delta(E - E_j) |E\rangle \quad (2.51)$$

Esta função será obtida por meio do programa em fortran aplicado ao sistema quântico já descrito para a análise de determinados efeitos causados pelo aumento ou queda da densidade de estados.

### Fidelidade

A fidelidade é uma grandeza de interesse em computação quântica por ser capaz de determinar em quais instantes o sistema se apresenta em determinado estado, utilizando a evolução temporal. Além disso, fornece uma alternativa além da diagonalização direta para as transições de energia do sistema [8]. Esta grandeza física faz a média das transferências de estados quânticos. Para a obtenção dessa grandeza temporal é necessário conhecer o módulo da função de onda do sistema no sítio  $N$ . Para obter a expressão da fidelidade é necessário encontrar a solução da equação de Schrödinger dependente do tempo. Utilizando a evolução temporal como uma das técnicas para a obtenção da fidelidade na rotina de programação em fortran, temos que ter informações sobre a dinâmica do pacote de onda localizado no sítio  $F$  (fonte), para que o tempo seja suficiente para chegar ao sítio  $R$  (receptor). Então, temos que resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo por meio da evolução temporal, bem como diagonalizar a matriz obtida como descrito anteriormente. A partir desse resultado podemos realizar o cálculo da fidelidade para a transferência de estados quânticos. De modo geral podemos exemplificar um

problema para a obtenção numérica da expressão da fidelidade. Com a finalidade de demonstrar a equação da fidelidade faremos uso do protocolo de BB84 (protocolo Alice e Bob) de transferência de um único qubit de estados de spin quântico composto por um estado puro e outro misto representado pela esfera de Bloch mostrada na figura a seguir.

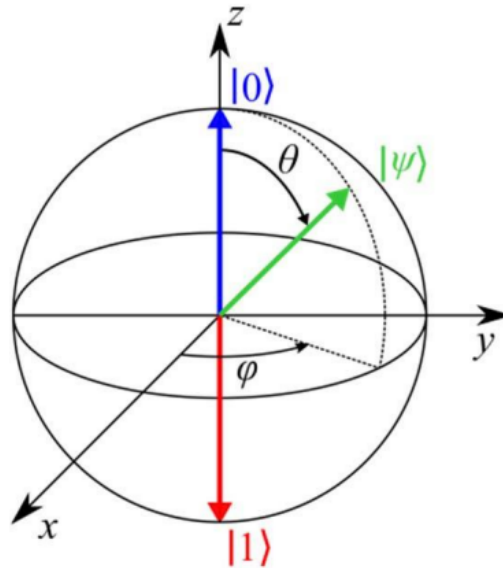


Figura 2.2: Esfera de Bloch.[25]

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin\frac{\theta}{2} |1\rangle \quad (2.52)$$

Um estado quântico puro é representado por um único vetor de estado, enquanto um estado quântico misto é um conjunto estatístico de estados puros [25]. A expressão 2.47 descreve estes estados, e deve ser trabalhada para que o estado final seja o mais próximo possível do estado inicial assim a transferência será muito eficiente. Para que isto ocorra é necessário esperar um tempo específico para o estado inicial evoluir até o estado final. Como nas extremidades em geral, é um estado misto deste modo é possível aplicar o traço dos estados de todos os outros spins de outros spins de  $|\psi\rangle$  [5].

$$\rho_{out}(t) = P(t) |\psi_{out}(t)\rangle \langle \psi_{out}(t)| + [1 - P(t)] |0\rangle \langle 0|. \quad (2.53)$$

Como,

$$|\Psi_{out}(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{P(t)}} \left( \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} f_{s,r}^N(t) |1\rangle \right). \quad (2.54)$$

e

$$P(t) = \cos^2 \frac{\theta}{2} + \sin^2 \frac{\theta}{2} |f_{s,r}^N(t)|^2. \quad (2.55)$$

Assim como,

$$f_{s,r}^N(t) = \langle r | e^{-iH_G t} | s \rangle. \quad (2.56)$$

Então, podemos considerar o  $r$ -ésimo spin em um determinado tempo  $t = t_0$ , para obter a fidelidade de comunicação quântica através da média sob todo o estado de entrada puro ( $|\Psi_{in}\rangle$ ) na esfera de Bloch (figura 2.2) é dada por:

$$F = \frac{1}{4\pi} \int \langle \Psi_{in} | \rho_{out}(t_0) | \Psi_{in} \rangle d\Omega \quad (2.57)$$

Realizando, os cálculos vamos ter,

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{in} | \rho_{out}(t_0) | \Psi_{in} \rangle &= P(t_0) \langle \Psi_{in} | \Psi_{out}(t_0) \rangle \langle \Psi_{out}(t_0) | \Psi_{in} \rangle + \langle \Psi_{in} | [1 - P(t_0)] | 0 \rangle \langle 0 | \Psi_{in} \rangle \\ \langle \Psi_{in} | \rho_{out}(t_0) | \Psi_{in} \rangle &= P(t_0) \langle \Psi_{in} | \Psi_{out}(t_0) \rangle \langle \Psi_{out}(t_0) | \Psi_{in} \rangle \\ &+ \langle \Psi_{in} | | 0 \rangle \langle 0 | \Psi_{in} \rangle - P(t_0) \langle \Psi_{in} | | 0 \rangle \langle 0 | \Psi_{in} \rangle. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Então,

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{in} | \rho_{out}(t_0) | \Psi_{in} \rangle &= \cos^4 \frac{\theta}{2} + \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} (f_{s,r}^N(t_0))^* + \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} f_{s,r}^N(t_0) + \sin^4 \frac{\theta}{2} |f_{s,r}^N(t_0)|^2 \\ &+ \cos^2 \frac{\theta}{2} - \cos^4 \frac{\theta}{2} - \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} |f_{s,r}^N(t_0)|^2. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Substituindo na expressão 2.51, temos:

$$\begin{aligned} F &= \frac{1}{4\pi} \int \cos^4 \frac{\theta}{2} + \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} (f_{s,r}^N(t_0))^* + \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} f_{s,r}^N(t_0) + \sin^4 \frac{\theta}{2} |f_{s,r}^N(t_0)|^2 \\ &+ \cos^2 \frac{\theta}{2} - \cos^4 \frac{\theta}{2} - \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} |f_{s,r}^N(t_0)|^2 d\Omega. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Como,  $\int d\Omega = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin\theta d\theta d\phi$ , não possui dependência em  $\phi$  então a integral em função de  $\phi = 2\pi$  portanto,

$$F = \frac{1}{2} \int_0^\pi \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \sin\theta (f_{s,r}^N(t_0))^* + \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \sin\theta f_{s,r}^N(t_0) \\ + \sin^4 \frac{\theta}{2} \sin\theta |f_{s,r}^N(t_0)|^2 + \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin\theta - \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \sin\theta |f_{s,r}^N(t_0)|^2 d\theta. \quad (2.61)$$

Resolvendo as integrais vamos ter que:

$$F = \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{3} (f_{s,r}^N(t_0))^* + \frac{1}{3} f_{s,r}^N(t_0) + \frac{2}{3} |f_{s,r}^N(t_0)|^2 + 1 - \frac{1}{3} |f_{s,r}^N(t_0)|^2 \right] \\ = [f_{s,r}^N(t_0) + (f_{s,r}^N(t_0))^*] \frac{1}{6} + \frac{1}{2} + \frac{1}{6} |f_{s,r}^N(t_0)|^2. \quad (2.62)$$

Vamos calcular o primeiro termo da expressão

$$(1) = |f_{s,r}^N(t_0)|^2 e^{i*arg(f_{s,r}^N(t_0))} + |f_{s,r}^N(t_0)| e^{-i*arg(f_{s,r}^N(t_0))} \\ = |f_{s,r}^N(t_0)| [e^{i*arg(f_{s,r}^N(t_0))} + e^{-i*arg(f_{s,r}^N(t_0))}] \\ = 2|f_{s,r}^N(t_0)| \cos(arg(f_{s,r}^N(t_0))). \quad (2.63)$$

A equação 2.56 fica,

$$F = [|f_{s,r}^N(t_0)| \cos(arg(f_{s,r}^N(t_0)))] \frac{1}{3} + \frac{1}{2} + \frac{1}{6} |f_{s,r}^N(t_0)|^2. \quad (2.64)$$

Para o sistema em estudo neste trabalho  $f_{s,r}^N(t_0) = f_N(t)$  (receptor), além disso,  $\cos(arg(f_{s,r}^N(t_0)))$  não é relevante em média temporal para valores máximos de fidelidade, logo podemos desconsiderá-lo. Assim a fidelidade tem a seguinte expressão:

$$F = \frac{1}{2} + \frac{1}{3} |f_N(t)| + \frac{1}{6} |f_N(t)|^2 \quad (2.65)$$

Para o sistema da figura 2.1 vamos observar a fidelidade máxima ( $F_{max}$ ) alcançada em um certo tempo variando as amostras, pois a dinâmica do sistema muda de acordo com essas

variações. Quando ocorre a perfeita transmissão de estados,  $F = 1$ . Em contrapartida, quando nada é transmitido,  $F = \frac{1}{2}$ , ou seja,  $f_N(t) = 0$  [26].

### Concorrência

A concorrência é uma medida do grau de emaranhamento entre partículas de um sistema de transferência de estados quânticos. Essa medida pode ser realizada para estados puros e mistos, em sistemas constituído de dois qubits. Esta medida de emaranhamento foi desenvolvida por William K. Woortters em 1998, e possui grande relevância por ter sido a primeira medida de emaranhamento para estados mistos de dois qubits, de modo que pôde ser estabelecida uma condição necessária e suficiente para que estes sejam subsistemas separáveis [16]. Para definir a expressão da concorrência, vamos usar um estado arbitrário  $|\Psi\rangle$ . Podemos escrever  $|\Psi\rangle$  como combinação linear dos vetores na base  $|n\rangle$ :

$$|\Psi\rangle = \sum_n \omega_n |n\rangle \quad (2.66)$$

Onde,  $\omega_n$  é uma amplitude de probabilidades e  $|\omega_n|^2$  é a probabilidade de achar a partícula no  $n$ -ésimo sítio. Assim, podemos supor uma dada matriz de densidades  $\rho$  de um par de sistemas quânticos considerando todas as possíveis decomposições de estados puros para  $\rho$ . Com base nisso vamos ter a seguinte equação para a densidade:

$$\rho = |\Psi\rangle \langle\Psi| = \sum_n \sum_i \omega_n \omega_i^* |n\rangle \langle i| \quad (2.67)$$

Utilizaremos a base computacional  $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$  para um sistema de qubits, podemos escrever a matriz densidade reduzida, com o intuito de verificar o quão emaranhado está um determinado par de spins  $(n, i)$  [26].

$$\rho_{n,i} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & c & 0 \\ 0 & d & e & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.68)$$

Onde,  $a = 1 - |\omega_n|^2 - |\omega_i|^2$ ,  $b = |\omega_n|^2$ ,  $c = \omega_n \omega_i^*$ ,  $d = \omega_n^* \omega_i$ ,  $e = |\omega_i|^2$ .

Com base nos estudos de Woortters, a concorrência para estados mistos de qubits é dada por:

$$C(\rho) = \max[0, (\lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4)] \quad (2.69)$$

Onde,  $\lambda_n$  são os autovalores da matriz, podemos obtê-los a partir da raiz quadrada dos autovalores de  $\rho \tilde{\rho}$ , e  $\tilde{\rho}$  dada pela expressão abaixo

$$\tilde{\rho} = (\hat{\sigma}^y \otimes \hat{\sigma}^y) \rho^* (\hat{\sigma}^y \otimes \hat{\sigma}^y), \quad (2.70)$$

$\hat{\sigma}^y$  é a matriz de *Pauli*. Realizando os cálculos do produto tensorial entre as matrizes de *Pauli* e o complexo conjugado ( $\rho^*$ ) e por fim fazendo o produto entre  $\rho \tilde{\rho}$  obtemos:

$$\rho \tilde{\rho} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k_1 & k_2 & 0 \\ 0 & k_3 & k_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.71)$$

Onde,  $k_1 = 2|\omega_n|^2|\omega_i|^2$ ,  $k_2 = 2|\omega_n|^2\omega_n\omega_i^*$ ,  $k_3 = 2|\omega_i|^2\omega_i\omega_n^*$ , e os autovalores de 2.67 são  $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 0$ ,  $\alpha_4 = 4|\omega_n|^2|\omega_i|^2$ , utilizando a equação 2.65 obtemos a seguinte expressão:

$$C(\rho_{n,i}) = 2|\omega_n||\omega_i| \quad (2.72)$$

Para valores de  $C(\rho_{n,i}) = 1$  temos uma transferência de estados quânticos perfeita pois o emaranhamento entre as partículas é máximo. Porém, quando  $C(\rho_{n,i}) = 0$  não apresenta transferência de estados quânticos, uma vez que as partículas não estão emaranhadas.

### 2.1.3 Fidelidade e Concorrência

A fidelidade e a concorrência são quantidades físicas de suma importância neste trabalho, pois trazem informações sobre transferências de estados quânticos e o grau de emaranhamento entre a fonte e o receptor. Nesta dissertação será realizada a plotagem de gráficos comparativos entre fidelidade e concorrência com o intuito de observar a eficiência da transferência de estados quânticos com desordem em trimeros e grau de emaranhamento quântico, entre outros fenômenos físicos que surgem no estudo destas quantidades. Todas essas grandezas serão quantificadas a partir do desenvolvimento de uma rotina de programação em fortran utilizando métodos de diagonalização de matrizes, evolução temporal, dentre outros, para um sistema quântico composto por uma fonte e um receptor acoplados ao canal por uma energia de *hopping* ( $g$ ). Os gráficos de concorrência e fidelidade serão plotados na mesma figura, a fim de fazer uma análise de seus comportamentos, além disso será feita uma comparação entre o comportamento de todas as grandezas citadas para desordens com correlação em trimeros e não-correlacionadas.

A fidelidade faz a média das transferências de estados quânticos, além disso, pode ser realizada para estados puros constituído de dois qubits e pode ser generalizada para sistemas quânticos. Esta é uma ferramenta muito utilizada na teoria da informação quântica como uma forma de comparar estados quânticos [11]. A concorrência trata-se da grandeza física que quantifica o grau emaranhamento quântico de um sistema. Para valores grandes de concorrência temos a indicação de um sistema quântico com emaranhamento entre determinados sítios. O emaranhamento é considerado atualmente o principal recurso da computação quântica para processamento de informações quânticas. Assim, a questão de criar, aprimorar e controlar o emaranhamento em vários sistemas compostos tem grande importância prática no processamento real de informações quânticas e atraiu muita atenção na teoria e na tecnologia de experimentos [10], esse é um dos principais motivos pelos quais é tão importante o estudo da função concorrência.



# Capítulo 3

## Resultados

O presente trabalho tem como objetivo estudar as transferências de ondas de spin em cadeias do tipo Heisenberg. Em linhas gerais, consideramos uma cadeia com  $N$  spins descritos pelo Hamiltoniano de Heisenberg e investigamos a transferência de estados de mágnon do spin localizado na extrema esquerda (spin  $n = 1$ ) para o spin localizado na extrema direita ( $n = N$ ). Salientamos que as extremidades  $n = 1$  e  $n = N$  são denominadas respectivamente a fonte (F) e receptor (R). Os spins internos ( $N - 2$ ) conectando F a R representam o canal. Estas características podem ser observadas na figura 2.1. Os spins internos do canal vão apresentar uma distribuição de acoplamento spin-spin com desordem correlacionada. A história da desordem correlacionada vem de diversos estudos dentro do contexto do modelo de Anderson. Se faz importante enfatizar novamente que o modelo de Anderson em dimensão baixa ( $d = 1$  por exemplo) tem estados totalmente localizados. Incluindo as correlações locais tipo dímeros ou trímeros[13], o modelo apresenta algumas ressonâncias, que são modos transparentes. Este tipo de desordem correlacionada foi amplamente estudada dentro do contexto eletrônico, pode ser implementada dentro da realidade das cadeias de Heisenberg. Vamos construir nosso modelo de desordem correlacionada para o canal de spins adaptando os modelo de dímeros ou trímeros que foram previamente investigados no contexto do modelo de Anderson. Em nosso estudo, o canal terá acoplamentos  $j_1 = 0.5$  e  $j_2 = 1$ . Partimos de um canal com todos os spins acoplados com  $j_1$ . Desta feita, considerando uma dada concentração  $c$  vamos distribuindo valores  $j_2$  de maneira tal que eles sempre apareçam em sequências de 3 valores (os chamados trímeros). Podemos exemplificar uma dada distribuição destas como sendo :  $\dots j_1 j_1 j_2 j_2 j_2 j_1 j_2 j_2 j_2 \dots$ . Observem que sempre que aparece um valor  $j_2$  ele é sucedido de outros dois valores  $j_2$  formando assim um trímero  $j_2 j_2 j_2$ . Salientamos que a implementação desta desordem deve ser feita de

forma cuidadosa principalmente quando a colocação do trímero ocorre na extremidade direita do canal. Caso o penúltimo ou último spin do canal sejam sorteados para receber o início de um trímero isso não pode ser aceito pois o final do trímero vai acabar ficando localizado fora do canal (e isso não deve acontecer). Então, se faz importante salientar, que devemos iniciar o sorteio aleatório para a colocação de trímeros apenas na região entre o primeiro spin do canal e o antepenúltimo spin. Uma vez gerado o canal com esta desordem correlacionada tipo trímero falta configurar a conexão entre as extremidades ( $n=1$  e  $n=N$ ) e o canal. Salientamos que os spins F e R são acoplados com o canal através de um termo de exchange de valor  $g$ . Ainda mais, vamos incluir um campo magnético sobre os spins  $n = 1$  e  $n = N$  que terá a função de regular a energia efetiva diagonal do Hamiltoniano nas posições  $H_{1,1}$  e  $H_{N,N}$ . Para que a transferência possa existir é importante que estes termos sejam bem controlado e estejam ressonantes com o canal [4]. Ou seja, vamos incluir um campo magnético nas extremidades de forma que  $H_{1,1} = H_{N,N} = E^{FR}$ .

Para a obtenção das quantidades físicas desenvolvemos rotinas de programação em fortran. Estas rotinas são responsáveis por encontrar resultados para a concorrência máxima ( $C_{max}$ ) e fidelidade máxima ( $F_{max}$ ) em função da energia ( $E^{FR}$ ) no sistema, além disso, obtemos as funções de Participação ( $Part$ ),  $fN1$  e  $fc$  para energia máxima de acoplamento nas extremidades ( $g$ ). E por fim observamos as densidades de estados ( $DOS$ ), ( $Dist$ ) e a condutância ( $G$ ) dentro do canal para a energia ( $E$ ). Como já foi descrito anteriormente, o modelo de Heisenberg com o campo nas extremidades é descrito por:

$$H = - \sum_{n=1}^N J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_{n=1}^N \vec{B}_n \vec{S}_i \quad (3.1)$$

Lembrando que o campo externo  $B_n$  atua apenas em  $n = 1$  e  $n = N$ , para os demais spins ele é nulo. Com o desenvolvimento dos cálculos descritos no capítulo 2 temos a representação matricial do Hamiltoniano  $H$  na base  $|\phi_n\rangle$  para um mágnon em uma cadeia com  $N$  spins  $1/2$ .

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2E^{FR} & -g & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -g & g + J_{2,3} & -J_{2,3} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -J_{2,3} & J_{2,3} + J_{3,4} & -J_{3,4} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -J_{3,4} & J_{3,4} + J_{4,5} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & J_{N-2,N-1} + g & -g \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -g & 2E^{FR} \end{pmatrix}_{N \times N} \quad (3.2)$$

De posse da representação matricial do Hamiltoniano (uma matriz tridiagonal) foi realizada a diagonalização total dela e posteriormente calculamos também a evolução temporal. Salientamos novamente que a diagonalização foi feita usando a rotina TQLI do livro "numerical recipies"[21]. A evolução temporal foi feita através do cálculo do operador de evolução temporal. Este por sua vez foi calculado usando os autovalores e autovetores obtidos através da diagonalização. A maior vantagem de usar o método do operador de evolução temporal é a precisão numérica que ele impetra ao estudo. O formalismo de operador de evolução temporal é formalmente exato (não existem aproximações como em métodos do tipo Runge-Kutta ou Taylor etc). Desta forma podemos fazer a evolução temporal para tempos bem maiores que  $10^5$  unidades de tempo, sem destruir a norma da função de onda. Obviamente é possível sim calcular a evolução temporal do pacote de onda usando métodos aproximados, mas tais métodos no limite de tempo longo não são tão confiáveis. Usando este procedimento numérico foi possível obter as quantidades físicas demonstradas nos gráficos apresentados a seguir. Salientamos que vamos considerar o modelo contendo correlações locais tipo trímeros e também fazer algumas comparações eventuais com o caso sem correlações.

Antes de apresentar nossos resultados acerca da existência (ou não) de transferência de estados quânticos, neste modelo vamos apresentar uma breve descrição acerca da natureza dos autoestados de um mágnon dentro do canal. Vamos considerar apenas os  $N - 2$  spins que compõem o canal e calcular as quantidades estáticas de *Dist*, condutância de Kubo e densidade de

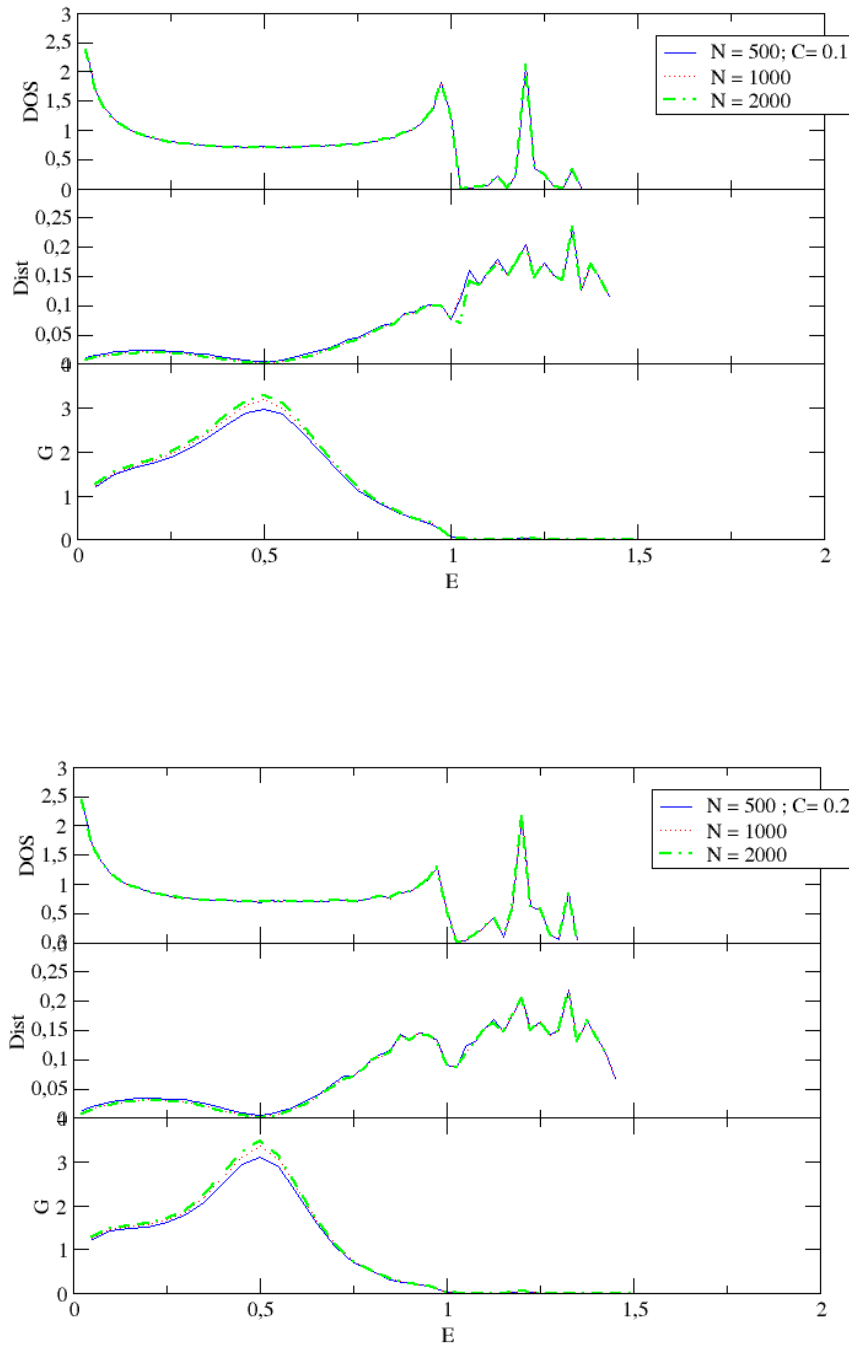


Figura 3.1: Curvas comparativas entre as densidades de estados ( $DOS$ ), ( $Dist$ ) e condutância ( $G$ ) em relação a energia do canal ( $E$ ) para uma concentração de trímeros com  $c = 0.1, 0.2$ , número de amostras ( $N$ ) e tamanho de cada amostras na seguinte ordem: 1000, 500, 250.

estados. O Hamiltoniano do canal é o bloco central de tamanho  $(N-2) \times (N-2)$  do Hamiltoniano mostrado acima, onde foram removidas as linhas e colunas referente a fonte e o receptor. Na figura 3.1 obtemos curvas comparativos entre a função ( $Dist$ ), densidade de estados ( $DOS$ ) e

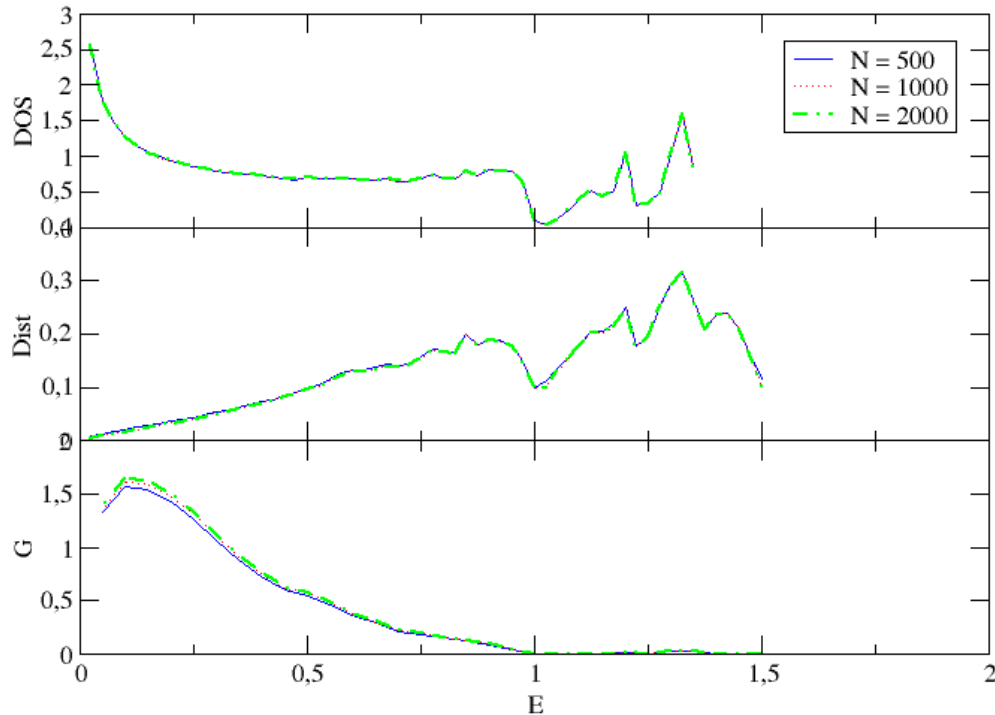


Figura 3.2: Curvas comparativas entre as densidades de estados ( $DOS$ ), ( $Dist$ ) e a condutância ( $G$ ) em relação a energia no canal ( $E$ ) para amostras sem correlação, com número de amostras ( $N$ ) e tamanho de cada amostras na seguinte ordem: 1000, 500, 250.

condutância ( $G$ ) para diversos tamanhos e diversas concentrações de trímeros. A densidade de estados vai indicar no sistema onde tem estados e onde não tem, no caso do sistema em estudo as observações indicam que na região de energia baixa  $DOS$  é grande, portanto, existe uma grande quantidade de estados de um mágnon. Outro ponto interessante na densidade de estados é que na região de baixas energias ela se torna mais suave. Esta suavização da  $DOS$  tem relação direta com a existência de estados metálicos. Nas regiões de energia alta em geral nota-se poucos estados de um mágnon. A função ( $Dist$ ) contribui para diferenciar estados localizado de estados estendidos. A  $Dist$  é pequena nas regiões de baixa energia indicando a presença de estados estendidos (particularmente em  $E = 0$  e  $E = 0.5$ ). Na região de altas energias a distância é grande o que sugere estados localizados. A condutância é uma quantidade que mede a existência (ou não) de estados condutores (estados estendidos). Através das curvas obtidas para a condutância podemos perceber que para  $E \leq 0.5$  temos uma região com boa condutância. Especialmente em  $E = 0.5$  temos que a condutividade parece ser máxima. Podemos observar também que os resultados

obtidos anteriormente são qualitativamente válidos para os diversos tamanhos e concentrações que utilizamos. Desta forma, esta análise sugere a existência de estados metálicos dentro do canal na região de baixas energias, particularmente  $E = 0$  e  $E = 0.5$ . Se faz importante comparar os estudos anteriormente apresentados com o caso de um canal com desordem binária não correlacionada (ou seja, uma sequência aleatória sem correlações de valores  $J_1$  e  $J_2$ ). Neste caso não é necessário definir a concentração pois vamos considerar probabilidade 0.5 de ocorrência para ambos os valores. Os resultados para as funções estáticas podem ser encontrados na figura 3.2. Podemos observar claramente que apenas o modo em torno de  $E = 0$  apresenta indícios de comportamento condutor. Os demais estados de alta energia são isolantes. Portanto, nossos resultados claramente indicam que canais desordenados sem correlações são isolantes na região de energia alta. A presença de correlações tipo trímico promove o aparecimento de ressonâncias (modos condutores) na região de altas energias. Agora que entendemos qual a natureza dos autoestados dentro do canal vamos investigar a transferência de estados quânticos entre a fonte e o receptor.

Na figura 3.3 temos os resultados para fidelidade e concorrência máxima em função da energia na fonte e no receptor ( $E^{FR}$ ). Consideramos  $N = 50$  e um número de amostras igual 4500. Será analisado o comportamento de  $C_{max}$  e  $F_{max}$  para quatro valores distintos de concentração de trímeros ( $c$ ).

Os gráficos da figura 3.3 exibem o comportamento da fidelidade e concorrência máxima em função da energia ( $E^{FR}$ ), com a concentração de trímeros variando entre 0.05, 0.1, 0.15, 0.2. Estes experimentos computacionais foram realizados com intuito de observar o comportamento da concorrência e fidelidade com quatro variações de  $c$ , para as energias de acoplamento externo ao canal, ou seja para as energias de acoplamento entre a fonte (F) e o canal, assim como entre o receptor (R) e o canal.

Nas regiões de energia variando de 0 a 0.5 aproximadamente, para qualquer valor de concentração observa-se valores consideravelmente altos para  $F_{max}$  e  $C_{max}$ . Quando  $E^{FR}$  cresce nota-se uma queda nessas quantidades chegando a zero para  $C_{max}$  e 0.5 para  $F_{max}$ . Os valores altos de  $F_{max}$  e  $C_{max}$  indicam que nesta região está ocorrendo uma boa transferência de estados quânticos, enquanto que nas regiões onde temos pouca ou nenhuma presença de concorrência e fidelidade sabe-se que não está ocorrendo transferência de estados quânticos. Isso costuma ocorrer para valores altos de energia, como podemos observar nos gráficos da figura 3.3. A faixa de energias onde o sistema possui os modos estendidos (ou com grande comprimento de

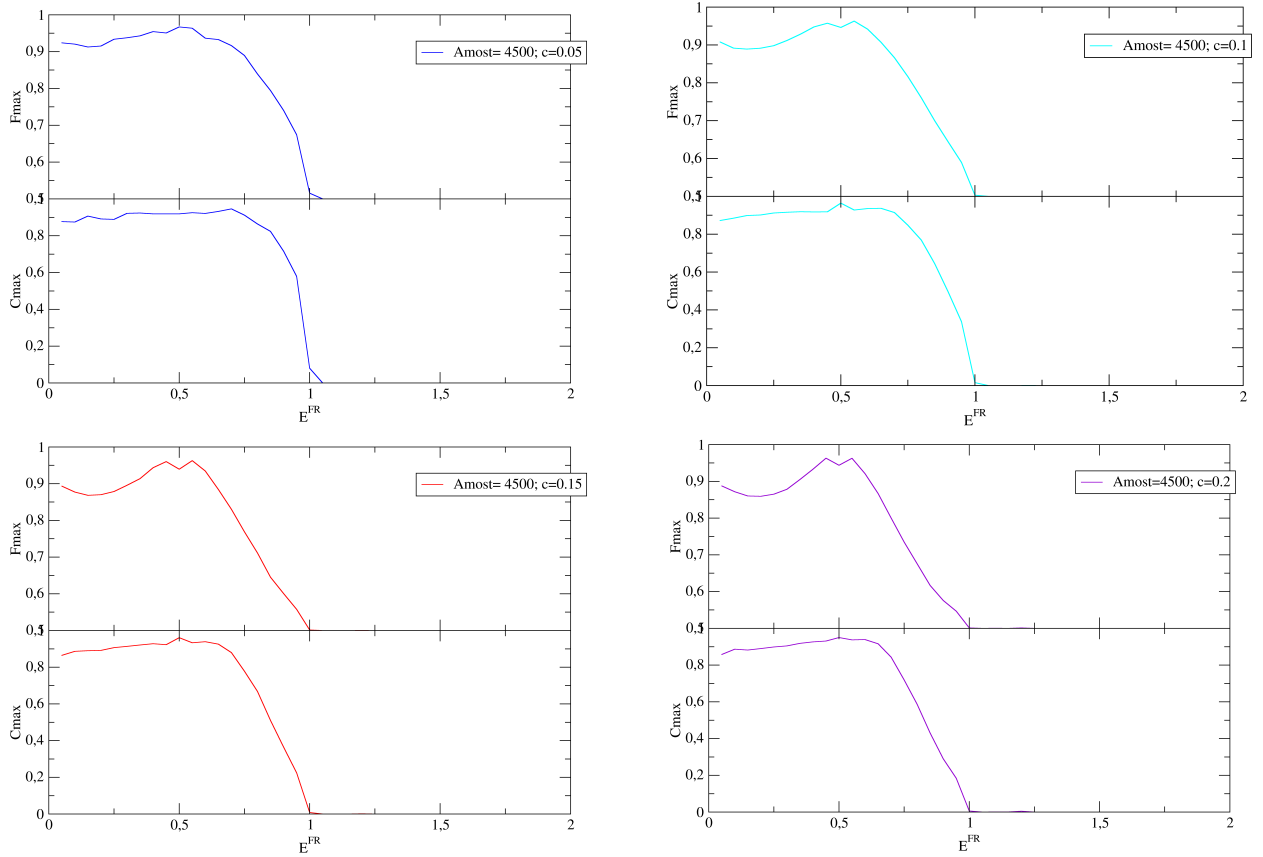


Figura 3.3: Concorrência máxima ( $C_{max}$ ) e fidelidade máxima ( $F_{max}$ ) em função da energia ( $E^{FR}$ ) para uma amostra de 4500,  $N = 50$  e valores de concentração de trímeros variando de  $c = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2$ .

localização) fica exatamente na região de baixas energias ( $[0, 0.5]$ ). Podemos observar que nesta região encontramos ressonâncias para as quais fidelidade e concorrência ficam próximas de 1. Nos pontos onde ocorre a ressonância podemos perceber a presença forte do emaranhamento quântico, principalmente quando  $C_{max} = 1$  ou próximo disso, pois como já foi mencionado anteriormente a concorrência é uma medida que quantifica o emaranhamento quântico. Da mesma forma, em toda essa região que observa-se valores baixos de concorrência e fidelidade, também encontramos a presença do emaranhamento menos intenso. Os casos onde não ocorre transferências de estados e nem emaranhamento são os estados localizados com valores altos de energia caracterizando o sistema como isolante. Esse comportamento ocorre para  $C_{max} = 0$  e  $F_{max} = 0.5$ .

Para efeito de comparação foi realizado este mesmo experimento na figura 3.4 para o modelo sem correlação com  $N = 50$  e 1000 amostras. Salientamos que este modelo sem correlação aqui investigado é um modelo com distribuição binária  $J_1, J_2$  com concentração

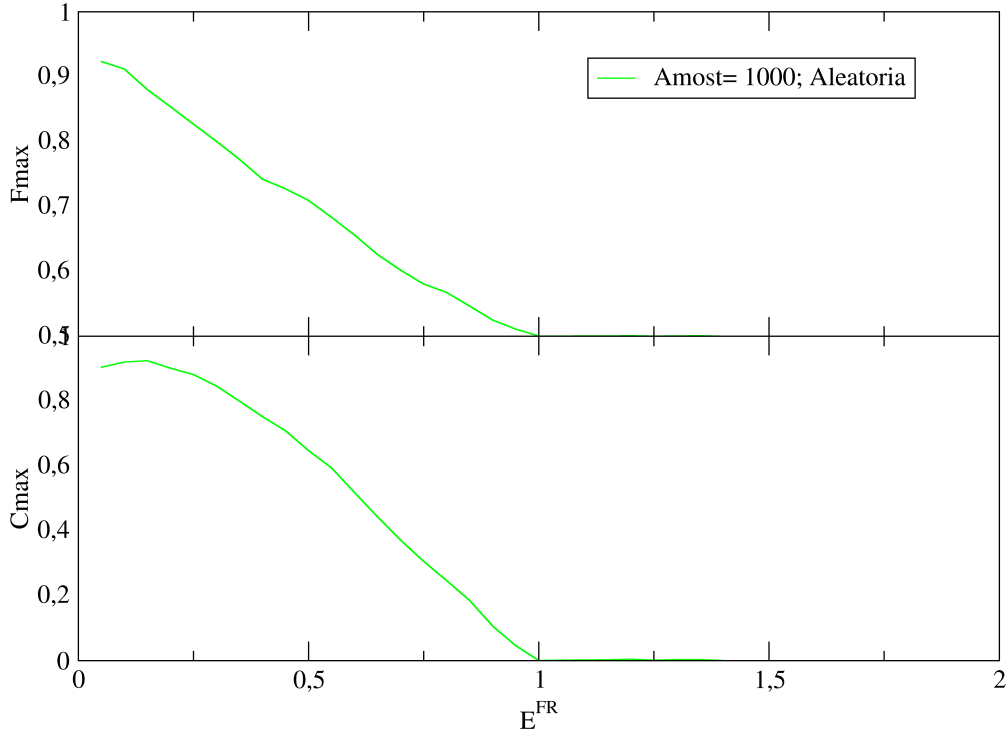


Figura 3.4: Concorrência máxima ( $F_{max}$ ) e Fidelidade máxima ( $C_{max}$ ) em função da energia ( $E^{FR}$ ) para uma amostra de 1000 e  $N = 50$  no para o modelo sem correlação.

$c = 0.5$ . Ou seja, não existem correlações tipo trimeros, é uma distribuição aleatória binária sem correlações internas. Podemos observar que tanto  $F_{max}$  quanto  $C_{max}$  apresentam valores máximos apenas na região de energia bem baixa ( $E^{FR} \approx 0$ ). Salientamos que estados de um mágnon com grande mobilidade em uma cadeia de Heisenberg desordenada ocorrem apenas na região de energia próxima de zero, pois tais modos tem grandes comprimentos de onda e assim são pouco afetados pela presença de desordem. Desta feita, as funções  $F_{max}$  e  $C_{max}$  acabam sendo afetadas pela existência de modos localizados na região de  $E^{FR} > 0$  e assim apenas os modos próximos da energia nula apresentam transferência de estados quânticos. Desta forma fica ainda mais claro o papel relevante das correlações tipo trimeros em cadeias magnéticas desordenadas.

Agora fixaremos as energias da fonte e receptor em  $E^{FR} = 0.5$  e vamos estudar a dependência de algumas quantidades físicas em relação ao parâmetro ( $g$ ), lembrando que  $g$  é o valor dos acoplamentos nas extremidades do sistema como mostrado na figura 2.1. Vamos calcular a dependência das funções  $f_{N1}$ ,  $f_c$  e a função participação ( $Part$ ) com o parâmetro  $g$ . Enfatizamos que a escolha de  $E^{FR} = 0.5$  tem relação com a figura 3.3 onde podemos observar que para este valor de energia temos uma região com a presença de modos ressonantes caracterizado por ter uma boa transferência de estados quânticos e a presença de emaranhamento quântico. Então com base nisto será feita uma análise da figura 3.5



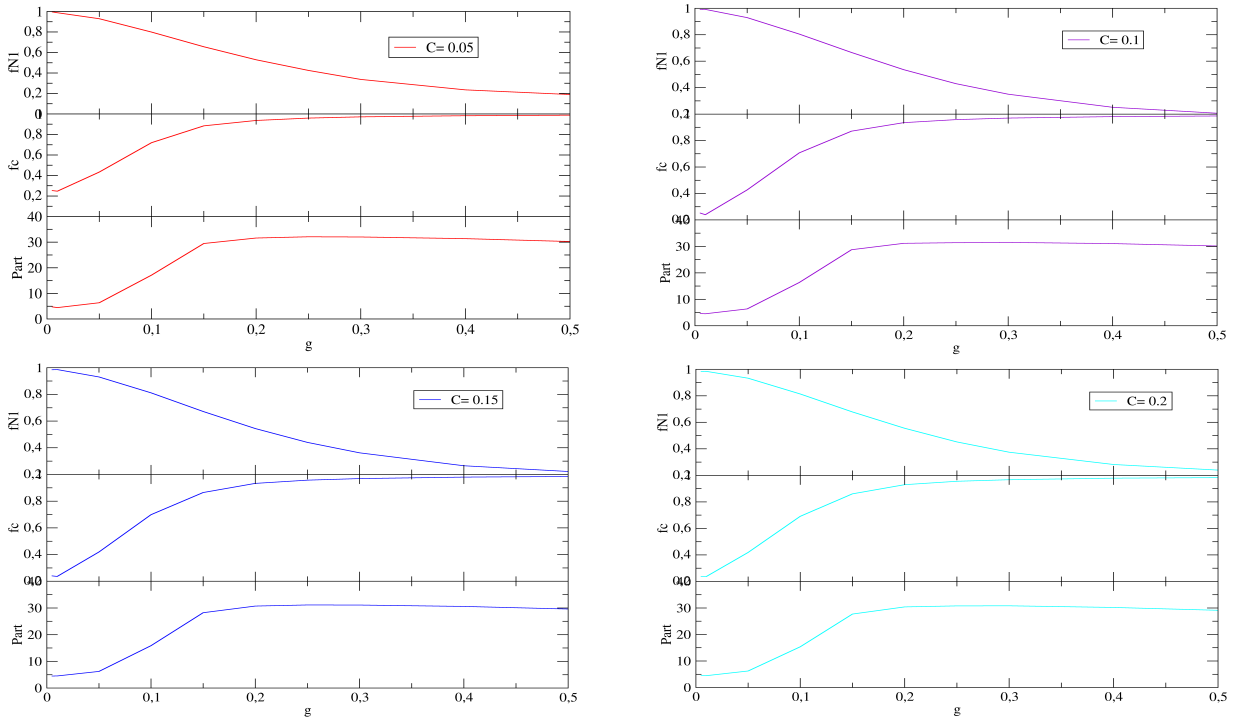


Figura 3.5: Funções  $f_{N1}$ ,  $f_c$  e Participação em relação a energia de exchange das extremidades do sistema ( $g$ ). Fixamos a energia da diagonal nas extremidades em  $E^{FR} = 0.5$ . Consideramos 4000 amostras e  $N = 50$ . Nesta figura abordamos o caso dos trimeros para uma concentração variando de  $c = 0.5, 0.1, 0.15, 0.2$ .

Os experimentos computacionais mostram que quando a energia  $E^{FR}$  é próximo de 0.5 já é sabido que a concorrência e fidelidade em seus valores máximos são próximos de 1 resultando na transferência de estados e emaranhamento quântico. Salientamos novamente que o canal desordenado para energias em torno de ( $E = 0.5$ ), apresenta modos com grande comprimento de localização (ressonâncias). Assim os estados estão sendo transferidos do primeiro sítio para último sítio, logo a função de onda vai está localizada no primeiro e no último sítio, de modo que  $f_{N1}$  inicia com seu valor máximo para o caso de  $g$  pequeno e em todos os casos de concentração de trimeros, como podemos perceber nas curvas das figuras 3.5. O  $f_c$  mostra se existe ou não função no canal. Nas curvas da figura acima o  $f_c$  inicia próximo de zero pois está ocorrendo transferência de estados quânticos como podemos comprovar com os valores altos de  $f_{N1}$ , isso significa que não tem função de onda no canal para a energia de acoplamento ( $g$ ) em valores muito pequenos, e que o primeiro e o último estado estão emaranhados. Porém, a medida que o valor de  $g$  aumenta é perceptível a queda nos valores de  $f_{N1}$  indicando que está havendo pouca ou nenhuma transferência de estados de modo que  $f_c$  cresce, pois a função de onda fica presa no canal. Portanto, o fenômeno de transferência de estados só vai ocorrer para valores de  $g$  bem

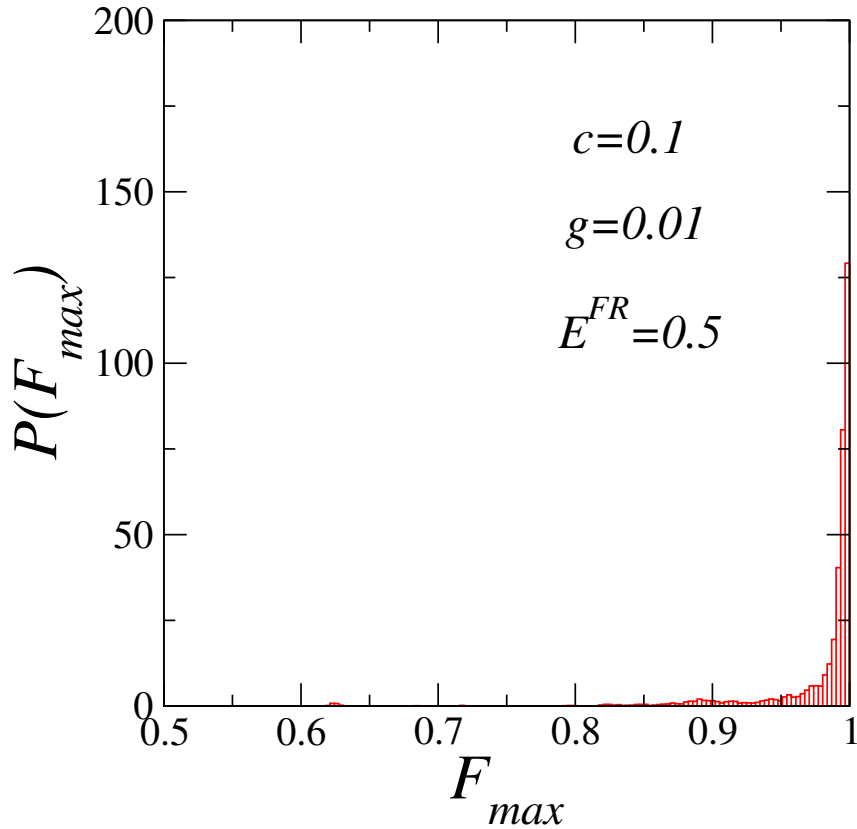


Figura 3.6: Distribuição de probabilidade  $P(F_{max})$  versus  $F_{max}$  considerando modelo com correlações tipo trímeros com  $g = 0.01$ ,  $E^{FR} = 0.5$ ,  $c = 0.1$ ,  $N = 50$  e 4000 amostras.

baixos.

É possível analisar as propriedades de localização do canal através do número de Participação, que pode ser compreendido como algo da ordem do número de átomos que participa do pacote de onda [5]. Na figura 3.5 temos o comportamento da participação ( $Part$ ) para a energia de acoplamento nas extremidades do sistema ( $g$ ). Inicialmente a função é zero para valores pequenos de  $g$ . Este comportamento se deve ao fato de que está ocorrendo transferência de estados quânticos, assim o sistema está no modo estendido. Com base nisso  $Part$  é zero para  $g$  muito baixo, pois não é possível quantificar o grau de localização no sistema, no entanto, a medida que a energia  $g$  cresce a função participação também cresce seguindo um padrão parecido com a função  $f_c$ , esse comportamento independe da concentração de trímeros na amostra para este caso.

Vamos complementar esta análise acerca da existência de transferência de estados quânticos neste modelo e sua dependência com o parâmetro  $g$  usando a distribuição de probabilidade para a fidelidade máxima  $F_{max}$ . Considerando o canal com desordem do tipo trímero e escolhendo  $E^{FR} = 0.5$  e  $c = 0.1$ . Desta forma calcularemos diversos valores de  $F_{max}$  em

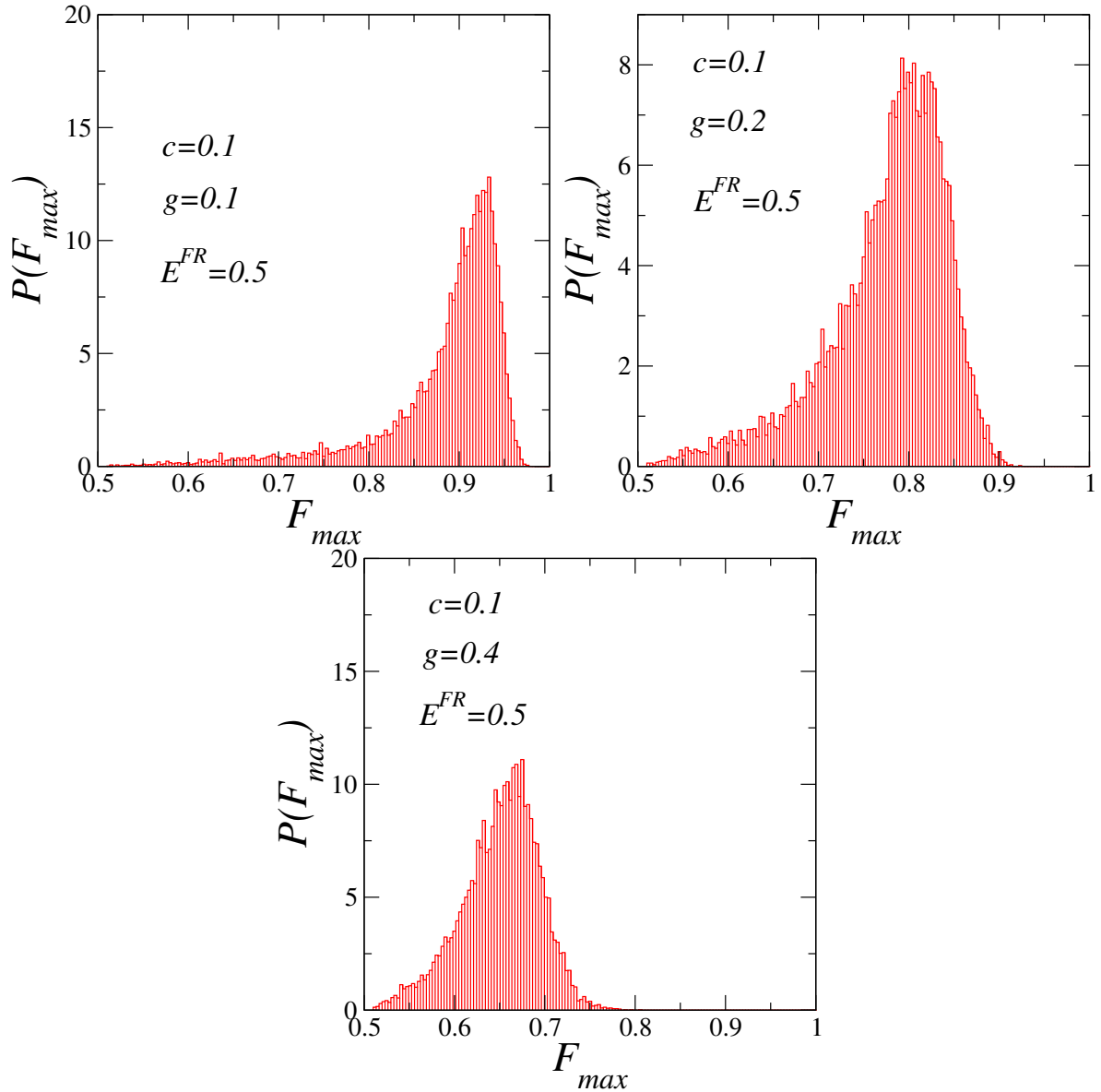


Figura 3.7: Distribuição de probabilidade  $P(F_{max})$  versus  $F_{max}$  considerando modelo com correlações tipo trimeros com  $E^{FR} = 0.5$ ,  $c = 0.1$ ,  $N = 50$ , 4000 amostras e  $g = 0.1, 0.2, 0.4$ .

uma cadeia com  $N = 50$  considerando 4000 amostras. De posse destes valores de fidelidade máxima vamos então obter a distribuição de probabilidade  $P(F_{max})$  versus  $F_{max}$ . Salientamos que o cálculo desta quantidade é basicamente um histograma normalizado dos valores de  $F_{max}$  na região  $[0.5, 1]$ . O resultado deste cálculo pode ser encontrado na figura 3.6. Podemos observar claramente que a distribuição  $P(F_{max})$  é praticamente nula na região com  $F_{max} < 1$ . Próximo de do valor máximo  $F_{max} \approx 1$  temos a distribuição de probabilidade efetivamente localizada. Este resultado apenas confirma que este modelo, para este limiar de correlações e para fraca interação  $g$  apresenta forte fidelidade dentro do contexto de transferência de estados quânticos. Por outro lado, se aumentarmos o valor de  $g$  vamos perceber um comportamento bem diferente. Na figura

3.7 plotamos a distribuição de probabilidade  $P(F_{max})$  versus  $F_{max}$  para o mesmo caso que foi mostrado anteriormente ( $c = 0.1$ ,  $N = 50$  e 4000 amostras) sendo que agora com  $g = 0.1, 0.2, 0.4$ . A medida que  $g$  cresce a distribuição  $P(F_{max})$  fica mais pronunciada em valores menores de  $F_{max}$  ou seja, na média a fidelidade máxima média vai caindo consideravelmente, e assim não temos transferência de estados quânticos. Este resultado está em total concordância com os resultados anteriores obtidos através das funções  $f_{N1}$ ,  $f_c$  e a função participação (*Part*).

Em resumo, estudamos a transferência de estados de um mágnon em cadeias ferromagnéticas. Consideramos uma fonte F conectada em um receptor R através de um canal desordenado. Consideramos canais com desordem binária não correlacionada bem como canais com desordem binária com correlações tipo trímero. Através de um detalhado arcabouço de cálculos numéricos mostramos que canais com desordem correlacionada tipo trímeros podem apresentar estados ressonantes na região de altas energias. Este resultado tem forte contraste com cadeias binárias aleatórias não correlacionada onde a ressonância aparece apenas em  $E = 0$ . Conseguimos mostrar numericamente que a desordem correlacionada do tipo trímero promove a transferência de estados quânticos de F até R com boa fidelidade e mantendo bom nível de emaranhamento quânticos.

# Capítulo 4

## Conclusões

Nesta dissertação foi realizado um estudo utilizando o modelo de Heisenberg para um sistema quântico formado por mágnons em cadeias ferromagnéticas desordenadas com  $N$  spins, considerando primeiros vizinhos. Esta pesquisa teve como objetivo principal analisar a eficiência da transferência de estados quânticos para uma desordem em trímeros. O sistema estudado está representado na figura 2.1 e é composto por duas extremidades, (fonte (F) e receptor (R)), ligados fracamente ao canal por uma energia de *hopping*. O canal que é o responsável por transferir as informações de F até R, este tem um *hopping*  $j$ .

Os resultados foram obtidos por meio de um experimento computacional, onde foi desenvolvida uma rotina de programação descrita no capítulo 2, com a finalidade de observar o comportamento da fidelidade, concorrência, participação, condutância,  $Dist$ , densidade de estados,  $f_{N1}$  e  $f_c$  em função das energias de *hopping* do sistema. Na figura 3.1 temos as curvas das densidades de estados ( $DOS$ ), ( $Dist$ ) e condutância ( $G$ ) para as concentrações de trímeros iguais a 0.1 e 0.2 em função da energia do canal ( $E$ ). Para cada valor de concentração considera-se três valores de número de amostras com  $N = 500, 1000, 2000$  para as seguintes e seus respectivos tamanhos de amostras; 1000, 500, 250. As curvas demonstram de modo geral para quais energia o sistema apresenta estados localizados ou estendidos. Na figura 3.2 fizemos um estudo das quantidades físicas ( $DOS$ ), ( $Dist$ ) e ( $G$ ) considerando o modelo com desordem não correlacionada. Nesta figura mostramos que o caso não-correlacionado tem estado isolantes em praticamente todo o espectro e apenas o modo de energia nula é metálico.

Após entender a natureza dos estados de um mágnon dentro do canal apresentamos nossos primeiros resultados acerca da existência ou não de transferência de estados quânticos da fonte até o receptor. Foram obtidos resultados sobre a concorrência e fidelidade em função da

energia nas extremidades ( $E^{FR}$ ) ( figura 3.3). Os resultados desta figura descrevem um sistema com transferência de estados eficiente no intervalo de  $E^{FR}$  entre 0 e 0.5 aproximadamente. A transferência é perceptível devido aos valores máximos para a concorrência e fidelidade indicam também que esta é uma região com bastante emaranhamento entre a fonte e o receptor. Para o caso com desordem não correlacionada foi possível observar que a transferência de estados quânticos ocorre apenas na região de energia nula. Os cálculos mostrados nas demais figuras do capítulo de resultado mostraram numericamente que o sistema com desordem correlacionada do tipo trímero tem transferência de estados quânticos na região de energias baixas e para fraco acoplamento com a fonte e receptor. No limite de acoplamento forte a fidelidade e a concorrência ficam bem próximas dos valores mínimos o que indica a ausência de transferência de estados quânticos.

Em linhas gerais nossos resultados indicam que a presença das correlações do tipo trímero promovem o aparecimento de transferência de estados quânticos para regiões de energias dentro do intervalo  $[0, 0.5]$ . Em comparação com o caso com desordem não correlacionada o modelo com correlações é bem mais eficiente para um experimento de transferência de estados de um mágnon. Em um contexto de perspectivas para este trabalho podemos incluir os efeitos da dimensionalidade no modelo. Podemos avaliar a transferência de estados quânticos considerando canais com dimensão maior que o caso aqui apresentado. Podemos generalizar nossos estudos para um canal do tipo escada (ou seja, duas linhas de spins acoplados) ou então geometrias bidimensionais. O procedimento numérico aqui apresentado teria que ser adaptado, mas a metodologia de cálculo e boa parte das grandezas físicas poderiam ser utilizadas.

# Bibliografia

- [1] Elihu Abrahams et al. “Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions”. Em: *Physical Review Letters* 42.10 (1979), p. 673.
- [2] Guilherme Martins Alves de Almeida et al. “Transferência de estado quântico em sistemas de cavidades acopladas”. Em: (2016).
- [3] Philip W Anderson. “Absence of diffusion in certain random lattices”. Em: *Physical review* 109.5 (1958), p. 1492.
- [4] “Comunicação quântica através de uma cadeia de spin não modulada”. Em: 91 (). Ed. por APS.
- [5] Francisco José de Araújo Filho. *TRANSFERÊNCIA DE ESTADOS QUÂNTICOS EM SISTEMAS COM HOPPING DECAINDO EXPONENCIALMENTE*. Maceió, Alagoas, 2011.
- [6] Yoichi Asada, Keith Slevin e Tomi Ohtsuki. “Anderson transition in two-dimensional systems with spin-orbit coupling”. Em: *Physical review letters* 89.25 (2002), p. 256601.
- [7] Alain Aspect, Philippe Grangier e Gérard Roger. “Experimental realization of Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm Gedankenexperiment: a new violation of Bell’s inequalities”. Em: *Physical review letters* 49.2 (1982), p. 91.
- [8] Bruno Heitor de Carvalho Barros. “Dinâmica quântica do Modelo de Heisenberg”. Em: (2019).
- [9] John S Bell. “On the einstein podolsky rosen paradox”. Em: *Physics Physique Fizika* 1.3 (1964), p. 195.
- [10] Eugene Mawuli Broni. “Dinâmica de emaranhamento de dois átomos no modelo de o Jaynes-Cummings-Hubbard”. Em: (2022).

- 
- [11] Jardel Caminha Carvalho Cestari. “Localização de Anderson em condensados de Bose-Einstein”. Em: (2011).
- [12] “Simulando física com computadores”. Em: *Feynman e computação*. Ed. por Imprensa CRC.
- [13] PK Datta e K Kundu. “The absence of localization in one-dimensional disordered harmonic chains”. Em: *Journal of Physics: Condensed Matter* 6.24 (1994), p. 4465.
- [14] Renato Ferreira Dutra et al. “Elementos da Teoria da Localização de Anderson”. Em: ().
- [15] Albert Einstein, Boris Podolsky e Nathan Rosen. “Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?” Em: *Physical review* 47.10 (1935), p. 777.
- [16] Felipe Fernandes Fanchini. “Desacoplamento dinâmico de estados quânticos via campos contínuos de alta frequência”. Tese de dout. Universidade de São Paulo, 2008.
- [17] Giulia Gualdi et al. “Perfect state transfer in long-range interacting spin chains”. Em: *Physical Review A* 78.2 (2008), p. 022325.
- [18] PRS Júnior et al. “Quantum communication through chains with diluted disorder”. Em: *Physics Letters A* 383.16 (2019), pp. 1845–1849.
- [19] Yuichiro Matsuzaki et al. “One-way transfer of quantum states via decoherence”. Em: *Journal of the Physical Society of Japan* 89.4 (2020), p. 044003.
- [20] DM Nunes, A Ranciaro Neto e FABF de Moura. “Coherent magnon dynamics in ferromagnetic models with nonuniform magnetic field and correlated disorder”. Em: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 410 (2016), pp. 165–170.
- [21] William H Press et al. *Numerical recipes in Fortran 90 the art of parallel scientific computing*. Cambridge university press, 1996.
- [22] Dalila Rivero. “Anderson Localization”. Em: (2018).
- [23] Demitry Messias Santos et al. “Transferência de estados quânticos em cadeias de spins desordenadas: cadeira com aperiodicidade e linha de grafeno”. Em: (2021).
- [24] Ildemir Ferreira dos Santos et al. “Transporte em baixa dimensionalidade na presença de não-linearidade e desordem”. Em: (2009).
- [25] Fabio Sebastiano et al. “Cryo-CMOS electronic control for scalable quantum computing”. Em: *Proceedings of the 54th Annual Design Automation Conference 2017*. 2017, pp. 1–6.



- 
- [26] Jefferson Deyvis dos Santos Silva et al. “Transferência de estados quânticos em cadeias com correlações na desordem”. Em: (2022).
- [27] João Marcos Costa da Silva e Matheus Pereira Lobo. “Protocolo para transferência de informação quântica sem transmissão de partículas”. Em: *DESAFIOS-Revista Interdisciplinar da Universidade Federal do Tocantins* 7.Especial (2020), pp. 157–162.
- [28] G Theodorou. “Spin waves in random one-dimensional ferromagnets”. Em: *Journal of Physics C: Solid State Physics* 15.36 (1982), p. L1315.
- [29] David J Thouless. “Electrons in disordered systems and the theory of localization”. Em: *Physics Reports* 13.3 (1974), pp. 93–142.
- [30] Timothy AL Ziman. “Localization and spectral singularities in random chains”. Em: *Physical Review Letters* 49.5 (1982), p. 337.
- [31] Analia Zwick et al. “Correntes de rotação para transferência de estado robusta: Acoplamentos de limite modificados versus cadeias completamente projetadas”. Em: 85 (). Ed. por APS.