

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS-UFAL  
INSTITUTO DE FÍSICA - IF/UFAL  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**PAULO RIBEIRO DA SILVA JÚNIOR**

**TRANSFERÊNCIA DE ESTADOS QUÂNTICOS EM CADEIAS COM DESORDEM  
DILUIDA**

**MACEIÓ  
2022**

PAULO RIBEIRO DA SILVA JÚNIOR

Transferência de Estados Quânticos em Cadeias com Desordem Diluída

Tese apresentada no Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Alagoas - UFAL Instituto de Física - IF/UFAL como requisito parcial para obtenção de título de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

Maceió  
2022

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

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

S586t Silva Júnior, Paulo Ribeiro da.  
Transferência de estados quânticos em cadeias com desordem diluída /  
Paulo Ribeiro da Silva Júnior. – 2022.  
[57] f. : il. color.

Orientador: Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura.  
Tese (Doutorado em Física) – Universidade Federal de Alagoas.  
Instituto de Física. Maceió, 2022.

Bibliografia: f. 48-51.  
Apêndice: f. [53]-[57].

1. Computação quântica. 2. Informação quântica. 3. Transferência de estado quântico. 4. Desordem diluída. I. Título.

CDU: 53

## **AGRADECIMENTOS**

A Deus por me amparar nos momentos difíceis, me dar força interior para superar as dificuldades, mostrar o caminho nas horas incertas e me suprir em todas as necessidades.

Ao meu estimado orientador Prof<sup>o</sup> Dr Francisco Anacleto de Barros Fidelis de Moura, pelo muito que me ensinou, por sua disponibilidade, generosidade e paciência, tornando-se amigo dileto nas horas de insegurança e medo. Serei eternamente grato, não só pelo conhecimento Físico que me ensinou, mas também como ser humano. Um obrigado é muito pouco para expressar o quanto sou grato a Vossa Pessoa.

A minha estimada Mãe, seu amor e incentivo foram fundamentais na superação de obstáculos e na formação da pessoa que sou hoje.

Ao meu querido amigo/irmão, José Gonzales Firmino pela generosidade com que se presta em me ajudar, grande companheiro de estudo, valoroso amigo e incentivador.

Aos companheiros de sala; Caio Mendes, Renato Dutra, Dimitry Ferreira, Ângela Maria, além de se tornarem grandes amigos, tiveram contribuições decisivas para conclusão desse curso, dando-me força, incentivo, companheirismo e amizade.

Aos meus colegas, Isaac Felix, João Paulo de Carvalho e José Luis pela amizade, agradável convívio e intercambio de ideias.

Ao Professor Dr Marcelo Lira pela acolhida no Instituto de Física - IF – UFAL.

A todos os meus professores do Ensino Fundamental até o Doutorado, pois sem seus ensinamentos e estímulos jamais teria chegado até aqui.

A minha Família e aos meus amigos, fontes inesgotáveis de estímulo e apoio.

A todos os Funcionários e Prestadores de Serviço do Instituto de Física - IF – UFAL, pela presteza em ajudar sempre.

A CAPES pela ajuda financeira.

A Deus, acima de tudo, por ter me dado forças,  
garra e perseverança para vencer mais este  
desafio.

## RESUMO

A Ciência da Computação revolucionou o processamento, a transmissão e o armazenamento da informação, contudo algumas limitações, surgiram com a minimização dos componentes eletrônicos a nível atômico, para solucionar esse problema foi proposto um novo modelo computacional baseado nas leis da Física Quântica, surgiu assim a Computação e a Informação Quântica, entretanto construir computadores com essa nova teoria tem se mostrado muito desafiador frente as limitações experimentais. Muitos modelos para transmissão da informação vem sendo propostos e um dos mais estudados é o transporte eletrônico em materiais com desordem. Um dos modelos mais bem exitosos para explicar tal fenômeno é o modelo de Localização de Anderson , assim o estudo das redes cristalinas e desordenadas é uma forte candidata a auxiliar o desenvolvimento de componentes eletrônicos para implementar esses novos computadores. Neste trabalho investigamos um protocolo de transferência de estado quântico com único qubit ao longo de um canal com desordem diluído na diagonal. No regime em que os sítios de origem e destino estão fracamente acoplados ao canal, assim relatamos a possibilidade de transmitir estados quânticos com alta fidelidade, além de estabelecer um emaranhamento de ponta a ponta nesse tipo de configuração. Discutimos ainda como o desempenho do protocolo depende da disponibilidade de estados estendidos no canal desordenado.

**Palavras-chave:** Comunicação quântica. Desordem diluída. Emaranhamento. Estados estendidos.

## ABSTRACT

Computer Science revolutionized the processing, transmission and storage of information, leading to some limitations that arose with the minimization of electronic components at the atomic level. Therefore, it was proposed a new computational model based on the laws of Quantum Physics, Computing, and Quantum Information; however, building computers with this new theory has proved to be very challenging in the face of experimental limitations. Many models for transmitting information have been proposed, and one of the most studied is electronic transport in materials with the disorder. One of the most successful models to explain this phenomenon is the Anderson Location model. The study of crystalline and disordered networks is a strong candidate to assist the development of electronic components in implementing these new computers. In this work, We investigate a single-qubit state transfer protocol along a channel featuring diluted diagonal disorder. In the regime where the source and destination sites are weakly coupled to the channel, we report the possibility of transmitting quantum states with high fidelity and establishing end-to-end entanglement in that configuration. We further discuss how the protocol's performance depends upon the availability of extended states within the disordered channel.

**Keywords:** Quantum communication. Diluted disorder. Entanglement. Extended states.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Representação de um bit clássico, bit probabilístico e q-bit na esfera de Bloch. Os ângulos $\theta$ e $\varphi$ representam o ponto sobre a esfera unitária, onde está o estado $ \psi\rangle$ . . . . .	15
Figura 2 – Exemplo de algumas portas lógicas . . . . .	16
Figura 3 – Representação do estado eletrônico estendido e localizado: (a) Representa a função de onda no estado estendido na transição de Bloch; (b) Representa a função de onda localizado na transição de Anderson. . . . .	18
Figura 4 – Representação esquemática da transição de Anderson. Em (a) tem-se um potencial aleatório com uma largura da desordem $W$ . Já em (b) tem-se um potencial cristalino com $B$ representado a largura da banda, ao qual é permitida à o elétron. A existência da localização dar-se ao momento em que $W$ é maior que $B$ . . . . .	20
Figura 5 – O comportamento qualitativo de $\beta(g)$ para $D = 1, 2$ e $3$ na teoria de escala apresentada por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnam. . . . .	26
Figura 6 – (a) Protocolo de comunicação dos estados. (b) Canal arbitrário de spin por onde a comunicação quântica pode ocorrer. . . . .	31
Figura 7 – (a) Esquema do modelo: os dois spins externos, as partes que se comunicam, são fracamente acoplados ao canal, ou seja, $g \ll J$ , que é formado por segmentos independentes de um sítio desordenado, cuja energia é escolhida aleatoriamente da distribuição pronta para uso $[-0.5J, 0.5J]$ mais dois sítios com energia fixa $\epsilon_0$ acoplamento intracanal $J$ é ajustado uniformemente através do canal. (b) Interação eficaz de ponta a ponta derivada da teoria de perturbação de segunda ordem. Ambas as partes externas adquirem energias locais renormalizadas $h_S$ e $h_R$ e criam seu próprio subespaço, conectando-se via $J_{eff}$ que depende da resolução espectral do canal. O mecanismo de trabalho do protocolo é fazer uso dessa configuração reduzida de dois sítios para induzir oscilações do tipo Rabi entre as spins externos. . . . .	33
Figura 8 – Distribuição de probabilidade normalizada $P(F_{max})$ versus $F_{max} = \max\{F(t)\}$ avaliada ao longo do intervalo de tempo até $5 \times 10^5$ unidades de tempo. Os dados foram obtidos a partir da diagonalização numérica do Hamiltoniano (49) para $N = 51, g = 0.01J, \epsilon_0 = 1J$ e $10^3$ realizações distintas de desordem. . . . .	43
Figura 9 – Fidelidade máxima $F_{max}$ versus $W$ (avaliada em $tJ \in [0.5 \times 10^5]$ ) em média $10^3$ realizações independentes de desordem para $N = 51, 102$ e $0.5J, 1.0J$ . Os dados foram obtidas a partir da diagonalização numérica exata do Hamiltoniano com $g = 0.1J$ (linhas sólidas) e $0.01 J$ (linhas tracejadas). . . . .	44

- Figura 10 – Número de participação  $\chi$  versus a auto-energias do canal  $E$  para  $N = 7200$  sítios  $\epsilon_0 = 1J$  em média em  $10^3$  realizações de desordem. Observe que o número de participação se torna da ordem do tamanho da cadeia nas energias 0 e  $2J$ , sinalizando os estados ressonantes deslocalizados. Na primeira banda, o  $\chi$  atinge o máximo da ordem de algumas dezenas de sítios. . . . . 45
- Figura 11 – Concorrência máxima  $C_{max}$  versus  $W$  (avaliada considerando tempos até  $5 \times 10^5$ ). Cálculos foram mediados usando aproximadamente  $10^3$  realizações independentes de desordem para  $N = 51, 102$  e  $\epsilon_0 = 0.5J, 1J$ . Os dados foram obtidos a partir da diagonalização numérica exata do Hamiltoniano (49) com  $g = 0.1J$  (linhas sólidas) e  $0.01J$  (linhas tracejadas). . . . . 46

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b> . . . . .	<b>10</b>
<b>2</b>	<b>A COMPUTAÇÃO QUÂNTICA</b> . . . . .	<b>14</b>
2.1	Bits Quânticos . . . . .	14
2.2	Informação Quântica . . . . .	16
2.2.1	Teoremas Relevantes para a Informação Quântica . . . . .	17
2.3	Localização de Anderson . . . . .	17
2.4	A teoria de Escala . . . . .	22
2.5	Medidas do grau de localização . . . . .	26
2.6	A TRANSFERÊNCIA DE ESTADOS QUÂNTICOS . . . . .	29
<b>3</b>	<b>TRANSFERÊNCIA DE ESTADOS QUÂNTICOS COM DESORDEM</b>	
	<b>DILUÍDA</b> . . . . .	<b>32</b>
3.1	Introdução . . . . .	32
3.2	Modelo . . . . .	32
3.3	Protocolo de Transferência de Estados Quânticos . . . . .	34
<b>4</b>	<b>RESULTADOS</b> . . . . .	<b>42</b>
<b>5</b>	<b>CONCLUSÕES</b> . . . . .	<b>48</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b> . . . . .	<b>49</b>
	<b>APÊNDICE</b> . . . . .	<b>53</b>

# 1 Introdução

A Revolução Científica e Tecnológica do século XX promoveu o desenvolvimento das ciências de forma imaginável. Duas importantes áreas do conhecimento contribuíram significativamente para esse avanço: A Mecânica Quântica e a Ciência da Computação.

A Mecânica Quântica com seu elegante formalismo resolveu problemas que a Física da época (clássica) não conseguia solucionar. A Teoria Quântica forneceu descrições precisas para muitos fenômenos previamente inexplicados. Através de suas teorias os cientistas promoveram uma verdadeira revolução no conhecimento do mundo microscópico e compreenderam melhor a natureza microscópica da matéria. Ela auxiliou o desenvolvimento da física do estado sólido, da física atômica, da física nuclear, da física de partícula e campo, entre outros ramos da Física. Estes ramos baseados no formalismo da Mecânica Quântica, foram utilizados na produção dos mais diversos equipamentos tecnológicos dos quais nos beneficiamos hoje.

Em relação à Ciência da Computação, alguns achados históricos encontrados na Babilônia datados de 1750 antes de Cristo relataram a ideia sofisticada de algoritmos, porém a ideia moderna de computação foi atribuída ao grande Matemático Alan Turing pelo seu artigo de 1936 [1, 2]. Nesse trabalho ele formulou a noção abstrata do que conhecemos hoje como computador programável e esse modelo foi batizado de máquina de Turing em sua homenagem.

Essa máquina utiliza seqüências lógicas de unidades de informação chamadas bits (*binary digit*). Este é conceito fundamental da computação e informação clássica e assumem valores “0” ou “1”. Pode-se dizer que o processamento e manipulação da informação contida num conjunto de bits se reduz a mudar “zeros” por “uns” e vice-versa. Assim toda informação, processamento e armazenamento são feitos usando essas unidades.

Na década de 1980 em meio a esse turbilhão de informações e conhecimentos produzidos por essas duas novas áreas do conhecimento silenciosamente iniciava-se a fusão da Mecânica Quântica com a Ciência da computação, resultando na Computação Quântica e Informação Quântica. Ambos com o intuito de aplicar os sistemas quânticos num aparato computacional, para a manipulação de informações [3].

Em 1981, o físico Richard Feynmann [4] apresentou uma proposta para utilização de sistemas quânticos em computadores quânticos, com o objetivo de possuir uma capacidade de processamento superior aos computadores comuns. Em 1985, David Deutsch [5], da Universidade de Oxford, descreveu o primeiro computador quântico universal, uma Máquina de Turing Quântica. Este, por sua vez, simularia outro computador quântico.

Novas notícias referentes ao computador quântico ressurgiram em 1994 [6] quando o professor de matemática aplicada Peter Shor desenvolveu o Algoritmo de Shor, capaz de fatorar grandes números numa velocidade aparentemente superior à dos computadores clássicos. Dois anos depois em 1996, Lov Grover [7, 8], desenvolveu o Speedup, o primeiro algoritmo para pesquisa de base de dados quânticos. Alguns meses depois foi proposto um modelo para a correção de erros quânticos [9].

Na última duas décadas foram lançados outros candidatos aos computadores quânticos, inicialmente com pequenas quantidade de q-bits, com o aperfeiçoamento da tecnologia fora aumentando a quantidade de q-bits . Muitas empresas estão nessa corrida para o desenvolvimento do computador quântica, entre elas podemos citar a Google, IBM, Microsoft . Em 2019 A Google anunciou sua supremacia quântica com o desenvolvimento do chip de computação Sycamore.

Mesmo com tantos avanços na área de Computação e Informação Quântica, existem grandes problemas a serem superados, um deles é manter o sistema isolado, pois qualquer alteração do campo magnético, choque de moléculas de ar, um fóton aleatório pode alterar os q-bits. Assim os processadores quânticos apresentam erros rotineiros devido a fragilidade dos q-bits. O estado quântico dura frações de segundo, mesmo com esses problemas alguns avanços já foram realizados.

A computação e a informação quântica é uma área em plena evolução, assim novas formas de transmitir informação de forma mais eficiente tem sido estudados no intuito de neutralizar ruídos que tanto atrapalha o transporte da informação.

O efeito preliminar da desordem nas cadeias quânticas é induzir o chamado fenômeno da localização de Anderson, que suprime a propagação da função de onda. Com base nos primeiros trabalhos de Anderson [10], sabemos que os autoestados de um Hamiltoniano de uma única partícula tight-binding (ligação forte) com desordem não correlacionado no local são exponencialmente localizados para qualquer grau de desordem nos sistemas 1D.

Por outro lado, foi demonstrado que a presença de correlações na distribuição da desordem permite o aparecimento de estados deslocalizados na banda [11, 12]. Uma classe particular de desordem correlacionada apresentada por Hilke na ref. [13] consiste em um modelo de Anderson no qual a desordem diagonal é distribuída por toda a rede após uma determinada periodicidade. Esse modelo de desordem diluída tem sido investigado em várias estruturas desde então [12, 13]. A versão padrão do modelo é baseada em duas sub-redes interpenetrante, uma com potenciais aleatórios no local e a outra com segmentos não aleatórios de potenciais constantes. Energias ressonantes especiais emergem devido à periodicidade desses segmentos. O modelo de Anderson

diluído foi posteriormente modificado para incluir uma função geral de diluição que define as energias no local dentro de cada segmento não aleatório [14]. Usando um procedimento analítico, foi demonstrado que este modelo exibe um conjunto de estados estendidos, cujo número depende fortemente do comprimento dos segmentos diluidores e da simetria da função que o gera. Na Ref. [15] a dinâmica eletrônica em cadeias diluídas aleatórias foi investigada em detalhes. Os autores demonstraram que o perfil de propagação da função de onda depende fortemente da posição inicial da partícula. Hilke investigou ainda mais o modelo de Anderson diluído em uma estrutura quadrada, onde foi encontrada uma verdadeira transição metal-isolador com bordas de mobilidade que delimitam uma faixa de estados estendidos. Recentemente, o distúrbio correlato também foi abordado no contexto de protocolos de comunicação quântica. Como promove o colapso da localização de Anderson, a coexistência entre estados localizados e estendidos permite a realização de transferência de estado quântico (QST) [16] e protocolos de distribuição de emaranhamento [17], mesmo na presença de desordem. Na realidade, deve-se sempre esperar a presença de alguma quantidade de desordem nas cadeias quânticas pré-projetadas para os protocolos QST [16, 18] devido a imperfeições experimentais no processo de fabricação ou a fatores dinâmicos.

Com isso em mente, é crucial investigar os efeitos do ruído correlacionado nesses protocolos [16, 19]. Tais correlações oferecem a possibilidade de mascarar a desordem sem a necessidade de recursos substanciais que seriam necessários para diminuí-la globalmente.

Aqui, estudamos uma classe de protocolo QST do tipo Rabi, em que ambas as extremidades da cadeia estão fracamente acopladas ao volume [20, 21], apresentando desordem diluída. Por meio da diagonalização numérica do Hamiltoniano completo do sistema, avaliamos a fidelidade média de entrada do QST [22], bem como o emaranhamento de ponta a ponta em uma janela de tempo fixa. Nossos cálculos revelam uma dependência interessante dessas quantidades em relação às ressonâncias existentes no canal devido a desordem diluída. Discutimos esses resultados à luz da existência de estados estendidos no conjunto de modos normais do canal.

No capítulo 1 é feita uma introdução geral sobre o tema em estudo e o que será desenvolvido em nosso trabalho. No capítulo 2 faremos uma revisão geral sobre alguns conceitos de Mecânica Quântica que são fundamentais para compreensão do nosso experimento. Posteriormente, abordaremos o Modelo de Anderson para transferência de um elétron. A chamada "Teoria da localização" é um tema importante dentro do contexto de transporte em sistemas desordenados. Vamos descrever o formalismo utilizado por Anderson para descrever dinâmica eletrônica em sistemas desordenados bem como apresentar a teoria de escala para a transição de Anderson.

A teoria proposta por Anderson, apesar de ter sido construída dentro do contexto eletrônico, é válida para sistemas magnéticos, acústicos etc. Uma vez estudado o básico necessário ao entendimento de transporte quântico em sistemas desordenados vamos então debater, de forma sucinta, a transferência de estados quânticos. No capítulo 3 será apresentado nosso modelo de estudo e todo o formalismo pertinente. Vamos debater também os métodos numéricos e/ou analíticos necessários para a solução do problema. Por fim vamos apresentar nossos principais resultados e uma discussão acerca da fenomenologia envolvida.

## 2 A Computação Quântica

De forma geral a Computação Quântica pode ser entendida como o estudo das tarefas que podem ser executadas através da análise de informações contidas em sistemas quânticos. Assim, a ideia é caracterizar, transportar e manipular a informação em meios exclusivamente quânticos.

As primeiras propostas de um computador que utiliza os princípios da Mecânica Quântica começaram a surgir na década de 1980, desde então pesquisas no setor computacional quântico se intensificaram atraindo gradativamente a atenção do setor tecnológico e industrial. Sua origem ocorreu devido as limitações que a física clássica impõe à fabricação de componentes eletrônicos em escala atômica, e a dificuldade de simular sistemas quânticos em um computador clássico.

### 2.1 BITS QUÂNTICOS

De forma análoga ao bit da Computação e da Informação Clássica, a Computação e a Informação Quântica é construída sobre o conceito de bit quântico (o quantum bit ou qubit.). Assim como o bit clássico que funcionam a partir de um código binário. Isso significa que os cálculos para o processamento de dados assumem os valores, 0 ou 1, já o qubit assume os valores de  $|0\rangle$ ,  $|1\rangle$  ou qualquer superposição deles.

*O princípio da superposição diz que o estado de um sistema físico pode ser escrito como uma combinação linear de outros estados e essa propriedade só existe no reino da mecânica quântica [23].*

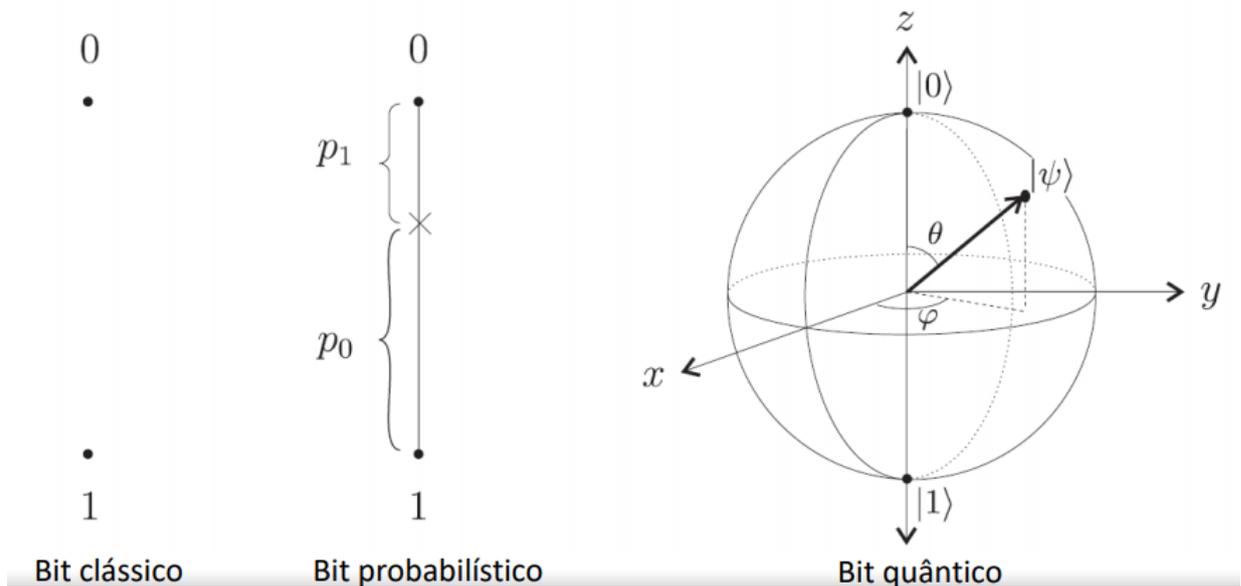
A ideia de superposição não é intuitiva e pode ser interpretada como se um q-bit pudesse guardar até o estado de uma moeda defeituosa e não apenas "cara" ou "coroa". O fato é que eles são reais e até que seja realizado um processo de medida, eles podem assumir muitos estados. Na prática, um q-bit é um sistema quântico de dois níveis. Por exemplo, uma partícula de spins que assume apenas dois valores onde,  $|1\rangle = -\frac{1}{2}$  e  $|0\rangle = \frac{1}{2}$  ou ainda os feixes de fótons passando por um espelho divisor de feixes, uma vez que o divisor separa as componentes do campo que constitui o fóton.

Os dois autoestados de um qubit qualquer são representados pelas matrizes colunas:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

O conjunto  $|0\rangle, |1\rangle$ , é Linearmente Independente (L.I.) e formam uma base no espaço de Hilbert, batizada de base computacional.

Figura 1 – Representação de um bit clássico, bit probabilístico e q-bit na esfera de Bloch. Os ângulos  $\theta$  e  $\varphi$  representam o ponto sobre a esfera unitária, onde está o estado  $|\psi\rangle$ .



Fonte: Prof. Carlos R. B. Azevedo - LbiC/FEEC/UNICAMP [24]

A representação geral de um q-bit é dada por:

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle, \quad (1)$$

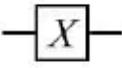
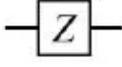
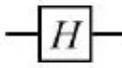
onde  $a$  e  $b$  representam amplitudes de probabilidade  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ , podemos também fazer essa representação geral através dos ângulos  $\theta$  e  $\varphi$  utilizando  $a = \cos(\theta/2)$  e  $b = e^{i\varphi}(\sin(\theta/2))$ :

$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2)|0\rangle + e^{i\varphi}(\sin(\theta/2))|1\rangle. \quad (2)$$

Uma forma de visualizarmos o comportamento do q-bit ( $|\psi\rangle$ ) é observar sua representação geométrica na esfera de Bloch (figura 1).

Novamente fazendo uma analogia entre o computador clássico que trabalha basicamente com fios e portas lógicas clássicas, o computador quântico utiliza um circuito quântico contendo fios e portas lógicas quânticas que carregam e manipulam a informação quântica [2]. Apesar dos circuitos quânticos serem semelhantes aos clássicos, eles diferem muito da analogia clássica por conta de seus algoritmos e portas lógicas com propriedades quânticas, estes que são mais rápidos que o modelo de circuitos de um computador convencional para uma mesma classe de problemas [2]. Um dos problemas enfrentados pela computação quântica é a criação de algoritmos quânticos que sejam realmente eficientes e a possibilidade de sua implementação.

Figura 2 – Exemplo de algumas portas lógicas

Gate	Notation	Matrix
NOT ( Pauli- $X$ )		$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$
Pauli- $Z$		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
Hadamard		$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$
CNOT ( Controlled NOT )		$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$

Fonte: Aplicação da Computação Quântica na Resolução de Problemas Computacionais e seu Impacto no Âmbito científico [25]

## 2.2 INFORMAÇÃO QUÂNTICA

“Information is physical (Informação é algo físico)” "Rolf Landauer"

A teoria matemática da informação estuda o armazenamento, processamento e transmissão de informação [26].

Como foi mencionado anteriormente a Computação Quântica e a Informação Quântica são áreas relativamente nova da Física e se alicerçam nas bases da Mecânica Quântica e da Ciência da Computação para seu desenvolvimento. Elas utilizam os qubits como unidade de armazenamento de informação que por sua vez, pode ser processada e comunicada, já na Computação e Informação Clássica se utiliza os bits para esse armazenamento e são representados por 0 e 1 (linguagem binária). Como veremos mais adiante um ponto crucial para o desenvolvimento da Teoria da Informação sua foi sua descrição matemática publicada por Claude E. Shannon em 1948 [26]. Nessa descrição Shannon batizou a quantificação de informação com o nome de Entropia . Calcular a entropia do sistema representa quantificar de incerteza probabilística envolvida na transmissão de uma determinada informação. Assim passamos a tratar o armazenamento do processamento de comunicação e informação considerando a natureza probabilística

dos resultados apresentados na determinação do experimento aleatório.

### 2.2.1 Teoremas Relevantes para a Informação Quântica

Para Compreensão de muitos fenômenos da Computação e Informação Quântica é fundamental entendermos alguns conceitos relevantes de Mecânica Quântica. De forma resumida citamos sem grandes detalhes três importantes teoremas derivados de conceitos fundamentais da mecânica quântica. Esses teoremas são bastante conhecidos e citados em vários trabalhos.

**Teorema 1 (Teorema da não-clonagem)** É impossível para qualquer dispositivo receber um estado quântico desconhecido e arbitrário como entrada e reproduzir exatamente o mesmo estado e uma cópia dele como saída. Ou seja, é impossível clonar um estado quântico.

**Teorema 2** É impossível determinar o estado quântico desconhecido de um sistema único e individual, mesmo considerando qualquer quantidade de medidas ou sequência de medições.

**Teorema 3** É impossível, para qualquer dispositivo, distinguir de forma inequívoca, estados não-ortogonais.

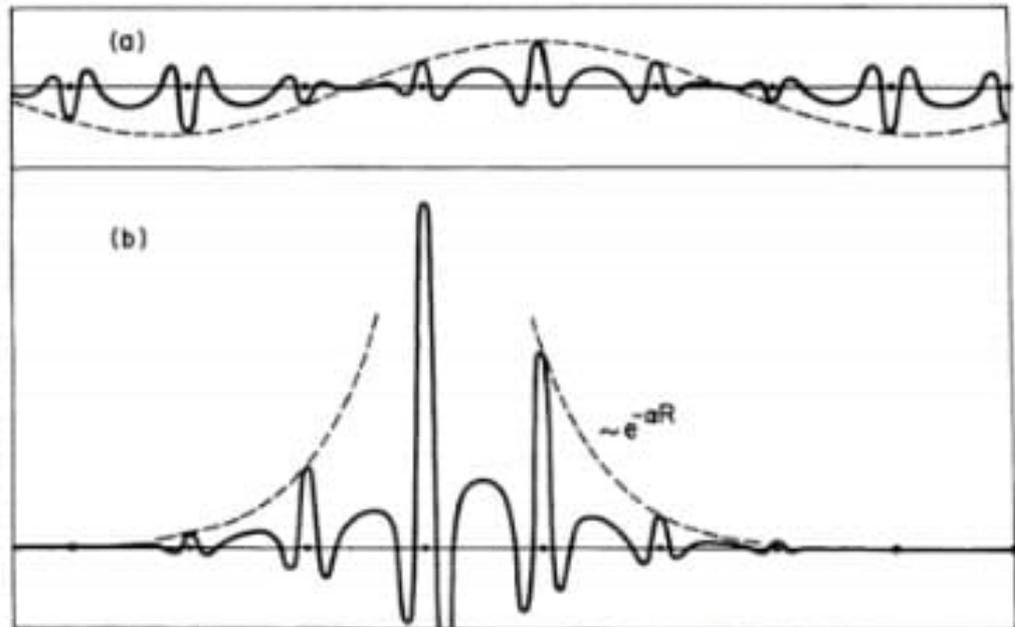
Esses três teoremas são fundamentais para teoria da informação quântica, pois limitam a realização de determinados experimentos baseados na Mecânica Quântica.

## 2.3 LOCALIZAÇÃO DE ANDERSON

Até a década de 1950 a maioria dos estudos realizados em sólidos era realizado em modelos quânticos sem desordem, ou seja, modelos com invariância translacional. Porém, em 1958 o físico Philip Warren Anderson propõe uma teoria que leva em conta a influência de impurezas e defeitos na condutividade de um determinado material, batizada de Teoria de Localização de Anderson [27–30].

A desordem produzida na rede força o elétron a se localizar em uma determinada região, explicando as transições metal-isolante. Anderson estudou esses mecanismos e percebeu que os átomos dos sólidos têm um potencial muito ordenado quando puro e que se repete periodicamente, mas quando colocamos impurezas, esse potencial periódico é quebrado, logo o elétron encontra essa desordem, e não consegue continuar seu trajeto, assim o sólido perde a condutibilidade. A localização acontece por causa das sucessivas interferências nos sítios da rede, devido as desordens encontradas. Ao analisarmos um sólido produzido na natureza ou

Figura 3 – Representação do estado eletrônico estendido e localizado: a) Representa a função de onda no estado estendido na transição de Bloch; (b) Representa a função de onda localizado na transição de Anderson.



Fonte: R. Zallen [31]

artificial encontramos certas imperfeições que aniquilam a invariância translacional e modificam as propriedades físicas previstas pelos modelos teóricos da época. Eles são boas aproximações se o sólido for um cristal perfeito. Como exemplo, o modelo de Bloch que prevê uma resistência nula para cristais perfeitos. Porém os resultados encontrados diferem bastante dos identificados em cristais reais. Logo é de extrema relevância estudar modelos teóricos que apresentem defeitos.

Em um cristal sem desordem, isto é, numa rede com simetria translacional perfeita, os estados estacionários podem ser escritos a partir da Equação de Schrödinger [32]

$$H\psi = \left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right] \psi = E\psi, \quad (3)$$

onde  $U(r)$  é um potencial com periodicidade  $U(r + R) = U(r)$  e  $R$  é um vetor de Bravais típico da rede. As ondas de Bloch, soluções da Eq.(1) são estendidas por todo espaço. Anderson mostrou que a natureza da função de onda pode mudar de estendida, como no caso das ondas de Bloch, para o caso localizada onde a função de onda fica restrita a uma pequena região da rede (fora desta pequena região a função de onda é nula) [33].

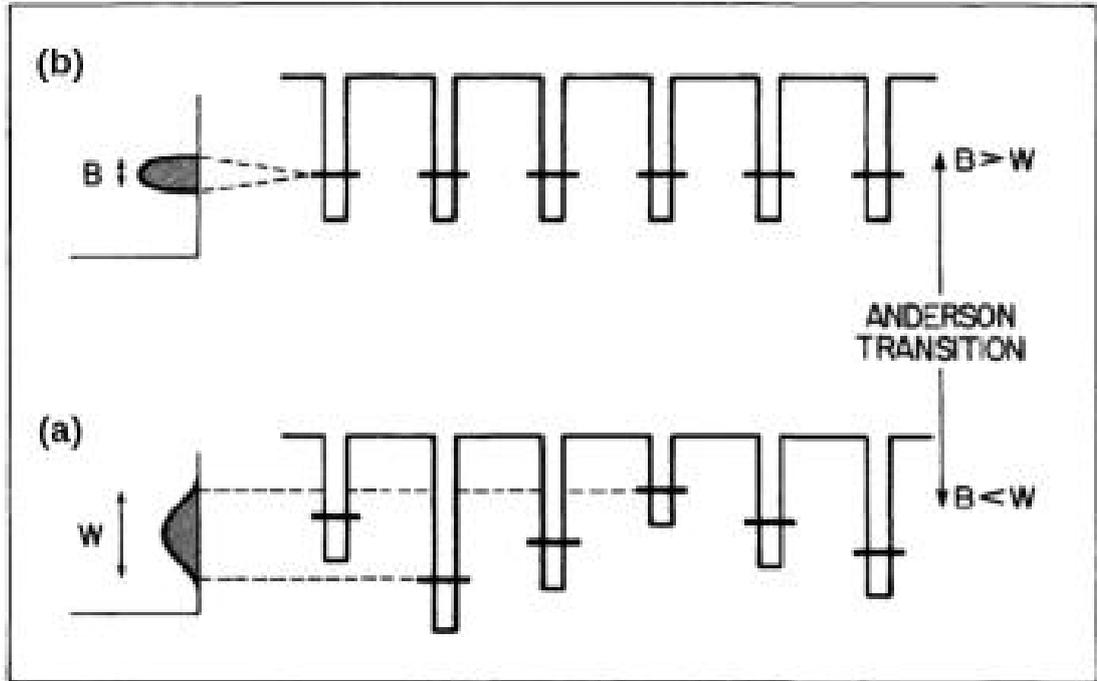
Tabela 1 – Exposição esquemática com as transições de Bloch, Mott e Anderson

Transição	Função de onda		Energia Característica	Mudança na transição	Localização
	Lado Metálico	Lado bolante		$M \rightarrow 1$	
Bloch	Estendida	Estendida	Largura de Banda B	Bandas Parcialmente preenchidas downarrow Bandas completamente preenchidas ou vazias	–
Mott	Estendida	Localizada	Energia de Interação Elétron-Elétron $U \left( \frac{e^2}{r_{ij}} \right)$	Localização induzida pela interação Elétron-Elétron	$U > B$
Anderson	Estendida	Localizada	Largura $W$ da distribuição das energias aleatórias dos sítios	Localização induzida por desordem	$W > B$

Vamos discutir de forma qualitativa o papel da desordem na localização dos estados eletrônicos. Considere o modelo de Bloch com potencial periódico nulo ( $U(r) = 0$ ), ou seja, um elétron livre. Se introduzirmos uma única barreira de potencial, a função de onda será parcialmente transmitida e parcialmente refletida pela barreira. Se, em vez de uma única barreira, introduzirmos duas barreiras de potencial, a função de onda sofrerá duas reflexões. Às duas barreiras geram ondas refletidas e incidentes que podem sofrer interferências destrutivas ou construtivas a depender da diferença de fase existente. Estas interferências podem mudar bastante o padrão da função de onda. Se um potencial aleatório estiver presente, o que pode ser representado por barreiras de potencial em posições aleatórias ou com intensidades aleatórias, a função de onda sofrerá várias reflexões, as quais não mantêm coerência de fase. Estas reflexões causam interferências destrutivas que induzem uma localização exponencial da função de onda como mostra a figura

O modelo de Anderson utiliza os elementos fundamentais para estudar a natureza dos estados eletrônicos em sistemas desordenados. Analisando o Hamiltoniano que representa esse modelo percebemos um termo cinético que descreve o hopping do elétron entre os sítios vizinhos na presença de um potencial qualquer. Através desse modelo podemos estudar vários fenômenos em metais que se apresentam devido a presença de desordem. Usando a representação de Wannier (tight-binding [32]) podemos escrever o Hamiltoniano de Anderson como:

Figura 4 – Representação esquemática da transição de Anderson. Em (a) tem-se um potencial aleatório com uma largura da desordem  $W$ . Já em (b) tem-se um potencial cristalino com  $B$  representado a largura da banda, ao qual é permitida a o elétron. A existência da localização dar-se ao momento em que  $W$  é maior que  $B$ .



Fonte: R. Zallen [27]

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{i \neq j} t_{ij} |i\rangle \langle j| \quad (4)$$

O  $t_{ij}$  representa o hopping responsável pela parte cinética entre os sítios  $i$  e  $j$ , também representa o elemento de matriz do Hamiltoniano entre os sítios  $i$  e  $j$ . O elemento de matriz  $t_{ij}$  é chamado de integral de transferência entre os sítios  $i$  e  $j$ . O parâmetro hopping  $t_{ij}$  diminui de forma rápida à medida que a distância entre os sítios  $|i - j|$  aumenta. O termo  $\epsilon_i$  é a energia do sítio  $i$ .  $|i\rangle$  são os estados que representam o orbital atômico centrado no sítio  $i$  e são ortogonais entre si, representando uma base na qual podemos expandir os autoestados do Hamiltoniano ( $H$ ). A energia potencial  $\epsilon_i$  tem valores aleatórios escolhidos dentro do intervalo de largura  $W$ . O parâmetro  $W$  é conhecido como a intensidade ou a largura de desordem do sistema. No modelo de Anderson tridimensional a transição metal-isolante é dada quando  $W = W_c$ , se  $W < W_c$  o sistema apresenta uma banda de estados estendidos encontrando-se na fase metálica.

$$H = \begin{bmatrix} \epsilon_1 & t_{12} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ t_{21} & \epsilon_2 & t_{23} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & t_{32} & \epsilon_3 & t_{34} & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & t_{43} & \epsilon_4 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \cdots & t_{N-1,N} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & t_{N,N-1} & \epsilon_N \end{bmatrix}$$

Representando a expansão dos autos estados na base dos orbitais  $|i\rangle$  por

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle. \quad (5)$$

Como  $c_i$  é amplitude da função de onda no sítio  $i$  e usando a equação de Schrödinger para calcular os autoestados e autoenergias temos:

$$H |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle. \quad (6)$$

Usando um *ket*  $|i\rangle$ , e trocando uma variável a Equação (4) torna-se:

$$H|i\rangle = \epsilon_i|i\rangle + \sum_{i \neq j} t_{ji} |j\rangle. \quad (7)$$

Substituindo a Equação (5) em (6) obtemos uma nova equação expressa por:

$$H |\Psi\rangle = \sum c_i H |i\rangle. \quad (8)$$

Relacionando a equações (7) e (8) obtemos:

$$H |\psi\rangle = \sum_i \epsilon_i c_i |i\rangle + \sum_{j \neq i} t_{ji} c_j |j\rangle. \quad (9)$$

Fazendo novamente uma mudança de variável, porem exclusivamente no segundo termo da equação (9), temos

$$H |\psi\rangle = \sum_i \left( \epsilon_i c_i + \sum_{i \neq j} t_{ij} c_j \right) |i\rangle. \quad (10)$$

Relacionando a equação (6) com a equação (10) obtemos:

$$E \sum_i c_i |i\rangle = \sum_i \left( \epsilon_i c_i + \sum_{i \neq j} t_{ij} c_j \right) |i\rangle. \quad (11)$$

Logo chegamos ao seguinte resultado:

$$E c_i = \epsilon_i c_i + \sum_j t_{ij} c_j. \quad (12)$$

Analisando dois casos especiais. Primeiro, o sistema unidimensional, segundo, os estados estendidos. No sistema unidimensional podemos atribuir um valor não nulo e constante a hopping entre os primeiros vizinhos, com essa atribuição a Eq. (12) pode ser escrita como

$$E c_i = \epsilon_i c_i + t \sum_{j=i-1}^{j=i+1} c_j. \quad (13)$$

onde  $T$  é a integral de transferência entre os primeiros vizinhos e a soma se estende em torno dos  $k$  vizinhos mais próximos do sítio  $i$ . Em estados sem desordem, ou seja, estados estendidos a solução é encontrada pelo caso limite da equação (13). Para um sólido cristalino utilizaremos  $W = 0$ , as energias são idênticas, logo podemos atribuir o valor de  $\epsilon_i = 0$ . Assim a equação (13) assume a seguinte forma:

$$E c_i = t(c_{i-1} + c_{i+1}), \quad (14)$$

a solução da equação (14) é do tipo exponencial complexa  $c_m = c_0 e^{imk}$ , que só é satisfeita se utilizarmos  $E = 2t \cos k$ . Esse resultado corresponde a banda cristalina da teoria de Bloch quando  $t$  assume os valores  $(-2t < E < +2t)$ . Em cadeias unidimensionais onde  $k = 2$  encontramos o valor da banda cristalina como  $B = 4t$ . Geralmente a amplitude, para uma rede de dimensão unidimensional é  $B = 2kt$ , onde o  $k$  representa as correlações do sistema. Anderson também estudou casos mais complexos onde  $W$  e  $t$  são diferentes de zero (não nulos), para isso ele usou a Teoria de perturbação para obter a solução dos problemas analisados. Muitas técnicas de estudo tanto numérico como analítico vem sendo utilizados para solucionar a equação de Schrödinger e conseqüentemente os casos mais complexos envolvendo a Teoria de Localização de Anderson de modo a encontrar quantidades que medem o grau de localização dos autoestados do Hamiltoniano  $H$  e alguns parâmetros de interesse como o expoente de Lyapunov ( $\gamma$ ) e a participação. A caracterização de um estado é definida como localizado ou estendido analisando esses parâmetros. Na seção 1.4 definiremos com mais detalhes essas quantidades, bem como sua importância para o estudo dos fenômenos de localização.

## 2.4 A TEORIA DE ESCALA

No final da década de 1970, precisamente no ano de 79, um artigo publicado por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnan [30] incrementaria o estudo de localização de estados. Esse estudo relacionou a transição metal – isolante com a dimensão do sistema.

Tabela 2 – Correspondência entre a teoria de escala tradicional e a reformulada

Modelo de Anderson	Reformulação da Teoria de Escala, por Thouless
Um sítio atômico individual	Um sólido formado por caixas contendo muitos sítios, com dimensão $d$ e lado $L$ , daí um volume $L^d$ .
A extensão $W$ da distribuição $E_i$ das energias dos sítios	O espaçamento médio $\Delta E \approx W/N$ dos $N$ níveis de energia com o volume $L^d$ .
A energia de transferência ou integral de hopping $T_{ij}$ que acopla os sítios vizinhos.	O passo de energia $\delta E$ causado por uma mudança nas condições de contorno na interface do cubo ( $\hbar/t_d$ , onde $t_d$ é o tempo necessário para um pacote de onda eletrônico difundir até os contornos de uma caixa de lado $L$ ).
$(W/B) \approx (W/2kT_0)$ , é a medida adimensional da intensidade de desordem	$(\Delta E/\delta E)(1/g)$ , onde $g(L) = (\hbar/e^2)\sigma L^{d-2}$ é a condutância adimensional da dependência de escala que serve - como intensidade de desordem.

Fonte: M . O. Sales, 2012 [35]

De forma grosseira a ideia básica da teoria de escala é encontrar uma quantidade que controle a transição metal isolante em temperatura igual ao zero absoluto ( $T = 0$ ), essa quantidade foi batizada de condutância generalizada  $g$ .

A aplicação da teoria de escala serviu para reformulação do modelo de Anderson feita por Thouless [34]. Podemos verificar algumas mudanças feitas por essa reestruturação na Tab 2. Nessa reformulação as unidades básicas são caixas de volume  $L^D$  acopladas umas as outras contendo muitos sítios formando um sólido. As energias características do modelo de Anderson  $\epsilon_n$  e  $T$  são analisados respectivamente no espaçamento médio entre os níveis de  $\delta E$  e em  $\delta E$  causadas por mudanças nas condições de contorno. Usaremos algumas relações heurísticas de modo a relacionarmos a condutância e as duas quantidades.

Segundo [31] podemos relacionar o princípio da incerteza com a variação de energia e o tempo  $T_{Df}$  necessário para o elétron difundir até os contornos do bloco de lado  $L$ . Assim temos:

$$\delta E \approx \hbar/T_{Df}. \quad (15)$$

Assumiremos que o elétron realize um movimento Browniano dentro do bloco, assim podemos escrever  $t_{Df}$  como:

$$T_{Df} = L^2/D_f, \quad (16)$$

onde  $D_f$  significa a difusão do sistema. Reescrever a equação (16) temos

$$D_f = \frac{L^2}{T_{Df}}. \quad (17)$$

A equação (15) pode ser reescrita de uma outra forma, assim temos

$$T_{Df} = \frac{\hbar}{\delta E}. \quad (18)$$

Usando a relação de Einstein entre a condutividade e as propriedades de difusão expressa por

$$\sigma = e^2 D n(E), \quad (19)$$

chegamos a uma nova relação para expressa  $\delta E$ , dado por:

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2 L^2 n(E)}. \quad (20)$$

Podemos expressar a densidade de estados média  $n(E)$  em função do espaçamento médio entre os níveis de energia  $\Delta E$ , assim temos:

$$n(E) = \frac{1}{L^d \Delta E}. \quad (21)$$

Estados estendidos são vulneráveis a mudanças nas condições de contorno ( $\delta E > \Delta E$ ), e possuem condutividade alta, já os estados localizados não apresentam essa vulnerabilidade, assim não percebem contornos e são bastante insensíveis ( $\delta E < \Delta E$ ). Definimos a medida da “força” de desordem como sendo a razão  $\Delta E/\delta E$  no sistema, análoga a razão  $W/J$  do modelo de Anderson tradicional. A condição de localização  $\delta E < \Delta E$  é interpretada no sentido de que a falta de regularidade altera o sistema para que não aja propagação, impedindo a transmissão do elétron. Sua condutividade é baixa. O parâmetro de desordem, denotado como  $g^{-1}$ , é a agora uma quantidade de dependência de escala, definida como sendo o inverso da condutividade:

$$\frac{1}{g(L)} \equiv \frac{\Delta E}{\delta E}. \quad (22)$$

Substituindo as Eq. (20) e (21) na Eq. (22), podemos observar a dependência de escala do parâmetro  $g$ :

$$g(L) = (h/e^2) \sigma L^{D-2}. \quad (23)$$

Ao analisarmos a equação (23) percebemos q sua aplicação só e valida para estados estendidos no limite macroscópico, ou seja,  $g$  grande, pois para encontrá-lo é necessário ter difusão no sistema. Para analisarmos o comportamento da função  $g$  usaremos a função  $\beta(g)$ , conhecida também como função fluxo.

$$\beta(g) = \frac{d[\ln g(L)]}{d[\ln L]}. \quad (24)$$

Devemos fazer uma análise da equação (24), assim quando  $\beta$  é positivo ( $\beta > 0$ ) existe um crescimento dos parâmetros  $g$  e  $L$ , porém quando  $\beta$  é negativo ( $\beta < 0$ ),  $g$  decresce enquanto  $L$  cresce. Para o caso de uma condutância generalizada  $g$  suficientemente grande ( $g \rightarrow \infty$ ), a função  $g(L)$  é dada pela teoria macroscópica de Thouless. Assim a equação (24) assume a seguinte forma:

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) \approx d - 2, \quad (25)$$

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. Nesse regime a condutância assume a forma

$$g(L) \propto e^{-\gamma L}, \quad (26)$$

onde  $\gamma$  representando o inverso do comprimento de localização e é conhecido como expoente de Lyapunov. Fazendo a substituição da Equação (26) na Equação (24) temos

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = \ln(g) \rightarrow -\infty. \quad (27)$$

A análise da função  $\beta(g)$  feita por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnam demonstra o comportamento qualitativo que pode ser determinado a partir dos seus limites assintóticos ( $g \rightarrow \infty$  e  $g \rightarrow 0$ ). Quando  $g$  assume valores altos podemos utilizar a equação (23) para chegar

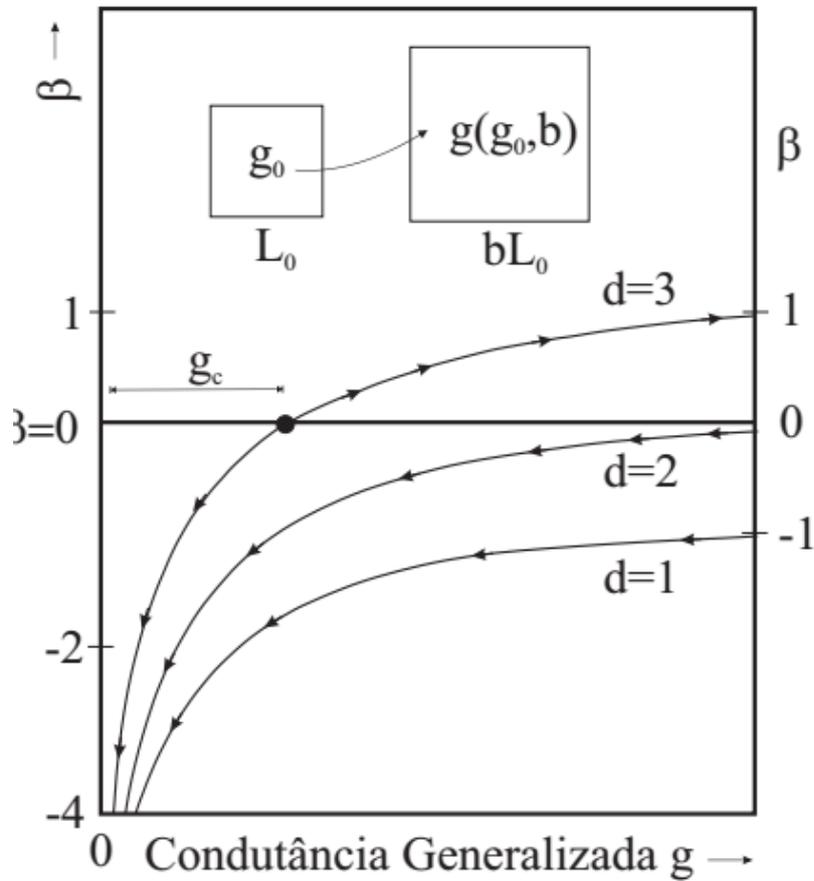
$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = D - 2, \quad (28)$$

a uma nova expressão (28).

Analisamos a fig. 5 percebemos o comportamento de  $\beta$  para os valores  $D = 1, 2, 3$ , assim  $\beta(g \rightarrow \infty) = 1$  quando  $D = 3$ ;  $\beta(g \rightarrow \infty) = 0$  quando  $D = 2$  e  $\beta(g \rightarrow \infty) = -1$  quando  $D = 1$ . Usando a equação (24) percebemos também que  $\beta(g)$  se aproxima de  $-\infty$  quando  $g$  tende a zero, ( $g$  muito pequeno) independente da dimensão. Assumindo que  $\beta(g)$  tenha variação lenta e monotônica entre os limites  $g \rightarrow \infty$  e  $g \rightarrow 0$ , A análise reproduz o comportamento qualitativo da fig. 5. As setas do diagrama de fluxo sobre as curvas representam a direção em que  $g$  sofre variações quando  $L$  cresce. Para  $D < 2$  as setas indicam que  $g$  sempre diminui quando  $L$  cresce. Em  $D = 3$ , temos duas situações bem distintas:

Abaixo de um determinado valor de  $g$  ( $\beta(g) < 0$ ) as setas do diagrama de fluxo indicam que a condutância generalizada  $g$  diminui quando  $L$  cresce; porém para outros valores de  $g$  ( $\beta(g) > 0$ ) o comportamento da função é oposto,  $g$  e  $L$  aumentam. Podemos notar um ponto fixo instável no diagrama de fluxo onde ( $g, \beta(g) = 0$ ). Percebemos também a dependência da transição de Anderson com dimensão  $D \leq 2$ , logo não existe transição metal isolante para essas dimensões, os estados são todos localizados, pois a condutividade tende a zero quando  $L \rightarrow \infty$ .

Figura 5 – O comportamento qualitativo de  $\beta(g)$  para  $D = 1, 2$  e  $3$  na teoria de escala apresentada por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnam.



Fonte: ABRAHAMS et al., 1979 [30]

Já para  $D = 3$  existe uma transição metal isolante (Transição de Anderson), um regime tanto metálico quanto isolante.

Para compreendermos melhor a questão da transição de estados localizados para estados estendidos devemos mensurar o grau de localização, para isto vamos fazer uma breve revisão sobre algumas quantidades necessárias para tais medidas. Primeiro as quantidades independentes do tempo, posteriormente as das quantidades dependentes do tempo.

## 2.5 MEDIDAS DO GRAU DE LOCALIZAÇÃO

De forma geral a Teoria de localização de Anderson consiste na identificação de estados estendidos ou estados localizados numa determinada banda eletrônica. Para esse fim, foram desenvolvidas várias técnicas matemáticas, tanto analítica como computacional para se calcular alguns parâmetros ou quantidades que meçam o grau de localização. Uma das técnicas consiste em fazermos a expansão dos autoestados do Hamiltoniano de Anderson onde escrevemos o operador Hamiltoniano  $H$  na forma matricial para chegarmos a diagonalização numérica de  $H$  numa determinada base indica, e calculamos um número que possa medir o grau de localização dos estados. Este número foi batizado de razão de participação  $\chi$  [36].

$$\chi = \frac{\sum_n |c_n|^2}{\sum_n |c_n|^4}. \quad (29)$$

Para relacionarmos a razão de participação com a localização, é fundamental analisar o caso de uma cadeia ( $\sum_n |c_n|^2$ ) pura onde todos os autoestados são estendidos com  $c_n$  constante. Observando a equação (29) percebemos que ela é igual a 1 devido a normalização dos autoestados do Hamiltoniano. Utilizando  $\sum_n |c_n|^2 = 1$ , chegamos ao seguinte resultado:  $N|c_n|^2 = 1$ . Assim podemos escrever a seguinte relação  $|c| = \frac{1}{\sqrt{N}}$ . Fazendo as devidas substituições na equação (29) temos:

$$\chi = \frac{1}{\sum_n |c_n|^4} = \frac{1}{\sum_n \frac{1}{N^2}} = N. \quad (30)$$

A função de participação  $\chi$  nada mais é do que o número de sítios onde as amplitudes  $c_n$  da função de onda diferem de zero. No limite termodinâmico  $\chi$  é finito para funções de onda localizadas em certa região do espaço [34].

Uma outra forma de medir a localização além da razão de participação e através do comprimento de localização  $L$ , que é definido através do comprimento assintótico da função de onda [34]. A função de onda apresenta um decaimento exponencial para longa distâncias. Esse decaimento é da forma

$$\Psi_i(r) = \psi(r)e^{-r/L}. \quad (31)$$

Definimos  $r$  como sendo a distância ao centro de localização. Para estados estendidos temos que  $L \rightarrow \infty$ . Outra forma de encontrar o comprimento de localização e através expoente de Lyapunov ( $\gamma$ ), onde  $\gamma$  é o inverso do comprimento de localização ( $\gamma = 1/L$ ). Com o aumento das pesquisas relacionadas a Teoria de Localização de Anderson, muitos métodos foram utilizados para calcular o valor de  $L$ , entre eles podemos citar: de grupo de renormalização, funções de Green e matriz de transferência. Dentre estes descreveremos o método de matriz de transferência.

Inicialmente vamos considerar um modelo tight binding unidimensional com desordem somente na diagonal, logo o Hamiltoniano pode ser expresso por

$$H = \sum_n \epsilon_n |n\rangle + t \sum_n [|n\rangle \langle n+1| + |n\rangle \langle n-1|], \quad (32)$$

onde  $|n\rangle$  representa o orbital atômico centrado no sítio  $n$  e  $\epsilon_n$  é o potencial aleatório. Podemos escrever a equação (32) de uma outra forma, assim temos

$$T(c_{n+1} + c_{n-1}) = (E - \epsilon_n)c_n. \quad (33)$$

Podemos reorganizar os termos da equação (33) temos:

$$Ec_n = \epsilon_n c_n + T(c_{n+1} + c_{n-1}), \quad (34)$$

onde  $c_n$  é a amplitude da função de onda no sítio  $n$ . Podemos expressar a equação (34) como uma equação matricial

$$\begin{pmatrix} c_{n+1} \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E-\epsilon_n}{t_{n,n+1}} & -\frac{t_{n-1,n}}{t_{n,n+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_n \\ c_{n-1} \end{pmatrix}. \quad (35)$$

Fazendo uma redefinição de variáveis na equação (35), temos

$$C_{n+1} = \begin{pmatrix} c_{n+1} \\ c_n \end{pmatrix}. \quad (36)$$

Definimos a matriz de transferência  $T_n$  como

$$T_n = \begin{pmatrix} \frac{E-\epsilon_n}{t_{n,n+1}} & -\frac{t_{n-1,n}}{t_{n,n+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (37)$$

Podemos escrever  $C_n$  na forma

$$C_n = T_{n-1}C_{n-1}. \quad (38)$$

Substituindo a equação (38) na equação (36), temos

$$C_{n+1} = T_n T_{n-1} C_{n-1}, \quad (39)$$

e para  $C_{n-1}$ , temos

$$C_{n-1} = T_{n-2} C_{n-2}, \quad (40)$$

substituindo agora na equação (39), a expressão fica definida na seguinte forma

$$C_{n+1} = T_n T_{n-1} T_{n-2} C_{n-2}. \quad (41)$$

Para obtermos  $C_{n+1}$  usa-se uma forma recursiva. Considerando uma condição inicial na forma

$$C_0 = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \end{pmatrix}, \quad (42)$$

podemos escrever a equação (36) através de um produtório da matriz de transferência, que pode ser escrita por

$$c_{n+1} = \prod_{l=0}^n T_l C_0. \quad (43)$$

Para relacionarmos a localização de Anderson ao comprimento de localização devemos assumir que  $|c_n|$  vs  $n$ , nas bordas, tem um decaimento exponencial, da forma  $e^{r/L}$  quando  $n$  assumi um valor grande. Sabendo que a função exponencial tem um comprimento de decaimento dado por  $L$ , podemos Calcular o logaritmo do módulo de  $c_n/n$ , através da relação:

$$\frac{\ln |c_n|}{n} \propto \frac{1}{L}. \quad (44)$$

Definido o comprimento de localização em termos de  $C_n$ , temos

$$L^{-1} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln |C_n|. \quad (45)$$

Assim podemos definir o expoente de Lyapunov como

$$\gamma = L^{-1}. \quad (46)$$

Relacionando as equações (45) com (46) temos

$$\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln |C_n|. \quad (47)$$

No limite termodinâmico se o expoente de Lyapunov for finito, o estado eletrônico é localizado, para uma função de onda igualmente finita. Se o expoente tender a zero ao tomarmos o limite termodinâmico, então o estado eletrônico é estendido.

Analisando a evolução temporal, ou seja, a dinâmica de um sistema desordenado podemos perceber também estados estendidos. Considerando o modelo de Anderson em uma dimensão (1d) como exemplo, e utilizando o tempo como sendo zero ( $t = 0$ ), um elétron é colocado no sítio  $m$  de maneira que  $|c_m(t = 0)|^2 = 1$ ,  $c_i(t = 0) = 0$  para  $i \neq m$ . Assim podemos reescrever a equação de Schrödinger dependente do tempo para este sistema da seguinte forma:

$$i\hbar \frac{dc_j(t)}{dt} = \epsilon_j c_j(t) + t_{j-1,j} c_{j-1}(t) + t_{j,j+1} c_{j+1}(t), \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (48)$$

Estudando o comportamento de  $c_m(t)$  para  $t \rightarrow \infty$ . E se a probabilidade de encontrar o elétron no sítio  $m$  após um longo período de tempo for nula, ou seja,  $|c_m(t \rightarrow \infty)|^2 = 0$ , no limite termodinâmico, o elétron é itinerante através da cadeia (estado estendido). Se  $c_m(t \rightarrow \infty) = 0$ , então o elétron não está espalhado por toda a rede podendo ser localizado apenas nas vizinhanças de  $m$  (estado localizado). A quantidade  $|c_m(t)|^2$  é chamamos de probabilidade de retorno ao ponto de partida. Uma maneira de calcularmos essa quantidade ( $|c_m(t)|^2$ ) é executar a integração numérica do conjunto de equações de movimento, usando o método de Runge-Kutta [37–39].

## 2.6 A TRANSFERÊNCIA DE ESTADOS QUÂNTICOS

A transferência de estados quânticos (QST - Quantum State Transfer), de forma geral, pode ocorrer de duas formas bem distintas: A transferência de estados usando o processo de emaranhamento de dois estados para transferência de um terceiro por teleporte quântico e a transferência que envolve a criação de um canal quântico, pelo qual os estados podem se propagar naturalmente de um local a outro evoluindo em concordância com seu Hamiltoniano ou através de controle externo.

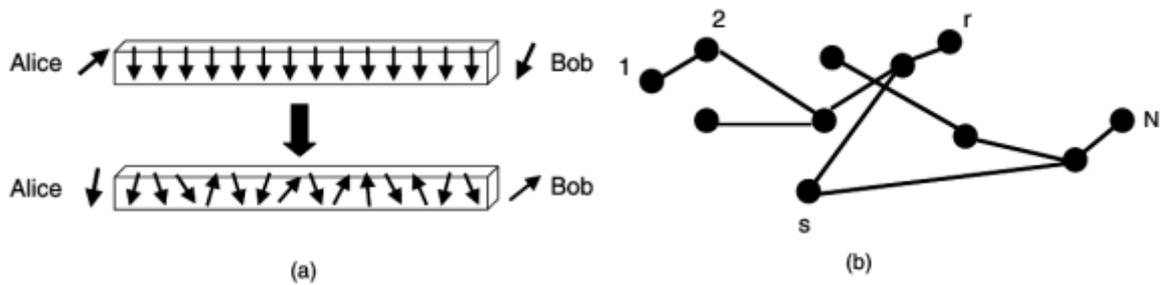
Quando dois sistemas quânticos (fótons, elétrons ou íons) são preparados de forma que haja interação entre eles, favorecendo a formação de um sistema composto, suas propriedades individuais deixam de ser independentes. As propriedades de um sistema dependem do outro, por isso, é dito entrelaçado ou emaranhado. Indispensável para a Computação e Informação

Quântica, o emaranhamento (ou correlação) é um efeito quântico enigmático para a maioria dos cientistas do século XX que se propuseram a desenvolver a teoria. Tão peculiar que o próprio Einstein a denominou como “ação fantasmagórica a distância” [40, p. 68]. Num sistema com duas ou mais partículas emaranhadas torna-se possível prever pelo menos o estado de uma delas, por exemplo: Correlacionando um par de elétrons A e B, levando em consideração apenas os spins de seu estado, ao observar que o elétron A está com o spin para cima, instantaneamente o elétron B ficará com o spin para baixo [41, p. 116].

Em geral, entende-se por teletransporte quântico qualquer estratégia que use apenas operações locais e comunicação clássica para transmitir um estado quântico desconhecido. Em 1993, Bennett et. al [42] mostraram que, com o auxílio de um estado de Bell (canal quântico), dois bits de informação (canal clássico) e um conjunto específico de operações locais ou medidas pode se transmitir toda a informação contida em um estado quântico de dois níveis desconhecido  $|\psi\rangle$  de uma região do espaço (digamos de Alice, subsistema A) para outra (Bob, subsistema B). Para que o teleporte ocorra o emissor e o receptor devem possuir duas partículas já emaranhadas formando um estado de Bell. O processo para se remeter o estado ocorre quando o emissor promove o emaranhamento de sua parte no estado de Bell com o q-bit a ser enviando, para isso efetua-se a uma medida na base dos estados de Bell. O remetente comunica ao receptor através de um canal de comunicação clássico o valor de sua medida. O destinatário aplica localmente a porta lógica correta no qubit ao qual ele tem acesso. Com esse procedimento se recupera o estado inicial possuído pelo remetente. Vale ressaltar que devido ao Teorema de não-clonagem o estado inicial do emissor foi destruído no seu processo de medida, dada a impossibilidade de se clonar um estado quântico [43]. Já a Transferência de estados através de um canal utiliza geralmente spins, estes são dotados de momento magnético quantizado e muitos materiais nos oferecem uma imensa quantidade deles. Uma característica desses materiais é o alinhamento dos momentos magnéticos paralelamente ou anti-paralelamente, fenômenos conhecidos como ferromagnetismo e anti-ferromagnetismo, respectivamente. Uma cadeia de spins modela uma grande quantidade de materiais, nos quais essas partículas estão permanentemente acopladas e arranjadas em uma estrutura unidimensional. Um canal de comunicação quântico pode ser representado por uma cadeia de spins e o Hamiltoniano que governa esse sistema foi primeiramente proposto por Heisenberg. Em 2003, Sougato Bose [44] propôs um modelo semelhante ao supracitado, que consiste em uma cadeia unidimensional imersa em um campo magnético constante na direção  $z$  no qual as interações entre os spins ocorrem apenas entre os primeiros vizinhos, Esta comunicação se dá colocando o estado do spin em uma ponta da cadeia e, após um tempo, o estado irá se propagar para a outra ponta, como pode ser visto na fig.(6)a). Além disso, a fig.(6b) nos mostra um canal onde os spins estão dispostos de formas aleatórias. A principal diferença entre esse protocolo de transferência em cadeias de spin e o de teleporte quântico é que esse último não é necessário fazer uma medida pra se determinar o estado transferido.

Muitos estudos sobre a transferência de estados quânticos utilizando spins tem sido desenvolvidos. Apollaro et al. [45] agrupa os protocolos de QST em sistemas spin  $\frac{1}{2}$  em dependentes e independentes do tempo. Nos dependentes do tempo, como o próprio nome

Figura 6 – (a) Protocolo de comunicação dos estados. (b) Canal arbitrário de spin por onde a comunicação quântica pode ocorrer.



Fonte: BOSE, 2003 [44]

indica, a operação de transferência é realizada por meio da modulação temporal dos parâmetros de interação; nos independentes do tempo, os parâmetros são estáticos durante a execução do protocolo de QST. Ele ainda classifica os sistemas de Hamiltonianos independentes do tempo em três classes: métodos de engenharia de acoplamento, balístico e dinâmica do tipo Rabi.

### 3 Transferência de Estados Quânticos com Desordem Diluída

#### 3.1 INTRODUÇÃO

No capítulo anterior, fizemos uma breve revisão sobre alguns conceitos fundamentais de Mecânica Quântica para compreensão do nosso trabalho, neste faremos um estudo sobre um protocolo de transferência de estados quânticos com um qubit ao longo de um canal que apresenta uma desordem específica chamada de desordem diluída. Nossa investigação é realizada utilizando o regime de fraco acoplamento entre os sítios de origem e de destino do canal. Inicialmente verificamos a possibilidade de transmissão de estados quânticos com alta fidelidade. Percebemos a viabilidade de se estabelecer um emaranhamento de ponta a ponta na configuração desenvolvida nessa categoria de transferência e analisamos o desempenho do protocolo que depende da disponibilidade de estados estendidos no canal desordenado. O capítulo foi estruturado da seguinte forma: a princípio descrevemos o modelo e os componentes necessários para realização de nosso trabalho, em seguida o protocolo de transferência utilizado, dando continuidade, demonstraremos os resultados encontrados e para finalizar apresentamos nossas conclusões.

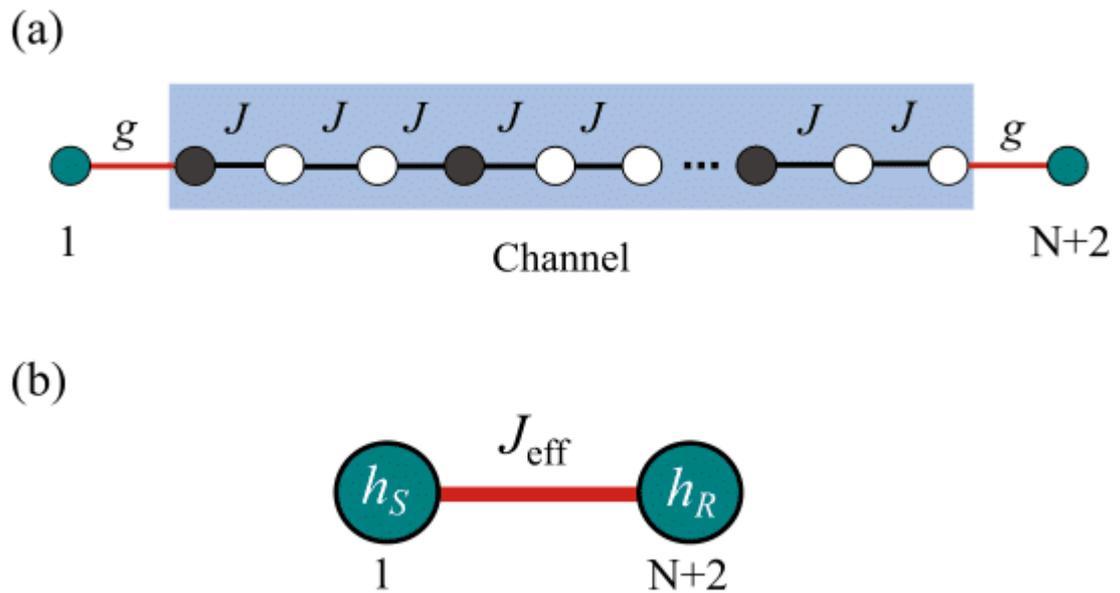
#### 3.2 MODELO

Consideramos uma cadeia de spin 1D (tipo X X) com  $N + 2$  sítios descritos pelo seguinte Hamiltoniano ( $\hbar = 1$ ):

$$\begin{aligned}
 H &= W(|1\rangle\langle 1| + |N + 2\rangle\langle N + 2|) \\
 &= + \sum_{j=2}^{N+1} \epsilon_j |j\rangle\langle j| + J \sum_{j=2}^N |j\rangle\langle j + 1| \\
 &= +g(|1\rangle\langle 2| + |N + 1\rangle\langle N + 2|) + H.c.,
 \end{aligned} \tag{49}$$

com o primeiro e o último sítios denotando os componentes da fonte ( $s$ ) e o receptor ( $r$ ), respectivamente, tendo energia local  $\epsilon_1 = \epsilon_{N+2} = W$  e acoplada ao canal (composto pelos sítios 2 a  $N + 1$ ), ambos à taxa  $g$ . Aqui, declare  $|i\rangle \equiv |\downarrow_1, \downarrow_2 \dots \uparrow_i \dots \downarrow_{N+2}\rangle$  indica um único spin no  $i$ -ésimo sítio. Definimos as forças de salto no canal como a unidade de energia, isto é,  $J \equiv 1$ . As energias correntes  $\epsilon_j$  diluídas nos sítios do canal são geradas da seguinte maneira. Para  $j = 2, 5, 8, 11, \dots, \epsilon_j$ , são números aleatórios tirados uniformemente do intervalo  $[-0, 5J, 0, 5J]$  enquanto para  $j = 3, 4, 6, 7, 9, 10, 12, 13, \dots$  temos uma sub-rede pura com energias dadas por  $\epsilon_j = \epsilon_0$ . De acordo com esta regra de construção, um em cada três sítios possui uma energia local aleatória [ver Fig.7(a)]. Para manter a periodicidade desses canal, que é o ingrediente principal neste tipo de sistema [14, 46], fixamos o número de sítios do canal  $N$  como sendo um múltiplo de três. Também nos restringimos ao regime de acoplamento fraco  $g < J$ . Nesta configuração, o QST é realizado através de oscilações do tipo Rabi devido a uma interação eficaz

Figura 7 – (a) Esquema do modelo: os dois spins externos, as partes que se comunicam, são fracamente acoplados ao canal, ou seja,  $g \ll J$ , que é formado por segmentos independentes de um sítio desordenado, cuja energia é escolhida aleatoriamente da distribuição pronta para uso  $[-0.5J, 0.5J]$  mais dois sítios com energia fixa  $\epsilon_0$  acoplamento intracanal  $J$  é ajustado uniformemente através do canal. (b) Interação eficaz de ponta a ponta derivada da teoria de perturbação de segunda ordem. Ambas as partes externas adquirem energias locais renormalizadas  $h_S$  e  $h_R$  e criam seu próprio subespaço, conectando-se via  $J_{eff}$  que depende da resolução espectral do canal. O mecanismo de trabalho do protocolo é fazer uso dessa configuração reduzida de dois sítios para induzir oscilações do tipo Rabi entre as spins externos.



Fonte: (JÚNIOR et al., 2019) [22]

entre as extremidades externas da cadeia [16, 20, 47]. A representação matricial do Hamiltoniano completo de nosso modelo pode ser encontrado abaixo:

$$H = \begin{pmatrix} W & g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ g & \varepsilon_2 & J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & J & \varepsilon_0 & J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & J & \varepsilon_0 & J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J & \varepsilon_5 & J & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & J & \varepsilon_0 & J & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J & \varepsilon_0 & J & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J & \varepsilon_8 & J & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J & \varepsilon_N & J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J & \varepsilon_{N+1} & g \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g & W \end{pmatrix},$$

Em linhas gerais, a representação matricial do Hamiltoniano tem esta forma tridiagonal. Este tipo de matriz é razoavelmente simples para diagonalizar. A diagonalização do Hamiltoniano é feita através da solução numérica da equação secular  $H|E\rangle = E|E\rangle$  onde  $|E\rangle$  são os autovetores e  $\{E\}$  são os autovalores. Vamos usar métodos tradicionais do livro Numerical Recipes [48] para resolver a equação secular e diagonalizar  $H$ . Como vamos descrever na próxima seção, os autovetores e autovalores vão ser usados tanto na investigação da natureza dos estados como também para se investigar a evolução temporal do estado do sistema e a transferência de estados quânticos.

### 3.3 PROTOCOLO DE TRANSFERÊNCIA DE ESTADOS QUÂNTICOS

Para transmitir um estado arbitrário de qubit  $|\phi\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$  usando a dinâmica natural do Hamiltoniano definida anteriormente, seguimos o esquema QST padrão proposto para Bose na referência [22]. Ao inicializar o canal e o receptor em seu estado fundamental, o estado inicial completo indica  $|\psi(0)\rangle = |\phi\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 \cdots |\downarrow\rangle_{N+2}$ . Dado que o Hamiltoniano subjacente do sistema preserva o número de excitações, a dinâmica real aqui ocorre no coletor de excitação única e, portanto, pode ser gerada por um Hamiltoniano tendo a forma da Eq. (49). Em seguida, deixamos o sistema evoluir  $e^{-iHt}$  através do estado  $|\phi\rangle$  disponível no site  $N + 2$  com a maior fidelidade possível  $F_\phi(\tau) = \langle \phi | \rho_{N+2} | \phi \rangle$  - em algum momento (prescrito)  $\tau$  - em que  $\rho_{N+2}$  é o estado reduzido do sistema após rastrear os sítios 1 através de  $N + 1$ . Uma figura de mérito apropriada para a transferência é obtida pela média de  $F_\phi$  sobre todas as entradas possíveis (que

estão sobre a esfera de Bloch) para obter [22]:

$$F(t) = \frac{1}{2} + \frac{|f_{N+2}(t)|}{3} \cos \varphi + \frac{|f_{N+2}(t)|^2}{6}, \quad (50)$$

onde  $f_{N+2}(t)$  = representa a amplitude da função de onda no receptor ( $r$ ) e  $\varphi$  é sua fase que pode ser geralmente negligenciada (estabelecemos  $\cos \varphi = 1$  a partir de agora) por uma escolha adequada dos potenciais externos após a conclusão do protocolo. A dedução da equação anterior pode ser feita de forma bem elegante usando formalismo padrão de teoria de informação quântica. Vamos reproduzir aqui a dedução da Fidelidade seguindo a referência ([49]). Vamos considerar o exemplo clássico de comunicação quântica onde Alice tenta transferir informação da fonte "s" para o sítio final da cadeia (receptor "r", onde está Bob). Para iniciar o protocolo, Alice coloca um spin em um estado desconhecido no sítio "s" na cadeia de spin:

$$|\psi_{in}\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle \quad (51)$$

Bob quer recuperar este estado, ou um estado mais próximo possível na outra extremidade da cadeia (sítio "r"). Para isso, deve-se esperar um tempo específico até que o estado inicial evolua para um estado final que seja mais próximo possível do eq.(51). O  $r$ -ésimo estado será, em geral, um estado misto e pode ser obtido aplicando o traço dos estados de todos os outros spins de  $\langle \Psi |$ . Isso evolui com o tempo:

$$\rho_{out}(t) = P(t) |\psi_{out}(t)\rangle \langle \psi_{out}(t)| + [1 - P(t)] |0\rangle \langle 0|, \quad (52)$$

com

$$|\psi_{out}(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{P(t)}} \left( \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} f_{N+2}(t) |1\rangle \right) \quad (53)$$

onde

$$P(t) = \cos^2 \frac{\theta}{2} + \sin^2 \frac{\theta}{2} |f_{N+2}(t)|^2 \quad (54)$$

e

$$f_{N+2}(t) = \langle r | \exp\{-iH_G t\} |s\rangle. \quad (55)$$

Agora suponha que Bob vai pegar o  $r$ -ésimo spin (e, portanto, completar o protocolo de comunicação) em um tempo predeterminado  $t = t_0$ . A fidelidade de comunicação quântica através da média sob todo o estado de entrada pura  $|\psi_{in}\rangle$  na esfera de Bloch que é dada por:

$$F = \frac{1}{4\pi} \int \langle \psi_{in} | \rho_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle d\Omega. \quad (56)$$

Resolvendo:

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

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

Vamos separar a equação em três partes:

$$(1) = P(t_0) \langle \psi_{in} | \psi_{out}(t_0) \rangle \langle \psi_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle. \quad (57)$$

$$(2) = \langle \psi_{in} | 0 \rangle \langle 0 | \psi_{in} \rangle. \quad (58)$$

$$(3) = -P(t_0) \langle \psi_{in} | 0 \rangle \langle 0 | \psi_{in} \rangle. \quad (59)$$

Façamos agora as contas separadamente:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{in} | \psi_{out}(t_0) \rangle &= \left[ \cos \frac{\theta}{2} \langle 0 | + e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \langle 1 | \right] \frac{1}{\sqrt{P(t_0)}} \left( \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} f_{N+2}(t) |1\rangle \right) \\ \langle \psi_{in} | \psi_{out}(t_0) \rangle &= \left[ \cos^2 \frac{\theta}{2} + \sin^2 \frac{\theta}{2} f_{N+2}(t_0) \right] \frac{1}{\sqrt{P(t_0)}} \end{aligned} \quad (60)$$

E também:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{in} | \psi_{out}(t_0) \rangle &= \frac{1}{\sqrt{P(t_0)}} \left( \cos \frac{\theta}{2} \langle 0 | + e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} (f_{N+2}(t_0))^* \langle 1 | \right) \left( \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle \right) \\ \langle \psi_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{P(t_0)}} \left[ \cos^2 \frac{\theta}{2} + \sin^2 \frac{\theta}{2} (f_{N+2}(t_0))^* \right] \end{aligned} \quad (61)$$

Assim, teremos:

$$(1) = \cos^4 \frac{\theta}{2} + \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} (f_{N+2}(t_0))^* + \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} f_{N+2}(t_0) + \sin^4 \frac{\theta}{2} |f_{N+2}(t_0)|^2 \quad (62)$$

$$(2) = \cos^2 \frac{\theta}{2} \quad (63)$$

$$(3) = -P(t_0) \cos^2 \frac{\theta}{2} = \cos^4 \frac{\theta}{2} - \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} |f_{N+2}(t_0)|^2 \quad (64)$$

Com essas expressões, podemos então resolver e calcular a fidelidade:

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

Sabendo que

$$\int d\Omega = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin \theta d\theta d\phi$$

Como não há dependência em  $\phi$  teremos que a integral vale  $2\pi$ , restando apenas a integral em  $\theta$ :

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{4\pi} 2\pi \int_0^\pi \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \sin \theta (f_{N+2}(t_0))^* + \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \sin \theta f_{N+2}(t_0) \\ &\quad \sin^4 \frac{\theta}{2} \sin \theta |f_{N+2}(t_0)|^2 + \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin \theta - \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \sin \theta |f_{N+2}(t_0)|^2 d\theta \end{aligned} \quad (65)$$

Usando o site( [50]) para resolver as integrais, temos:

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{3} (f_{N+2}(t_0))^* + \frac{1}{3} f_{N+2}(t_0) + \frac{2}{3} |f_{N+2}(t_0)|^2 + 1 - \frac{1}{3} |f_{N+2}(t_0)|^2 \right] \\ &= \frac{1}{6} [f_{N+2} + (f_{N+2}(t_0))^*] + \frac{1}{2} + \frac{1}{6} |f_{N+2}(t_0)|^2. \end{aligned} \quad (66)$$

Vamos focar nossas atenções agora no primeiro termo:

$$\Delta = |f_{N+2}(t_0)| e^{i \cdot \arg(f_{N+2}(t_0))} + |f_{N+2}(t_0)| e^{-i \cdot \arg(f_{N+2}(t_0))} = |f_{N+2}(t_0)| [e^{i \cdot \arg(f_{N+2}(t_0))} + e^{-i \cdot \arg(f_{N+2}(t_0))}]$$

$$\Delta = 2|f_{N+2}(t_0)| \cos(\arg(f_{N+2}(t_0))) \quad (67)$$

Logo:

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

Ou então:

$$F = \frac{1}{3} |f_{N+2}(t_0)| \cos(\gamma) + \frac{1}{6} |f_{N+2}(t_0)|^2 + \frac{1}{2} \quad (68)$$

onde  $\gamma = \arg[f_{N+2}(t_0)]$ .

Logo , usando este formalismo demonstramos a equação matemática da Fidelidade na transferência de estados quânticos. A quantidade  $F(t)$  pode ser calculada e/ou avaliada através de métodos numéricos e/ou métodos perturbativos. Vamos inicialmente debater um pouco acerca da investigação numérica da Fidelidade. Em linhas gerais o cálculo da fidelidade é feito através da evolução temporal do estado quântico. Esta evolução temporal pode ser feita através da solução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo. A solução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo pode ser feita , por exemplo, usando métodos tais como Runge-kutta (RK) e/ou método de Taylor(MT). Entretanto, neste caso,

podemos descrever um procedimento simples usando basicamente as definições básicas da Mecânica quântica dentro do contexto do operador de evolução temporal(OET). Uma descrição bem detalhada deste procedimento pode ser encontrado nas referências [51], [52]. Uma das maiores vantagens de usar o método do operador de evolução temporal é a precisão numérica. A solução numérica via (OET) não tem aproximações como no caso de (RK) e (MT). Por outro lado este formalismo também tem sérias dificuldades e umas delas é a dimensão do sistema. No caso unidimensional (como o nosso por exemplo), esta dificuldade não é tão acentuada pois o Hamiltoniano é uma matriz razoavelmente pequena e simples de diagonalizar. Vamos apresentar agora o formalismo do (OET) para resolver numericamente a equação de Schrödinger dependente do tempo. Vamos iniciar considerando um problema geral em Mecânica Quântica com Hamiltoniano  $H$ . Formalmente, a evolução temporal do estado quântico deste sistema é dada por:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iH\frac{t}{\hbar}} |\Psi(0)\rangle, \quad (69)$$

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

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n f_n(t) |n\rangle \quad (70)$$

e

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_n f_n(0) |n\rangle \quad (71)$$

vamos substituir as equações (70) e (71) na Eq.(69) para encontrar uma relação simples entre  $f_n(t)$  e  $f_n(0)$ . Logo temos que:

$$\sum_n c_n(t) |n\rangle = e^{-iH\frac{t}{\hbar}} \sum_n c_n(0) |n\rangle. \quad (72)$$

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

$$|E\rangle = \sum_n z_n^E |n\rangle. \quad (73)$$

Vamos agora usar  $\{|E\rangle\}$  para expandir o estado inicial do sistema da forma:

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= \sum_E [\langle E|\psi_0|E|\psi_0\rangle] |E\rangle \\ |\psi(0)\rangle &= \sum_{\substack{n,m \\ E}} [z_m^{E*} f_n(0)] (\langle m|n|m|n\rangle) |E\rangle. \end{aligned} \quad (74)$$

Temos que  $\langle m|n|m|n\rangle = \delta_{m,n}$ , logo

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n,E} z_n^E f_n(0) |E\rangle \quad (75)$$

$$|\psi_0(0)\rangle = \sum_E \left[ \sum_n z_n^E f_n(0) \right] |E\rangle. \quad (76)$$

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

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \sum_E \left[ \sum_n z_n^E f_n(0) \right] |E\rangle \quad (77)$$

sabemos que  $e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |E\rangle = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} |E\rangle$ , logo, a equação anterior pode ser escrita como:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_E \left[ \sum_n z_n^E f_n(0) \right] e^{-\frac{iEt}{\hbar}} |E\rangle. \quad (78)$$

Temos que  $|\psi(t)\rangle = \sum_n f_n(t) |n\rangle$  e  $|E\rangle = \sum_m z_m^E |m\rangle$ , logo

$$\sum_n f_n(t) |n\rangle = \sum_E \left[ \sum_n z_n^E f_n(0) \right] e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \sum_m z_m^E |m\rangle. \quad (79)$$

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

$$\sum_n f_n(t) |n\rangle = \sum_{E,m} Z(E) z_m^E e^{-\frac{iEt}{\hbar}} |m\rangle. \quad (80)$$

Podemos eliminar o somatório através de uma mudança de variáveis  $m \rightarrow n$  logo, a função de onda eletrônica dependente do tempo  $t$  no site  $n$  pode ser obtida usando a seguinte equação:

$$f_n(t) = \sum_E Z(E) z_n^E e^{-\frac{iEt}{\hbar}}, \quad (81)$$

Este procedimento pode ser usado tranquilamente para encontrar, por exemplo,  $f_{N+2}(t)$  (a função de onda no sítio final ou seja, em "r"). Em linhas gerais o algoritmo para o cálculo é o seguinte: i) escreve a representação matricial do Hamiltoniano completo do sistema canal+fonte(s)+receptor (r) (ou seja, o sistema com  $N+2$  sítios). ii) Diagonaliza o Hamiltoniano encontrando assim os autovetores  $|E\rangle$  e seus respectivos autovalores  $E$ . iii) Substitui os autovetores, autovalores e o estado inicial na equação 81 e encontra a evolução temporal do estado quântico do sistema. Uma vez que o estado quântico no tempo  $t$  foi obtido podemos calcular tranquilamente a Fidelidade  $F(t)$ .

Outra abordagem que pode ser feita neste tipo de problema é uma abordagem analítica usando teoria de perturbação. Podemos calcular a amplitude de transição no regime de acoplamento fraco  $g \ll J$  usando a teoria de perturbação de segunda ordem para o Hamiltoniano (49) [47]. Dado  $|\lambda_k = \sum_{j=2}^{N+1} v_{k,j}|j\rangle$  e  $\lambda_k$  são, respectivamente, os autovalores e autovetores do canal hamiltoniano  $H_{ch} = \sum_{j=2}^{N+1} \epsilon_j |j\rangle\langle j| + J \left( \sum_{j=2}^N |j\rangle\langle j+1| + H.c \right)$ , podemos reescrever a Eq. (49) como

$$\begin{aligned}
H &= W(|1\rangle\langle 1| + |N+2\rangle\langle N+2|) + \sum_k \lambda_k |\lambda_k\rangle\langle \lambda_k| \\
&= +g \sum_k (v_{k,2}|1\rangle\langle \lambda_k| + v_{k,N+1}|N+2\rangle\langle \lambda_k| + H.c.). \tag{82}
\end{aligned}$$

Essa equação nos diz que, no limite  $g \ll J$ , os spins externos, cada uma com energia  $W$  no sítio, ficam em ressonância estreita com um ou os modos de canal, digamos  $W = \lambda_k$ , ou não. A primeira situação leva a um sistema efetivo de três níveis, enquanto o último, caso ressonante, promove o aparecimento de um subespaço de dois níveis reduzido [47], abrangido por ambas as partes comunicantes, que é o resultado mais provável, dado que estamos lidando com um canal desordenado (o espectro de energia flutua amostra por amostra). Portanto, sempre que  $W \neq \lambda_k$  para todos os  $k$ , somos capazes de derivar o seguinte Hamiltoniano efetivo de dois níveis Fig. 7(b).

$$H_{eff} = h_S|1\rangle\langle 1| + h_R|N+2\rangle\langle N+2| + J_{eff}(|1\rangle\langle N+2| + H.c.) \tag{83}$$

com

$$h_S = W - g^2 \sum_k \frac{|v_{k,2}|^2}{\lambda_k - W}, \tag{84}$$

$$h_R = W - g^2 \sum_k \frac{|v_{k,N+1}|^2}{\lambda_k - W}, \tag{85}$$

$$J_{eff} = -g^2 \sum_k \frac{v_{k,2}v_{k,N+1}^*}{\lambda_k - W}. \tag{86}$$

Alguns detalhes sobre como abordar essas expressões podem ser vistos em Ref. [47]. Em princípio, a estrutura efetiva acima não faz nenhuma suposição em relação à topologia do canal; poderia ser qualquer rede arbitrária, desordenada ou não. Sem ir mais longe, é imediato ver que a qualidade da transferência de partícula única do local 1 para  $N+2$  (ou para trás) deve depender do ajuste  $\Delta = h_S - h_R$ . De fato, após a diagonalização do Hamiltoniano efetivo [Eq. (83)] temos

$$|\xi^\pm\rangle = \frac{2J_{eff}|1\rangle + (\Delta \pm \Omega|N+2\rangle)}{\sqrt{(\Delta \pm \Omega)^2 + 4J_{eff}^2}}, \tag{87}$$

onde  $\Omega = \sqrt{\Delta^2 + 4J_{eff}^2}$  efetua a frequência Rabi efetiva. As energias correspondentes são  $\xi^\pm = (h_S + h_R \pm \Omega)/2$ . O valor absoluto da amplitude de transição assume a forma

$$|f_{N+2}(t)| = \left| \frac{2J_{eff}}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right) \right|. \tag{88}$$

Assim, vemos que, para obter a máxima fidelidade [ver Eq. (50)], é necessário  $\Delta = 0$ , produzindo  $\Omega = 2J_{eff}$  e conseqüentemente  $|f_{N+2}(t)| = 1$  para  $\tau = n\pi/2|J_{eff}|$  ( $n = 1, 3, 5, \dots$ ).

Isso é facilmente atendido quando o canal apresenta simetria espelhada, o que significa que  $|v_{k,2}| = |v_{k,N+1}|$  para cada  $k$  ou quando o espectro apresenta simetria de orifício de partículas - como a de uma corrente com número par de sítios com acoplamentos arbitrários  $J_i$  e energias uniformes no local [21] - para os quais  $\lambda_k = -\lambda_k$  e  $|v_{k,j}| = |v_{-k,j}|$ , levando trivialmente a  $h_S = h_R = 0$ , desde que  $W$  esteja sintonizado no centro da banda. (Observe que a simetria de espelho implica naturalmente simetria de orifício de partículas.)

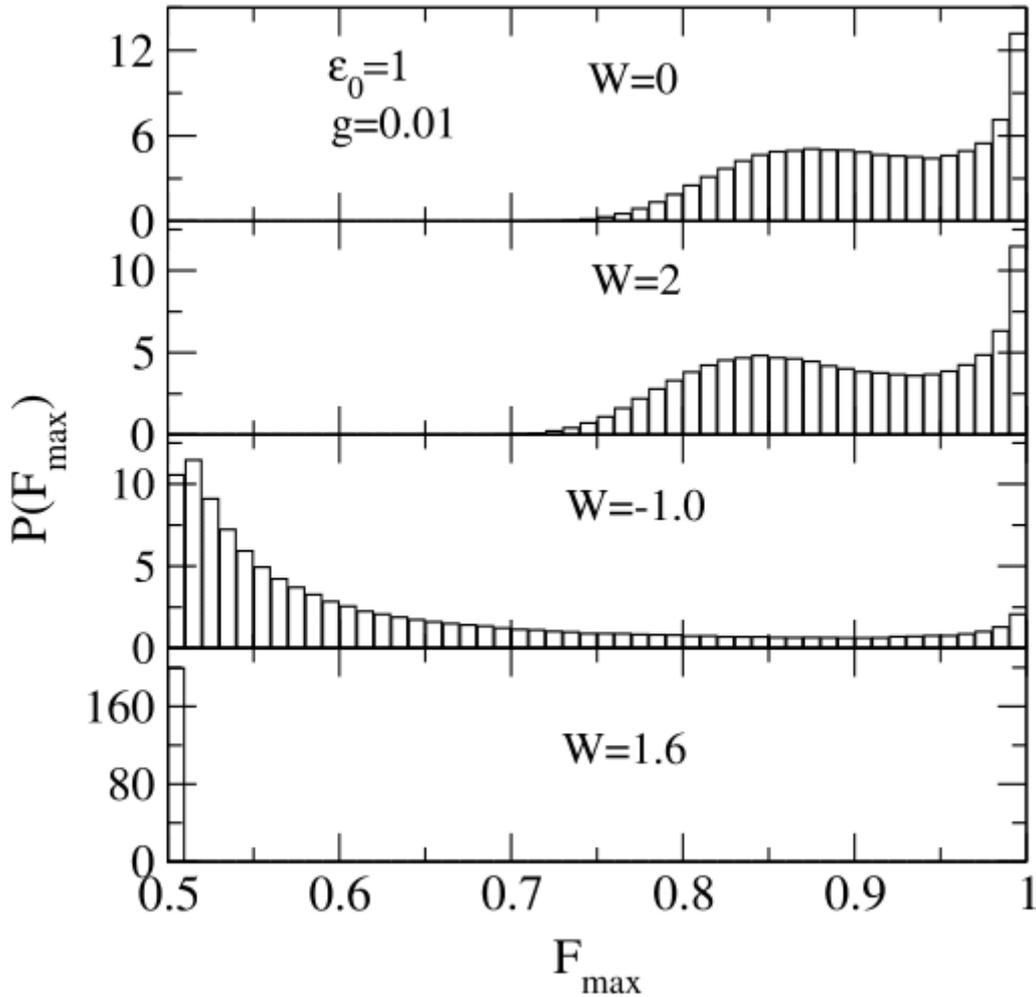
Aqui, como temos que lidar com desordens no local,  $\Delta \neq 0$  diminuindo assim a qualidade da transferência de estados quânticos (QST) devido a ausência de simetria na banda do canal. Por outro lado, podemos minimizar esses efeitos encontrando estados semelhantes deslocalizados apropriados em algum lugar do espectro e ajustando  $W$  de acordo (observe que a contribuição para as somas nas Eqs. (84)-(86) decai como  $(\lambda_k - W)^{-1}$  e portanto, modos distantes  $W$  torna-se menos relevante, de modo a equilibrar as sobreposições  $|v_{k,2}|$  e  $|v_{k,n+1}|$ , tanto quanto possível, portanto,  $|\Delta/J_{eff}| \ll 1$  para obter  $\Omega \approx 2J_{eff}$  [veja Eqs. (50) e (88)]. Obviamente, isso seria inútil no caso de desordem não correlacionado, em que todos os autoestados estão localizados em 1D e 2D. Nosso objetivo aqui é, então, rastrear conjuntos de estados deslocalizados induzidos no modelo de desordem diluída, controlando a energia remetente-receptor  $W$ , de modo a maximizar a fidelidade QST. Mencionamos também que, embora a desordem torne um pouco difícil definir o tempo exato de transferência  $\tau$  de realização por realização [21], aqui estamos, finalmente, cuidando da perspectiva de gerar uma dinâmica Rabi-like de ponta a ponta através de uma cadeia desordenada com características discutidas na seção anterior. Também merece destaque o fato de que o Hamiltoniano efetivo na Eq. (83) é uma aproximação. Ao considerar o sistema completo [Eq. (49)] esperamos algum vazamento do  $\{|1 \rangle, |N+2 \rangle\}$  subespaço no canal durante a evolução [20], dado  $H \neq H_{eff} \oplus H_{ch}$ .

## 4 Resultados

Começamos mostrando nossos resultados para a fidelidade máxima atingida  $F_{max} = \max\{F(t)\}$  considerando um intervalo de tempo de aproximadamente  $5 \times 10^5$ . Também consideramos muitas realizações de desordem para fazer uma estatística um pouco mais aprimorada (consideramos aproximadamente 1000 realizações de desordem). Parte destes resultados podem ser encontrados na Fig. 8. Como descrevemos no capítulo anterior, os cálculos foram feitos através da diagonalização numérica exata do Hamiltoniano completo [Eq. (49)]. Coletamos diversos valores de  $F_{max}$  para diversos valores de energia do emissor/receptor (ou seja, diversos valores de  $W$ ). Fizemos inicialmente um histograma de  $F_{max}$  e percebemos que este histograma tem uma forte dependência com o valor de  $W$  considerado. Para  $W = 0$  e  $2J$ , a maioria das amostras teve valores de  $F_{max}$  em torno de  $F_{max} \approx 1$ . Para  $W = -1J$  o histograma obtido apresentou uma distribuição bem espalhada. Considerando a fonte e o receptor com energia  $W = 1.6J$  nossos resultados indicam que o valor  $F_{max} \approx 1/2$  foi o mais frequente. Este histograma sugere que existem situações para as quais a transferência de estados quânticos ocorre com melhor fidelidade. Os casos onde fonte e o receptor tem energias próximas de  $W = 0$  ou  $2$  são casos onde a transferência de estados ocorre com fidelidade máxima. Para aprender mais sobre essa dependência da fidelidade em relação a  $W$ , na Fig. 9, repetimos o cálculo de  $F_{max}$  agora para dois tamanhos de canal diferentes. Primeiro, observamos que existem dois intervalos de  $W$  para as quais a qualidade da transferência se aproxima da unidade e é fracamente sensível ao tamanho da corrente. Além disso, observamos um terceiro intervalo nas regiões de energias negativas onde encontramos também uma boa fidelidade. Entretanto, se faz importante salientar que essa não representa uma região com transferência de estados quânticas. Podemos observar que esta região está claramente associada a um efeito de tamanho finito. O aparente efeito de transferência vai sendo visivelmente degradado quando o tamanho  $N$  do sistema cresce. Esses aspectos podem ser explicados pela análise da natureza dos modos normais do canal. Com base na ref. [46], cadeias com desordem diluída, semelhantes à que estamos usando aqui, apresentam duas ressonâncias dentro da faixa de estados permitidos. Essas ressonâncias correspondem aos estados de Bloch com amplitude de fuga nos sítios desordenados. Os estados de Bloch têm auto-energias dadas por  $E_k = \epsilon_0 - 2J \cos k$ , com  $k = 2\pi/\zeta$  e  $\zeta$  sendo o comprimento de onda associado. No presente caso, as ressonantes são  $\zeta = 6$  e  $\zeta = 3$  e, portanto, para, digamos  $\epsilon_0 = 1J$ , as energias ressonantes são  $0$  e  $2J$ , em torno das quais ocorrem os mais altos resultados de fidelidade QST. Na Ref. [46] foi ainda demonstrado que o expoente de Lyapunov é finito para todas as energias, exceto nesses dois valores. Mencionamos que, embora estejamos aplicando algum tipo de periodicidade em todo o canal - para o qual as propriedades acima se mantêm - considerando apenas segmentos independentes compostos por um sítio desordenado seguido por dois limpos (veja a Figura 7 (a)), se decompõe no final do canal, digamos, considerando  $N = 52$  ou  $N = 53$ , o comportamento geral seria o mesmo, dado que estamos lidando com pequenas cadeias.

É importante destacar que existe uma região finita nas proximidades das energias resso-

Figura 8 – Distribuição de probabilidade normalizada  $P(F_{max})$  versus  $F_{max} = \max\{F(t)\}$  avaliada ao longo do intervalo de tempo até  $5 \times 10^5$  unidades de tempo. Os dados foram obtidos a partir da diagonalização numérica do Hamiltoniano (49) para  $N = 51, g = 0.01J, \epsilon_0 = 1J$  e  $10^3$  realizações distintas de desordem.

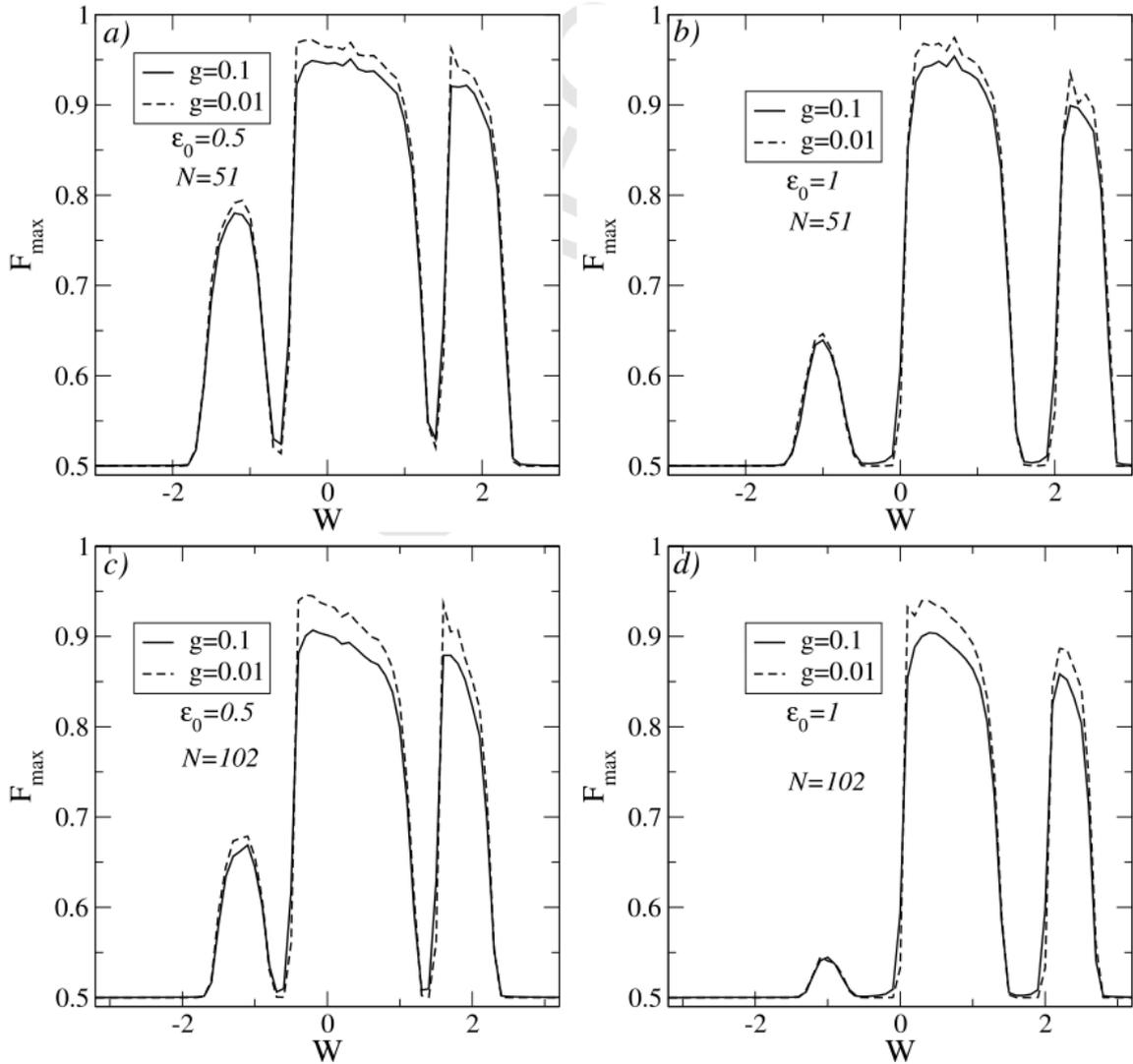


Fonte:

(JÚNIOR et al., 2019) [53]

nantes em que o comprimento da localização é extremamente pronunciado (mas finito). Isso é ilustrado na Fig. 10 onde plotamos o número de participação, dado por  $\chi(E) = (\sum_i |z_i^E|^4)^{-1}$ , versus energia média em muitas realizações de desordem para uma cadeia com  $N = 7200$  sítios. Se faz importante incluir aqui uma rápida revisão acerca da função participação. Como já foi discutido anteriormente, a função  $\chi(E)$  representa o número de átomos (sítios) que participam do estado quântico. Vamos revisar aqui os limites de  $\chi(E)$  para estados estendidos e localizados. Considere um dado autovetor  $|E\rangle$  definido como  $|E\rangle = \sum_i z_i^E |i\rangle$ . Vamos assumir que este estado é estendido ou seja, suas amplitudes  $z_i^E$  são todas idênticas ou seja:  $z_i^E = z_0$ . Sabemos que o autovetor é normalizado logo podemos escrever a seguinte equação:  $\sum_{i=1}^N |z_i^E|^2 = 1$ ; substituindo  $z_i^E = z_0$  temos que,  $\sum_{i=1}^N |z_0|^2 = 1$ , ou seja,  $z_0 = 1/\sqrt{N}$ ; substituindo  $z_k^j = z_0 = 1/\sqrt{N}$  na equação da participação temos que  $\chi(E) = \sum_{i=1}^N (1/\sqrt{N})^4$ , isto é,  $\chi(E) = N$ . Logo, para estados estendidos a função participação é igual  $N$ . Por outro lado, para os estados localizados,

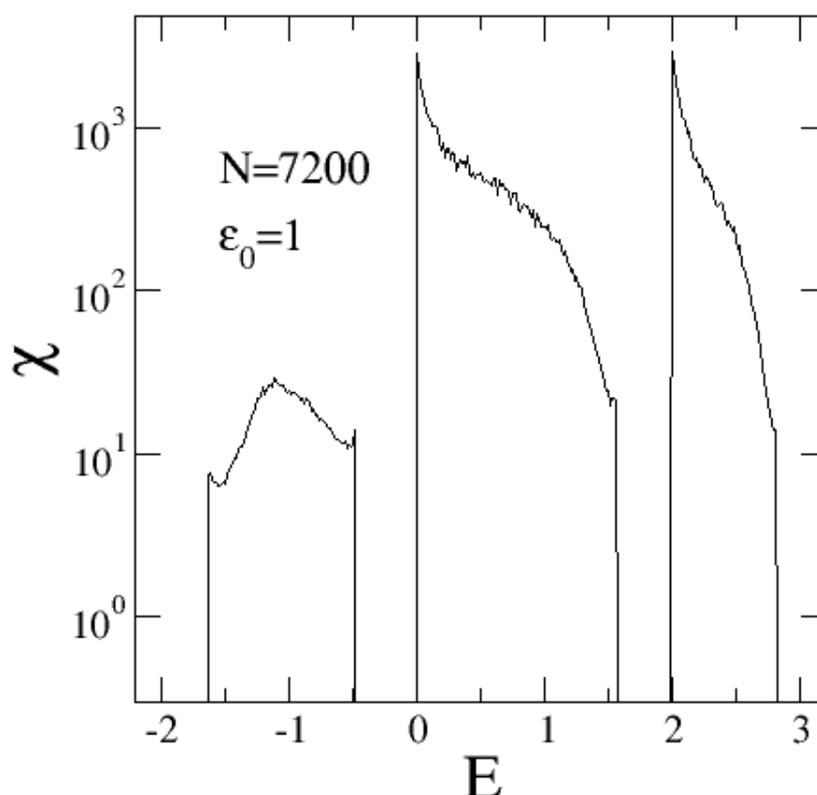
Figura 9 – Fidelidade máxima  $F_{max}$  versus  $W$  (avaliada em  $tJ \in [0.5 \times 10^5]$ ) em média  $10^3$  realizações independentes de desordem para  $N = 51, 102$  e  $0.5J, 1, 0J$ . Os dados foram obtidas a partir da diagonalização numérica exata do Hamiltoniano com  $g = 0.1J$  (linhas sólidas) e  $0.01 J$  (linhas tracejadas).



Fonte: (JÚNIOR et al., 2019) [53]

a função  $\chi(E)$  é uma constante, cujo valor é em geral bem menor que o tamanho do sistema. Ou seja, a participação é uma forma indireta de medir o "tamanho" do estado quântico (seria uma medida indireta do chamado "comprimento de localização"). Vamos avaliar o comportamento de  $\chi$  dentro do contexto do problema da cadeia diluída. Observe que o número de participação permanece bem grande para energias próximas das ressonâncias. Este resultado é totalmente compatível com a existência de boa transferência de estados quânticos para estados próximos das ressonância (como obtivemos na Fig. 9). A análise da função  $\chi$  também explica a diminuição de eficiência da transferência de estados quânticos na primeira banda. Observe que a participação na primeira banda é razoavelmente pequena (pouco mais de 10 sítios participam do estado quântico). Portanto, quando fazemos experimentos de transferência de estados quânticos usando cadeias "grandes" (ao menos maiores que 10-20 sítios) observemos que este tamanho é superior

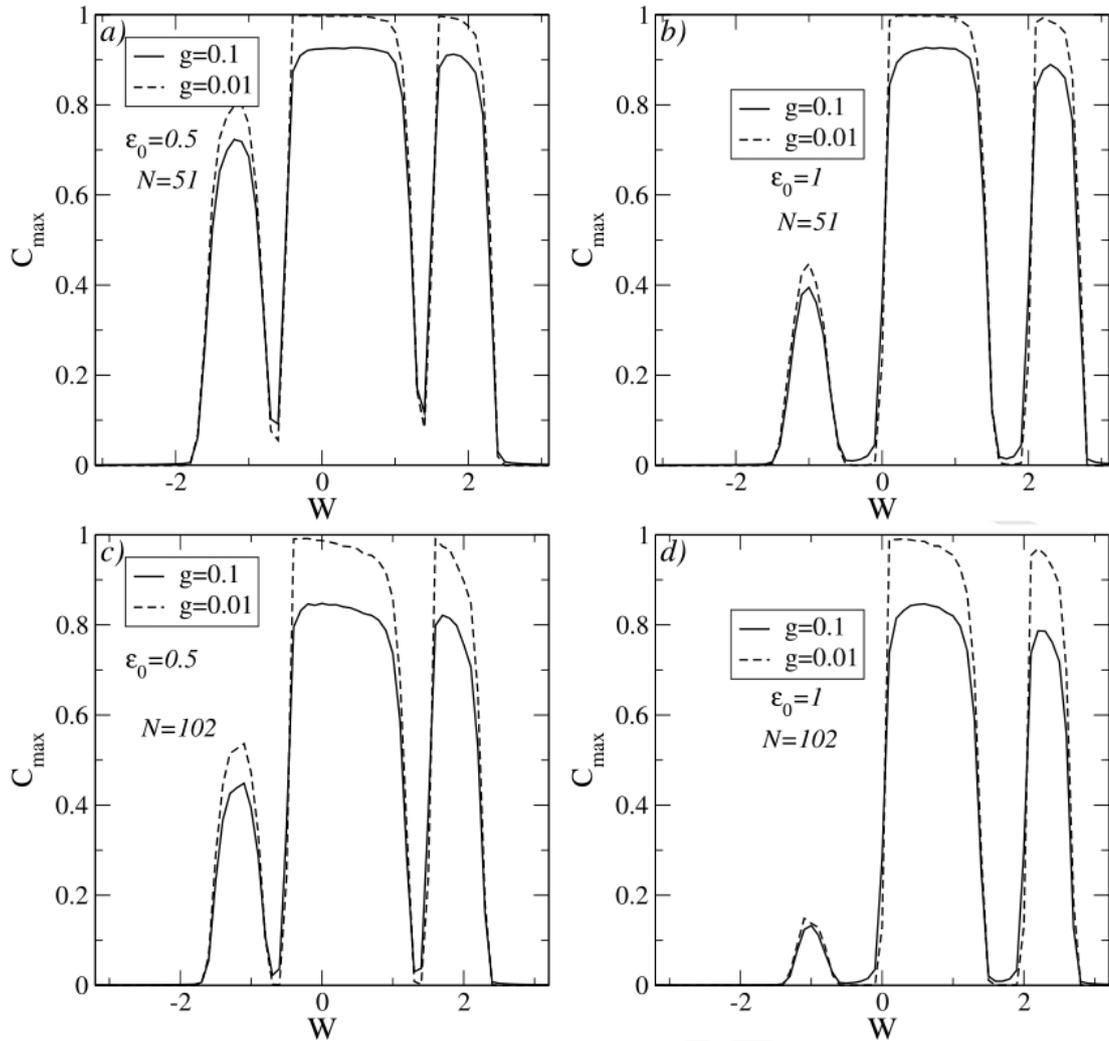
Figura 10 – Número de participação  $\chi$  versus a auto-energias do canal  $E$  para  $N = 7200$  sítios  $\epsilon_0 = 1J$  em média em  $10^3$  realizações de desordem. Observe que o número de participação se torna da ordem do tamanho da cadeia nas energias 0 e 2J, sinalizando os estados ressonantes deslocalizados. Na primeira banda, o  $\chi$  atinge o máximo da ordem de algumas dezenas de sítios.



Fonte: (JÚNIOR et al., 2019) [53]

ao comprimento de localização (dentro da primeira banda). Assim, a transferência de estados quânticos não vai ocorrer com boa eficiência. Já na segunda e terceira banda observamos que a participação é consideravelmente grande (da ordem de  $10^3$  sítios). Portanto, experimentos de transferência de estados quânticos nesta região são possíveis (mesmo que a cadeia utilizada tenha  $N = 50$  ou  $100$ , como foi observado nas figuras anteriores). Como foi observado na Fig. 9, a transferência de estados quânticos, mesmo para  $N$  em torno de  $100$  é possível entretanto existe uma pequena dependência com  $N$  (a fidelidade vai diminuindo a medida que  $N$  cresce). Uma forma de melhorar um pouco o valor da fidelidade quando o tamanho cresce é diminuir o termo de acoplamento  $g$ . Entretanto, temos que lembrar que o tempo necessário para que a transferência

Figura 11 – Concorrência máxima  $C_{max}$  versus  $W$  (avaliada considerando tempos até  $5 \times 10^5$ ). Cálculos foram mediados usando aproximadamente  $10^3$  realizações independentes de desordem para  $N = 51, 102$  e  $\epsilon_0 = 0.5J, 1J$ . Os dados foram obtidos a partir da diagonalização numérica exata do Hamiltoniano (49) com  $g = 0.1J$  (linhas sólidas) e  $0.01J$  (linhas tracejadas).



Fonte: (JÚNIOR et al., 2019) [53]

de estados ocorra cresce da forma  $\tau \sim g^{-2}$  [47, 54]. Logo, este crescimento do tempo pode se tornar um problema tanto computacional quanto também levar a efeitos de decoerência.

Por fim, investigamos a criação de emaranhamento que ocorre durante a dinâmica da transferência de estados quânticos entre a fonte ( $s$ ) e o receptor ( $r$ ). Vamos considerar o estado inicial como sendo  $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$ . Vamos considerar, dentro do formalismo do Hamiltoniano efetivo, que  $\Delta = h_S - h_R = 0$ . Assim podemos encontrar um estado estado emaranhado da forma

$$\begin{aligned}
|\psi(t')\rangle &= \frac{|1\rangle + e^{i\varphi}|N+2\rangle}{\sqrt{2}} \\
&= \left( \frac{|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_{N+2} + e^{i\varphi}|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_{N+2}}{\sqrt{2}} \right) \otimes |\downarrow\rangle_{channel}
\end{aligned} \tag{89}$$

onde  $t' = \tau/2$ . A Quantificação do emaranhamento entre  $s$  e  $r$  pode ser feito através da concorrência definida por : [17,55]

$$C(t) = 2|f_1(t)f_{N+2}^*(t)| = \sqrt{|f_{N+2}(t)|^2 - |f_{N+2}(t)|^4}. \tag{90}$$

Portanto, no limite  $g \ll J$  para o qual o Hamiltoniano efetivo [Eq. (83)] é válido e a amplitude de transição pode ser expressa como na Eq. (88), a concorrência atinge seu valor máximo  $C = 1$  sempre que a probabilidade de ocupação da partícula ser no sítio  $N+2$  é  $p_{N+2} \equiv |f_{N+2}(t)|^2 = 1/2$ . Examinando a Eq. (88) e lembrando que  $\Omega = \sqrt{\Delta^2 + 4J_{eff}^2}$ , quando  $|\Delta/J_{eff}| < 2$ , significando  $p_{N+2}^{(max)} > 1/2$ , a ocorrência sempre terá duas máximas locais em torno do pico de  $p_{n+2}$ . Quando  $|\Delta/J_{eff}| \geq 2$  ( $p_{N+2}^{(max)} \leq 1/2$ ), ambas as quantidades atingem seu máximo simultaneamente, embora a transmissão (que é a fidelidade) já seja insignificante. Por outro lado, o emaranhado permanece forte até  $|\Delta/J_{eff}| = 2$ , acima do qual a concorrência máxima começa a diminuir de  $C = 1$ .

O cálculo numérico de  $C(t)$  bem como da concorrência máxima  $C_{max} = \max\{C(t)\}$  pode ser feito usando exatamente o mesmo procedimento de evolução temporal que usamos para o cálculo de  $F(t)$ . Diagonalizamos o Hamiltoniano completo, calculamos o operador de evolução temporal e assim encontramos  $f_1(t)$  e  $f_{N+2}(t)$ . Vamos focar nossos estudos dentro do contexto da concorrência máxima  $C_{max} = \max\{C(t)\}$  (considerando  $g \ll JJ$ ). A concorrência máxima foi obtida considerando tempos até  $5 \times 10^5$  unidades de tempo. Na Fig. 11 plotamos  $C_{max}$  contra  $W$  considerando  $g = 0.1, 0.01, \epsilon_0 = 0.5$  e  $1$  e  $N = 51$  e  $102$ . Em linhas gerais, os resultados de  $C_{max}$  estão em boa concordância com os resultados para a fidelidade. Nas mesmas regiões onde temos transferência de estados quânticos com boa fidelidade observamos que a concorrência máxima  $C_{max}$  também é grande (perto do máximo  $C = 1$ ). Isso mostra que quando a transferência ocorre o sistema mostra grande emaranhamento entre a fonte e o receptor.

## 5 Conclusões

Em resumo, investigamos os protocolos de transferência de estados quânticos e geração de emaranhamento em um sistema 1d descrito por uma fonte e um receptor fracamente conectados por um canal desordenado. Em nosso sistema, o canal desordenado usado foi uma cadeia com desordem diluída. O tipo de desordem diluída que usamos foi a desordem descrita por Hilke [13] e colaboradores. Nesta abordagem temos uma “mistura” de uma cadeia pura e uma cadeia desordenada. A cadeia diluída apresenta desordem sem correlação intercalada com uma cadeia periódica (cristalina). Foi demonstrado por Hilke e diversos outros autores que esta cadeia apresenta algumas ressonâncias (estados estendidos). A posição destas ressonâncias dentro da banda de energias permitidas depende do tipo de diluição que foi usado [13]. Entretanto este modelo tem bastante relevância pois se trata de um modelo unidimensional desordenado que contém alguns modos estendidos (ou seja, tem transporte mesmo na presença de desordem). Desta forma utilizamos este Hamiltoniano diluído como sendo o canal para protocolos de transferência de estados quânticos. Em nosso estudo preparamos o estado inicial na fonte e evoluímos o mesmo até o receptor. A evolução temporal foi feita usando operador de evolução temporal(OET). O (OET) foi obtido através da diagonalização numérica do Hamiltoniano do sistema. A fidelidade da transferência foi avaliada bem como o nível de emaranhamento entre a fonte e o receptor. Nossos resultados indicaram que a existência de ressonâncias especiais provenientes da desordem diluída do canal são fundamentais para a ocorrência de transferência de estados quânticos bem como de emaranhamento. Mostramos que ao redor das supracitadas ressonâncias é possível a transferência de estados quânticos com razoável fidelidade (mesmo no limite de desordem intermediária). Fizemos um estudo analítico um pouco mais detalhado acerca das especificidades gerais de transferência de estados quânticos dentro deste tipo de sistema. Usando teoria de perturbação, mapeamos o sistema em um sistema de dois níveis acoplados com hopping  $J_{eff}$ . Nossos resultados analíticos corroboram as previsões numéricas obtidas através da evolução do pacote de onda. Em linhas gerais, nossos estudos sugerem a possibilidade de transferência de estados quânticos em sistemas desordenados diluídos, bem como, produção de emaranhamento. Os principais resultados desta pré-tese foram publicados no volume 383 da *Physics Letters A*. Nossas perspectivas envolvem o estudo deste tipo de sistema em dimensão  $d > 1$ . Estamos interessados em investigar sistemas quasi-unidimensionais bem como sistemas bidimensionais.

## REFERÊNCIAS

- 1 NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. **Computação quântica e informação quântica**. [S.l.]: Bookman, 2003.
- 2 TURING, A. M. et al. On computable numbers, with an application to the entscheidungsproblem. **J. of Math**, v. 58, n. 345-363, p. 5, 1936.
- 3 JUNIOR, O. F.; GRECA, I. M. Informação e teoria quântica. **Scientiae Studia**, SciELO Brasil, v. 11, n. 1, p. 11–33, 2013.
- 4 FEYNMAN, R. P. Simulating physics with computers. **Int. J. Theor. Phys**, v. 21, n. 6/7, 1982.
- 5 DEUTSCH, D. Quantum theory, the church–turing principle and the universal quantum computer. **Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences**, The Royal Society London, v. 400, n. 1818, p. 97–117, 1985.
- 6 STEANE, A. M. Error correcting codes in quantum theory. **Physical Review Letters**, APS, v. 77, n. 5, p. 793, 1996.
- 7 GROVER, L. K. Quantum computers can search arbitrarily large databases by a single query. **Physical review letters**, APS, v. 79, n. 23, p. 4709, 1997.
- 8 GROVER, L. K. Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack. **Physical review letters**, APS, v. 79, n. 2, p. 325, 1997.
- 9 PORTUGAL R., L. C. C. L. M. N. Uma introdução aos algoritmos quânticos. **Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ)**, 2004.
- 10 ANDERSON, P. et al. Possible explanation of nonlinear conductivity in thin-film metal wires. **Physical Review Letters**, APS, v. 43, n. 10, p. 718, 1979.
- 11 FLORES, J. Transport in models with correlated diagonal and off-diagonal disorder. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 1, n. 44, p. 8471, 1989.
- 12 COSTA, A.; MOURA, F. de. Extended acoustic waves in diluted random systems. **The European Physical Journal B**, Springer, v. 80, n. 1, p. 59–63, 2011.
- 13 HILKE, M. Localization properties of the periodic random anderson model. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, IOP Publishing, v. 30, n. 11, p. L367, 1997.
- 14 LAZO, E.; ONELL, M. Existence of delocalized states in two interpenetrated 1-d diluted anderson chains. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 283, n. 5-6, p. 376–381, 2001.
- 15 ALBUQUERQUE, S. et al. Sensitivity to initial conditions of the wave-packet dynamics in diluted anderson chains. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 355, n. 6, p. 468–472, 2006.
- 16 ALMEIDA, G. M. et al. Quantum-state transfer through long-range correlated disordered channels. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 382, n. 20, p. 1335–1340, 2018.
- 17 ALMEIDA, G. M. et al. Disorder-assisted distribution of entanglement in x y spin chains. **Physical Review A**, APS, v. 96, n. 3, p. 032315, 2017.

- 18 ESTARELLAS, M. P. et al. Robust quantum entanglement generation and generation-plus-storage protocols with spin chains. **Physical Review A**, APS, v. 95, n. 4, p. 042335, 2017.
- 19 BURGARTH, D.; BOSE, S. Perfect quantum state transfer with randomly coupled quantum chains. **New journal of physics**, IOP Publishing, v. 7, n. 1, p. 135, 2005.
- 20 WÓJCIK, A. et al. Unmodulated spin chains as universal quantum wires. **Physical Review A**, APS, v. 72, n. 3, p. 034303, 2005.
- 21 ALMEIDA, G. M. Interplay between speed and fidelity in off-resonant quantum-state-transfer protocols. **Physical Review A**, APS, v. 98, n. 1, p. 012334, 2018.
- 22 BOSE, S. Quantum communication through an unmodulated spin chain. **Physical review letters**, APS, v. 91, n. 20, p. 207901, 2003.
- 23 BAKER, J. ideias de física quântica que você precisa conhecer. **São Paulo**, 50.
- 24 AZEVEDO, C. R. B. **Nota de aula**. [S.l.].  
<https://www.dca.fee.unicamp.br/lbocato/topico10.2IA013computacaoquantica.pdf>.
- 25 AZEVEDO, C. R. B. **Aplicação da Computação Quântica na Resolução de Problemas Computacionais e seu Impacto no Âmbito científico**. [S.l.]. Disponível em <https://monografias.brasilecola.uol.com.br/computacao/aplicacao-computacao-quantica-na-resolucao-problemas-computacionais-impacto-cientifico.htm> na data 08/04/2021.
- 26 SHANNON, C. E. Communication theory of secrecy systems. **The Bell system technical journal**, Nokia Bell Labs, v. 28, n. 4, p. 656–715, 1949.
- 27 ZALLEN, R. The physics of amorphous solids. **New York: A Wiley-Interscience**, 1983.
- 28 ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. **Physical review**, APS, v. 109, n. 5, p. 1492, 1958.
- 29 KRAMER, B.; MACKINNON, A. Localization: theory and experiment. **Rep, Prog, Phys**, v. 56, p. 1469–1564, 1993.
- 30 ABRAHAMS, E. et al. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. **Physical Review Letters**, APS, v. 42, n. 10, p. 673, 1979.
- 31 ZALLEN, R. **The physics of amorphous solids**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2008.
- 32 ASHCROFT, N. W. et al. **Solid state physics**. [S.l.]: holt, rinehart and winston, new york London, 1976. v. 2005.
- 33 KOKUBUN, M. A. E. Caos quântico e localização de anderson em um rotor perturbado. 2008.
- 34 THOULESS, D. J. Electrons in disordered systems and the theory of localization. **Physics Reports**, Elsevier, v. 13, n. 3, p. 93–142, 1974.
- 35 SALES, M. d. O. et al. Localização em sistemas com desordem correlacionada: correlações exponenciais e correlações tipo ornstein-uhlenbeck. Universidade Federal de Alagoas, 2012.
- 36 KRAMER, B.; MACKINNON, A. Localization: theory and experiment. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, v. 56, n. 12, p. 1469, 1993.

- 37 HAIRER, E. et al. **Solving ordinary differential equations I, nonstiff problems, corr. 3rd printing**. [S.l.]: Springer, Berlin, 2008.
- 38 BARATTO, G. Solução de equações diferenciais ordinárias usando métodos numéricos. **Universidade Federal de Santa Maria**, 2007.
- 39 PRESS, W. H. et al. **Numerical recipes 3rd edition: The art of scientific computing**. [S.l.]: Cambridge university press, 2007.
- 40 JR, O. F. et al. **Teoria quântica: estudos históricos e implicações culturais**. [S.l.]: Eduepb, 2011.
- 41 NOVAES, M.; STUDART, N. Mecânica quântica básica. **Livraria da Física, 1o edição**, v. 12, 2016.
- 42 BENNETT, C. H. et al. Teleporting an unknown quantum state via dual classical and einstein-podolsky-rosen channels. **Physical review letters**, APS, v. 70, n. 13, p. 1895, 1993.
- 43 WOOTTERS, W. K.; ZUREK, W. H. A single quantum cannot be cloned. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 299, n. 5886, p. 802–803, 1982.
- 44 BOSE, S. Quantum communication through an unmodulated spin chain. **Physical Review Letters**, v. 91, n. 20, p. 1–4, 2003. ISSN 10797114.
- 45 APOLLARO, T. et al. Many-qubit quantum state transfer via spin chains. **Physica Scripta**, IOP Publishing, v. 2015, n. T165, p. 014036, 2015.
- 46 MOURA, F. D. et al. Delocalization and wave-packet dynamics in one-dimensional diluted anderson models. **The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems**, Springer, v. 36, n. 1, p. 81–86, 2003.
- 47 WOJCIK, A. et al. Multiuser quantum communication networks. **Physical Review A**, APS, v. 75, n. 2, p. 022330, 2007.
- 48 PRESS WILLIAM H E TEUKOLSKY, S. A. e. V. W. T. e. F. B. P. **Receitas Numéricas em Fortran 90: Receitas Numéricas em Fortran 77V. 2. Receitas numéricas em Fortran 90**. [S.l.]: Cambridge University Press.
- 49 MENDES, C. V. C. Caminhada e transferência de estados quânticos em meios desordenados. 2021.
- 50 INC., W. R. **Mathematica Online, Version 13.1**. Disponível em: <<https://www.wolfram.com/mathematica>>.
- 51 FILHO, F. J. de A. Transferência de estados quânticos em sistemas com hopping decaindo exponencialmente. 2021.
- 52 NUNES, D. M. Dinâmica de um mágnon em cadeias ferromagneticas com desordem correlacionada e campos magnéticos não homogêneos. 2021.
- 53 JÚNIOR, P. et al. Quantum communication through chains with diluted disorder. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 383, n. 16, p. 1845–1849, 2019.

54 ALMEIDA, G. M. et al. Quantum-state transfer through long-range correlated disordered channels. **Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics**, Elsevier B.V., v. 382, n. 20, p. 1335–1340, 2018. ISSN 03759601. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.physleta.2018.03.028>>.

55 WOOTTERS, W. K. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. **Physical Review Letters**, APS, v. 80, n. 10, p. 2245, 1998.

## **Apêndice – Artigo Publicado**



# Quantum communication through chains with diluted disorder

P.R.S. Júnior, G.M.A. Almeida, M.L. Lyra, F.A.B.F. de Moura\*

Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, AL 57072-970, Brazil

## ARTICLE INFO

### Article history:

Received 30 August 2018  
 Received in revised form 8 March 2019  
 Accepted 10 March 2019  
 Available online 15 March 2019  
 Communicated by R. Wu

### Keywords:

Quantum-state transfer  
 Anderson localization  
 Quantum communication

## ABSTRACT

We investigate a single-qubit state transfer protocol along a channel featuring diagonal diluted disorder. In the regime where the source and destination sites are weakly coupled to the channel, we report the possibility of transmitting quantum states with high fidelity as well as establishing end-to-end entanglement in that sort of configuration. We further discuss how the performance of the protocol depends upon the availability of extended states within the disordered channel.

© 2019 Elsevier B.V. All rights reserved.

## 1. Introduction

The primary effect of disorder in quantum chains is to induce the so-called phenomenon of Anderson localization which suppresses propagation of the wave function. Based on the Anderson's early works [1] we know that the eigenstates of a single-particle tight-binding Hamiltonian with on-site uncorrelated disorder are exponentially localized for any degree of disorder in 1D systems. On the other hand, it was shown that the presence of correlations within the disorder distribution allows for the appearance of delocalized states in the band [2–16].

A particular class of correlated disorder put forward by Hilke in Ref. [9] consists of an Anderson model on which diagonal disorder is distributed throughout the lattice following a given periodicity. This *diluted* disorder model has been investigated in various frameworks since then [9–16]. The standard version of the model is based on two interpenetrating sub-lattices, one with random on-site potentials and the other featuring non-random segments of constant potentials. Special resonant energies emerge due to the periodicity of those segments. The diluted Anderson model was later modified to include a general diluting function which defines the on-site energies within each non-random segment [11]. Using an analytical procedure, it was demonstrated that this model displays a set of extended states, the number of which strongly depends on the length of the diluting segments and the symmetry of the function generating it. In Ref. [14] the electronic dynamics in diluted random chains was investigated in detail. The authors demonstrated that the wave function spreading profile strongly de-

pends upon the initial position of the particle. Hilke [15] further investigated the diluted Anderson model in a square lattice, where a true metal-insulator transition with mobility edges delimiting a band of extended states was found.

Recently, correlated disorder has also been addressed in the context of quantum communication protocols. As it promotes the breakdown of Anderson localization, the coexistence between localized and extended states allows for the realization of quantum-state transfer (QST) [17] and entanglement distribution protocols [18] even in the presence of disorder. In reality, one should always expect the presence of some amount of disorder in pre-engineered quantum chains for QST protocols [17–26] due to experimental imperfections in the manufacturing process or dynamical factors. With this in mind, it is crucial to investigate the effects correlated noise on those protocols [17–20]. Such correlations offer the possibility of masking disorder without the need of substantial resources that would be required in order to globally diminishing it.

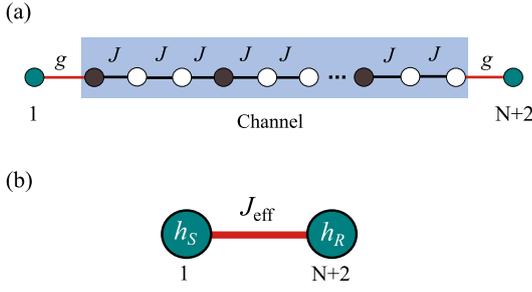
Here, we study a class of Rabi-type QST protocol where both ends of the chain are weakly coupled to the bulk [27–30], this featuring diluted disorder. By means of numerical diagonalization of the full Hamiltonian of the system we evaluate the QST input-averaged fidelity [31] as well as the end-to-end entanglement over a fixed time window. Our calculations reveal an interesting dependence of those quantities upon the resonances that exist within the channel due to the diluted disorder. We discuss those results in light of the existence of extended states in the set of normal modes of the channel.

## 2. Model

We consider a 1D spin chain (*XX* type) with  $N + 2$  sites described by the following Hamiltonian ( $\hbar = 1$ )

\* Corresponding author.

E-mail address: fidelis@fis.ufal.br (F.A.B.F. de Moura).



**Fig. 1.** (a) Model scheme: both outer spins, the communicating parties, are weakly coupled to the channel, that is  $g \ll J$ , which is made by independent segments of one disordered site (dark circles) having its energy randomly picked out of the box distribution  $[-0.5J, 0.5J]$  plus two clean ones featuring fixed energy  $\epsilon_0$ . The intrachannel coupling  $J$  is set uniformly across the channel. (b) Effective end-to-end interaction derived from second-order perturbation theory. Both outer parties acquire renormalized local energies  $h_S$  and  $h_R$  and create their own subspace, becoming connected via  $J_{\text{eff}}$  that depends on the spectral resolution of the channel. The working mechanism of the protocol is to make use of such reduced two-site configuration to induce Rabi-like oscillations between the outer spins.

$$H = W (|1\rangle\langle 1| + |N+2\rangle\langle N+2|) + \sum_{j=2}^{N+1} \epsilon_j |j\rangle\langle j| + J \sum_{j=2}^N |j\rangle\langle j+1| + g (|1\rangle\langle 2| + |N+1\rangle\langle N+2|) + \text{H.c.}, \quad (1)$$

with the first and last sites denoting the source and receiver components, respectively, having local energy  $\epsilon_1 = \epsilon_{N+2} = W$  and coupled to the channel (made up by sites 2 through  $N+1$ ) both at rate  $g$ . Here, state  $|i\rangle \equiv |\downarrow_1 \downarrow_2 \cdots \uparrow_i \cdots \downarrow_{N+2}\rangle$  denotes a single spin up at the  $i$ -th site. We set the hopping strengths in the channel as the energy unit, i.e.,  $J \equiv 1$ . The diluted random on-site energies  $\epsilon_j$  in the channel is generated in the following manner. For  $j = 2, 5, 8, 11, \dots$ ,  $\epsilon_j$  are random numbers taken uniformly from the interval  $[-0.5J, 0.5J]$  whereas for  $j = 3, 4, 6, 7, 9, 10, 12, 13, \dots$  we have a pure sub-lattice with energies given by  $\epsilon_j = \epsilon_0$ . According to this construction rule, one out of each three sites has a random local energy [see Fig. 1(a)]. In order to maintain the periodicity of these segments, which is the very ingredient responsible for inducing a set of delocalized states within the spectrum [11,13], here we fix the number of sites of the channel,  $N$ , to be a multiple of three. We also restrict ourselves to the weak coupling regime  $g \ll J$ . In this configuration, QST is performed via Rabi-like oscillations due to an effective interaction between the outer ends of the chain [27,28,30].

### 3. Quantum-state transfer protocol

In order to transmit an arbitrary qubit state  $|\phi\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$  using the natural dynamics of the Hamiltonian defined above, we follow the standard QST scheme put forward by Bose in Ref. [31]. When initializing the channel and receiver at their ground state, the full initial state reads  $|\psi(0)\rangle = |\phi\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 \cdots |\downarrow\rangle_{N+2}$ . Given that the underlying Hamiltonian of the system preserves the number of excitations, the actual dynamics here takes place in the single-excitation manifold and can thus be generated by a Hamiltonian having the form of Eq. (1). We then let the system evolve through  $e^{-iHt}$  until state  $|\phi\rangle$  is available at site  $N+2$  with highest possible fidelity  $F_\phi(\tau) = \langle \phi | \rho_{N+2} | \phi \rangle$  – at some (prescribed) time  $\tau$  – where  $\rho_{N+2}$  is the reduced state of the system after tracing out sites 1 through  $N+1$ . An appropriate figure of merit for the transfer is obtained by averaging  $F_\phi$  over every possible input (that is over the Bloch sphere) to obtain [31]

$$F(t) = \frac{1}{2} + \frac{|f_{N+2}(t)|}{3} \cos \varphi + \frac{|f_{N+2}(t)|^2}{6} \quad (2)$$

where  $f_{N+2}(t) = \langle N+2 | e^{-iHt} | 1 \rangle$  represent the end-to-end transition amplitude and  $\varphi$  is its phase which can be generally neglected (we set  $\cos \varphi = 1$  henceforth) by a suitable choice of the external potentials after the protocol is done.

We can work out that transition amplitude in the weak-coupling regime  $g \ll J$  using second-order perturbation theory for Hamiltonian (1) [28]. Given  $|\lambda_k\rangle = \sum_{j=2}^{N+1} v_{k,j} |j\rangle$  and  $\lambda_k$  are, respectively, the eigenstates and eigenvalues of the channel Hamiltonian  $H_{\text{ch}} \equiv \sum_{j=2}^{N+1} \epsilon_j |j\rangle\langle j| + J (\sum_{j=2}^N |j\rangle\langle j+1| + \text{H.c.})$ , we may rewrite Eq. (1) as

$$H = W (|1\rangle\langle 1| + |N+2\rangle\langle N+2|) + \sum_k \lambda_k |\lambda_k\rangle\langle \lambda_k| + g \sum_k (v_{k,2} |1\rangle\langle \lambda_k| + v_{k,N+1} |N+2\rangle\langle \lambda_k| + \text{H.c.}). \quad (3)$$

This picture tells us that deep in the limit  $g \ll J$  the outer spins, each with on-site energy  $W$ , either get in narrow resonance with one or the channel modes, say  $W = \lambda_{k'}$ , or does not. The former situation leads to an effective three-level system whereas the latter, off-resonant case, promotes the appearance of a reduced two-level subspace [28] spanned by both communicating parties, which is the most likely outcome given we are dealing with a disordered channel (the energy spectrum fluctuates sample by sample). So, whenever  $W \neq \lambda_k$  for all  $k$  we are able to derive the following two-site effective Hamiltonian [see Fig. 1(b)]

$$H_{\text{eff}} = h_S |1\rangle\langle 1| + h_R |N+2\rangle\langle N+2| + J_{\text{eff}} (|1\rangle\langle N+2| + \text{H.c.}) \quad (4)$$

with

$$h_S = W - g^2 \sum_k \frac{|v_{k,2}|^2}{\lambda_k - W}, \quad (5)$$

$$h_R = W - g^2 \sum_k \frac{|v_{k,N+1}|^2}{\lambda_k - W}, \quad (6)$$

$$J_{\text{eff}} = -g^2 \sum_k \frac{v_{k,2} v_{k,N+1}^*}{\lambda_k - W}. \quad (7)$$

Details on how to approach to these expressions can be seen in Ref. [28]. In principle, the above effective framework does not make any assumptions toward the topology of the channel; it could be any arbitrary network, disordered or not. Without going any further, it is immediate to see that the quality of the single-particle transfer from site 1 to  $N+2$  (or backwards) should depend on the detuning  $\Delta = h_S - h_R$ . Indeed, after diagonalization of the effective Hamiltonian [Eq. (4)] we get

$$|\xi^\pm\rangle = \frac{2J_{\text{eff}}|1\rangle + (\Delta \pm \Omega)|N+2\rangle}{\sqrt{(\Delta \pm \Omega)^2 + 4J_{\text{eff}}^2}}, \quad (8)$$

where  $\Omega = \sqrt{\Delta^2 + 4J_{\text{eff}}^2}$  is the effective Rabi frequency. The corresponding energies read  $\xi^\pm = (h_S + h_R \pm \Omega)/2$ . The absolute value of the transition amplitude finally takes the form

$$|f_{N+2}(t)| = \left| \frac{2J_{\text{eff}}}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right) \right|. \quad (9)$$

Thereby, we see that in order to get maximum fidelity [see Eq. (2)], one needs  $\Delta = 0$ , yielding  $\Omega = 2J_{\text{eff}}$  and then  $|f_{N+2}(t)| = 1$  at times  $\tau = n\pi/2|J_{\text{eff}}|$  ( $n = 1, 3, 5, \dots$ ). This is readily met when the channel is mirror symmetric, meaning that  $|v_{k,2}| = |v_{k,N+1}|$  for every  $k$  or when the spectrum features particle-hole symmetry

– such as that of a chain with even number of sites with arbitrary couplings  $J_i$  and uniform on-site energies [30] – for which  $\lambda_k = -\lambda_{-k}$  and  $|v_{k,j}| = |v_{-k,j}|$ , trivially leading to  $h_S = h_R = 0$  as long as  $W$  is tuned at the very center of the band. (Note that mirror symmetry naturally implies particle-hole symmetry.)

Here, as we have to deal with on-site disorder,  $\Delta \neq 0$  thereby decreasing the QST quality due to asymmetries within the channel band. On the other hand, we may minimize such effects by finding proper delocalizedlike states somewhere in the spectrum and tuning  $W$  accordingly (note that the contribution to the sums in Eqs. (5)–(7) decays as  $(\lambda_k - W)^{-1}$  and thus modes distant from

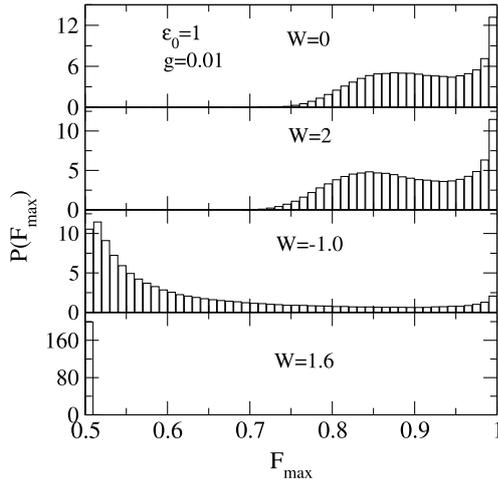
$W$  becomes less relevant), so as to *balance* the overlaps  $|v_{k,2}|$  and  $|v_{k,N+1}|$  as much as possible and thus  $|\Delta/J_{\text{eff}}| \ll 1$  to get  $\Omega \approx 2J_{\text{eff}}$  [see Eqs. (2) and (9)]. Of course, that would be useless in the case of uncorrelated disorder, where every eigenstate is localized in 1D and 2D. Our goal here is then to track down sets of delocalized states induced in the diluted disorder model by controlling the sender-receiver energy  $W$  in order to maximize the QST fidelity.

We also mention that although disorder will make it somewhat difficult to define the exact transfer time  $\tau$  realization by realization [17], here we are ultimately looking after the prospect of generating an end-to-end Rabi-like dynamics through a disordered chain having the characteristics discussed in the previous section. It also deserves to notice the fact that the effective Hamiltonian in Eq. (4) is an approximation. When considering the full system [Eq. (1)] we expect some leakage from the  $\{|1\rangle, |N+2\rangle\}$  subspace into the channel during the evolution [27], given  $H \neq H_{\text{eff}} \oplus H_{\text{ch}}$ .

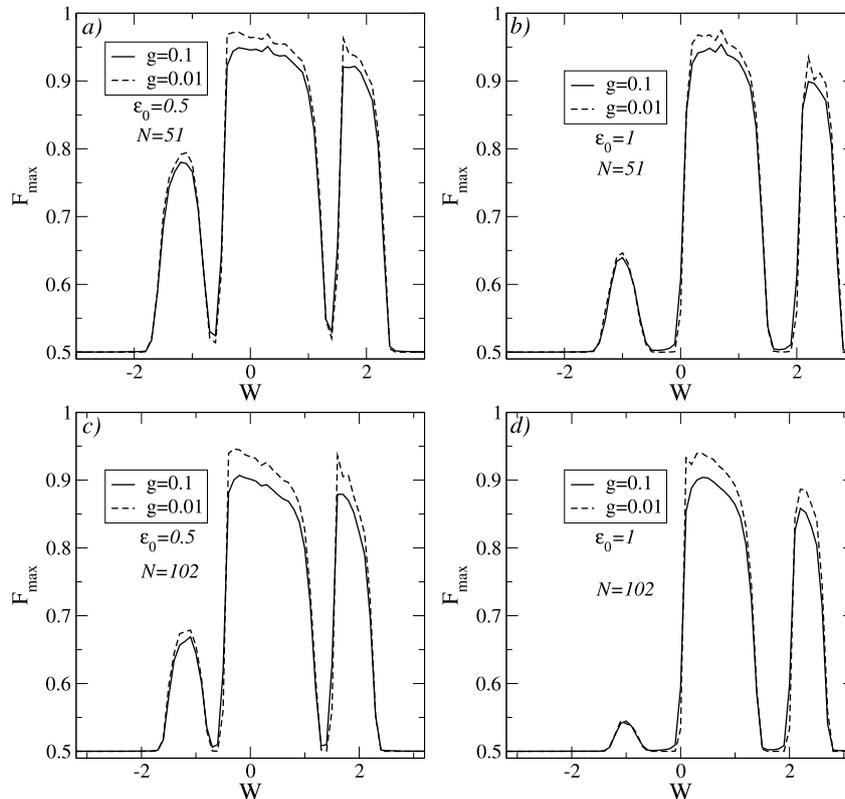
#### 4. Results

We start by showing our results for the maximum achieved fidelity  $F_{\text{max}} = \max\{F(t)\}$  over a fixed time interval  $tJ \in [0, 5 \times 10^5]$  for many distinct disordered samples (Fig. 2). Calculations were done through exact numerical diagonalization of the full Hamiltonian [Eq. (1)]. In each histogram of Fig. 2 we considered different sender/receiver local frequencies  $W$ . We readily note that the fidelity is very sensitive against it. For  $W = 0$  and  $2J$ , the majority of the samples fell around  $F_{\text{max}} \approx 1$  whereas  $W = -1J$  resulted in a well spread distribution. The frequency  $W = 1.6J$  had the poorest transfer quality ( $F_{\text{max}} \approx 1/2$ ).

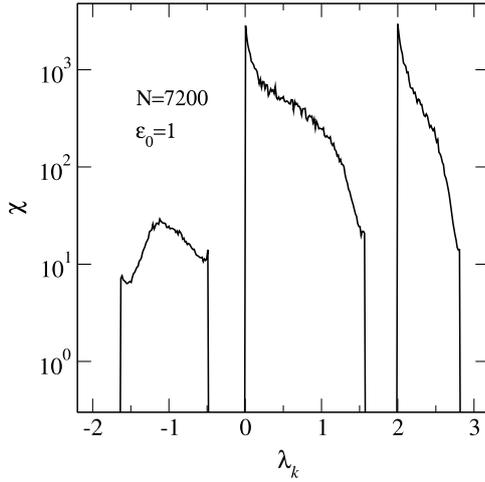
In order to learn more about this dependence of the fidelity over  $W$ , in Fig. 3 we show  $F_{\text{max}}$  averaged over distinct realizations within the same time interval as before, now for two different channel sizes. First, we note that there are two windows of  $W$  for which the transfer quality approaches unit and is weakly sensitive



**Fig. 2.** Normalized probability distribution  $P(F_{\text{max}})$  versus  $F_{\text{max}} = \max\{F(t)\}$  evaluated over the time interval  $tJ \in [0, 5 \times 10^5]$ . Data were obtained from numerical diagonalization of Hamiltonian (1) for  $N = 51$ ,  $g = 0.01J$ ,  $\epsilon_0 = 1J$ , and  $10^4$  distinct disorder realizations.



**Fig. 3.** Maximum fidelity  $F_{\text{max}}$  versus  $W$  (evaluated within  $tJ \in [0, 5 \times 10^5]$ ) averaged over  $10^3$  independent realizations of disorder for  $N = 51, 102$  and  $\epsilon_0 = 0.5J, 1J$ . Data were obtained from the exact numerical diagonalization of the Hamiltonian (1) with  $g = 0.1J$  (solid lines) and  $0.01J$  (dashed lines).



**Fig. 4.** Participation number  $\chi$  versus channel eigenenergy  $\lambda_k$  for  $N = 7200$  sites and  $\epsilon_0 = 1J$  averaged over  $10^3$  disorder realizations. Note that the participation number becomes of the order of the chain size at energies 0 and  $2J$ , signaling the delocalized resonant states. Within the first band,  $\chi$  reaches a maximum of the order of a few dozens of sites.

to the chain size. Moreover, we observe a third (less pronounced) window with high-fidelity centered at negative energies. This is not, however, a robust QST window for it is clearly associated to a finite-size effect, being visibly degraded for larger  $N$ . These aspects can be explained by analyzing the nature of the normal modes of the channel. Based on Ref. [13], chains with diluted disorder similar to the one we are using here feature two resonances within the band of allowed states. These resonances correspond to Bloch states with vanishing amplitude at the disordered sites. The Bloch states have eigenenergies given by  $E_k = \epsilon_0 - 2J \cos k$ , with  $k = 2\pi/\zeta$  and  $\zeta$  being the associated wavelength. In the present case, the resonant ones are  $\zeta = 6$  and  $\zeta = 3$  and thus for, say  $\epsilon_0 = 1J$ , the resonant energies are 0 and  $2J$ , around which it occurs the highest QST fidelity outcomes. In Ref. [13] it was further demonstrated that the Lyapunov exponent is finite for all energies except at those two values. We mention that although we are enforcing some sort of periodicity throughout the channel – for which the above properties hold – by only considering independent segments made up by a disordered site followed by two clean ones (see Fig. 1(a)), if we break it down at the end of the channel, say, by considering  $N = 52$  or  $N = 53$ , the overall behavior would be about the same given we are dealing with small chains.

It is important to highlight that there is a finite region in the vicinity of the resonant energies in which the localization length is extremely pronounced (but finite). This is illustrated in Fig. 4 on which we plot the participation number, given by  $\chi(\lambda_k) = (\sum_j |v_{k,j}|^4)^{-1}$ , versus energy averaged over many disorder realizations for a chain with  $N = 7200$  sites. Notice that the participation number remains quite large for energies above the resonances, thus supporting an efficient QST in the finite energy bands reported in Fig. 3. It also explains the loss of QST efficiency in the first band. When the chain size exceeds a few dozens of sites, it becomes much larger than the localization length in this low-energy band. Therefore, within the context of QST along a finite channel, only modes with large localization length contribute to the high fidelity of the transmission, effectively diminishing the ratio  $|\Delta/J_{\text{eff}}|$  [see Eqs. (5) through (7)].

Back to Fig. 3, we also note that increasing  $N$  will lead to a fidelity decrease over the entire range of  $W$ . This is due to the allocation of more channel modes closer to  $W$  thereby disturbing the reduced subspace  $\{|1\rangle, |N+2\rangle\}$ . This can be solved by further lowering  $g$  at the expense of increasing the QST timescale given  $\tau \sim g^{-2}$  [28,30].

Last, we investigate the creation of pairwise entanglement that occurs during the dynamics of the single-particle transfer from one end to the other. If one prepares  $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$ , and arrange for  $\Delta = h_S - h_R = 0$  in the effective model [Hamiltonian (4)], for instance, we get a fully entangled state of the form

$$\begin{aligned} |\psi(t')\rangle &= \frac{|1\rangle + e^{i\varphi}|N+2\rangle}{\sqrt{2}} \\ &= \left( \frac{|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_{N+2} + e^{i\varphi} |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_{N+2}}{\sqrt{2}} \right) \otimes |\downarrow\rangle_{\text{channel}} \end{aligned} \quad (10)$$

at times  $t' = \tau/2$ .

We formally quantify the end-to-end entanglement by means of the so-called concurrence [32] which in our case (single-particle manifold) is simply [18]

$$C(t) = 2|f_1(t)f_{N+2}^*(t)| = \sqrt{|f_{N+2}(t)|^2 - |f_{N+2}(t)|^4}. \quad (11)$$

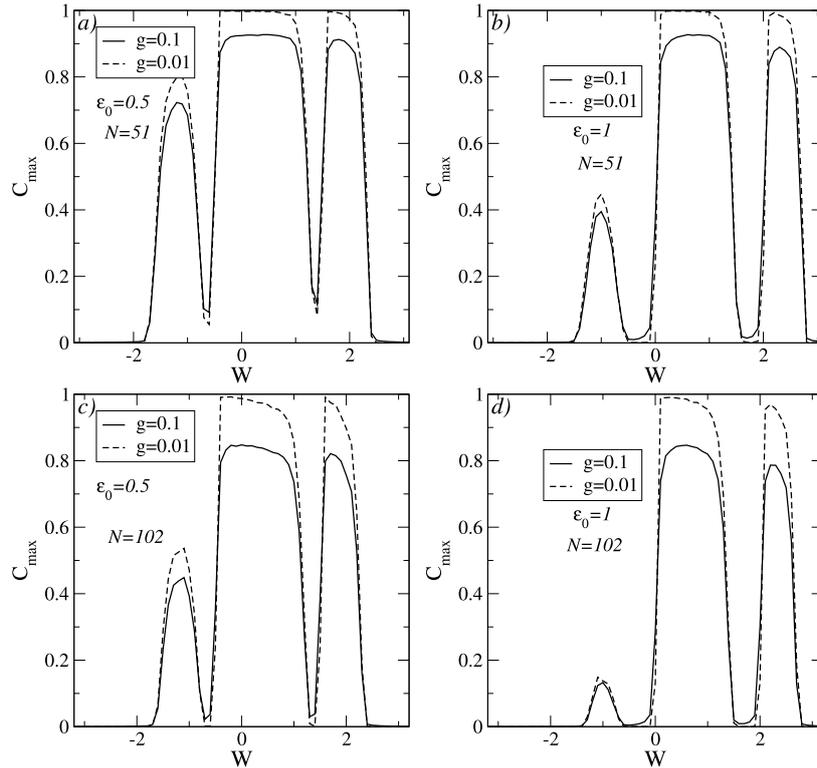
Therefore, in the limit  $g \ll J$  for which the effective Hamiltonian [Eq. (4)] is valid and the transition amplitude can be expressed as in Eq. (9), the concurrence reaches its maximum value  $C = 1$  whenever the occupation probability of the particle to be in site  $N+2$  is  $p_{N+2} \equiv |f_{N+2}(t)|^2 = 1/2$ . By examining Eq. (9) and recalling that  $\Omega = \sqrt{\Delta^2 + 4J_{\text{eff}}^2}$ , when  $|\Delta/J_{\text{eff}}| < 2$  meaning  $p_{N+2}^{(\max)} > 1/2$ , the concurrence will always have two local maximum surrounding the  $p_{N+2}$  peak. When  $|\Delta/J_{\text{eff}}| \geq 2$  ( $p_{N+2}^{(\max)} \leq 1/2$ ), then both quantities reach about their maximum at the same time although the transmission (that is the fidelity) is already insignificant. On the other hand, entanglement remains strong up to  $|\Delta/J_{\text{eff}}| = 2$ , above which the maximum concurrence starts to decrease from  $C = 1$ .

Getting back to the full Hamiltonian [Eq. (1)] featuring small, but finite  $g$ , we now evaluate in the maximum concurrence  $C_{\max} = \max\{C(t)\}$  achieved over the same time interval as in Fig. 3 and plot it against  $W$  in Fig. 5. As we expect from the discussion carried out above, the concurrence is indeed much more reliable against disorder (compare it with Fig. 3). It is worth stressing that in Fig. 5 we have considered the same parameters as in Fig. 3 when investigating the maximum fidelity. Needless to say, the resonance properties of the channel discussed at the beginning of this section applies here as well.

## 5. Summary and conclusions

In summary, we investigated QST and entanglement generation protocols over a 1D chain with weak end couplings featuring a particular kind of noise named diluted disorder, where the random on-site energies are set following a given periodicity. We showed that the existence of special resonances within the energy band of the channel allows for a high-quality realization of the above quantum information tasks even in the presence of disorder.

The overall performance of the channel primarily depends upon inducing an effective, reduced interaction between the outer ends of the chain (setting  $g \ll J$ ) and making sure that there is a proper set of delocalized states around the tuning frequency  $W$ , that ultimately yields  $|\Delta/J_{\text{eff}}| \ll 1$  for the QST protocol or, at least  $|\Delta/J_{\text{eff}}| \leq 2$  for the entanglement generation procedure. In such diluted disorder model, the fidelity of the protocols is enhanced whenever  $W$  matches Bloch-like resonant modes with vanishing amplitude at the disordered sites. It is important to stress that the location of those resonant modes can be tuned by properly tailoring the energy profile in the non-random segments, thus opening the possibility of carrying out efficient quantum communication schemes for any specific frequency associated with the sender and receiver sites.



**Fig. 5.** Maximum concurrence  $C_{\max}$  versus  $W$  (evaluated within  $tJ \in [0, 5 \times 10^5]$ ) averaged over  $10^3$  independent realizations of disorder for  $N = 51, 102$  and  $\epsilon_0 = 0.5J, 1J$ . Data were obtained from exact numerical diagonalization of the Hamiltonian (1) with  $g = 0.1J$  (solid lines) and  $0.01J$  (dashed lines).

## Acknowledgements

This work was partially supported by the Brazilian research agencies CNPq and CAPES, as well as by the Alagoas state research agency FAPEAL.

## References

- [1] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, T.V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42** (1979) 673.
- [2] J.C. Flores, *J. Phys. Condens. Matter* **1** (1989) 8471.
- [3] D.H. Dunlap, H.-L. Wu, P.W. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* **65** (1990) 88; H.-L. Wu, P. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* **66** (1991) 1366; P.W. Phillips, H.-L. Wu, *Science* **252** (1991) 1805.
- [4] S. Gangopadhyay, A.K. Sen, *J. Phys. Condens. Matter* **4** (1992) 3725.
- [5] P.K. Datta, D. Giri, K. Kundu, *Phys. Rev. B* **47** (1993) 10727.
- [6] S.N. Evangelou, D.E. Katsanos, *Phys. Lett. A* **164** (1992) 456.
- [7] F.M. Izrailiev, A.A. Krokhin, N.M. Makarov, *Phys. Rep.* **512** (2012) 125.
- [8] F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* **81** (1998) 3735.
- [9] M. Hilke, *J. Phys. A* **30** (1997) L367.
- [10] F. Domínguez-Adame, I. Gomez, A. Avakyan, D. Sedrakyan, A. Sedrakyan, *Phys. Status Solidi B* **221** (2000) 633.
- [11] E. Lazo, M.E. Onell, *Physica B* **299** (2000) 173; E. Lazo, M.E. Onell, *Phys. Lett. A* **283** (2001) 376.
- [12] S.S. Albuquerque, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, *Physica A* **266** (2005) 465.
- [13] F.A.B.F. de Moura, M.N.B. dos Santos, U.L. Fulco, E. Lazo, M. Onell, M.L. Lyra, *Eur. Phys. J. B* **36** (2003) 81.
- [14] S.S. Albuquerque, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, E. Lazo, *Phys. Lett. A* **355** (2006) 468.
- [15] M. Hilke, *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 226403.
- [16] A.E.B. Costa, F.A.B.F. de Moura, *Eur. Phys. J. B* **80** (2011) 59.
- [17] G.M.A. Almeida, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, *Phys. Lett. A* **382** (2018) 1335.
- [18] G.M.A. Almeida, F.A.B.F. de Moura, T.J.G. Apollaro, M.L. Lyra, *Phys. Rev. A* **96** (2017) 032315.
- [19] G. De Chiara, D. Rossini, S. Montangero, R. Fazio, *Phys. Rev. A* **72** (2005) 012323.
- [20] D. Burgarth, S. Bose, *New J. Phys.* **7** (2005) 135.
- [21] D.I. Tsomokos, M.J. Hartmann, S.F. Huelga, M.B. Plenio, *New J. Phys.* **9** (2007) 79.
- [22] N.Y. Yao, L. Jiang, A.V. Gorshkov, Z.-X. Gong, A. Zhai, L.-M. Duan, M.D. Lukin, *Phys. Rev. Lett.* **106** (2011) 040505.
- [23] A. Zwick, G.A. Álvarez, J. Stolze, O. Osenda, *Phys. Rev. A* **84** (2011) 022311.
- [24] S. Lorenzo, T.J.G. Apollaro, A. Sindona, F. Plastina, *Phys. Rev. A* **87** (2013) 042313.
- [25] S. Ashhab, *Phys. Rev. A* **92** (2015) 062305.
- [26] M.P. Estarellas, I. D'Amico, T.P. Spiller, *Phys. Rev. A* **95** (2017) 042335.
- [27] A. Wójcik, T. Łuczak, P. Kurzyński, A. Grudka, T. Gdala, M. Bednarska, *Phys. Rev. A* **72** (2005) 034303.
- [28] A. Wójcik, T. Łuczak, P. Kurzyński, A. Grudka, T. Gdala, M. Bednarska, *Phys. Rev. A* **75** (2007) 022330.
- [29] G.M.A. Almeida, F. Ciccarello, T.J.G. Apollaro, A.M.C. Souza, *Phys. Rev. A* **93** (2016) 032310.
- [30] G.M.A. Almeida, *Phys. Rev. A* **98** (2018) 012334.
- [31] S. Bose, *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 207901.
- [32] W.K. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998) 2245.