



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

Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada

**TRANSFERÊNCIA DE MÁGNONS EM CADEIAS DE  
HEISENBERG DESORDENADAS**

*Wilma Valeria Pereira de Lima*

Dissertação de Mestrado

Recife - PE

01 de março de 2023

---

# AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar agradeço a Deus por tudo na minha vida.

Agradeço aos meus pais e meu irmão (IN MEMORIAN).

Agradeço aos meus filhos a compreensão pelos momentos que estive ausente, por confiar, acreditar e incentivar no decorrer desta jornada.

Agradeço a FACEPE pelo financiamento da minha pesquisa e ao professor Jonas Lima pela confiança.

Agradeço a banca formada pelo professores Fernando Moraes (UFRPE) e Guilherme Martins (UFAL).

Agradeço ao Professor Anderson que me ensinou a ser persistente e incansável.

Agradeço em especial ao professor Francisco Fidelis pelo desenvolvimento da minha pesquisa e pela incansável dedicação.

Agradeço a todos professores da graduação e pós-graduação.

Agradeço aos colegas da pós-graduação.

Agradeço a todos funcionários e terceirizados desta instituição.

---

# RESUMO

Este trabalho investiga a transferência de mágnon ao longo de uma cadeia de Heisenberg desordenada. Consideramos um modelo que consiste em uma fonte  $S$ , no sítio número um, conectada a um receptor  $R$ , no último sítio, a conexão entre  $S$  e  $R$  é feita usando spins de Heisenberg. Estes sítios internos funcionam como um canal de conexão entre  $S$  e  $R$ . Em nosso modelo, o acoplamento de Heisenberg entre os spins vizinhos dentro no canal são números aleatórios. Além disso, também incluímos um campo magnético externo. Em nosso modelo, o campo magnético também são números aleatórios uniformemente distribuídos. O acoplamento entre os sítios  $S$  e  $R$  e os sítios internos, é um parâmetro chamado  $g$ , que pode ser ajustado. Nossos cálculos foram feitos considerando um desvio de spin no sítio número um e obtendo sua propagação por longos tempos. Nossas análises indicam que para  $g$  muito menor que um e para uma desordem fraca, é possível obter transferência quântica de mágnon do primeiro para o último sítio sempre que as energias diagonais efetivas do primeiro e do último sítio forem próximas ao modo uniforme,  $E = 0$ . Discutimos em detalhes as condições necessárias para manter essa transferência de mágnon. Em particular, obtivemos aproximadamente os valores máximos médios para desordem nos acoplamentos internos e perturbação de campo magnético, que podemos escolher para manter uma boa transferência.

**Palavras-chave:** Transferência de Mágnon. Heisenberg. Campo magnético.

---

# ABSTRACT

This work investigates the magnon transference throughout a disordered Heisenberg chain. We considered a model consisting of a source  $S$ , site number one, connected to a receiver  $R$ , in the last site, using Heisenberg spins. The inner sites work as a channel connecting  $S$  and  $R$ . In our model, the Heisenberg coupling between nearest-neighbor spins at the channel are random numbers. In addition, we also include an external magnetic field. In our model, the magnetic field is also random numbers uniformly distributed. The coupling between the sites  $S$  and  $R$  and the inner sites is a tunable parameter called  $g$ . Our calculations were done by considering a spin deviation at site number one and obtaining its propagation for long times. Our analyzes indicate that for  $g$  much smaller than one e for a weak disorder, it is possible to obtain quantum transfer of magnon from the first to the last site whenever the effective diagonal energies of the first and from the last site are close to the uniform mode,  $E = 0$ . We discuss in detail the necessary conditions to maintain this magnon transfer. In particular, we obtained approximately mean maximum values for disorder in internal couplings and field disturbance magnetic, which we can choose to keep good transfer.

**Keywords:** Magnon transfer. Heisenberg. Magnetic field.

---

# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Modelo Teórico</b>	<b>5</b>
2.1	Mágnons . . . . .	5
2.2	Localização de Anderson . . . . .	12
2.3	Transferências de Estados Quânticos . . . . .	14
2.3.1	Protocolo da TEQ . . . . .	15
<b>3</b>	<b>Metodologia</b>	<b>16</b>
3.1	Diagonalizando o Hamiltoniano de Heisenberg . . . . .	16
3.2	Evolução Temporal . . . . .	22
3.3	Determinação das grandezas físicas . . . . .	24
3.3.1	Fidelidade . . . . .	24
3.3.2	Concorrência . . . . .	30
3.3.3	Participação . . . . .	30
3.3.4	Amplitude total $f_{1N}$ e $f_c$ . . . . .	31
3.3.5	Densidade de Estados (DOS) . . . . .	32
3.3.6	Entropia de Shannon . . . . .	33

3.3.7	R . . . . .	34
<b>4</b>	<b>Resultados</b>	<b>35</b>
4.1	Topologia e propriedades do canal . . . . .	36
4.1.1	Estudo dos estados quânticos do canal . . . . .	37
4.2	Experimento de transferência de estados quânticos . . . . .	41
4.2.1	A dependência da TEQ com o tamanho $L$ do Canal . . . . .	42
4.2.2	Análise da TEQ através das grandezas Fidelidade e Concorrência $\times$ Energia . . . . .	44
4.2.3	A dependência da transferência de estados quânticos com o parâmetro $g$	45
<b>5</b>	<b>Conclusões e Perspectivas</b>	<b>50</b>
	<b>Referências</b>	<b>55</b>

---

# LISTA DE FIGURAS

1.1	Número de transistores em um processador em função do tempo. Segundo a Lei de Moore a cada 18 a 24 meses é lançada uma nova tecnologia que permite que os computadores dupliquem o desempenho. . . . .	2
1.2	Canal unidimensional com $N-2$ átomos mais acoplamentos ( $S$ e $R$ ), formando uma cadeia de $N$ átomos, onde $n = 1$ é a fonte $S$ e $n = N$ o receptor $R$ . . . .	3
2.1	(a) Estado fundamental de um ferromagneto e (b) Possível estado excitado.	8
2.2	(Acima) Ondas de spin, excitações elementares de baixa energia. (Abaixo) Vista superior de uma onda de propagação de spin. . . . .	10
2.3	Duas barreiras de potencial. . . . .	13
2.4	(a) Cadeia de spin no estado fundamental na presença de um campo magnético, com Alice e Bob nos extremos da cadeia. (b) Uma transmissão quântica arbitrária em uma cadeia com canal $N$ , onde $1, 2, 3, \dots, N$ representam o número de spins, $s$ (fonte ou transmissor) é o spin mais próximo de Alice e $r$ (receptor) o spin mais próximo de Bob. Logo esta cadeia possui $N + 2$ spins.	14
3.1	Representação de um estado <i>qubit</i> , $ \psi\rangle = \alpha 0\rangle + \beta 1\rangle$ , na esfera de Bloch. .	27
3.2	Representação do estado estendido . . . . .	33
3.3	Representação do estado localizado . . . . .	34



4.1	Canal unidimensional contendo $L = N - 2$ spins de Heisenberg com acoplamento spin-spin. . . . .	36
4.2	Densidade de estados, Entropia de Shannon e $R \times$ Energia para $w_j = 0.25$ e $w_h = 0.1$ . . . . .	37
4.3	Densidade de estados, Entropia de Shannon e $R \times$ Energia para $w_j = 0.25$ e $w_h = 0.2$ . . . . .	38
4.4	Densidade de estados, Entropia de Shannon e $R \times$ Energia para $w_j = 0.5$ e $w_h = 0.1$ . . . . .	39
4.5	Densidade de estados, Entropia de Shannon e $R \times$ Energia para $w_j = 0.5$ e $w_h = 0.2$ . . . . .	40
4.6	Densidade de estados, Entropia de Shannon e $R \times$ Energia para $w_j = 0.75$ e $w_h = 0.1$ . . . . .	41
4.7	Densidade de estados, Entropia de Shannon e $R \times$ Energia para $w_j = 0.75$ e $w_h = 0.2$ . . . . .	42
4.8	Gráfico da Fidelidade e Concorrência $\times L$ para energia $E = 0.25$ . . . . .	43
4.9	Gráfico da Fidelidade e Concorrência $\times N$ para energia $E = 0.5$ . . . . .	44
4.10	Fidelidade e Concorrência $\times E$ . . . . .	45
4.11	Fidelidade e Concorrência $\times g$ para $E = 0.25$ . . . . .	46
4.12	Participação, $f_{1N}$ e $f_c \times g$ para $E = 0.25$ . . . . .	47
4.13	Fidelidade e Concorrência $\times g$ para $E = 0.5$ . . . . .	48
4.14	Participação, $f_{1N}$ e $f_c \times g$ para $E = 0.5$ . . . . .	49

---

---

# CAPÍTULO 1

---

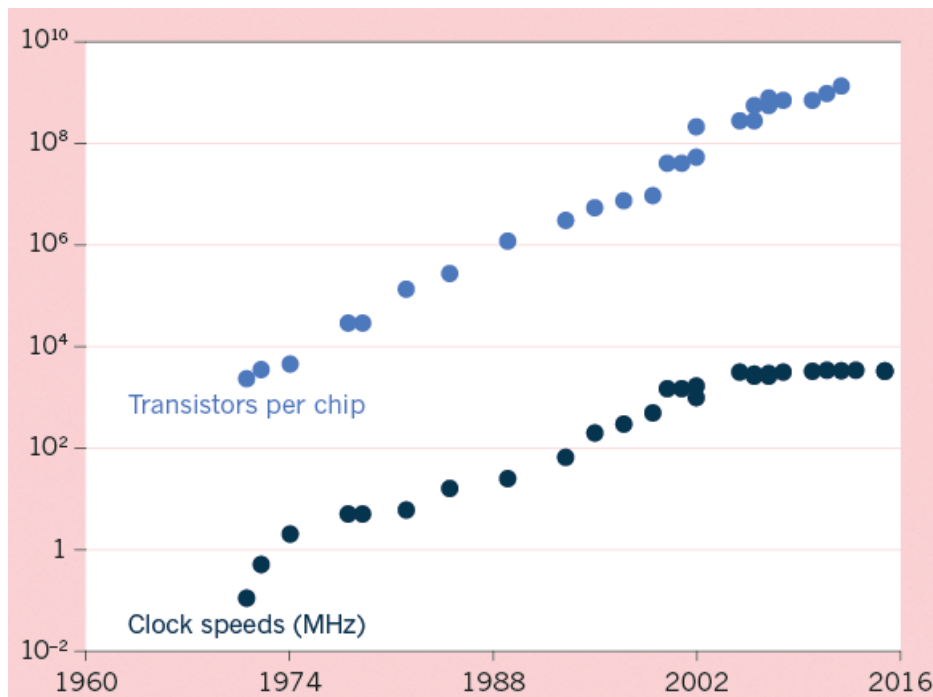
## INTRODUÇÃO

Em informática, sendo mais específica, quando se tratando de computadores, o sistema é organizado como entrada  $\Rightarrow$  processamento  $\Rightarrow$  saída. A entrada é onde os dados são introduzidos no computador, o processamento é a maneira pela qual os dados são organizados, modificados, agrupadas gerando assim a informação de saída, e a saída são os dispositivos através dos quais são geradas as informações resultantes do processamento.

A parte mais importante de um computador é a unidade central de processamento (CPU) conhecida como processador. Ele funciona como um cérebro realizando diversas funções, interpretado e conectando programas, bem como possibilitando a interação do usuário com a máquina. A característica de um bom processador é o seu poder de executar várias tarefas de maneira simultânea, isto está relacionado com o número de núcleos que ele possui. Os primeiros processadores contavam com apenas um núcleo, hoje os computadores de alta performance podem ter até 32 núcleos de processamento. Outra coisa muito importante é a sua velocidade de processar as informações, uma máquina veloz possui um clock de 3,2 GHz, isto significa que ela pode realizar bilhões de ciclos de operações em segundos. A CPU é a parte mais importante, mas sozinha é como um cérebro sem corpo, ela depende do conjunto: fonte, placa de vídeo, memória e outros componentes para funcionar. Então, o que queremos é que este conjunto, o qual chamamos de computador, possua uma alta performance, alta

velocidade e que seja compacto e robusto.

Figura 1.1: Número de transistores em um processador em função do tempo. Segundo a Lei de Moore a cada 18 a 24 meses é lançada uma nova tecnologia que permite que os computadores dupliquem o desempenho.



Fonte: [1]

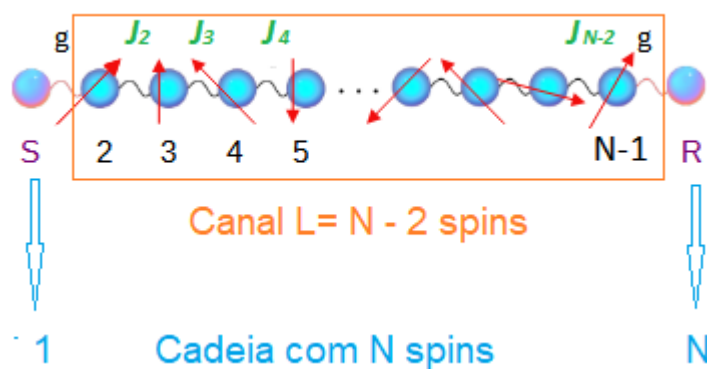
O que a eletrônica tem tentado é desenvolver computadores menores e mais rápidos. Para isso, componentes eletrônicos como circuitos integrados estão sempre passando por reduções de tamanho. Gordon Earle Moore, cofundador da INTEL, publicou o artigo *Cramming More Components onto Integrated Circuits* em 1965 [2], onde defendia a miniaturização de circuitos integrados, com inserção de mais componentes, de modo a viabilizar o desenvolvimento de computadores menores e mais eficientes. De acordo com a Lei de Moore <sup>1</sup> "A cada 18 a 24 meses é lançada uma nova tecnologia que permite que os computadores dupliquem o desempenho" figura (1.1).

Porém a Lei de Moore está caindo em desuso, devido a dificuldade de criar computadores menores e mais rápidos. Além do mais, o aumento na velocidade do processamento

<sup>1</sup>Na verdade não é uma lei e sim uma observação.

acarretaria num maior consumo de energia e dissipação de calor [1]. Para resolver estes problemas muitos grupos de pesquisa ao redor do mundo [3] e grandes empresas como Airbus, IBM, INTEL, NOKIA e outras, têm feitos grandes investimento na computação quântica.

Figura 1.2: Canal unidimensional com  $N - 2$  átomos mais acoplamentos ( $S$  e  $R$ ), formando uma cadeia de  $N$  átomos, onde  $n = 1$  é a fonte  $S$  e  $n = N$  o receptor  $R$ .



Fonte: Elaborada pela autora.

Os computadores quânticos utilizam-se dos princípios da mecânica quântica como superposição e interferência. Então, entende-se como computadores quânticos qualquer dispositivo que processa informações utilizando-se de sistemas físicos quânticos. A principal diferença entre os computadores clássicos e os quânticos está na unidade básica de informação. Os computadores clássicos utilizam o *bit*, que pode assumir os valores 0 ou 1, enquanto os quânticos utilizam o *bit quântico* ou *qubit*, que pode assumir o valor de 0, 1 ou uma *sobreposição de ambos* [4].

Assim como os computadores clássicos os quânticos necessitam de um protocolo de comunicação, fazendo com que a informação saia do ponto de origem e chegue ao seu destino. Existem dois protocolos de comunicações: o *Teletransporte Quântico* e a *Transferência de Estados Quânticos (TEQ)*. E foi este último protocolo que utilizamos em nossa pesquisa.

Esta dissertação apresenta um modelo para transmissão de mágnons em cadeia desordenada de Heisenberg considerando o estado fundamental ferromagnético, conforme a figura (1.2). O modelo é constituído de um spin fonte ( $S$ ) e um spin receptor ( $R$ ) fracamente conectados a um canal com  $L = N - 2$  spins. Este canal possui uma perturbação nos termos

de *hopping* para simular as imperfeições de um sólido e perturbação no campo magnético. Investigamos a viabilidade do canal em questão, com foco na transmissão da informação quântica.

Este trabalho está dividido em quatro capítulos:

No *Capítulo 2* apresentamos o modelo teórico, onde encontra-se a descrição dos principais conceitos nos quais a dissertação foi fundamentada.

No *Capítulo 3* apresentamos os cálculos numéricos do modelo de Heisenberg, a evolução temporal do estado quântico, as definições e cálculos das grandezas que usamos para estudar a transferência de estado e a viabilidade do canal.

Os resultados encontram-se no *Capítulo 4*, onde estudamos um canal para identificar se este era viável ou não para transferência de estados quânticos (*TEQ*). Também, fizemos a evolução temporal do estado quântico, a fim de observarmos qual seria o melhor tamanho do canal para o nosso modelo. Ainda nesta seção analisamos a *TEQ* através de medidas como fidelidade, concorrência, participação e outras [5–10].

No *Capítulo 5* apresentamos as conclusões e perspectivas.

---

---

# CAPÍTULO 2

---

## MODELO TEÓRICO

### 2.1 Mágns

Todas as partículas como elétrons, prótons, nêutrons, fótons, partículas alfa, possuem momento angular e associado a este um número quântico chamado de spin, que é uma propriedade intrínseca de cada partícula [11], assim como a massa e a carga. Tomemos como exemplo o elétron, que independentemente de ser uma partícula livre ou está ligado a um átomo, possui spin  $\frac{1}{2}$ .

A posição de equilíbrio de um spin num campo magnético  $\vec{H}$  é a direção paralela ao campo. Isto se deve ao fato de que o torque que o campo exerce sobre o momento magnético  $\vec{\mu} = g\mu_B\vec{S}$ , associado ao spin,

$$\tau = \vec{\mu} \times \vec{H} = g\mu_B\vec{S} \times \vec{H} \quad (2.1)$$

é nulo nesta posição. Esta posição também corresponde ao mínimo da energia do momento magnético no campo,

$$E = \vec{\mu} \cdot \vec{H} = g\mu_B\vec{S} \cdot \vec{H} \quad (2.2)$$

onde  $\mu_B$  é o magneton de Bohr e  $g$  o fator adimensional chamado “razão giromagnética”.

Agora imaginemos um determinado material que seja submetido a um campo magnético  $\vec{H}$ . De acordo com a *Lei de Lenz*, ao ligarmos este campo, pequenas correntes surgem nos átomos do material gerando um campo magnético oposto ao campo  $\vec{H}$  aplicado. Este material pode responder de diferentes formas na presença de um campo magnético externo e esta resposta vem na forma do alinhamento magnético e da susceptibilidade magnética.

Se os momentos magnéticos induzidos se opõem a  $\vec{H}$ , temos um material diamagnético e sua susceptibilidade magnética  $\chi$  possui um valor negativo. Quando os momentos tentam alinhar-se, mas nem todos conseguem, temos um material paramagnético e  $\chi$  varia com o inverso da temperatura, conforme a *Lei de Curie* [12, 13]. Então os materiais paramagnéticos podem ser explicados por um modelo onde o spins encontram-se na presença de um campo magnético externo, porém este modelo é incapaz de explicar os sólidos cristalinos ferromagnéticos [14]. Isto porque estes materiais mantém o ordenamento dos momentos magnéticos na ausência de um campo magnético externo. Eles permanecem magnetizados mesmo a altas temperaturas, até o limite da temperatura de *Curie* ( $T_c$ ), acima delas estes materiais tornam-se paramagnéticos. Apenas como exemplo, o Ferro possui uma temperatura  $T_c = 770^\circ C$ .

Para explicar o ordenamento ferromagnético a altas temperaturas, em 1928 *Werner Heisenberg* propôs um modelo baseado em argumentos quânticos. Para iniciar o nosso estudo vamos considerar o modelo de dois elétrons interagindo entre si através de um potencial coulombiano dado por

$$U_{(r_1, r_2)} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}, \quad (2.3)$$

onde a distância entre os dois elétrons é  $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ .

Como a função de onda depende da interação dos elétrons, podemos escrever a função de onda do sistema como uma combinação linear das funções de onda dos dois elétrons isoladamente como

$$\Psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) \pm \psi_a(r_2)\psi_b(r_1)]. \quad (2.4)$$

Agora vamos calcular a energia média usando as funções de onda espaciais, que são combinações simétricas e anti-simétricas. Como a interação independe do spin, precisamos apenas

da parte espacial da função de onda. Então o valor esperado do potencial  $\langle U \rangle$  é

$$\langle U \rangle = \int \Psi_{\pm}^* U \Psi_{\pm} d^3 r_1 d^3 r_2. \quad (2.5)$$

Substituindo 2.3, 2.4 em 2.5 temos

$$\begin{aligned} \langle U \rangle &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \left[ \int \psi_a^*(r_1) \psi_b^*(r_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(r_1) \psi_b(r_2) d_{r_1}^3 d_{r_2}^3 \right. \\ &\quad \pm \int \psi_a^*(r_1) \psi_b^*(r_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(r_2) \psi_b(r_1) d_{r_1}^3 d_{r_2}^3 \\ &\quad + \int \psi_a^*(r_1) \psi_b^*(r_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(r_1) \psi_b(r_2) d_{r_1}^3 d_{r_2}^3 \\ &\quad \left. \pm \int \psi_a^*(r_1) \psi_b^*(r_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(r_2) \psi_b(r_1) d_{r_1}^3 d_{r_2}^3 \right]. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Por se tratar de dois elétrons, ou seja, duas partículas idênticas, podemos reescrever a equação 2.6 como

$$\begin{aligned} \langle U \rangle &= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} 2 \left[ \int \psi_a^*(r_1) \psi_b^*(r_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(r_1) \psi_b(r_2) d_{r_1}^3 d_{r_2}^3 \right. \\ &\quad \left. \pm \int \psi_a^*(r_1) \psi_b^*(r_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(r_2) \psi_b(r_1) d_{r_1}^3 d_{r_2}^3 \right]. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Na equação 2.7 temos dois termos, o primeiro termo representa a energia coulombiana média do sistema que denotaremos por  $E$  e o segundo termo a interação de troca ou *exchange* que denotaremos por  $J_{TROCA}$ . Então

$$E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \psi_a^*(r_1) \psi_b^*(r_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(r_1) \psi_b(r_2) d_{r_1}^3 d_{r_2}^3, \quad (2.8)$$

e

$$J_{TROCA} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \psi_a^*(r_1) \psi_b^*(r_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(r_2) \psi_b(r_1) d_{r_1}^3 d_{r_2}^3. \quad (2.9)$$

Desta forma, podemos escrever o valor esperado da equação (2.7) como sendo

$$\langle U \rangle = E \pm J_{TROCA}. \quad (2.10)$$

A energia  $E$  seria o único termo presente se o princípio da exclusão de Pauli não tivesse sido levado em conta. Este princípio impõe sobre a função de onda do par, o termo  $J_{TROCA}$ . O sinal ( $\pm$ ) da equação (2.11) será negativo ou positivo dependendo do estado dos spins, ou seja, se ele é um singlete ou tripleto. No que diz respeito a álgebra dos momentos angulares para 2 spins -  $\frac{1}{2}$ , temos 4 estados caracterizados pelo seu spin total  $S$ :



$$S = 0 \implies \textit{Singlete} \quad H|\Phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

e

$$S = \hbar \implies \textit{Triplete} \quad H|\Phi_1\rangle = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \end{cases}$$

Embora a energia  $E$  de interação entre dos elétrons não dependa do spin, a energia média  $\langle U \rangle$  dependerá. Então podemos escrever  $\langle U \rangle$  em termos das variáveis de spin como

$$\langle U \rangle = E \pm 4J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (2.11)$$

Se os spins forem paralelos,  $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = +\frac{1}{4}$ , a função espacial será anti-simétrica, porém se os spins forem antiparalelos,  $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = -\frac{1}{4}$ , a função espacial será simétrica.

Figura 2.1: (a) Estado fundamental de um ferromagneto e (b) Possível estado excitado.



Heisenberg foi o primeiro a observar a importância da energia de troca para explicar o comportamento dos materiais ferromagnéticos [15]. Ele escreveu o hamiltoniano de troca como sendo

$$\mathcal{H}_{TROCA} = -J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (2.12)$$

O modelo de Heisenberg assume que o ordenamento magnético encontrado nos cristais vem da interação de troca (*exchange*) entre os elétrons situados no sítio da rede, em concordância com o resultado do estudo de Paul Dirac [16] (*exchange*, como resultado da interação eletrotática entre as partículas). Estes resultados foram descobertos de maneira simultânea e independente por Dirac e Heisenberg em 1928.

Se considerarmos  $N$  elétrons localizados em  $N$  sítios da rede, o hamiltoniano efetivo para o sistema e é escrito na forma [17]

$$\mathcal{H} = - \sum_{i < j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.13)$$

onde  $S$  são os spins dos elétrons e  $J_{i,j}$  a energia de troca ou *exchange*.

O termo *efetivo*, deve-se ao fato de termos uma interação coulombiana modificada pelo efeito quântico de troca. Porém consideramos como se fosse uma interação spin-spin, onde  $J_{ij} = J_{TROCA}$  é denominada energia de troca ou *exchange* de dois elétrons no estado  $i$  e  $j$ , respectivamente. Então os singletos (spins antiparalelos) e tripleto (spins paralelos) possuem energias diferentes e o estado fundamental depende do sinal de  $J_{ij}$ . Quando  $J_{ij} > 0$ , o estado fundamental é tripleto (ferromagnetismo), e quando  $J_{ij} < 0$ , o estado fundamental é singlete (antiferromagnetismo) [18]. Intuitivamente esperamos que o estado tripleto tenha mais baixa energia ( $J > 0$ ), porque dois elétrons com spins paralelos não podem ficar no mesmo sítio, ao contrário do estado singlete. O estado tripleto minimiza a energia de repulsão coulombiana.

Agora imaginemos um material ferromagnético onde os spins estão acoplados por meio de interações de troca (*exchange*) figura (2.1a). Quando houver excitações na cadeia de spins teremos uma precessões coletiva em torno de sua posição de equilíbrio, figura (2.1b). Se a excitação for de menor energia, teremos um modo uniforme onde todos os spins precessionam em torno de  $\vec{H}$ , mantendo-se uns paralelos aos outros, ou seja, em fase. Porém quando a fase de precessão variar no espaço teremos as *ondas de spins* figura (2.2). Logo define-se ondas de spins como excitações elementares de um sistema magnético [19, 20]. Essas ondas são quantizadas e seu quantum, chamados de *mágnons* [21].

Excitações elementares do sistema de spins, ou magnos, podem ser exemplificada através da interação entre dois spins  $\vec{S}_1$  e  $\vec{S}_2$  que interagem de acordo com a equação de Heisenberg:

$$\mathcal{H} = -J_0 \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2. \quad (2.14)$$

Esta interação pode ser estudada através do cálculo da variação temporal das componentes de qualquer um dos spins [22], por exemplo sobre  $S_{1x}$ ,  $S_{1y}$  e  $S_{1z}$  usando a equação de Heisenberg.

Das relações de comutação temos que

$$1\hbar\dot{S}_{1x} = [S_{1x}, \mathcal{H}]; \quad 1\hbar\dot{S}_{1y} = [S_{1y}, \mathcal{H}]; \quad 1\hbar\dot{S}_{1z} = [S_{1z}, \mathcal{H}]; \quad (2.15)$$

onde

$$[S_{1x}, S_{1y}] = iS. \quad (2.16)$$

Das equações (2.14), (2.15) e (2.16) obtemos que

$$\dot{S}_{1x} = \frac{J_0}{\hbar}(S_{1y}S_{2z} - S_{1z}S_{2y}), \quad (2.17)$$

$$\dot{S}_{1y} = \frac{J_0}{\hbar}(S_{1z}S_{2x} - S_{1x}S_{2z}), \quad (2.18)$$

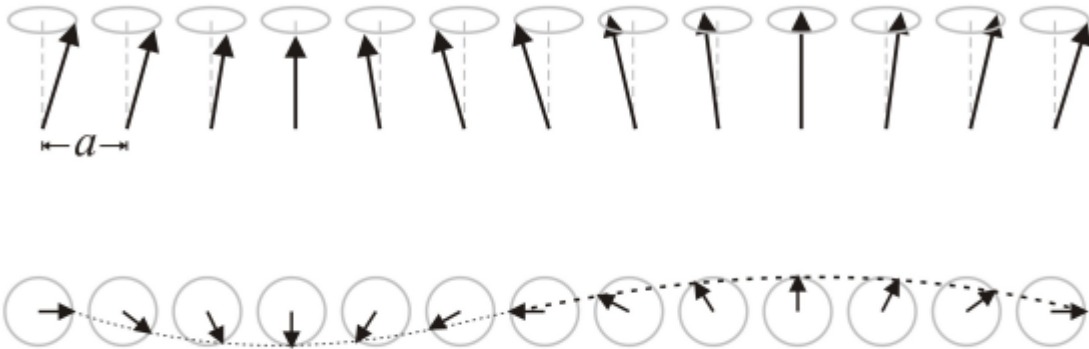
$$\dot{S}_{1z} = \frac{J_0}{\hbar}(S_{1x}S_{2y} - S_{1y}S_{2x}), \quad (2.19)$$

que podem ser reescritas como

$$\dot{\vec{S}}_1 = \vec{S}_1 \times \left( \frac{J_0}{\hbar} \vec{S}_2 \right). \quad (2.20)$$

Esta equação possui a mesma forma do movimento de um momento magnético na presença de um campo magnético  $\vec{B} = \frac{J_0}{\hbar} \vec{S}_2$ .

Figura 2.2: (Acima) Ondas de spin, excitações elementares de baixa energia. (Abaixo) Vista superior de uma onda de propagação de spin.



Podemos analisar as excitações em uma rede cristalina, onde em cada sítio há um spin interagindo com seus vizinhos e com o campo magnético externo  $\vec{B} = B_0\hat{z}$ , através do hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} J_0 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - g\mu_B B_0 \sum_i S_{iz}, \quad (2.21)$$

onde  $S_i$  é o spin no sítio  $i$  da rede,  $S_j$  é o spin de um primeiro vizinho de  $i$  e  $S_{iz}$  é a componente  $z$  do spin  $i$ . O primeiro termo é a interação de troca dos spins e seus primeiros vizinhos e o segundo a interação dos spins e o campo magnético.

Com base no que descrito acima, vamos analisar o modelo onde temos uma cadeia desordenada de Heisenberg. Consideramos o estado fundamental ferromagnético em que cada spin no sítio interage via *exchange* com seus primeiros vizinhos na presença de um campo magnético externo  $\vec{h}_n = h_n \hat{k}$ , onde  $h_n$  é o valor do campo no  $n$ -ésimo spin da rede. Neste formalismo estamos considerando que cada spin está submetido a um campo diferente, este é o formalismo do chamado *campo aleatório*, onde cada região do material está submetida a um campo distinto. Este tipo de formalismo é bem poderoso pois consegue recuperar elementos bem próximos daqueles que de fato acontecem em materiais magnéticos. Desta maneira, o valor do campo sobre cada spin será então considerado um número aleatório. A energia de interação de um dado spin com a componente de campo  $h_n$  é então dada por  $H_n = g\mu_B h_n$  [23]. Assim, a quantidade  $H_n$  tem status de energia de interação local entre o spin da posição  $n$  e o campo magnético  $h_n$ . Em um contexto mais amplo, parametrizando as constantes  $g$  e  $\mu_B$  como adimensionais podemos chamar  $H_n$  de campo magnético efetivo. Entretanto, faz-se importante mencionar que, na verdade, se trata de uma energia efetiva de interação entre o campo  $h_n$  e o spin na posição  $n$ . Fazendo  $i = n$  e  $j = n + 1$  podemos escrever o hamiltoniano como

$$\mathcal{H} = - \sum_n (J_{n,n+1} S_n S_{n+1} + H_n S_n). \quad (2.22)$$

Em resumo, o hamiltoniano acima é a descrição matemática de nosso modelo, representado na figura (1.2). Em linhas gerais vamos fazer experimentos de transferência de mágnons entre as posições  $n = 1$  e  $n = N$ . Salientamos que  $n = 1$  funcionará como uma fonte (ponto de partida para o estado quântico inicial). Enquanto o sítio  $n = N$  será um receptor, o estado quântico que foi inicialmente colocado em  $n = 1$  deve ser transferido para  $n = N$  completamente.

A transferência de estados entre os sítios  $n = 1$  e  $n = N$  pode ser aferida através de diversas funções que medem a fidelidade da transferência ou o nível de emaranhamento entre os sítios  $n = 1$  e  $n = N$ . Em nosso estudo vamos considerar um modelo com termo de

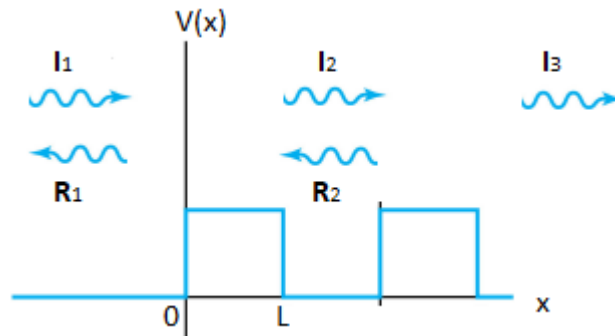
*exchange* dentro do canal aleatório seguindo a relação  $J_n = w_j r_n + \langle J \rangle$  para  $n = 2, \dots, N - 2$ , onde  $r_n$  são números aleatórios uniformemente distribuídos no intervalo  $[-0.5, 0.5]$ . A quantidade  $\langle J \rangle$  é o valor médio de  $J_n$  e será nossa escala de energia. Neste estudo vamos parametrizar este valor como sendo  $\langle J \rangle = 1$ . Salientamos que além deste termo temos também o termo de energia de interação entre os spins e o campo  $h_n$ . Este valor de energia será dado por  $H_n = w_h z_n$  onde  $z_n$  são número aleatórios uniformemente distribuídos na região de  $[-0.5, 0.5]$ . Salientamos que em nosso modelo a desordem do canal é não correlacionada. Os sítios da extremidade são sítios especiais. O acoplamento entre os spins das posições  $n = 1$  e  $n = N$  com o canal será dado por  $g$ , veja figura (1.2). A energia de interação do campo com as extremidades também terá valores especiais. Vamos ajustar a energia de interação com campo  $H_1$  e  $H_N$  de maneira tal que o termo efetivo diagonal do Hamiltoniano será constante e igual a  $E_0$ . Iremos apresentar a descrição detalhada da representação matricial do Hamiltoniano e assim explicar com mais detalhes estes termos nos capítulos seguintes.

## 2.2 Localização de Anderson

Em sistema com invariância translacional (sistemas sem desordem como os sólidos cristalinos perfeitos) as excitações coletivas como elétrons, mágnons e fônons são descritas como funções de ondas estendidas por todo sistema. Porém quando se trata de sólidos reais ou mesmo os produzidos em laboratórios este tipo de modelagem não se aplica devido as imperfeições do sólido

Em 1958, Philip Warren Anderson elaborou um modelo [24] que levava em conta as impurezas e defeitos da rede cristalina na condução elétrica. Anderson descobriu que estas impurezas e defeitos provocariam uma desordem na rede. Se esta desordem fosse suficientemente forte, os elétrons seriam incapazes de se moverem e ficariam presos a átomos específicos. Com isso, não haveria formação de corrente elétrica, o que explicando a transições metal-isolante.

Figura 2.3: Duas barreiras de potencial.



Fonte: Elaborada pela autora.

Antes de discutir os efeitos da desordem [25], vamos primeiro analisar o caso sem desordem. Considere inicialmente um elétron livre na presença de uma barreira de potencial, figura 2.3. Quando a onda incidente  $I_1$  incidir na barreira, parte da onda será transmitida  $I_2$  e parte será refletida  $R_1$ . Agora adicionamos mais uma barreira, o fenômeno descrito anteriormente se repete, porém a segunda onda incidente  $I_2$  irá se encontrar com a segunda onda refletida  $R_2$ , ocorrendo uma interferência, que pode ser destrutiva dependendo da diferença de fases das ondas, isso quer dizer que elas podem mudar muito o padrão da onda.

Agora imaginemos um potencial aleatório, representado por barreiras com intensidades e posições aleatórias, neste caso as reflexões sofridas pela função de onda não mantêm a coerência de fase causando interferências destrutivas, as quais induzem uma localização exponencial da função de onda. Assim, a partícula fica localizada a medida que o envelope da função de onda decai exponencialmente, ou seja, a probabilidade de se encontrar um elétron de uma distância  $r$  do centro da função de onda é dada por

$$|\Psi(r)| = e^{-r/\xi},$$

onde  $\xi$  é o comprimento da localização. Esta é a fase conhecida como isolante, no caso contrário, onde o elétron viaja pelo material e a função de onda está estendida por todo material, temos a fase metálica.

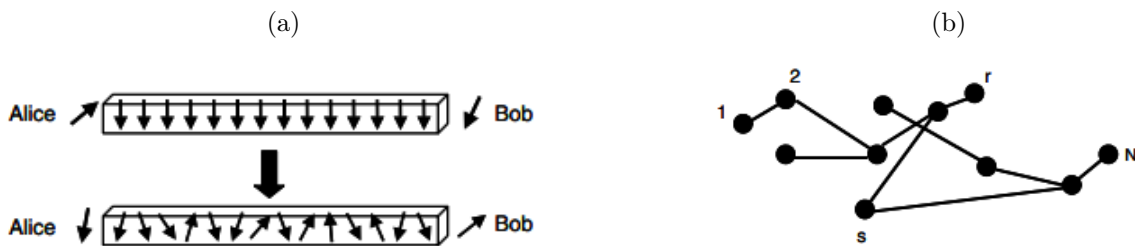
Anderson mostrou a dependência entre os estados eletrônicos e o grau de desordem do sistema [26, 27]. Se o sistema possui um grau de desordem fraco, seu comportamento

é metálico, se o grau de desordem for forte, então temos um isolante, porém se o grau for intermediário, seu comportamento é metal-isolante. Existem vários tipos de medidas que caracterizam um sistema como metálico (estendido) ou isolante (localizado), como a participação, densidade de estados (DOS) entre outras descritas na seção 3.3.

## 2.3 Transferências de Estados Quânticos

Sougato Bose, professor de Física da *University College London*, foi o primeiro a propôr a transferência de estados quânticos (*TEQ*) no artigo *Quantum Communication through an Unmodulated Spin Chain* [28]. Neste trabalho, Bose propõe usar uma cadeia de spin como um canal para comunicação quântica a curta distância. Mais especificamente, ele colocou um estado quântico em um spin da cadeia com o objetivo de enviar este estado a um spin distante, com alguma fidelidade, após um determinado tempo. Em seu estudo, Bose verificou que um qubit pode ser transferido com alta fidelidade após um tempo longo.

Figura 2.4: (a) Cadeia de spin no estado fundamental na presença de um campo magnético, com Alice e Bob nos extremos da cadeia. (b) Uma transmissão quântica arbitrária em uma cadeia com canal  $N$ , onde  $1, 2, 3, \dots, N$  representam o número de spins,  $s$  (fonte ou transmissor) é o spin mais próximo de Alice e  $r$  (receptor) o spin mais próximo de Bob. Logo esta cadeia possui  $N + 2$  spins.



Fonte: [28].

Em seu artigo Bose utiliza uma cadeia de spin unidimensional, que pode ser um ímã 1D real ou simulado, como canal para transmissão a curta distância. Este trabalho foi o marco para uma série de outros trabalhos sobre *TEQ* utilizando uma cadeia de spin e o modelo

de Heisenberg. A transferência é realizada com a evolução temporal do estado quântico de acordo com o hamiltoniano escolhido. Para explicar como acontece a *TEQ*, usaremos o mesmo protocolo apresentado pelo físico em seu artigo.

### 2.3.1 Protocolo da TEQ

O hamiltoniano descrito por Bose na equação 2.23, descreve o sistema apresentado na figura (2.4b), um gráfico arbitrário que possa realizar a transmissão quântica utilizando o seu protocolo.

$$H_G = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{\sigma}^i \cdot \vec{\sigma}^j - \sum_{i=1}^N \vec{B}_i \vec{\sigma}_z^i, \quad (2.23)$$

Protocolo de Bose:

onde  $\vec{\sigma}^i = (\vec{\sigma}_x^i, \vec{\sigma}_y^i, \vec{\sigma}_z^i)$  são as matrizes de Pauli,  $J_{ij}$  é o termo de interação entre os spins vizinhos e  $\vec{B}_i$  os campos magnéticos estáticos que se aplica localmente em cada spin.

1. Inicialmente temos uma cadeia de spins no estado fundamental na presença de um campo magnético ( $\vec{B}$ ). Para garantir que todos os spins estejam no estado fundamental (spins alinhados ao longo na direção  $-z$ ), faz-se necessário reduzir a temperatura do sistema até que todos atinjam o estado *down*. Neste estado a cadeia é representado por  $|0\rangle_c = |0\rangle_1 |0\rangle_2 \dots |0\rangle_i \dots |0\rangle_N$ , como representado na figura (2.4a).

2. Nas extremidades da cadeia encontram-se Alice e Bob. Alice prepara um spin no estado quântico que deseja transmitir e coloca no spin **S** mais próximo dela, ou seja, ela dá um giro no spin. Descrevendo tecnicamente, é introduzido uma classe de estados dada por  $|\mathbf{j}\rangle = |00\dots 010\dots 0\rangle$ , onde  $\mathbf{j} = \mathbf{1}, \mathbf{2}, \dots, \mathbf{s}, \dots, \mathbf{r}, \dots, \mathbf{N}$ , no qual o spin no sítio  $j_n$  foi alterado para o estado  $|1\rangle$ ;

4. Após um tempo razoável, o estado preparado por Alice viaja para o spin receptor **R**;

5. Bob pega o spin no receptor **R**, para obter o estado que Alice deseja transferir.

A figura (2.4b) mostra que os spins do canal estão fracamente acoplados com **S** e **R**, então a princípio podemos ter qualquer arranjo no canal, que pode ser simulado através de uma desordem.

Os cálculos do Protocolo da *TEQ*, encontra-se na subsecção (3.3.1).



---

---

# CAPÍTULO 3

---

## METODOLOGIA

### 3.1 Diagonalizando o Hamiltoniano de Heisenberg

Vamos estudar uma cadeia ferromagnética sem desordem, na presença de um campo magnético  $H_0$  aplicado na direção  $z$ . Para esse modelo o Hamiltoniano é dado por

$$H = -\mu_B H_0 \sum S_i^z - \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (3.1)$$

O primeiro termo do Hamiltoniano representa o Efeito Zeeman. O operador  $\vec{S}_i$  depende dos operadores  $S_i^x$ ,  $S_i^y$ ,  $S_i^z$  e os operadores  $S_i^x$  e  $S_i^y$  podem ser escritos em termos dos operadores  $S_i^+$  e  $S_i^-$  como

$$\vec{S}_i^x = \frac{1}{2} (S_i^+ + S_i^-), \quad (3.2)$$

$$\vec{S}_i^y = \frac{1}{2i} (S_i^+ - S_i^-). \quad (3.3)$$

Então,  $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_i$  pode ser escrito como

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ + 2 S_i^z S_j^z). \quad (3.4)$$

Substituindo a equação (3.4) em (3.1) temos

$$H = - \sum_{i \pm j} J_{ij} \left[ \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right]. \quad (3.5)$$

Agora vamos introduzir um desvio no spin no sítio  $n$ , a fim de estudarmos as excitações do sistema. O desvio será introduzido aplicando um operador  $S_n^-$  ao estado inicial. Aplicando o Hamiltoniano obtido na equação (3.5) no estado  $|\psi_n\rangle$

$$H|\psi_n\rangle = - \sum_{i \pm j} J_{ij} \left[ \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right] |\psi_n\rangle, \quad (3.6)$$

onde

$$H|\psi_n\rangle = - \sum_{i \pm j} J_{ij} S_i^z S_j^z |\psi_n\rangle - \frac{1}{2} \sum_{i \pm j} J_{ij} S_i^+ S_j^- |\psi_n\rangle - \frac{1}{2} \sum_{i \pm j} J_{ij} S_i^- S_j^+ |\psi_n\rangle. \quad (3.7)$$

Vamos escrever assim  $i = l$ ,  $j = l + 1$ , pois são sítios vizinhos, estamos tratando de uma cadeia linear e estudando a interação entre seus vizinhos

$$H|\psi_n\rangle = - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\psi_n\rangle - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^+ S_{l+1}^- |\psi_n\rangle - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- S_{l+1}^+ |\psi_n\rangle. \quad (3.8)$$

Vamos calcular separadamente os somatórios  $I$ ,  $II$  e  $III$  da equação (3.8)

**Somatório  $I$ :** Seja

$$H_I = - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\psi_n\rangle. \quad (3.9)$$

A fim de facilitar os cálculos vamos retirar dois termos do somatório,  $n = l - 1$  e  $n = l$ , e reescrevemos a equação acima como

$$\begin{aligned} H_I = & - \sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\psi_n\rangle - J_{n-1,n} S_{n-1}^z S_n^z |\psi_n\rangle \\ & - J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z |\psi_n\rangle - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\psi_n\rangle. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Sabemos que  $S_i^z$  aplicado ao estado  $|\psi_n\rangle$ , com  $i \neq n$  tem valor  $S$  máximo na direção  $z$ , temos então

$$\begin{aligned}
H_I = & - \sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S^2 |\psi_n\rangle - (J_{n-1,n} S_{n-1}^z S_n^z |\psi_n\rangle \\
& - J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z |\psi_n\rangle - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S^2 |\psi_n\rangle. \tag{3.11}
\end{aligned}$$

Aplicando a relação de comutação

$$[S_k^z, S_l^-] = S_k^z S_l^- - S_l^- S_k^z = - S_k^z \delta_{lk}, \tag{3.12}$$

no estado  $|\psi_0\rangle$ , temos

$$- S_n^- |\psi_0\rangle = S_n^z S_n^- |\psi_0\rangle - S_n^- S_n^z |\psi_0\rangle, \tag{3.13}$$

mas  $S_n^- |\psi_0\rangle = |\psi_n\rangle$  então

$$- S_n^- |\psi_0\rangle = S_n^z |\psi_n\rangle - S_n^- S_n^z |\psi_0\rangle, \tag{3.14}$$

$$S_n^z |\psi_n\rangle = - S_n^- |\psi_0\rangle + S_n^- S_n^z |\psi_0\rangle. \tag{3.15}$$

Substituindo equação (3.15) em (3.11) obtemos

$$\begin{aligned}
H_I = & - \sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S^2 |\psi_n\rangle - [J_{n-1,n} S_{n-1}^z (S_n^- S_n^z |\psi_0\rangle - S_n^- |\psi_0\rangle)] \\
& - [J_{n,n+1} S_{n+1}^z (S_n^- S_n^z |\psi_0\rangle - S_n^- |\psi_0\rangle)] - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S^2 |\psi_n\rangle. \tag{3.16}
\end{aligned}$$

Utilizando mais uma vez  $S_i^z |\psi_n\rangle = S |\psi_n\rangle$  e  $S_n^- |\psi_0\rangle = |\psi_n\rangle$ , temos

$$\begin{aligned}
H_I = & - \sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S^2 |\psi_n\rangle - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S^2 |\psi_n\rangle \\
& - (J_{n-1,n} S_{n-1}^z (S - 1) |\psi_n\rangle) - (J_{n,n+1} S_{n+1}^z (S - 1) |\psi_n\rangle). \tag{3.17}
\end{aligned}$$

Lembrando que  $S_{n+1}^z |\psi_n\rangle = S |\psi_n\rangle$  e  $S_{n-1}^- |\psi_0\rangle = S |\psi_n\rangle$  e desmembrando o terceiro e quarto termo da equação (3.17), temos

$$\begin{aligned}
H_I = & - \sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S^2 |\psi_n\rangle - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S^2 |\psi_n\rangle \\
& - J_{n-1,n} S^2 |\psi_n\rangle + J_{n-1,n} S |\psi_n\rangle - J_{n,n+1} S^2 |\psi_n\rangle + J_{n,n+1} S |\psi_n\rangle. \tag{3.18}
\end{aligned}$$

Agrupando os termos que possuem  $S^2$  em um único somatório obtemos

$$H_I = - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S^2 |\psi_n\rangle + S (J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) |\psi_n\rangle. \quad (3.19)$$

O somatório  $-\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} = E_0$  é a energia no estado fundamental  $|\psi_0\rangle$ . Logo podemos escrever a equação (3.19) como

$$H_I = E_0 |\psi_n\rangle + S (J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) |\psi_n\rangle. \quad (3.20)$$

**Somatório II:** Seja

$$H_{II} = -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^+ S_{l+1}^- |\psi_n\rangle. \quad (3.21)$$

Usando a relação de comutação  $[S_n^+, S_l^-]$

$$[S_l^+, S_n^-] = S_l^+ S_n^- - S_n^- S_l^+ = 2 S_l^z \delta_{ln}, \quad (3.22)$$

aplicando no estado  $|\psi_0\rangle$

$$S_l^+ S_n^- |\psi_0\rangle - S_n^- S_l^+ |\psi_0\rangle = 2 S_l^z \delta_{ln} |\psi_0\rangle, \quad (3.23)$$

mas  $S_n^- |\psi_0\rangle = |\psi_n\rangle$  substituindo na equação (3.23)

$$S_l^+ |\psi_n\rangle = 2 S_l^z \delta_{ln} |\psi_0\rangle + S_n^- S_l^+ |\psi_0\rangle. \quad (3.24)$$

Substituindo a equação (3.24) em  $H_{II}$

$$H_{II} = -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_{l+1}^- (2 S_l^z \delta_{ln} |\psi_0\rangle + S_n^- S_l^+ |\psi_0\rangle), \quad (3.25)$$

mas  $S_l^+ |\psi_0\rangle = 0$

$$H_{II} = - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_{l+1}^- (S_l^z \delta_{ln} |\psi_0\rangle). \quad (3.26)$$

A função  $\delta_{ln}$  permite que entrem no somatório apenas os termos em que  $n = l$ . Lembrando que  $S_{n+1}^+ |\psi_0\rangle = |\psi_{n+1}\rangle$  e que  $S_n^z |\psi_0\rangle = S |\psi_0\rangle$ , temos

$$H_{II} = - J_{n,n+1} S_{n+1}^- S_n^z |\psi_0\rangle = - J_{n,n+1} S |\psi_{n+1}\rangle. \quad (3.27)$$

**Somatório III:** Seja

$$H_{III} = -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- S_{l,l+1}^+ |\psi_n\rangle. \quad (3.28)$$

Usando a relação de comutação  $[S_{l+1}^+, S_n^-] = S$

$$[S_{l+1}^+, S_n^-] = S_{l+1}^+ S_n^- - S_n^- S_{l+1}^+ = 2 S_{l+1}^z \delta_{l+1,n}, \quad (3.29)$$

e aplicando ao estado  $|\psi_0\rangle$

$$S_{l+1}^+ S_n^- |\psi_0\rangle - S_n^- S_{l+1}^+ |\psi_0\rangle = 2 S_{l+1}^z \delta_{l+1,n} |\psi_0\rangle. \quad (3.30)$$

Mas  $S_n^- |\psi_0\rangle = |\psi_n\rangle$ . Substituindo na equação (3.30) obtemos

$$S_{l+1} |\psi_n\rangle = 2 S_{l+1}^z \delta_{l+1,n} |\psi_0\rangle + S_n^- S_{l+1}^+ |\psi_0\rangle. \quad (3.31)$$

Substituindo a equação (3.31) em  $H_{III}$

$$H_{III} = -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- (2 S_{l+1}^z \delta_{l+1,n} |\psi_0\rangle + S_n^- S_{l+1}^+ |\psi_0\rangle), \quad (3.32)$$

mas  $S_{l+1}^+ |\psi_0\rangle = 0$

$$H_{III} = - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- S_{l+1}^z \delta_{l+1,n} |\psi_0\rangle. \quad (3.33)$$

Usando a função  $\delta$  e lembrando que  $S_{n-1}^- |\psi_0\rangle = |\psi_{n-1}\rangle$ , temos

$$H_{III} = - J_{n-1,n} S_{n-1}^- S_n^z |\psi_0\rangle = - J_{n-1,n} S |\psi_{n-1}\rangle. \quad (3.34)$$

Agora substituindo as equações (3.20), (3.27), (3.34) na equação (3.8) obtemos,

$$H|\psi_n\rangle = E_0 |\psi_n\rangle + S[(J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) |\psi_n\rangle - J_{n-1,n} |\psi_{n-1}\rangle - J_{n,n+1} |\psi_{n+1}\rangle]. \quad (3.35)$$

Verificamos com equação (3.35) que a excitação realizada no sítio  $n$ , quando introduzimos um desvio no spin, aplicando um operador  $S_n^-$  no estado fundamental, não ficou localizada em  $n$ , ela se propagou por toda cadeia através da interação de  $n$  com seus vizinhos,  $n + 1$  e  $n - 1$ . Esta excitação coletiva é chamada de onda de spin. O fato da excitação não ficar localizada apenas em  $n$ , faz  $|\psi_n\rangle$  não ser um autoestado de  $H$ .

O objetivo agora é determinar que estado apresenta esta configuração da equação (3.35). Para isso, vamos expandir a onda de spin usando os estados  $|\psi_n\rangle$ . Usaremos  $|\Psi\rangle$  para representar a onda de spin

$$|\Psi\rangle = C(S, N) \sum_{n=1}^N f_n |\psi_n\rangle, \quad (3.36)$$

onde  $f_n$  representa as amplitudes de probabilidade de ocorrer um desvio no sítio  $n$ . Vamos usar a equação de Schrödinger para mostrar que  $|\Psi\rangle$  é um autoestado de  $H$

$$H |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle. \quad (3.37)$$

Substituindo a equação (3.36) em (3.37) obtemos,

$$\sum_{n=1}^N f_n H |\psi_n\rangle = E \sum_{n=1}^N f_n |\psi_n\rangle, \quad (3.38)$$

substituindo a equação (3.35) em (3.38)

$$\begin{aligned} & \sum_{n=1}^N \{E_0 |\psi_n\rangle + S[(J_{n-1,n} + J_{n,n+1})f_n |\psi_n\rangle \\ & - J_{n-1,n} f_n |\psi_{n-1}\rangle - J_{n,n+1} f_n |\psi_{n+1}\rangle]\} = E \sum_{n=1}^N f_n |\psi_n\rangle \end{aligned} \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{n=1}^N (J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) f_n |\psi_n\rangle - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} f_n |\psi_{n+1}\rangle \\ & - \sum_{n=1}^N J_{n-1,n} f_n |\psi_{n-1}\rangle = \frac{E - E_0}{S} \sum_{n=1}^N f_n |\psi_n\rangle. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Fazendo  $n = n + 1$  no segundo somatório e  $n = n - 1$  no terceiro somatório, obtemos

$$\sum_{n=1}^N \{[(J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) f_n - J_{n,n+1} f_{n+1} - J_{n-1,n} f_{n-1}]\} |\psi_n\rangle = \frac{(E - E_0)}{S} \sum_{n=1}^N f_n |\psi_n\rangle. \quad (3.41)$$

Esta relação de recorrência entre os números  $f_n$  pode ser usada para se obter uma representação matricial do Hamiltoniano  $H$  na base  $(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_n\rangle)$ . Esta representação consiste em uma matriz tridiagonal, ou seja, todos os termos da matriz são nulos exceto os termos

da diagonal principal ( $H_{n,n} = J_{n-1,n} + J_{n,n+1}$ ) e das duas primeiras diagonais secundárias ( $H_{n,n+1} = H_{n+1,n} = -J_{n,n+1}$ ). A representação matricial do Hamiltoniano do problema de um mágnon considerando uma cadeia com  $N$  spins 1/2 pode ser escrita da forma

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} J_{0,1} + J_{1,2} & -J_{1,2} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -J_{1,2} & J_{1,2} + J_{2,3} & -J_{2,3} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -J_{2,3} & J_{2,3} + J_{3,4} & -J_{3,4} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -J_{3,4} & J_{3,4} + J_{4,5} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & J_{N-2,N-1} + J_{N-1,N} & -J_{N-1,N} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -J_{N-1,N} & J_{N-1,N} + J_{N,N+1} \end{pmatrix}^{N \times N} \quad (3.42)$$

De posse da representação matricial do Hamiltoniano, iremos diagonalizar esta matriz a fim de obtermos os autovalores e autovetores. Trata-se de uma matriz quadrada  $N \times N$ , onde  $N$  é o número de spin da cadeia. Para diagonalizar, implementamos um programa em Fortran, onde utilizamos a sub-rotina *TQLI* [29].

## 3.2 Evolução Temporal

Até o momento trabalhamos com a equação de Schrödinger independente do tempo, equação (3.35). Porém, para analisarmos o comportamento dinâmico de um mágnon, a fim de verificarmos a ausência ou a presença de um estado estendido, necessitamos estudar a sua evolução temporal.

A equação de Schrödinger dependente do tempo é

$$i\hbar \frac{d |\Psi(t)\rangle}{dt} = H |\Psi(t)\rangle. \quad (3.43)$$

Esta é a Equação de Schrödinger para o operador evolução temporal [30]. Realizar a evolução temporal de um sistema quântico é aplicar o operador evolução temporal  $e^{-iHt/\hbar}$  no estado  $t = 0$  [31]

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle. \quad (3.44)$$

Vamos expandir  $|\psi(0)\rangle$  e  $|\psi(t)\rangle$  na base de orbitais  $n$

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n f_n(0) |n\rangle \quad (3.45)$$

e

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n f_n(t) |n\rangle. \quad (3.46)$$

Substituindo as equações (3.45) e (3.46) em (3.44) obtemos

$$\sum_n f_n(t) |n\rangle = e^{-iHt/\hbar} \sum_n f_n(0) |n\rangle, \quad (3.47)$$

onde  $\{|n\rangle\}$  é uma base no espaço de Hilbert. Iremos usar  $\{|n\rangle\}$  para escrever a representação matricial  $H$  e expandir seus autovetores. Vamos considerar que  $|E\rangle$  é um autovetor de  $H$ , logo

$$H |E\rangle = E |E\rangle \quad (3.48)$$

e

$$|E\rangle = \sum_n z_n^E |n\rangle, \quad (3.49)$$

usando  $|E\rangle$  para expandir o estado inicial

$$|\psi(0)\rangle = \sum_E [\langle E|\psi_0\rangle] |E\rangle \quad (3.50)$$

onde

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n,E} z_m^{E*} f(0) \langle m|n\rangle |E\rangle. \quad (3.51)$$

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

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n,E} z_n^E f(0) |E\rangle. \quad (3.52)$$

Separando os somatórios

$$|\psi(0)\rangle = \sum_E \left[ \sum_n z_n^E f(0) \right] |E\rangle \quad (3.53)$$

e fazendo a evolução temporal da equação (3.44) obtemos

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} \sum_E \left[ \sum_n z_n^E f(0) \right] |E\rangle. \quad (3.54)$$



Substituindo as equações (3.46) e (3.49) em (3.54) temos

$$\sum_n f_n(t) |n\rangle = \sum_E \left[ \sum_n z_n^E f(0) \right] e^{-iEt/\hbar} \sum_n z_n^E |n\rangle, \quad (3.55)$$

fazendo  $Z(E) = \sum_n z_n^E f(0)$

$$\sum_n f_n(t) |n\rangle = \sum_{E,n} Z(E) z_n^E e^{-iEt/\hbar} |n\rangle, \quad (3.56)$$

podemos eliminar os somatórios em  $n$ , ficamos com

$$f_n(t) = \sum_E Z(E) z_n^E e^{-iEt/\hbar}. \quad (3.57)$$

Esta é a equação da evolução temporal, ela nos fornece a evolução temporal do pacote de onda. Assim, podemos encontrar a função de onda no átomo  $n$  em qualquer tempo. Por ser formalmente a solução da equação de Schrödinger dependente do tempo e por ter sido obtida a partir do operador evolução temporal ela é exata, ou seja, não possui aproximação, logo a norma da função de onda fica bem estabelecida para qualquer tempo.

### 3.3 Determinação das grandezas físicas

A partir da diagonalização do Hamiltoniano obtemos os autovetores e os autovalores correspondentes e conseqüentemente a medida de dois observáveis fundamentais para análise da *TEQ*, a fidelidade e a concorrência,.

#### 3.3.1 Fidelidade

A fidelidade mede o quanto o estado quântico preparado no sítio  $S$  (fonte) é recebido no sítio  $R$  (receptor). Para calcular a fidelidade é necessário conhecer a dinâmica do pacote de onda, para isso, devemos resolver a equação de Schrödinger independente do tempo.

Na seção (3.2) realizamos o estudo do operador evolução temporal, onde encontramos a equação (3.57) da função de onda dependente do tempo. Este procedimento tem uma grande precisão numérica dentro do contexto da conservação da norma da função de onda. Por outro lado, ele exige a diagonalização total do Hamiltoniano o que acarreta em um custo

computacional, em geral, bem caro, então é interessante considerarmos cadeias pequenas com  $N < 10000$  por exemplo. Para sistemas grandes, técnicas tradicionais como o *Runge-Kuta* ou o método de Taylor são mais recomendáveis [32]. Com base nesta informação e pelo fato que nossa proposta é trabalhar com sistemas pequenos, nesta dissertação utilizamos uma cadeia com  $N = 50$ .

Para obtermos a equação matemática da fidelidade, vamos seguir um protocolo definido por Bose [28] para transferência de estados quânticos em uma cadeia de spins homogênea. As interações entre os spins são do tipo ferromagneto de Heisenberg e na cadeia existem  $N$  spins, podemos escrever o Hamiltoniano como

$$\mathbf{H}_G = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{\sigma}^i \cdot \vec{\sigma}^j - \sum_{i=1}^N B_i \sigma_z^i, \quad (3.58)$$

onde  $\vec{\sigma}^i = (\sigma_x^i, \sigma_y^i, \sigma_z^i)$  representam as matrizes de Pauli,  $J_{i,j}$  é o termo de interação entre os primeiros vizinhos  $\langle i, j \rangle$  e  $B_i$  é a intensidade do campo magnético estático que se aplica localmente em cada spin.

1. Inicialmente preparamos a cadeia no estado  $|0\rangle_C = |0\rangle_1 |0\rangle_2 \dots |0\rangle_i \dots |0\rangle_N$ .
2. Preparamos o estado  $|\phi\rangle_S = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  em  $S$  e o estado  $|0\rangle$  no  $R$ , assim o estado geral da cadeia passa a ser  $|j\rangle_C = |0\rangle_1 |0\rangle_2 \dots |1\rangle_j \dots |0\rangle_N$ , ou seja, o spin na posição  $j$  no estado  $|1\rangle$ . O estado inicial da cadeia,  $|\Psi(0)\rangle$ , pode ser escrito como

$$|\Psi(0)\rangle = |\phi\rangle_S |0\rangle_{C_{N-2}} |0\rangle_R; \quad (3.59)$$

3. Agora precisamos fazer  $|\Psi(0)\rangle$  evoluir no tempo

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt} |\Psi(0)\rangle = e^{-iHt} |\phi\rangle_S |0\rangle_{C_{N-2}} |0\rangle_R, \quad (3.60)$$

onde assumimos que  $\hbar = 1$  e  $C_{N-2}$  refere-se aos  $N$  spins da cadeia menos a fonte  $S$  e o receptor  $R$ ;

4. Após a evolução temporal do sistema, o objetivo é recuperar o estado final no tempo  $\tau$ , onde a cadeia se encontra no estado

$$|\Psi(\tau)\rangle = |0\rangle_S |0\rangle_{C_{N-2}} |\phi\rangle_R. \quad (3.61)$$

A dinâmica da cadeia ao longo do tempo pode ser escrita como

$$|\Psi(t)\rangle = \alpha|0\rangle + \beta \sum_{j=1}^N f_j|j\rangle, \quad (3.62)$$

onde  $f_j = \langle \mathbf{j} | e^{-iHt} | \mathbf{S} \rangle$  é a amplitude de transmissão entre os spins  $\mathbf{S}$  e  $\mathbf{j}$ , onde  $\mathbf{j} = 1$  é o spin  $S$  e  $\mathbf{j} = N$  é o spin  $R$  da cadeia.

Agora iremos seguir o protocolo preparando inicialmente o estado quântico arbitrário na fonte ( $S$ ) e recuperá-lo no receptor ( $R$ ). Este estado é chamado de *qubit* e vamos representá-lo por  $|\psi\rangle$ . Em uma representação geométrica, um *bit* clássico está em dois pontos, enquanto o *qubit* encontra-se na chamada esfera de Bloch figura (3.1).

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad (3.63)$$

onde  $\alpha$  e  $\beta$  são números complexos que satisfazem  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$  e podemos representá-la através de coordenadas polares da seguinte forma:

$$\alpha = |\alpha|e^{i\arg(\alpha)} \quad \text{e} \quad \beta = |\beta|e^{i\arg(\beta)}.$$

Onde,  $0 \leq \arg(z) \leq 2\pi$  e considerando as operações entre ângulos como módulo de  $2\pi$ , podemos reescrever a equação (3.63) da seguinte maneira:

$$|\psi\rangle = |\alpha| e^{i\gamma} |0\rangle + |\beta| e^{i(\gamma+\varphi)} |1\rangle. \quad (3.64)$$

Ao definirmos  $\xi$  como  $\cos(\xi) = |\alpha|$  e  $\sin(\xi) = |\beta|$ , sendo  $0 \leq \xi \leq \pi/2$ , e  $\theta = 2\xi$ , com  $\theta \in [0, \pi]$ , iremos substituir essas variáveis na equação anterior e assim obteremos a forma polar do *qubit*:

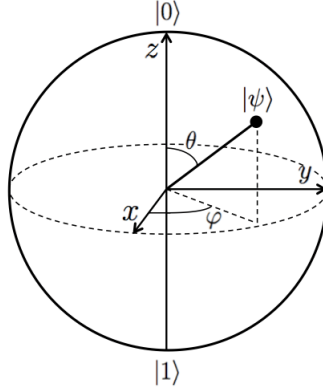
$$|\psi\rangle = e^{i\gamma} [\cos(\theta/2) |0\rangle + e^{i\varphi} \sin(\theta/2) |1\rangle], \quad (3.65)$$

o fator de fase global  $e^{i\gamma}$  não alterar a probabilidade de se obter  $|0\rangle$  ou  $|1\rangle$ , então, podemos desprezar esse fator simplificando a forma global do *qubit* para:

$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2) |0\rangle + \sin(\theta/2) e^{i\varphi} |1\rangle. \quad (3.66)$$

Representação do estado quântico (3.66) na esfera de Bloch:

Figura 3.1: Representação de um estado *qubit*,  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ , na esfera de Bloch.



Vamos conectar o estado quântico da equação (3.66) no sítio  $S$  situado no início da cadeia e recuperá-lo na outra extremidade  $R$ . O estado na extremidade  $R$ , em geral, é misto e pode ser obtido aplicando o traço dos estados de todos os outros spins de  $|\psi\rangle$ .

O que desejamos agora é receber o estado  $|\psi\rangle$  que foi colocado na fonte ( $S$ ), para isso vamos preparar o estado  $|\psi_1\rangle$  com probabilidade  $p_1$  e o estado  $|\psi_2\rangle$  com probabilidade  $p_2$ , o valor esperado para o observável  $A$  será dado por:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= p_1 \langle \psi_1 | A | \psi_1 \rangle + p_2 \langle \psi_2 | A | \psi_2 \rangle \\ &= p_1 T_r(|\psi_1\rangle \langle \psi_1 | A) + p_2 T_r(|\psi_2\rangle \langle \psi_2 | A) \\ &= T_r(\rho A), \end{aligned} \quad (3.67)$$

sendo  $\rho$  o operador densidade.

Baseado nisto podemos construir o estado no receptor ( $R$ ) como

$$\rho_{out}(t) = P(t) |\psi_{out}(t)\rangle \langle \psi_{out}(t)| + (1 - P(t)) |0\rangle \langle 0|, \quad (3.68)$$

sendo

$$|\psi_{out}(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{P(t)}} \left[ \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) f_{r,s}^N(t) |1\rangle \right] \quad (3.69)$$

e

$$P(t) = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) |f_{r,s}^N(t)|^2, \quad (3.70)$$

onde

$$f_{r,s}^N(t) = \langle R | e^{-iHt} | S \rangle. \quad (3.71)$$

Dizemos que o teletransporte quântico é perfeito quando o estado gerado na saída é igual ao estado gerado na entrada, nesse caso a fidelidade é igual a 1. A fidelidade é uma medida sobre todos os estados de entrada  $|\Psi_{in}\rangle$ , na esfera de Bloch, figura (3.1). A fidelidade é dada por

$$F = \frac{1}{4\pi} \int \langle \psi_{in} | \rho_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle d\Omega. \quad (3.72)$$

Vamos substituir a equação (3.68) em (3.72)

$$F = \frac{1}{4\pi} \int [P(t_0) \langle \psi_{in} | \psi_{out}(t_0) \rangle \langle \psi_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle + \langle \psi_{in} | 0 \rangle \langle 0 | \psi_{in} \rangle - P(t_0) \langle \psi_{in} | 0 \rangle \langle 0 | \psi_{in} \rangle] d\Omega. \quad (3.73)$$

Vamos calcular cada parcela da equação (3.73) separadamente

**Parcela I :** Seja

$$P(t_0) \langle \psi_{in} | \psi_{out}(t_0) \rangle \langle \psi_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle. \quad (3.74)$$

Vamos começar calculando  $\langle \psi_{in} | \psi_{out}(t_0) \rangle$  :

$$\begin{aligned} \langle \psi_{in} | \psi_{out}(t_0) \rangle = & \left[ \cos(\theta/2) \langle 0 | + \sin(\theta/2) e^{i\phi} \langle 1 | \right] \frac{1}{\sqrt{P(t_0)}} \left[ \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle \right. \\ & \left. + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) f_{r,s}^N(t) |1\rangle \right], \end{aligned} \quad (3.75)$$

$$\langle \psi_{in} | \psi_{out}(t_0) \rangle = \frac{1}{\sqrt{P(t)}} \left[ \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) |f_{r,s}^N(t)| \right], \quad (3.76)$$

agora  $\langle \psi_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle$  :

$$\langle \psi_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle = \frac{1}{\sqrt{P(t_0)}} \left[ \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) |f_{r,s}^N(t)|^* \right]. \quad (3.77)$$

Substituído as equações (3.76) e (3.77) na equação (3.74), temos

$$\begin{aligned} P(t_0) \langle \psi_{in} | \psi_{out}(t_0) \rangle \langle \psi_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle = & \cos^4\left(\frac{\theta}{2}\right) + \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) f_{r,s}^N(t_0)^* \\ & + \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) f_{r,s}^N(t_0) + \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right) |f_{r,s}^N(t)|^2, \end{aligned} \quad (3.78)$$

**Parcela II :**  $\langle \psi_{in} | 0 \rangle \langle 0 | \psi_{in} \rangle$

$$\langle \psi_{in} | 0 \rangle \langle 0 | \psi_{in} \rangle = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right). \quad (3.79)$$

**Parcela III:**  $-P(t_0)\langle\psi_{in} | 0\rangle \langle 0|\psi_{in}\rangle$

$$-P(t_0)\langle\psi_{in} | 0\rangle \langle 0|\psi_{in}\rangle = -P(t_0) \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right). \quad (3.80)$$

Substituindo a equação (3.70) em (3.80) obtemos

$$-P(t_0)\langle\psi_{in} | 0\rangle \langle 0|\psi_{in}\rangle = \left[ -\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)|f_{r,s}^N(t)|^2 \right] \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right). \quad (3.81)$$

Substituindo as equações (3.78), (3.79) e (3.81) em (3.73) obtemos a relação matemática para fidelidade

$$F = \frac{1}{4\pi} \int \left[ \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) f_{r,s}^N(t_0)^* + \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) f_{r,s}^N(t_0) - \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)|f_{r,s}^N(t)|^2 + \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)|f_{r,s}^N(t_0)|^2 \right] d\Omega, \quad (3.82)$$

sabendo que  $d\Omega = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin\theta d\theta d\phi$ , ficamos com

$$F = \frac{1}{2} \int_0^\pi \left[ \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) f_{r,s}^N(t_0)^* + \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) f_{r,s}^N(t_0) + \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)|f_{r,s}^N(t_0)|^2 + \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)|f_{r,s}^N(t_0)|^2 \right] \sin\theta d\theta \quad (3.83)$$

Resolvendo a integral obtemos

$$F = \frac{1}{6} \left[ (f_{r,s}^N(t_0))^* + f_{r,s}^N(t_0) \right] + \frac{1}{2} + \frac{1}{6} |f_{r,s}^N(t_0)|^2. \quad (3.84)$$

Agora vamos nos concentrar no primeiro termo da equação (3.84), vamos chama-lo de  $\Delta$ , por  $f_{r,s}$  ser uma função complexa, podemos representa-la através de coordenadas polares  $f_{r,s}^N(t_0) = |f_{r,s}^N(t_0)| e^{i \text{Arg}(f_{r,s}^N(t_0))}$ ,

$$\Delta = |f_{r,s}^N(t_0)| e^{i \text{arg}(f_{r,s}^N(t_0))} + |f_{r,s}^N(t_0)| e^{-i \text{arg}(f_{r,s}^N(t_0))}, \quad (3.85)$$

$$\Delta = |f_{r,s}^N(t_0)| [e^{i \text{arg}(f_{r,s}^N(t_0))} + e^{-i \text{arg}(f_{r,s}^N(t_0))}], \quad (3.86)$$

$$\Delta = 2|f_{r,s}^N(t_0)| \cos \left[ \text{arg}(f_{r,s}^N(t_0)) \right]. \quad (3.87)$$

Substituindo a equação (3.87) em (3.84) obtemos

$$F = \frac{1}{3} \left\{ |f_{r,s}^N(t_0)| \cos \left[ \text{arg}(f_{r,s}^N(t_0)) \right] \right\} + \frac{1}{2} + \frac{1}{6} |f_{r,s}^N(t_0)|^2. \quad (3.88)$$

Vamos fazer  $\gamma = \arg (f_{r,s}^N(t_0))$

$$F = \frac{1}{3}|f_{r,s}^N(t_0)| \cos \gamma + \frac{1}{2} + \frac{1}{6}|f_{r,s}^N(t_0)|^2, \quad (3.89)$$

A fim de obtermos o valor máximo para a fidelidade teremos que escolher os campos magnéticos  $B_i$  de modo que  $\cos \gamma = 1$  e que a amplitude de excitação seja ao longo de toda a cadeia  $f_N(t) = f_{r,s}^N(t_0)$ , assim obteremos:

$$F = \frac{1}{2} + \frac{1}{3}|f_N(t)| + \frac{1}{6}|f_N(t)|^2. \quad (3.90)$$

Devemos considerar o fato da escala de tempo do sistema variar de forma significativa com o número de amostras, por este motivo vamos nos concentrar na fidelidade média máxima,  $F_{max} = \langle \max \{F(t)\} \rangle$ . Dizer que tivemos uma boa  $TEQ$ , é dizer que a  $F_{max} \approx 1$ .

### 3.3.2 Concorrência

A concorrência, de acordo com William Wootters [33], é uma grandeza que quantifica o emaranhamento de duas partículas.

Para o cálculo da concorrência em nosso modelo, utilizamos a expressão:

$$C(t) = 2|f_1(t)f_N(t)|, \quad (3.91)$$

onde  $f_N$  é a amplitude de probabilidade. Esta grandeza, aqui expressa, visa obter uma medida do grau de emaranhamento gerado entre os estados nas extremidades da cadeia. Ela possui um valor real compreendido de 0 a 1, se o valor da concorrência  $C(t) = 1$ , indica que a transferência de estados quânticos foi perfeita, devido o emaranhamento máximo entre as partículas. Porém quando  $C(t) = 0$ , significa que não houve transferência de estados quânticos, uma vez que não houve emaranhamento das partículas.

### 3.3.3 Participação

A participação é uma grandeza que caracteriza a localização de um autoestado. Ela pode assumir o valor 1 quando os estados estiverem totalmente localizados em um único spin e

$N$  para estados espalhados ou estendidos, onde  $N$  é o número de átomos que participam do pacote de onda.

$$P = \left( \sum_{n=1}^N |f_n|^4 \right)_{MAX}^{-1}. \quad (3.92)$$

Esta grandeza é da ordem do número de átomos que participam do canal. Para verificar isso consideramos que todas as amplitudes dos estados estendidos sejam iguais a  $f_{n_k}^j = f_{n_0}$ ,

$$\sum |f_{n_k}^j|^2 = \sum |f_{n_0}|^2 = 1. \quad (3.93)$$

Fazer esse somatório é o mesmo que

$$\sum |f_n(0)|^2 = N|f_{n_0}|^2, \quad (3.94)$$

então

$$\sum N|f_{n_0}|^2 = 1 \Rightarrow f_{n_0} = \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (3.95)$$

Substituindo a equação (3.95) em (3.92) obtemos

$$P = \left[ \sum_{K=1}^N \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \right)^4 \right]^{-1} = \left( N \frac{1}{N^2} \right)^{-1} = N \quad (3.96)$$

logo,  $P = N$ , a participação é da ordem do número de átomos do canal. Por outro lado se o pacote de onda estiver localizado em uma região pequena do sistema a participação será da ordem do tamanho desta pequena região. Se faz importante salientar também que o valor de  $P$  (seja ele algo da ordem de  $N$  ou bem menor que  $N$ ) não é a única informação relevante existente nesta função. A classificação de um estado (seja de localizado ou estendido) não é feita apenas usando o valor da participação e sim usando a dependência da participação com  $N$ . Em geral, para o estudo da natureza dos auto-estados, se faz importante calcular  $P$  para diferentes tamanhos de sistema e obter a dependência de  $P = P(N)$ . Em sistemas de dimensão  $d = 1$  tradicionalmente encontramos  $P \propto N^1$  para estados estendidos. Por outro lado, para estados localizados encontramos  $P \propto N^0$ .

### 3.3.4 Amplitude total $f_{1N}$ e $f_c$

Vamos considerar em nosso estudo algumas medidas topológicas acerca do perfil espacial (e temporal) do estado do sistema. Estas medidas são simples aferições acerca da fração do



pacote de onda que fica localizado nos sítios  $S$  e  $R$  e a fração do pacote de onda que fica preso dentro do canal. A quantidade definida como  $f_{1N}$  está relacionada com a fração do pacote de onda que se encontra localizado na fonte e no receptor.

$$f_{1N} = \langle |f_1|^2 + |f_N|^2 \rangle_{MAX} \quad (3.97)$$

Vamos debater rapidamente os valores e propriedades da função  $f_{1N}$ . Vamos considerar inicialmente que as funções  $f_1$  e  $f_N$  são funções temporais obtidas através da solução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo. Se, no limite de tempo longo,  $f_{1N}$  tem valor 0 ou bem menor que a unidade então podemos interpretar que a transferência de estados quânticos entre os spins 1 e  $N$  não tem chance de ter ocorrido. Por outro lado, se esta quantidade for grande, particularmente bem próxima de 1, temos que existe uma considerável probabilidade do fenômeno de  $TEQ$  ter ocorrido no sistema. Claro que analisar esta função somente pode induzir a um erro. A condição  $f_{1N} \approx 1$  pode também está relacionada com a localização do modo no sítios  $S$  (o que, obviamente, indica ausência de  $TEQ$ ). Desta feita é importante incluir o estado de  $f_{1N}$  dentro de um cenário mais amplo onde outras funções sejam consideradas de forma complementar. Outra função interessante é a função  $f_c$  que está relacionada com a fração do pacote de onda que se encontra no canal. Esta quantidade é definida por :

$$f_c = \left\langle \sum_{i=2}^{N-1} |f_i|^2 \right\rangle_{MAX} \quad (3.98)$$

A análise desta quantidade revela a existência (ou não) de pacote de onda preso no canal. Se  $f_c$  for zero temos então um bom indício que o sistema pode ter evoluído para a presença do pacote no estado R (ou, por exemplo, preso oscilando entre S e R). As funções  $f_{1N}$  e  $f_c$  são ferramentas auxiliares para entender o perfil do pacote de onda em tempo longo. Tradicionalmente se  $f_{1N} \approx 1$  e  $f_c \approx 0$  temos fortes indícios de uma dinâmica do pacote de onda entre S e R (o que pode caracterizar a existência de  $TEQ$ ).

### 3.3.5 Densidade de Estados (DOS)

O DOS é uma grandeza útil para entender as propriedades espectrais do canal. De maneira geral, ela informa o número de estados em uma dada faixa de energia. Sua importância

consiste em informar quais as regiões do canal concentram-se o maior número de estados. Normalmente em altas energias boa parte dos sistemas possuem poucos estados, já para as baixas energias é o contrário. Em resumo, a DOS informa a melhor região que deve ser realizado um experimento de transferência de estados quânticos. A definição formal da DOS é dada pela expressão matemática

$$DOS = \sum_{E_j} \delta(E - E_j). \quad (3.99)$$

### 3.3.6 Entropia de Shannon

A entropia de Shannon, também conhecida como entropia da comunicação, está relacionada com o grau de desorganização da mensagem, ou seja, quanto mais desorganizada, mais entrópica. Shannon [34] batizou a quantificação da informação com o nome de entropia, pois, para ele, calcular a entropia de um sistema é o mesmo que medir a incerteza probabilística de transmissão de uma informação.

Shannon demonstrou que a entropia pode ser uma medida da informação. A entropia de Shannon é dada por [34]

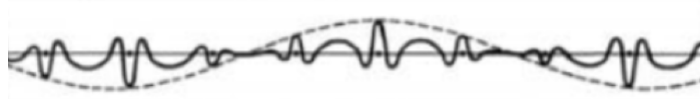
$$S = - \sum \rho_i \ln \rho_i \quad (3.100)$$

onde  $\rho_i$  é um conjunto de probabilidades  $\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_n$ . Esta grandeza tem um comportamento semelhante ao descrito para a participação, entretanto, em escala logarítmica. Sua expressão matemática pode ser reescrita como

$$S = - \sum |f_n|^2 \ln |f_n|^2. \quad (3.101)$$

Se o estado encontra-se estendido por todo o sistema a entropia tem comportamento  $S \approx \ln(L)$  conforme a figura (3.2), por outro lado, se o estado está localizado a figura (3.3), temos então que  $S = 0$ .

Figura 3.2: Representação do estado estendido



Fonte: [35].

Figura 3.3: Representação do estado localizado



Fonte: [35].

### 3.3.7 R

Outra grandeza que pode ser destacada é o  $R$ , que definimos como sendo o módulo do máximo da função de onda menos o módulo do mínimo da função de onda.

$$R = |f_n^{max}| - |f_n^{min}| \quad (3.102)$$

Para explicar melhor, vamos usar a figura (3.2) que representa o estado estendido. Calculando  $|f_n^{max}| - |f_n^{min}|$  observe que esse valor  $R$  será muito pequeno, isso porque a função de onda está espalhada em todo espaço. Caso contrário vai acontecer se calcularmos a mesma quantidade  $R$  para figura (3.3), agora teremos um valor muito alto. Podemos simplificar assim,  $R = 0$  é um estado estendido (ou metálico),  $R > 0$  é um estado localizado (ou isolante).

---

---

# CAPÍTULO 4

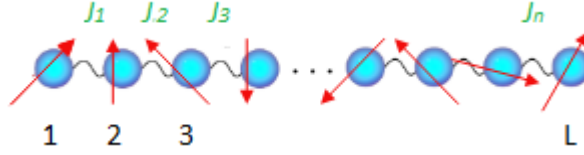
---

## RESULTADOS

O foco central de nosso trabalho é estudar o transporte de estados de um mágnon através de uma cadeia desordenada incluindo a possibilidade de considerar também campos magnéticos externos. Como já foi debatido anteriormente, nosso modelo consiste de um spin inicial no sítio  $n = 1$ , também chamado de fonte ( $S$ ) e um spin final no sítio  $n = N$ , também chamado de receptor ( $R$ ). A conexão entre eles é feita através de um canal contendo  $L = N - 2$  spins. Faz-se importante enfatizar que tanto os spins nas posições  $S$  e  $R$  quanto o canal são descritos pelo modelo de Heisenberg considerando o estado fundamental como sendo ferromagnético, conforme a figura (1.2).

Nossos estudos foram efetuados em duas etapas. Em uma etapa preliminar apresentamos uma investigação acerca das propriedades do canal de  $L$  spins. Desta maneira, é relevante apresentar uma breve revisão acerca das propriedades de transporte de mágnons no canal. Assim, estudamos a natureza dos autoestados de um mágnon considerando inicialmente apenas o canal desordenado (na ausência de campo). Após esta análise procedemos com a investigação acerca de experimentos de transferência de estados de um mágnon da fonte  $S$  para o receptor  $R$ . Esta última etapa foi investigada usando as funções que foram descritas nos capítulos anteriores, particularmente a fidelidade e a concorrência. Nosso objetivo foi estudar sobre quais condições de desordem e/ou campo magnético externo, nosso modelo

Figura 4.1: Canal unidimensional contendo  $L = N - 2$  spins de Heisenberg com acoplamento spin-spin.



Fonte: Elaborada pela autora.

pode contemplar transferência de estados quânticos com boa qualidade e mantendo um bom nível de emaranhamento.

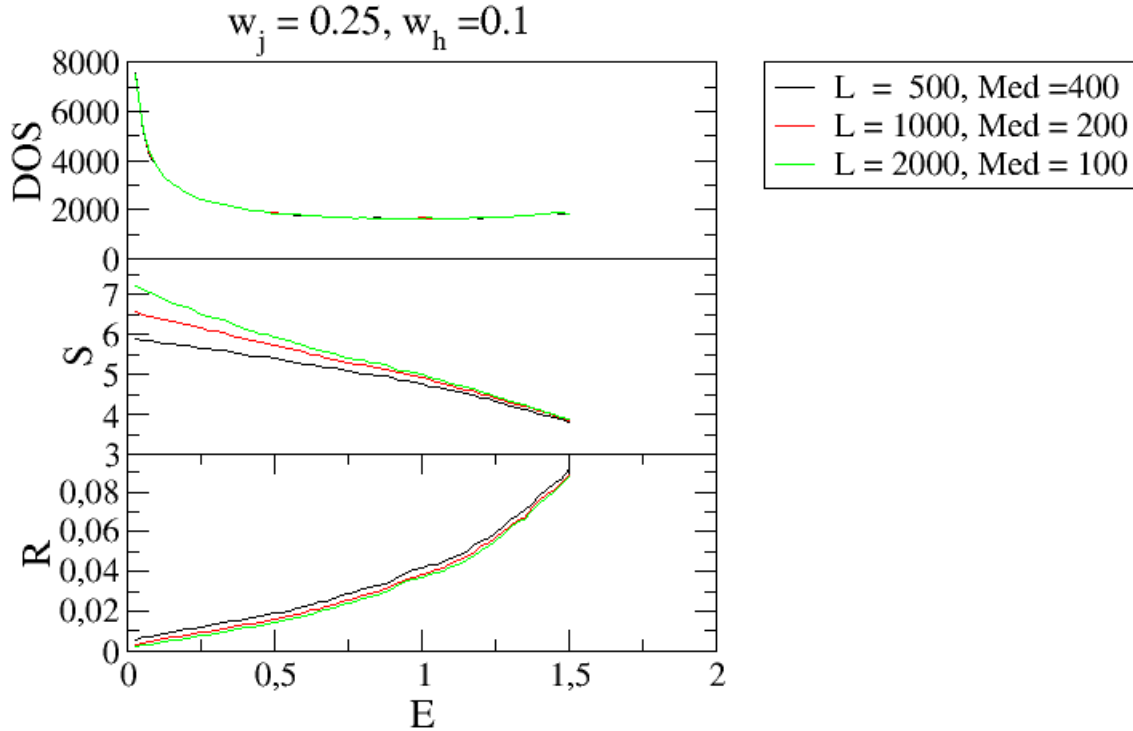
## 4.1 Topologia e propriedades do canal

Vamos descrever de forma rápida qual o tipo de canal que utilizamos neste estudo. A figura (4.1) é uma representação de nosso canal contendo  $L$  spins de Heisenberg acoplados com interação  $J$ . Lembrando, em linhas gerais, nosso sistema é uma cadeia com  $N$  spins de Heisenberg. O canal propriamente dito são os  $L = N - 2$  sítios internos, considerando que os sítios nas posições  $n = 1$  e  $n = N$  representam a fonte e o receptor.

Aqui investigamos rapidamente apenas o canal  $L$  e lembramos que  $J$  representa o termo de acoplamento spin-spin, também chamado de termo de *exchange* ou *hopping*. Em linhas gerais, os termos de acoplamentos spin-spin raramente apresentam um padrão cristalino, ou seja, são todos iguais. Em boa parte dos sistemas reais, este termo depende consideravelmente da posição dos spins dentro do material, em outras palavras, cada par de spins vai ter seu próprio acoplamento e, concomitantemente, teremos uma distribuição  $J_1, J_2, J_3, J_4, \dots$  não uniforme, também chamada de sequência aleatória. Como já mencionamos nos capítulos anteriores, em nosso estudo consideramos que  $J_n = \langle J \rangle + w_j r_n$ , onde  $\langle J \rangle = 1$  é nossa escala de energia e a quantidade  $r_n$  são números aleatórios distribuídos na região  $[-0.5, 0.5]$ . O parâmetro  $w_j$  representa a força da distribuição de desordem no acoplamento de exchange. Se  $w_j = 0$  temos um modelo cristalino e se  $w_j \approx \langle J \rangle$  temos o limite de desordem forte. Salienciamos que como vamos considerar  $\langle J \rangle$  como sendo a escala de energia, nossos resultados vão ser, de certa forma, gerais e assim válidos para uma faixa de valores reais de  $\langle J \rangle$ . Faz-se

importante mencionar que, em boa parte dos sistemas magnéticos reais, o valor típico para  $\langle J \rangle$  é algo dentro do intervalo  $[0.01, 0.1] eV$ .

Figura 4.2: Densidade de estados, Entropia de Shannon e  $R \times$  Energia para  $w_j = 0.25$  e  $w_h = 0.1$ .



Fonte: Elaborada pelo autor através do xmgrace.

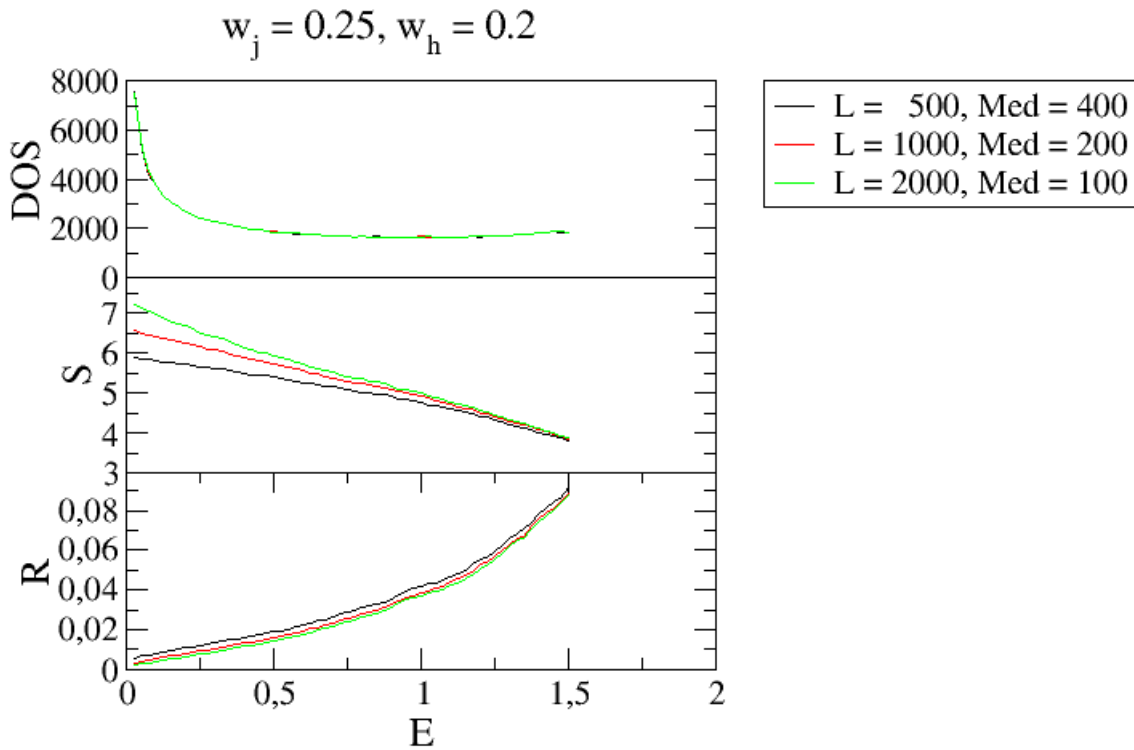
#### 4.1.1 Estudo dos estados quânticos do canal

Iniciamos o estudo diagonalizando o Hamiltoniano para o canal obtendo seus autovetores e autoenergias. O processo de diagonalização foi feito através de um código em Fortran usando rotinas do *numerical recipes* [29], particularmente a rotina *TQLI* que é uma rotina própria para diagonalizar matrizes tri-diagonais Hermitianas. Após usar este código para diagonalizar a matriz do canal obtivemos as grandezas **DOS**, **S** e **R** em função da energia, conforme as figuras (4.2) a (4.7).

Para a implementação numérica da *DOS*, o espectro de energia obtido após a diagonalização, foi dividido em janelinhas  $(E - E_j)$ , em seguida fizemos um histograma  $\sum_{E_j} \delta(E - E_j)$ ,

que é a contagem de quantos estados tem em cada janelinha de energia, normalizamos o histograma e obtivemos a *DOS*. Com isso foi possível conhecer qual o espectro de energia do nosso modelo.

Figura 4.3: Densidade de estados, Entropia de Shannon e  $R \times$  Energia para  $w_j = 0.25$  e  $w_h = 0.2$ .



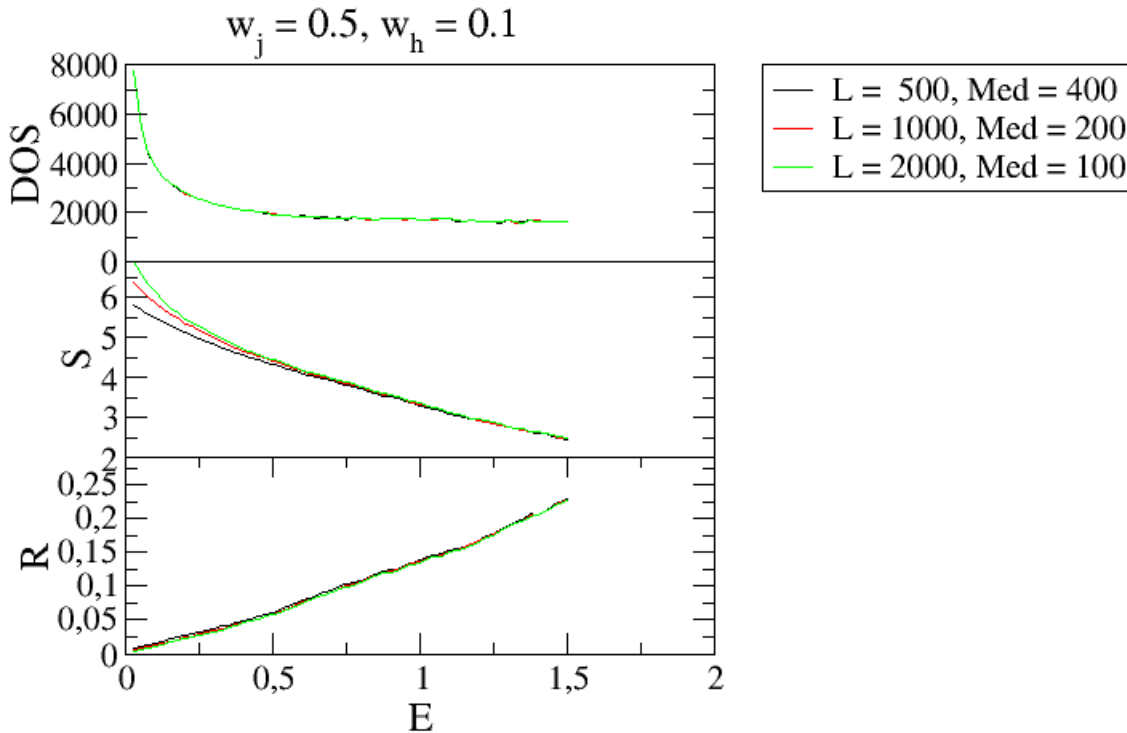
Fonte: Elaborada pelo autor através do xmgrace.

Iniciamos calculando a *DOS*, isto porque esta medida nos traz informações importantes a cerca das propriedades espectrais do canal. Através dela pode-se observar, por exemplo, a largura do espectro de energias possíveis, ou seja, banda de estados permitidos. Exemplificando: se a *DOS* for igual a zero para uma determinada energia isso indica que naquela energia existe total ausência de estados, por outro lado, se a *DOS* é grande, significa que temos uma quantidade grande de estados para uma dada energia. Ela nos informa a viabilidade do modelo para nossa *TEQ*.

Através da análise dos gráficos da *DOS* x *E* nas figuras (4.2) a (4.7), podemos verificar que independente da desordem imposta ao canal e as variações de campo magnéticos ( $w_h$ ),

para energias próximas de zero, obtivemos um grande número de estados e baixa rugosidade na curva. Se faz importante salientar que nosso canal possui uma desordem fraca e, para pequenas energias, temos grandes comprimentos de ondas. Estes modos com grandes comprimentos de onda não difratam nas pequenas imperfeições do canal. Este comportamento na região de energia baixa acaba promovendo uma curva de densidade de estados com baixa rugosidade [25]. O que concluimos com referência a  $DOS$  para o nosso modelo é que teremos que trabalhar com baixas energias, ou seja, energias abaixo de 0.5.

Figura 4.4: Densidade de estados, Entropia de Shannon e  $R \times$  Energia para  $w_j = 0.5$  e  $w_h = 0.1$ .



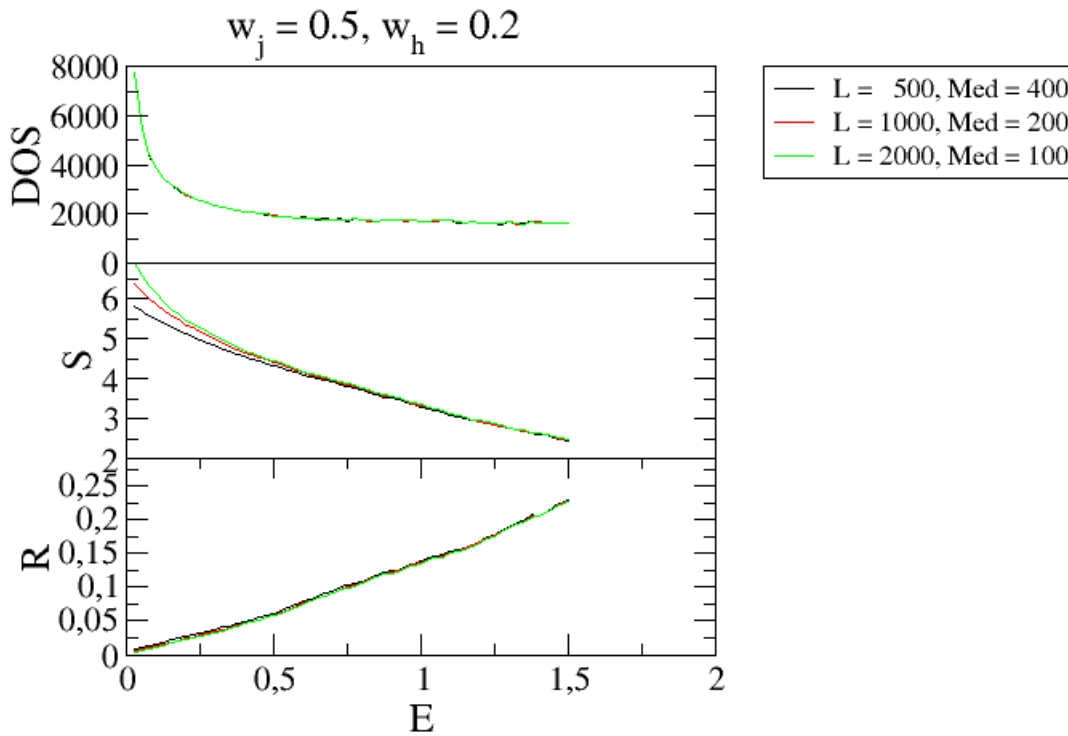
Fonte: Elaborada pelo autor através do xmgrace.

Em seguida calculamos a Entropia de Shannon e obtivemos os gráficos para  $S \times E$  conforme as figuras (4.2) a (4.7). Como explicamos na subseção (3.3.6) a entropia de Shannon nos diz sobre a quantificação da informação, isto é, para estados localizados (isolantes) temos  $S \approx 0$ , porém para o estados estendidos (metálicos) a entropia tem comportamento  $S \approx \ln(N)$ . Com isso podemos concluir que para energias em torno de 0 observamos uma



maior entropia e conseqüentemente o aparecimento de estados com boa condutividade ou boa transmissividade. Este comportamento também tem relação com a existência de modos com grande comprimento de onda na região de  $E \approx 0$ .

Figura 4.5: Densidade de estados, Entropia de Shannon e  $R \times$  Energia para  $w_j = 0.5$  e  $w_h = 0.2$ .



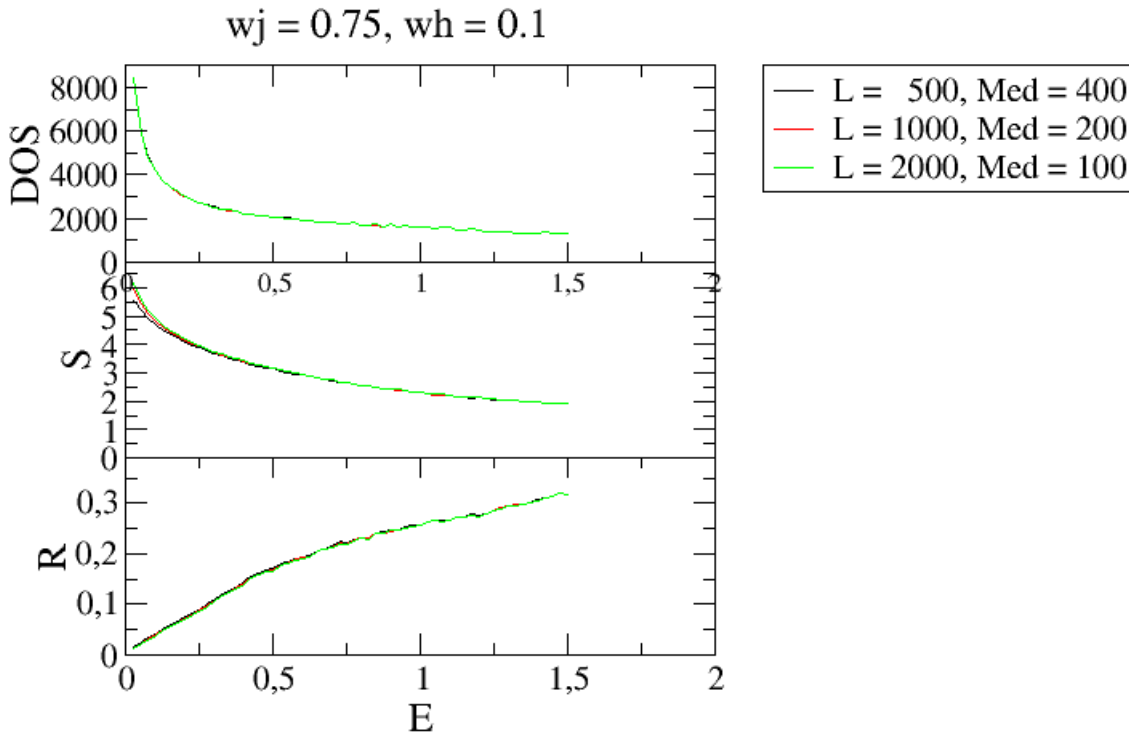
Fonte: Elaborada pelo autor através do xmgrace.

Por fim analisamos  $R \times E$ , gráficos (4.2) a (4.7). Não comentamos, mas fazemos agora, a escolha da letra R foi uma alusão a medida Resistência Elétrica. Conforme explicamos na subseção (3.3.7), para  $R \approx 0$  temos um estado estendido (ou metálico),  $R > 0$  é um estado localizado (ou isolante) e mais uma vez observamos estados metálicos para energias em torno de  $E \approx 0$ .

Após a análise dessas três medidas, concluímos que o nosso modelo de canal tem grande probabilidade de realizar uma boa transferência de estados quânticos na região de baixas energias, pois nesta região temos uma boa quantidade de estados e boa parte destes estados têm comprimento de localização grande, ou seja, são estados cuja a função de onda está

localizada sobre uma grande quantidade de spins (muitas dezenas e/ou centenas de spins). Portanto, considerando experimentos de transferência de estados quânticos em tamanhos pequenos, nesta mesma escala citada, acreditamos que o atual modelo pode sim ter bons resultados.

Figura 4.6: Densidade de estados, Entropia de Shannon e  $R \times$  Energia para  $w_j = 0.75$  e  $w_h = 0.1$ .



Fonte: Elaborada pelo autor através do xmgrace.

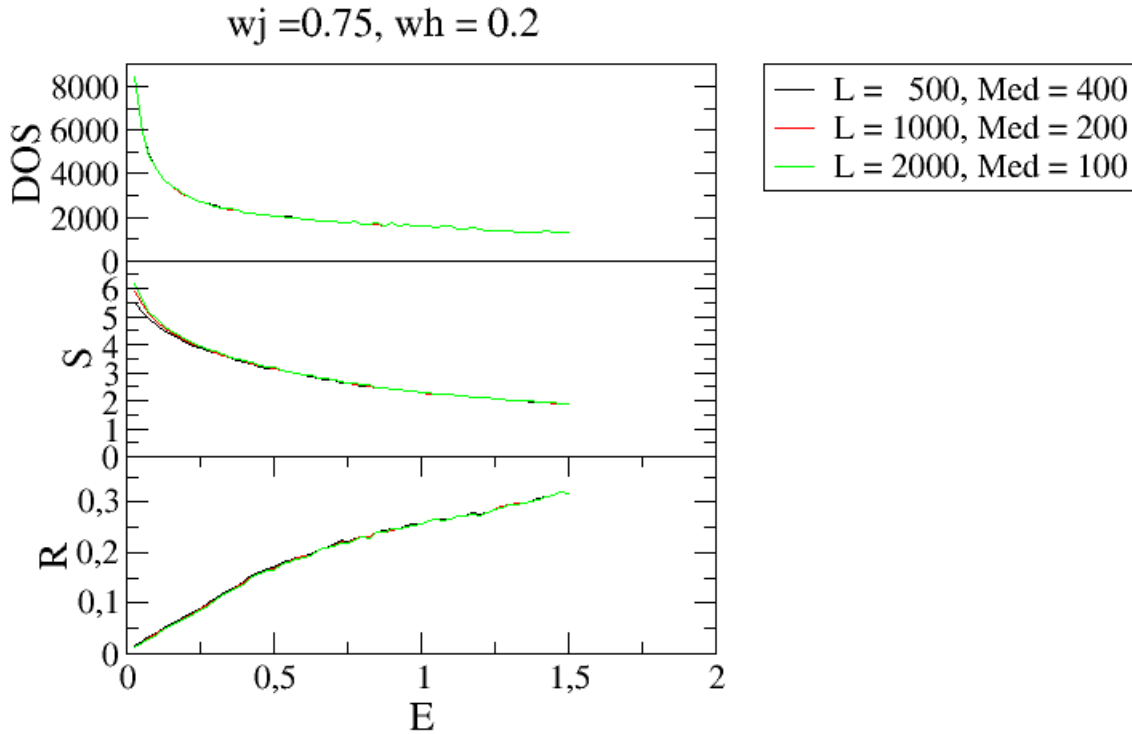
## 4.2 Experimento de transferência de estados quânticos

Aqui o nosso objetivo foi estudar a transferência de estados quânticos. Para análise da  $TEQ$  utilizamos o mesmo canal descrito anteriormente, porém foi acoplado a cada extremidade deste canal uma fonte  $S$  e um receptor  $R$  desta maneira, a cadeia total fica então com  $N$  spins. Para que a transferência de estados ocorra duas condições são necessárias: (1) A energia diagonal efetiva na fonte receptor deve ser dado por :  $\epsilon_S = \epsilon_R = E$  e (2) Os termos de *hopping*  $S - \text{canal}$  ( $J_1$ ) e  $R - \text{canal}$  ( $J_{N-1}$ ) devem ser idênticos ou seja,  $g = J_1 = J_{N-1}$  e

devem ser bem menores que o *hopping* médio dentro do canal (i.e.  $g \ll J$ ).

Nesta parte da pesquisa determinamos o tamanho do canal e analisamos as grandezas que medem a *TEQ*, primeiro versus  $E$  e em seguida versus  $g$ .

Figura 4.7: Densidade de estados, Entropia de Shannon e  $R \times$  Energia para  $w_j = 0.75$  e  $w_h = 0.2$ .



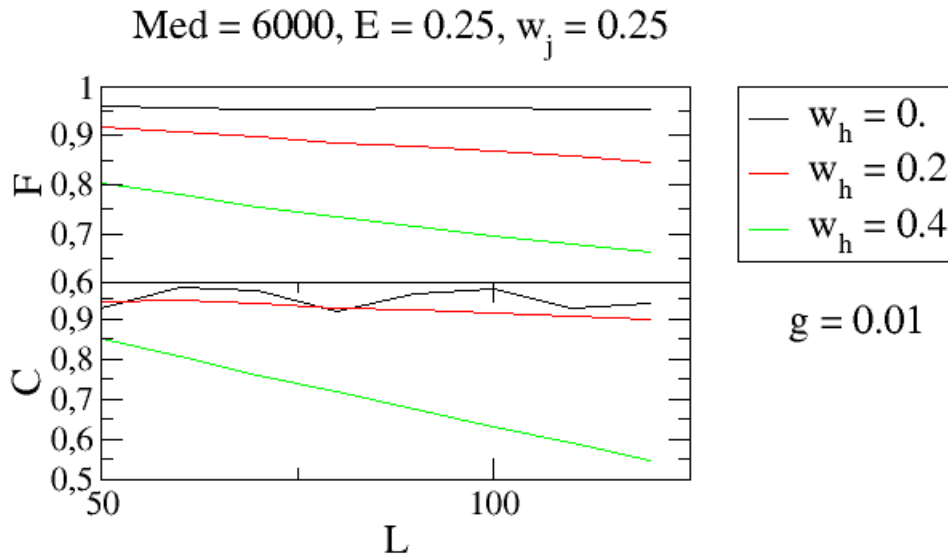
Fonte: Elaborada pelo autor através do xmgrace.

#### 4.2.1 A dependência da TEQ com o tamanho $L$ do Canal

Conforme comentamos na subseção (3.3.1), neste tipo de experimento de transferência de estados quânticos se faz importante trabalhar com sistemas pequenos, algumas dezenas ou centenas de spins. Isso é uma consequência do tipo de protocolo utilizado e do interesse em considerar transferência de estados quânticos dentro de pequenos circuitos quânticos. Assim vamos considerar, em geral, cadeias com  $N \ll 1000$ . Os experimentos numéricos envolvendo transferência de estados quânticos envolvem a diagonalização matricial, novamente usando *TQLI*, associado com o cálculo do operador de evolução temporal. Este procedimento foi

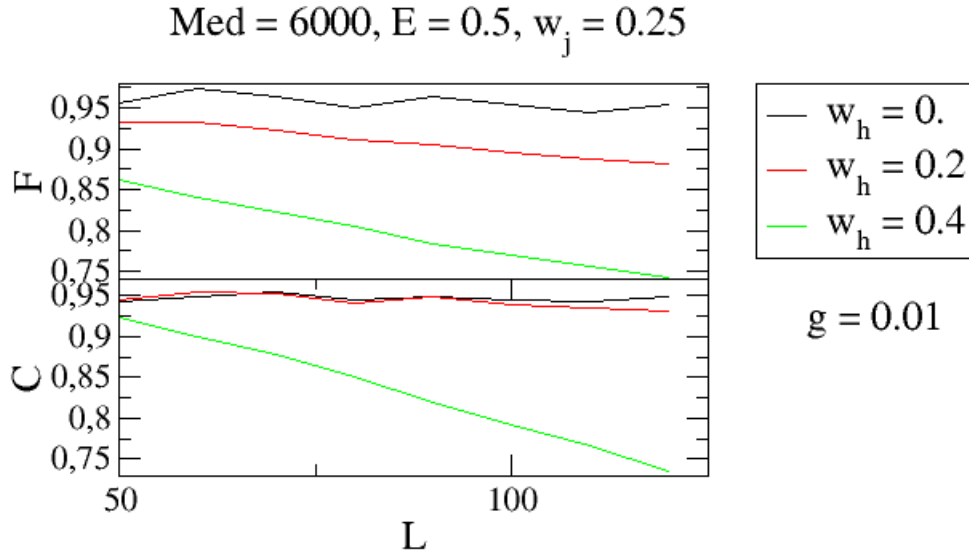
feito através de um código em fortran desenvolvido pela autora em colaboração com os orientadores e colaboradores. Neste mesmo código, calculamos a fidelidade e concorrência média para tempo longo. Os primeiros resultados da fidelidade e concorrência  $\times$  o tamanho do canal  $L$ , para energias  $E = 0.25$  e  $0.5$  podem ser encontrados nos gráficos (4.8) e (4.9). Utilizamos um número de amostras como sendo aproximadamente 6000. Estes gráficos foram obtidos para  $w_j = 0.25$  e  $w_h = 0., 0.2, 0.25$ .

Figura 4.8: Gráfico da Fidelidade e Concorrência  $\times L$  para energia  $E = 0.25$ .



Fonte: Elaborada pelo autor através do xmgrace.

Analisando os dois gráficos podemos tirar duas conclusões, a primeira que esperávamos obter sobre o tamanho do canal para ambas energias, onde verificamos que a fidelidade e a concorrência diminuem a medida que o tamanho do canal  $L$  aumenta, com isso podemos concluir que teremos uma  $TEQ$  mais eficiente para  $L < 100$ . A segunda conclusão é que podemos observar que tanto a Fidelidade quanto a Concorrência, na energia  $E = 0.25$  e ( $w_h = 0$ ) são consideravelmente próximas de 1, o que indica uma excelente transferência de estados quânticos.

Figura 4.9: Gráfico da Fidelidade e Concorrência  $\times N$  para energia  $E = 0.5$ .

Fonte: Elaborada pelo autor através do xmgrace.

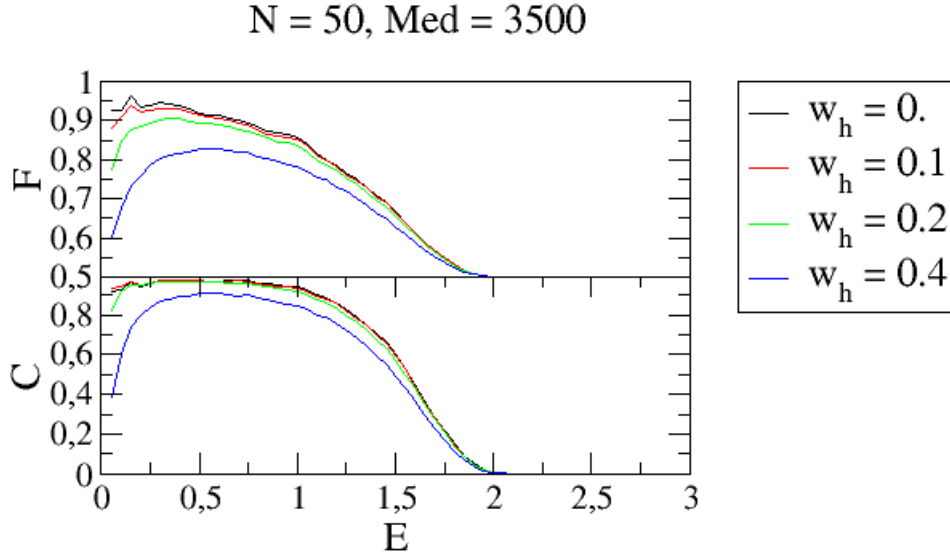
#### 4.2.2 Análise da TEQ através das grandezas Fidelidade e Concorrência $\times$ Energia

Aqui o nosso objetivo foi realizar os cálculos para transferência de estados quânticos e avaliar a dependência das quantidades fidelidade e concorrência em função da energia. Vamos considerar o tamanho do canal  $L = 50$  compatível com os resultados encontrados na subseção anterior (4.2.1). Neste estudo consideramos aproximadamente 4000 amostras, valor este que mostrou suficiente melhora dos resultados obtidos. Depois de escolhido o tamanho da cadeia e o número de amostras salientamos que os cálculos foram realizados para os campos magnéticos  $w_h = 0, 0.1, 0.2$  e  $0.4$ .

Começamos analisando a fidelidade  $F$ , como já comentamos a fidelidade mede o quanto um estado preparado no sítio  $S$  foi transmitido para o sítio  $R$ . Observamos através do gráfico (4.10) que obtivemos valores máximos da fidelidade na região de energias baixas, particularmente para energias na região  $[0, 0.25]$ , este resultado acaba confirmando a análise da subseção (4.2.1), para campos magnéticos pequenos baixos ( $w_h = 0$  e  $0.1$ ). No caso dos resultados para a concorrência podemos notar que os maiores valores de  $C$  também foram obtidos na região de energias baixas, particularmente na região  $[0, 0.5]$ , considerando campos

baixos  $w_h = 0$ . e  $0.1$ .

Figura 4.10: Fidelidade e Concorrência  $\times E$



Fonte: Elaborada pela autora através do xmgrace.

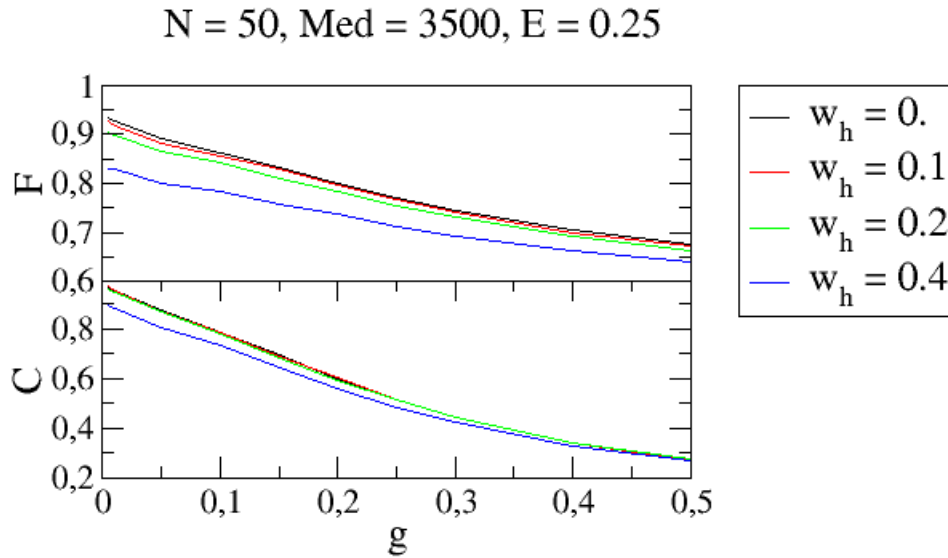
### 4.2.3 A dependência da transferência de estados quânticos com o parâmetro $g$

Na subseção anterior obtivemos que a concorrência e fidelidade apresentam valores máximos (próximos de 1) nas regiões de energia baixa ( $E < 0.5$ ). Nosso interesse agora é entender como o processo de transferência depende do acoplamento com o canal (valor de  $g$ ). Portanto vamos medir  $F$  e  $C$  em função de  $g$  para alguns valores de energias, especificamente  $E = 0.25$  e  $E = 0.5$ . A estratégia foi bem parecida com a utilizada na subseção anterior, para cada valor de  $w_h$  diagonalizamos o Hamiltoniano do canal, calculamos o operador de evolução temporal e fizemos as diversas medidas físicas de interesse. Uma síntese de nossos resultados podem ser encontrados nas figuras (4.11) , (4.12) , (4.13) e (4.14). Os cálculos foram feitos para os mesmos valores de campos magnético  $w_h = 0, 0.1, 0.2$  e  $0.4$ .

Verificamos anteriormente que na região de baixas energias temos modos com grande comprimento de localização no canal. Em particular o modo com energia  $E = 0$  é formalmente um modo metálico. Sendo assim, nosso objetivo agora é entender como o processo de

transferência pode ocorrer nesta região de baixas energias. Focamos em energias próximas do modo metálico pois, como já explicamos, tais modos têm grande comprimento de localização. Neste estudo fizemos uso das seguintes grandezas: fidelidade ( $F$ ), concorrência ( $C$ ), participação ( $P$ ),  $f_{1N}$  e  $f_c$ , já descritas na seção (3.3).

Figura 4.11: Fidelidade e Concorrência  $\times g$  para  $E = 0.25$

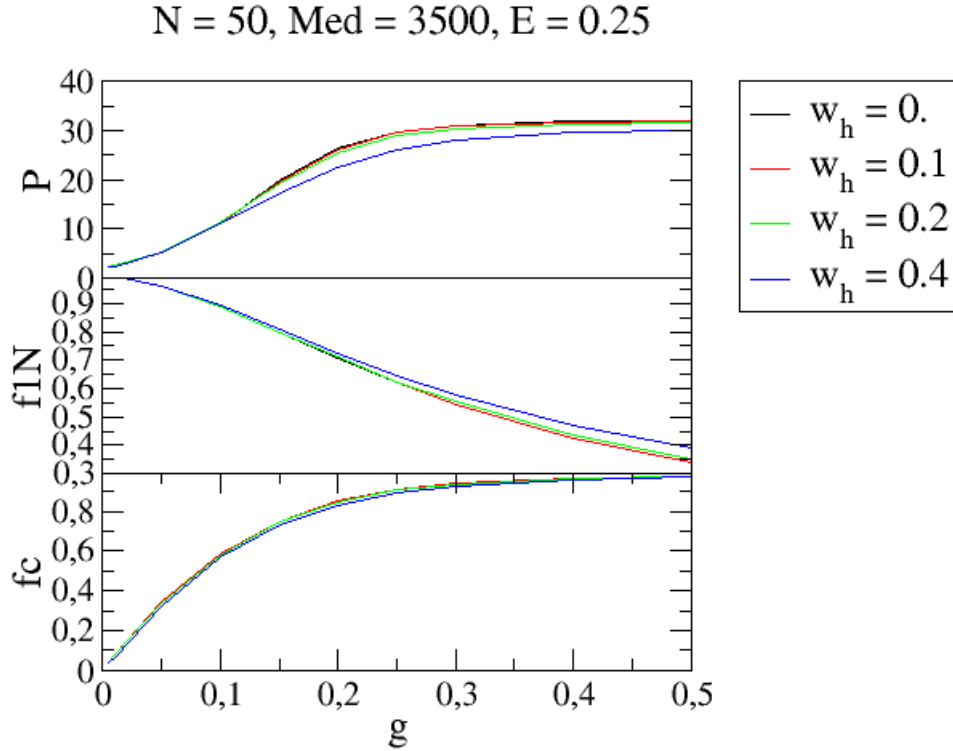


Fonte: Elaborada pela autora através do xmgrace.

Quando analisamos a  $F$  e  $C$  em função da energia de acoplamento  $g$ , verificamos que estas grandezas decaem consideravelmente a medida que  $g$  aumenta. Este resultado indica que para ocorrer a transferência de estados temos de considerar que a energia de acoplamento entre as extremidades ( $S$  e  $R$ ) e o canal seja bem pequena, conforme comentamos na seção (4.2). A análise das quantidades  $P$ ,  $f_{1N}$  e  $f_c$  versus  $g$  para energias 0.25 e 0.5 pode ser encontrada nas figuras (4.12) e (4.14). A participação nos informa o quão espalhado ou não se encontra o estado, se a  $P$  for pequena temos que o estado ficou localizado, nesta situação existe a probabilidade do estado quântico ter sido transferido de  $S$  para  $R$ , se  $P$  for grande, significa que o estado se espalhou pelo canal e não houve transferência de estado. Observando os gráficos (4.12) e (4.14) nota-se uma maior probabilidade de transferência para  $g \approx 0.01$  e foi essa energia que tomamos em nossos cálculos, pois já sabíamos que esta energia deveria ser muito pequena, essa é uma das condições para realização da  $TEQ$ , conforme já comentamos

na seção (4.2).

Figura 4.12: Participação,  $f_{1N}$  e  $f_c \times g$  para  $E = 0.25$



Fonte: Elaborada pela autora através do xmgrace.

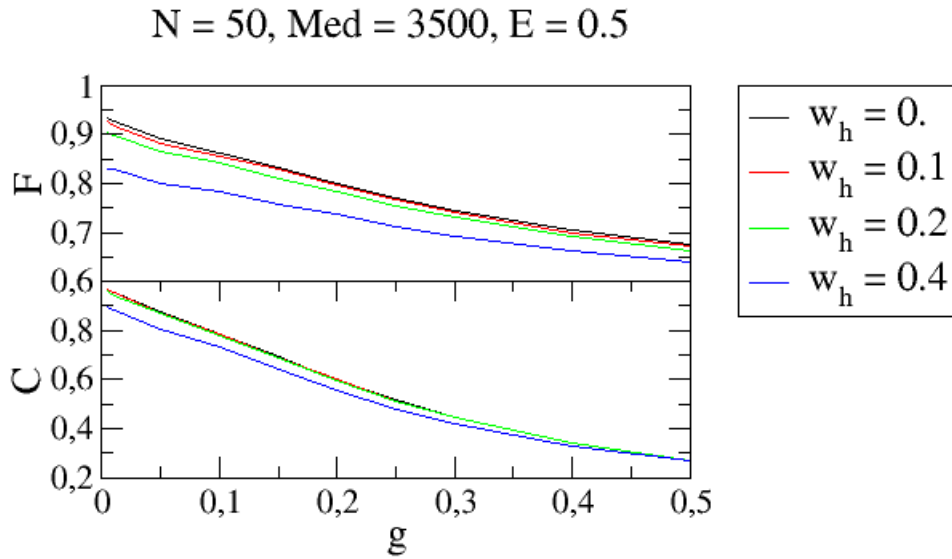
A grandeza  $f_{1N}$  nos diz se o estado encontra-se localizado nas bordas, ou melhor, se  $f_{1N} = 1$  significa que o estado está totalmente preso nos spins localizados em  $S$  e  $R$ , assim pode ter ocorrido  $TEQ$ . Observando os gráficos, verificamos que para  $g$  pequeno os cálculos indicam  $f_{1N} \approx 1$ . Este resultado novamente mostra a possibilidade de  $TEQ$  quando  $g$  é pequeno.

Para  $f_c \approx 1$  temos que o estado encontra-se preso no canal e assim não existe possibilidade de  $TEQ$ . Mas uma vez observando os gráficos, nos certificamos que para  $g$  pequeno existe possibilidade de  $TEQ$ . A medida que  $g$  cresce a função  $f_c \approx 1$  sugerindo a mistura dos estados das bordas com os estados do canal. Esta mistura acaba impedido o processo de transferência de estados entre a fonte e o receptor. Então existe a necessidade de um ajuste entre o acoplamento do canal com os sítios externos. Este resultado foi também encontrado dentro da abordagem de modelos XY [36]. Dentro do contexto do subespaço de



um mágnon considerando spins de Heisenberg, nossos resultados sugerem que a transferência pode acontecer no regime de desordem fraca e campo magnético fraco. Salientando também que a transferência, mesmo no regime de desordem fraca, pode ocorrer na região de baixas energias.

Figura 4.13: Fidelidade e Concorrência  $\times g$  para  $E = 0.5$

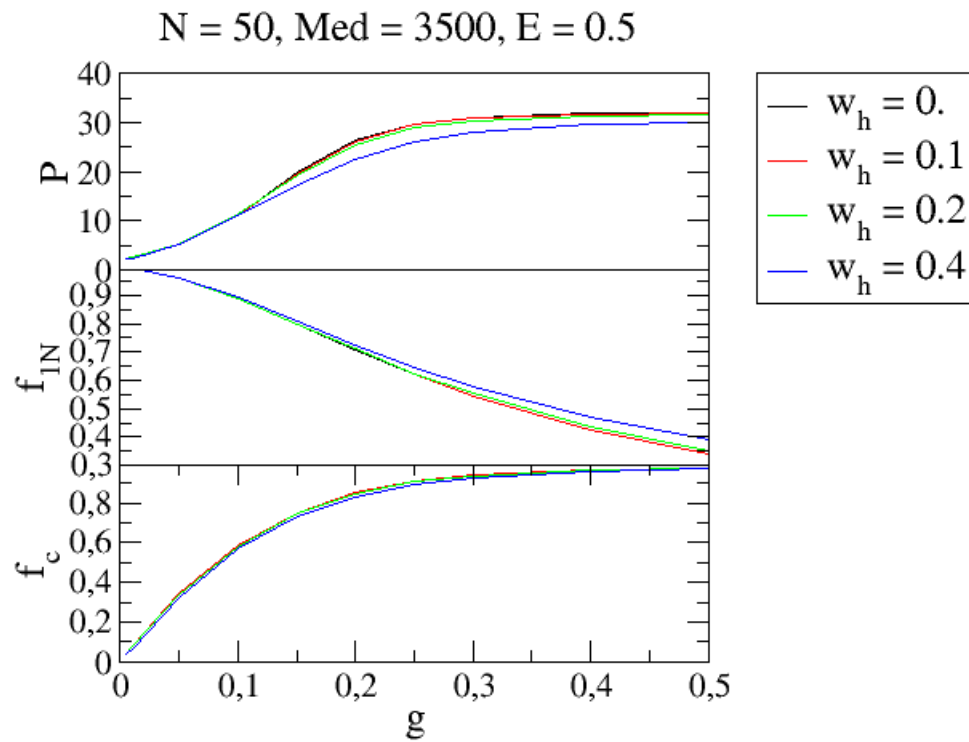


Fonte: Elaborada pela autora através do xmgrace.

O estudo das diversas quantidades físicas ( $F$ ,  $C$ ,  $P$ ,  $f_{1N}$ ,  $f_c$  etc) propiciou um considerável panorama acerca da possibilidade de transferência de estados de um mágnon através de cadeias desordenadas. A fidelidade  $F$  e a concorrência  $C$  fornecem medidas diretas acerca da transferência entre  $S$  e  $R$  bem como o nível de emaranhamento. As medidas de  $P$ ,  $f_{1N}$ ,  $f_c$  apresentam uma descrição do padrão espacial do pacote de onda no limite de tempos longos. Combinando estas informações podemos entender com certa completude a fenomenologia encontrada em nossos estudos. No limite de desordem fraca, desordem mais fraca que o termo de *hopping* médio, temos a possibilidade de encontrar  $TEQ$  entre  $S$  e  $R$  se a energia efetiva destes spins for ajustada próximo da região de baixas energias. Os modos de baixa energia com grandes comprimento de localização existentes dentro do canal, fracamente acoplado com os estados em  $S$  e  $R$ , propiciam a transferência de estados. Nosso estudo também demonstrou numericamente que este fenômeno ainda pode ser observado no limiar

de fracos campos magnéticos externos.

Figura 4.14: Participação,  $f_{1N}$  e  $f_c \times g$  para  $E = 0.5$



Fonte: Elaborada pela autora através do xmgrace.

---

---

# CAPÍTULO 5

---

## CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Nesta dissertação investigamos a transferência de mágnons em cadeias desordenadas de Heisenberg na presença de campo magnético. O modelo utilizado nesta dissertação para Transferência de Estados Quânticos (*TEQ*), consiste em uma cadeia unidimensional isotrópica, apresentando interações entre os spins do tipo ferromagneto de Heisenberg. A cadeia com  $N$  spins possui um canal  $L$  com  $N - 2$  spins, em uma extremidade deste canal foi acoplada um spins fonte  $S$  e na outra extremidade um spin receptor  $R$ , em seguida realizada a transmissão através do protocolo que Sougato Bose utilizou em seu artigo [28].

Realizamos a diagonalização do Hamiltoniano descobrindo qual o tamanho ideal do canal para o nosso modelo, fixando então o tamanho de  $N = 50$  spins. Após a evolução temporal do mágnon, fizemos a análise da viabilidade da *TEQ* através do estudo de diversas grandezas com fidelidade, concorrência, participação, densidade de estados (DOS), entropia de Shanon,  $R$  e outras, onde pudemos tirar diversas conclusões acerca das autoenergias, onde verificamos que para o modelo em questão realizar uma boa *TEQ* seria necessários valores abaixo de 0.5. Calculamos também a melhor energia entre os acoplamentos ( $S$  e  $R$ ) e o canal, onde encontramos o valor em torno de  $g = 0.01$ . Obtivemos informação até quanto a perturbação de campo magnético não interferiria em nosso modelo e conseqüentemente na *TEQ* e observamos que a partir de  $wh = 0.2$  não teríamos uma boa transferência de estados

---

quânticos. Por fim concluímos que dentro do regime de desordem fraca e baixas energias nosso modelo tem grandes chances de realizar uma boa transferência de estados quânticos de um mágnon. Uma perspectiva óbvia de nosso trabalho requer estudar este tipo de experimento em sistemas com dimensão elevada, por exemplo, sistemas "quasi-unidimensionais" ou mesmo topologias bidimensionais. Este tipo de sistema é pouco estudado na literatura devido aos desafios analíticos/numéricos, entretanto consiste de uma modelagem mais robusta contendo efeitos topológicos mais fáceis de simular experimentalmente.

---

# REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] M Mitchell Waldrop. The chips are down for moore's law. *Nature News*, 530(7589):144, 2016.
- [2] Gordon E Moore. Cramming more components onto integrated circuits. *Proceedings of the IEEE*, 86(1):82–85, 1998.
- [3] Thaddeus D Ladd, Fedor Jelezko, Raymond Laflamme, Yasunobu Nakamura, Christopher Monroe, and Jeremy Lloyd O'Brien. Quantum computers. *nature*, 464(7285):45–53, 2010.
- [4] Luiz Henrique de O.Bueno. A computação quântica inteligência artificial. [ur-lhttps://https://pt.linkedin.com/pulse/computa](https://pt.linkedin.com/pulse/computa), 2022.
- [5] Alastair Kay. Perfect, efficient, state transfer and its application as a constructive tool. *International Journal of Quantum Information*, 8(04):641–676, 2010.
- [6] Tobias J Osborne and Noah Linden. Propagation of quantum information through a spin system. *Physical Review A*, 69(5):052315, 2004.
- [7] Antoni Wójcik, Tomasz Łuczak, Paweł Kurzyński, Andrzej Grudka, Tomasz Gdala, and Małgorzata Bednarska. Unmodulated spin chains as universal quantum wires. *Physical Review A*, 72(3):034303, 2005.

- [8] Davide Castelvecchi. Ibm's quantum cloud computer goes commercial. *Nature*, 543(7644), 2017.
- [9] John Preskill. Quantum computing in the nisq era and beyond. *Quantum*, 2:79, 2018.
- [10] Frank Arute, Kunal Arya, Ryan Babbush, Dave Bacon, Joseph C Bardin, Rami Barends, Rupak Biswas, Sergio Boixo, Fernando GSL Brandao, David A Buell, et al. Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. *Nature*, 574(7779):505–510, 2019.
- [11] David Jeffrey Griffiths and Lara Freitas. *Mecânica quântica*. Pearson Prentice Hall, 2011.
- [12] Mehran Kardar. *Statistical physics of particles*. Cambridge University Press, 2007.
- [13] Richard Phillips Feynman, Robert B Leighton, and Matthew Sands. *Lições de física de Feynman: edição definitiva*. Bookman, 2008.
- [14] Sílvio RA Salinas. *Introdução a física estatística vol. 09*. Edusp, 1997.
- [15] Werner Heisenberg. *Zur theorie des ferromagnetismus*. Springer, 1985.
- [16] Paul Adrien Maurice Dirac. On the theory of quantum mechanics. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 112(762):661–677, 1926.
- [17] Robert M White, Robert M White, and Bradford Bayne. *Quantum theory of magnetism*, volume 1. Springer, 1983.
- [18] Steven H Simon. *The Oxford solid state basics*. OUP Oxford, 2013.
- [19] Anil Prabhakar and Daniel D Stancil. *Spin waves: Theory and applications*, volume 5. Springer, 2009.
- [20] Anderson Magno Chaves Cunha. Ondas de spin em sistemas magnéticos bidimensionais com interação de troca aleatória. 2009.

- [21] Anil Prabhakar and Daniel D Stancil. *Spin waves: Theory and applications*, volume 5. Springer, 2009.
- [22] Ivan S Oliveira. *Introdução à física do estado sólido*. Editora Livraria da Física, 2005.
- [23] Yuriy A Kosevich and Vladimir V Gann. Magnon localization and bloch oscillations in finite heisenberg spin chains in an inhomogeneous magnetic field. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 25(24):246002, 2013.
- [24] Philip W Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Physical review*, 109(5):1492, 1958.
- [25] Francisco Anacleto Barros Fidelis de MOURA. Transição de anderson em sistemas de baixa dimensionalidade com desordem correlacionada. 2003.
- [26] Ilia Mikhaï Lifshits. *Introduction to the theory of disordered systems*.
- [27] Bernhard Kramer and Angus MacKinnon. Localization: theory and experiment. *Reports on Progress in Physics*, 56(12):1469, 1993.
- [28] Sougato Bose. Quantum communication through an unmodulated spin chain. *Physical review letters*, 91(20):207901, 2003.
- [29] William H Press, Saul A Teukolsky, William T Vetterling, and Brian P Flannery. *Numerical recipes in Fortran 90 the art of parallel scientific computing*. Cambridge university press, 1996.
- [30] Peter J Bussey. Modern quantum mechanics: by jj sakurai and jim napolitano, cambridge, cambridge university press, 2020, 566 pp., £ 59.99 (hardback), isbn: 978-1-10858-728-0. scope: textbook. level: advanced undergraduate. postgraduate, 2021.
- [31] DM Nunes, A Ranciaro Neto, and FABF de Moura. Coherent magnon dynamics in ferromagnetic models with nonuniform magnetic field and correlated disorder. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 410:165–170, 2016.

- 
- [32] Renato Ferreira Dutra, Demitry Messias dos Santos, Caio Vitor Castro Mendes, and Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura. Elementos da teoria da localização de anderson.
- [33] S Hill. *Phys. rev. lett.*, 78(1997) 5022; wootters w. k. *Phys. Rev. Lett.*, 80:2245, 1998.
- [34] Claude E Shannon. Communication theory of secrecy systems. *The Bell system technical journal*, 28(4):656–715, 1949.
- [35] Richard Zallen. *The physics of amorphous solids*. John Wiley & Sons, 2008.
- [36] Guilherme MA Almeida, Francisco ABF de Moura, and Marcelo L Lyra. Quantum-state transfer through long-range correlated disordered channels. *Physics Letters A*, 382(20):1335–1340, 2018.