

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

Scuola di Scienze
Dipartimento di Fisica e Astronomia
Corso di Laurea in Fisica

QUANTUM RANDOM WALK E LOCALIZZAZIONE DI ANDERSON

Relatore:
Prof. Elisa Ercolessi

Presentata da:
Alessandro Sinibaldi

Anno Accademico 2020/2021

Abstract

I due nuclei tematici principali del presente elaborato sono il modello del Quantum Random Walk (QRW) e il fenomeno della localizzazione di Anderson, i quali vengono prima trattati separatamente nei loro aspetti più rilevanti e in seguito ne viene esaminata la relazione reciproca. In particolare, dopo una breve introduzione sul Random Walk classico, si espone la formalizzazione teorica del QRW e si procede ad un'analisi dettagliata della distribuzione di probabilità del processo, con maggiore attenzione rivolta al QRW di Hadamard. La localizzazione di Anderson viene illustrata a partire dal modello *tight-binding* di un elettrone in un reticolo, di cui si affronta sia la versione in assenza di disordine che quella 1D disordinata, con inizialmente una descrizione di natura teorica e dopo uno studio di tipo numerico basato su diversi metodi computazionali. L'ultima parte è dedicata alla connessione tra i due argomenti e rappresenta il punto di arrivo dell'intero elaborato, dal momento che essa verte sulla localizzazione di Anderson per un QRW 1D con disordine. Viene presentato il modello e si ricavano risultati analitici che caratterizzano le proprietà di localizzazione del sistema, con approfondimento dei casi di disordine completo e di disordine debole. Anche nel capitolo finale è riservato spazio alle simulazioni, che vengono impiegate per studiare numericamente la localizzazione e per verificare la correttezza degli esiti dei calcoli teorici.

Indice

Introduzione	i
1 Random Walk	1
1.1 RW a tempo discreto su un reticolo 1D finito	1
1.1.1 Distribuzione di probabilità	2
1.1.2 Momenti della distribuzione	3
1.1.3 RW <i>unbiased</i>	3
1.1.4 Regime diffusivo e balistico	4
1.1.5 Distribuzione limite ed implementazione del RW	4
2 Quantum Random Walk	7
2.1 Generalità sul QRW 1D	8
2.1.1 Operatore di evoluzione	9
2.2 QRW a tempo discreto su un reticolo 1D finito	13
2.2.1 Equazioni di evoluzione e relazione di dispersione	13
2.2.2 Implementazione e distribuzione di probabilità	15
2.2.3 <i>Coin</i> di Hadamard	16
2.3 QRW di Hadamard	16
2.3.1 Caso asimmetrico	16
2.3.2 Caso simmetrico	18
2.4 Studio della distribuzione di probabilità	19
2.4.1 I tre teoremi	20
2.4.2 Analisi di Fourier del QRW di Hadamard	21
2.4.3 Momenti della distribuzione	24
2.4.4 Tempo di mescolamento	26
3 Localizzazione di Anderson	28
3.1 Modello <i>tight-binding</i>	29
3.2 Assenza di disordine	31

3.3	Caso disordinato 1D	34
3.3.1	Analisi dello spettro energetico	35
3.3.2	Stima della lunghezza di localizzazione degli autostati a bassa energia	37
3.4	Risultati numerici	37
3.4.1	Diagonalizzazione esatta	37
3.4.2	Matrici di trasferimento	43
3.4.3	Evoluzione temporale	45
4	Localizzazione di Anderson per un QRW 1D disordinato	47
4.1	Evoluzione di un QRW con disordine di fase	48
4.1.1	Diagonalizzazione esatta	48
4.2	Rappresentazione tridiagonale e variabile di Riccati	52
4.3	Disordine completo	54
4.4	Disordine debole	57
	Conclusione	60
	Appendice	62
4.5	Forma asintotica delle funzioni d'onda con il metodo della fase sta- zionaria	62
	Bibliografia	66
	Ringraziamenti	68

Elenco delle figure

1.1	Grafici della distribuzione numerica e di quella limite del RW <i>unbiased</i>	5
2.1	Rappresentazione della sfera di Bloch per un singolo <i>qubit</i>	10
2.2	Grafico della distribuzione di probabilità del QRW di Hadamard	17
2.3	Grafico della distribuzione di probabilità del QRW di Hadamard simmetrico	19
2.4	Grafici della distribuzione $p(n, t)$ esatta di quella approssimata con il metodo della fase stazionaria	24
2.5	Grafici delle distribuzioni $p(n, t)$ e $p'_{slow}(n, t)$	25
3.1	Grafici delle probabilità di localizzazione di alcuni autostati dei livelli meno energetici con diversi gradi di disordine.	38
3.2	Grafici della lunghezza di localizzazione ξ in funzione dell'energia con diversi gradi disordine	40
3.3	Grafici del reciproco dell'IPR in funzione dell'energia con reticoli di dimensione N diversa	41
3.4	Grafico del reciproco dell'IPR per un dato valore di energia in funzione della dimensione N del reticolo e relativo <i>fit</i>	42
3.5	Grafici dell'inverso dell'esponente di Lyapunov λ_1 in funzione dell'energia con diversi gradi disordine	44
3.6	Grafici dell'evoluzione temporale delle distribuzioni di probabilità di tre pacchetti d'onda di autostati con tre diversi gradi di disordine	46
4.1	Grafici delle probabilità di localizzazione di alcuni autostati per il QRW con diversi gradi di disordine di fase.	49
4.2	Grafici nel piano complesso dello spettro degli autovalori per il QRW con diversi gradi di disordine di fase.	50
4.3	Grafico 3D dell'inverso dell'IPR normalizzato con N per diversi valori di W e θ	52

4.4	Istogrammi 3D della variabile di Riccati nel piano complesso con due differenti valori di θ	55
4.5	Grafico in scala semilogaritmica del confronto tra formula analitica e risultati numerici per la lunghezza di localizzazione ξ in funzione di θ	57
4.6	Grafico in scala semilogaritmica del confronto tra espressione analitica ed analisi numerica per l'esponente di Lyapunov λ , normalizzato con la varianza delle fasi casuali, in funzione di β per diversi valori di θ	58

Elenco delle tabelle

1.1	Valori delle probabilità di occupazione delle posizioni dopo T passi per il RW <i>unbiased</i> a partire dall'origine	4
2.1	Valori delle probabilità di occupazione delle posizioni dopo T passi con <i>coin</i> di Hadamard a partire dallo stato $ \uparrow\rangle \otimes 0\rangle$	17
2.2	Valori dei momenti ottenuti dall'integrazione di $p_{slow,\alpha}$ e dal calcolo esatto con p	26

Introduzione

A partire dalla scoperta della meccanica quantistica, si è venuti per la prima volta a contatto con il carattere controintuitivo delle leggi naturali che regolano l'infinitamente piccolo. La fisica del mondo quantistico, infatti, è nella sua essenza intrinsecamente differente da quella valida in ambito classico, fino al punto da essere in certi casi in apparente contraddizione con essa. Con il passare del tempo, la scienza è riuscita sempre meglio a comprendere i principi fondamentali alla base della realtà quantistica e a spiegare nel dettaglio il funzionamento dei fenomeni osservati alle piccole scale. Inoltre, è stato possibile anche usufruire dei meccanismi quantistici per costruire tecnologie innovative o più performanti di quelle esistenti, che hanno permesso di portare progresso e concreti benefici alle società moderne. Queste tecnologie quantistiche, tra le quali si possono citare come esempi il laser, gli orologi atomici, i dispositivi a semiconduttore, permeano ormai completamente la vita quotidiana di ogni individuo.

Negli anni più recenti, una grande attenzione si è focalizzata sullo studio dello sfruttamento delle proprietà dei sistemi quantistici per l'implementazione di calcoli computazionali, portando così importanti sviluppi nell'ambito della computazione quantistica e, in generale, della teoria dell'informazione quantistica. Da un lato, sono stati dimostrati un certo numero di notevoli risultati teorici, tra i quali uno dei più rilevanti è sicuramente l'algoritmo quantistico creato da Peter Shor, il quale implementa la fattorizzazione di un numero intero in un tempo che cresce in modo polinomiale con la lunghezza del numero stesso. Dall'altro lato, è iniziato l'immenso sforzo tecnologico e sperimentale volto alla costruzione dei primi computer quantistici, ossia calcolatori in grado di mettere in pratica algoritmi quantistici su reali sistemi fisici, con lo scopo di risolvere concretamente certi problemi computazionali più velocemente ed efficacemente rispetto ai computer classici. In ogni caso, l'avanzamento di questo ambito di ricerca ha portato alla scoperta di nuovi processi quantistici di significativo interesse, caratterizzati da aspetti che li differenziano nettamente dalle loro controparti classiche. Tra questi si colloca indubbiamente il Quantum Random Walk (QRW), ovvero la versione quantistica del ben noto Ran-

dom Walk (RW) che costituisce uno dei più semplici processi stocastici conosciuto già a partire dai primi del '900.

Il RW è adottato come modello matematico per un elevato numero di problemi affrontabili con un approccio probabilistico, i cui ambiti di appartenenza vanno dalla fisica all'economia e dalla matematica alla medicina. Un'applicazione rilevante del RW, in particolare, è quella della creazione di algoritmi casuali in *computer science*, dal momento che esso fornisce un paradigma generale per campionare ed esplorare insiemi molto vasti di strutture combinatoriali. Questi fatti suggeriscono, quindi, che allo stesso modo il QRW possa essere usato per modellizzare con successo il comportamento di certi sistemi quantistici, anche dal momento che la teoria quantistica è fondata sul concetto di probabilità, e possa essere impiegato per la progettazione di efficienti algoritmi di tipo quantistico [11].

Dopo aver introdotto brevemente il QRW, viene ora presentato il fenomeno della localizzazione di Anderson, che rappresenta il secondo nucleo tematico fondamentale di questo elaborato. La localizzazione di Anderson consiste generalmente nell'assenza di diffusione di onde in un mezzo disordinato e, dal momento che queste onde possono essere funzioni d'onda di una particella quantistica, comporta quindi la localizzazione di una particella in una porzione ristretta del dominio spaziale quando è presente disordine. Da quando questo fenomeno è stato per la prima volta introdotto da Anderson nel 1958 [3] per una particella soggetta ad un potenziale casuale, esso ha continuamente suscitato un grande interesse nella comunità scientifica e ha stimolato numerose ricerche. La localizzazione di Anderson, infatti, riveste un ruolo centrale nella transizione della materia da conduttrice ad isolante (in inglese *metal-insulator transition*) ed è presente nei meccanismi di trasporto di onde di varia natura. Il fenomeno di Anderson è strettamente correlato anche alla localizzazione a molti corpi quantistici (in inglese *many body localization*), un argomento intensamente studiato negli ultimi anni. In generale, i processi in cui compare la localizzazione di Anderson sono molteplici e di elevata rilevanza fisica.

Recentemente, in alcuni lavori [6, 9, 18] la localizzazione di Anderson è stata analizzata nell'ambito del QRW dotato di un certo grado disordine, ottenendo interessanti risultati sia dal punto di vista teorico che numerico. In questo modo, si è verificato che a partire dal modello del QRW è possibile riprodurre fenomeni quantistici non banali, come la localizzazione, che sono effettivamente osservati nei sistemi fisici reali. La connessione tra QRW e localizzazione di Anderson è il tema dell'ultimo capitolo della presente trattazione e in esso si mettono a fianco i due argomenti dopo che sono stati discussi separatamente nei capitoli precedenti. Di seguito viene esposta la struttura di questo elaborato con una concisa presentazione

del contenuto di ogni suo capitolo.

Nel capitolo 1 viene descritto brevemente il RW nei suoi aspetti fondamentali. In particolare, ci si concentra sulla versione a tempo discreto e su un reticolo 1D, dal momento che essa rappresenta il caso più semplice che permette di cogliere le caratteristiche rilevanti del modello. Lo scopo di questa sintetica prima parte è quello di richiamare alcuni concetti basilari dei processi stocastici e di permettere, in seguito, l'individuazione delle differenze e delle affinità esistenti tra questo RW classico e la sua forma quantistica, che viene illustrata nel proseguio.

Il capitolo 2 è dedicato al primo nucleo tematico centrale dell'elaborato, ovvero il QRW. Nella prima sezione, si introduce la formalizzazione del modello e si descrive la dinamica di evoluzione nel caso 1D generale. Successivamente, si approfondisce lo studio della versione a tempo discreto su un reticolo 1D, analoga a quella esaminata precedentemente per il RW classico. La sezione seguente è incentrata su un'analisi più dettagliata del QRW di Hadamard, sia per quanto riguarda il caso asimmetrico che simmetrico. Su questo tipo di cammino è focalizzata anche l'ultima parte, nella quale si derivano teoremi che descrivono comportamenti notevoli dell'associata distribuzione di probabilità.

Nel capitolo 3 viene trattato il fenomeno della localizzazione di Anderson. Dopo aver presentato in modo generale il modello *tight-binding* di un elettrone soggetto ad un potenziale periodico, viene affrontato prima il caso con reticolo privo di disordine e poi quello con reticolo disordinato, ricavando per entrambi risultati rilevanti relativamente agli autostati e allo spettro di energia. Nell'ultima parte del capitolo si studia numericamente il verificarsi della localizzazione attraverso simulazioni, utilizzando i metodi computazionali della diagonalizzazione esatta della Hamiltoniana, per calcolare autostati ed autovalori e conseguentemente per analizzare la lunghezza di localizzazione ed il rapporto di partecipazione inversa (in sigla inglese IPR), delle matrici di trasferimento per esaminare l'esponente di Lyapunov associato e dell'evoluzione temporale di pacchetti d'onda di autostati.

Il capitolo 4 si occupa della localizzazione di Anderson per un QRW 1D disordinato, connettendo tra loro gli argomenti affrontati nei capitoli precedenti e costituendo in un certo senso il punto di arrivo del presente elaborato. Il disordine è inserito nel modello di QRW tramite l'aggiunta nelle equazioni di evoluzione di un fattore di fase casuale. In primo luogo, si calcolano numericamente attraverso la diagonalizzazione esatta gli autostati e lo spettro degli autovalori, per poi passare allo studio dell'IPR. Successivamente, si procede ad una formulazione dell'equazione di evoluzione attraverso una rappresentazione tridiagonale e si ricava una mappa della variabile di Riccati che compare nella definizione dell'esponente di Lyapunov del

sistema, con il quale si può stimare la lunghezza di localizzazione. In seguito, viene eseguita un'analisi più approfondita dei due casi notevoli di disordine completo e di disordine debole, ricavando per il primo di essi un'espressione dell'esponente di Lyapunov in funzione del parametro di accoppiamento e per il secondo la relazione di dipendenza dell'esponente dagli autovalori dello spettro. Viene verificato, infine, che le precedenti due formule analitiche sono in accordo con i risultati ottenuti a partire dai calcoli numerici dell'esponente di Lyapunov.

Tutte le simulazioni numeriche realizzate in ogni capitolo con cui sono state generate ciascuna figura e tabella sono state implementate con codice originale scritto appositamente per la presente trattazione. Nel *repository* GitHub [16] sono reperibili tutti i *files* sorgente di codice, prevalentemente in linguaggio Python, e alcuni documenti di testo contenenti gli esiti di certe simulazioni (nei casi in cui si è utilizzato un sistema di *input/output*). Il lettore interessato, dunque, può eseguire autonomamente i programmi così da verificare che i risultati ottenuti coincidono con quelli illustrati nell'elaborato e può variare i parametri rilevanti di ogni simulazione per produrre indipendentemente risultati propri.

Capitolo 1

Random Walk

Il Random Walk (RW) è un processo stocastico in cui un oggetto (detto *walker*) si muove in un dato dominio spaziale attraverso passi successivi con direzioni date da certi valori di probabilità. Le applicazioni del modello del RW sono molto numerose e alcuni esempi sono la modellazione di fenomeni fisici quali il moto Browniano e il ripiegamento di polimeri, la simulazione dell'andamento dei prezzi dei titoli finanziari e la creazione di algoritmi in *computer science*. Esistono numerose versioni di RW a seconda della tipologia di dominio in cui avviene il movimento, della natura del parametro temporale che scandisce l'evoluzione e del modo in cui sono definite le probabilità dei diversi passi.

Il fatto di poter implementare un RW su un *computer*, in particolare, richiede necessariamente che il tempo sia una variabile a valori discreti e l'insieme delle posizioni assumibili dal *walker* venga a sua volta discretizzato e reso finito, per cui il movimento avviene su un reticolo o eventualmente anche su un grafo con passi successivi separati da un certo intervallo temporale. Uno degli esempi più semplici di RW di questo tipo, ma che è al contempo in grado di mettere in evidenza le proprietà più caratteristiche del processo, è il RW a tempo discreto su un reticolo 1D finito [12]. Questo caso rilevante viene trattato nel presente capitolo, con lo scopo di introdurre i principali concetti relativi ai processi stocastici e di poter successivamente mettere in evidenza gli aspetti di diversità e di somiglianza che esso presenta rispetto al suo analogo quantistico (per il quale si veda il capitolo 2).

1.1 RW a tempo discreto su un reticolo 1D finito

Si consideri un *walker* che si muove in un reticolo 1D finito compiendo passi di ampiezza costante tra siti adiacenti ad istanti temporali discreti. In questo caso ogni

posizione è indicata con un intero n che la identifica sulla linea tra i due estremi $-N$ e N , per cui il dominio è dato dall'insieme $\{n : n \in \mathbb{Z}, -N \leq n \leq N \text{ con } N \in \mathbb{Z}\}$. Si assume che la finitezza del dominio non abbia nessuna conseguenza rilevante sulla dinamica del RW. Le direzioni consentite per un passo a partire da ogni posizione sono solamente due, destra o sinistra, per cui si definisce p la probabilità di fare un passo verso destra e $q = 1 - p$ la complementare probabilità di fare un passo verso sinistra. Per semplicità si assumerà che p e q non dipendano dalla posizione n , ma che siano invece quantità costanti su tutto il dominio. Un RW bernoulliano di questo tipo è esemplificato per eccellenza dal lancio di una moneta, che abbia una probabilità p di dare come esito testa e una probabilità q per croce. Dal momento che la scelta della direzione di ogni passo è casuale, non è possibile sapere con esattezza la posizione del *walker* dopo un certo numero di passi se non si conosce la sequenza di movimenti che viene eseguita. Tuttavia, è possibile calcolare la probabilità che esso si trovi nella posizione n dopo un numero T di passi e quindi, al variare di n , la distribuzione di probabilità per le varie posizioni.

1.1.1 Distribuzione di probabilità

Si considerino tutti i cammini distinguibili che partono dall'origine $n = 0$ e che sono costituiti da T_d passi verso destra e T_s passi verso sinistra. Assumendo che ogni passo sia un evento indipendente rispetto ai passi precedenti, si ha che la probabilità che avvenga ciascuno di questi cammini è data da $p^{T_d}q^{T_s}$. Questi cammini si differenziano solo per l'ordine in cui i T_d passi verso destra e i T_s passi verso sinistra vengono effettuati, per cui conducono tutti alla stessa posizione finale $n = T_d - T_s$ (assumendo come posizioni con $n > 0$ quelle verso destra). In particolare, dal momento che deve essere soddisfatta anche la condizione $T = T_d + T_s$, sono gli unici che terminano in n . Dunque, considerando i cammini come eventi tra loro mutuamente escludentisi, la probabilità $p(n, T)$ di raggiungere la posizione generica n dopo T passi è data da:

$$p(n, T) = \frac{T!}{T_d!T_s!} p^{T_d} q^{T_s}, \quad (1.1)$$

dove il fattore combinatorio fornisce il numero dei cammini con uguali T_d e T_s , ma che si differenziano nell'ordine dei passi. Esprimendo $p(n, T)$ in funzione di n e di T si ottiene:

$$p(n, T) = \frac{T!}{[\frac{1}{2}(T+n)]![\frac{1}{2}(T-n)]!} p^{\frac{1}{2}(T+n)} q^{\frac{1}{2}(T-n)}, \quad (1.2)$$

che rappresenta la distribuzione di probabilità della posizione n occupata dal *walker* dopo T passi. È importante evidenziare che, a seconda se T è pari o dispari, $p(n, T)$

deve essere nulla rispettivamente per ogni n dispari o per ogni n pari. Infatti, con T pari si raggiungono solo posizioni con n pari, mentre al contrario con T dispari è possibile spostarsi solo in siti con n dispari. Dunque, la (1.2) fornisce la probabilità di occupazione dei siti con n pari nel caso di T pari e di quelli con n dispari quando si ha T dispari.

1.1.2 Momenti della distribuzione

Si possono calcolare i momenti principali della (1.2) per acquisire maggiori informazioni sul comportamento del RW. Per determinare la media $\langle n \rangle$, è utile avvalersi dei valori medi di T_d e T_s dati da $\langle T_d \rangle = Tp$ e $\langle T_s \rangle = Tq$, i quali possono essere ricavati dalla distribuzione binomiale (1.1). Grazie ad essi, infatti, si ha semplicemente:

$$\langle n \rangle = \langle T_d - T_s \rangle = T(p - q). \quad (1.3)$$

Per ottenere la deviazione standard σ_n , invece, è possibile impiegare la nota relazione $\sigma_n = \sqrt{\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2}$. Il calcolo di $\langle n^2 \rangle$ può essere svolto sapendo che, sempre a partire dalla (1.1), vale $\langle T_d^2 \rangle = Tp(Tp + q)$ e quindi, con alcune manipolazioni algebriche, si deriva:

$$\langle n^2 \rangle = \langle (2T_d - T)^2 \rangle = \langle n \rangle^2 + 4Tpq. \quad (1.4)$$

Grazie al precedente risultato, dunque, si ricava infine $\sigma_n = \sqrt{4Tpq}$. È importante notare che nella (1.4) il primo termine cresce come T^2 , mentre il secondo è proporzionale T . Questo fatto sarà rilevante quando, in seguito, si tratteranno il regime diffusivo e balistico.

1.1.3 RW *unbiased*

Risulta utile studiare più in dettaglio il caso significativo del RW *unbiased* in cui $p = q = 1/2$, dal momento che molti fenomeni che si possono interpretare con il modello del RW hanno una natura simmetrica. Per questo caso particolare la (1.2) si semplifica in:

$$p(n, T) = \frac{T!}{[\frac{1}{2}(T+n)]![\frac{1}{2}(T-n)]!} \frac{1}{2^T}, \quad (1.5)$$

da cui si possono calcolare i valori delle probabilità di occupazione delle varie posizioni n in funzione del numero di passi T , i quali vengono riportati nella seguente tabella.

$T \backslash n$	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
0						1					
1					$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{2}$				
2				$\frac{1}{4}$		$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{4}$			
3			$\frac{1}{8}$		$\frac{3}{8}$		$\frac{3}{8}$		$\frac{1}{8}$		
4		$\frac{1}{16}$		$\frac{1}{4}$		$\frac{3}{8}$		$\frac{1}{4}$		$\frac{1}{16}$	
5	$\frac{1}{32}$		$\frac{5}{32}$		$\frac{5}{16}$		$\frac{5}{16}$		$\frac{5}{32}$		$\frac{1}{32}$
...

Tabella 1.1: Valori delle probabilità che il *walker* si trovi nelle posizioni n con $-5 \leq n \leq 5$ dopo $T \leq 5$ passi con $p = q = 1/2$ a partire dall'origine. Si nota una simmetria della distribuzione dei valori rispetto alla posizione iniziale $n = 0$.

Come si può dedurre dalla tabella 1.1 e come è prevedibile data la simmetria del processo, per il RW *unbiased* si ha $\langle n \rangle = 0$ e quindi $\langle n^2 \rangle = \sigma_n^2 = T$.

1.1.4 Regime diffusivo e balistico

Una grandezza rilevante per il RW è la radice della distanza quadratica media dall'origine dopo T passi, ovvero $n_{rms} \equiv \sqrt{\langle n^2 \rangle}$. Per il RW *unbiased* essa vale:

$$n_{rms} = \sqrt{T}. \quad (1.6)$$

Dal momento che il tempo t è una variabile discreta, che scandisce gli istanti equispaziati in cui avvengono i passi del *walker*, si può assumere che $T \propto t$. Considerando ciò, si ottiene $n_{rms} \propto \sqrt{t}$, che è l'andamento dello spostamento in funzione del tempo tipico di un processo diffusivo. La distribuzione di probabilità del *walker* si allarga nel dominio spaziale con un rateo proporzionale alla radice del tempo.

Se invece si ha $p \neq q$, allora per grandi T domina $\langle n \rangle^2$ nella (1.4), per cui:

$$n_{rms} \approx \langle n \rangle = T(p - q). \quad (1.7)$$

Se di nuovo si considera la variabile dinamica t al posto di T , si ha $n_{rms} \propto t$, che è la relazione propria del moto balistico. In questa situazione, dunque, la distribuzione si espande più velocemente con il passare del tempo rispetto al regime diffusivo.

1.1.5 Distribuzione limite ed implementazione del RW

Informazioni più complete sulla natura di un RW si ottengono graficando direttamente la distribuzione di probabilità $p(n, T)$. In particolare, per $T \rightarrow \infty$, il teorema

del limite centrale afferma che la $p(n, T)$ data dalla (1.2) tende alla distribuzione:

$$p(n, T) \rightarrow \begin{cases} \frac{2}{\sqrt{2\pi\sigma_n^2}} \exp\left(-\frac{(n - \langle n \rangle)^2}{2\sigma_n^2}\right) & \text{per } n \text{ pari/dispari} \\ 0 & \text{altrimenti,} \end{cases} \quad (1.8)$$

dove le posizioni nelle quali la distribuzione è non nulla sono quelle con n pari o dispari a seconda se T è pari o dispari, in accordo con ciò che è stato detto in precedenza. Il termine diverso da zero nella (1.8) è un multiplo con fattore 2 della $G(\mu = \langle n \rangle; \sigma = \sigma_n)$, ossia della Gaussiana con media $\mu = \langle n \rangle$ e deviazione standard $\sigma = \sigma_n$. Per un RW *unbiased*, bisogna considerare la $G(\mu = 0; \sigma = \sqrt{T})$.

La distribuzione di probabilità delle varie posizioni può essere ottenuta anche implementando un vero e proprio RW. Per fare ciò, si considera un numero elevato di *walker* e si fa avanzare ognuno di essi per T passi con probabilità p di muoversi a destra e q a sinistra ad ogni passo. Quindi, si costruisce l'istogramma delle frequenze delle posizioni raggiunte dai *walker* ed esso costituisce l'approssimazione numerica di $p(n, T)$. Nella prossima figura si confrontano i grafici della distribuzione numerica con un T sufficientemente grande e di quella limite per il caso *unbiased*.

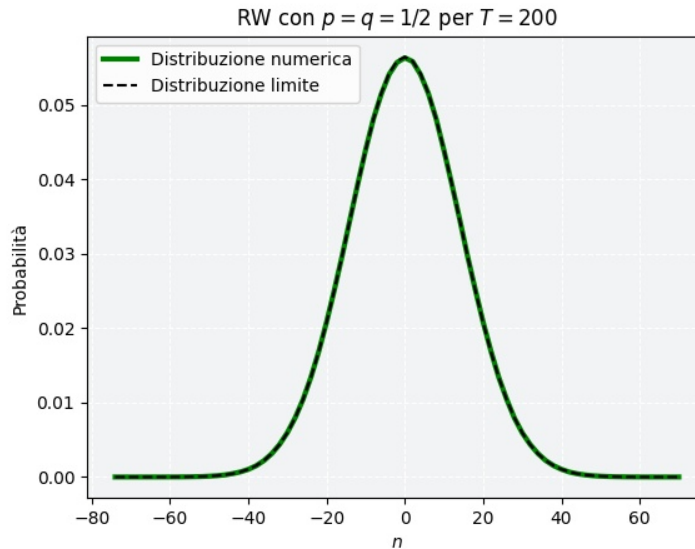


Figura 1.1: Grafici della distribuzione numerica (in verde) e di quella limite (in nero tratteggiata) per la probabilità che il *walker* si trovi nella posizione n dopo $T = 200$ passi a partire dall'origine con $p = q = 1/2$. Per il calcolo della distribuzione numerica sono stati presi in considerazione 10^7 *walker*. Dal momento che T è pari, sono rappresentate solo le probabilità nei siti con n pari.

Come si vede nella figura 1.1, la distribuzione numerica è praticamente coincidente con la distribuzione limite. In particolare, anche la media e la deviazione standard della distribuzione numerica, $\langle n \rangle \approx 0.003$ e $\sigma_n \approx 14.14$, sono molto prossime a quelle limite $\mu = 0$ e $\sigma = \sqrt{200}$.

I valori presenti in tabella 1.1 e il grafico di figura 1.1 sono stati generati attraverso simulazioni svolte con codice Python, appositamente sviluppato e reperibile nel *repository* GitHub [16].

Capitolo 2

Quantum Random Walk

Il Quantum Random Walk (QRW) è l'analogo quantistico del RW e descrive un sistema quanto-meccanico che si muove in un certo dominio spaziale in base al valore di almeno un grado di libertà interno al sistema stesso. Se nel RW il comportamento *random* del movimento del *walker* è interamente regolato dalle probabilità di compiere un passo nelle varie direzioni ad ogni istante temporale, nel QRW la stocasticità del movimento del sistema deriva dalla natura intrinsecamente probabilistica della meccanica quantistica.

Lo stato del sistema quantistico è descrivibile attraverso una combinazione lineare di stati di base, i quali corrispondono alle varie posizioni e ai diversi valori dei gradi di libertà interni possibili per il sistema. Ciò che avviene ad ogni istante del QRW è una trasformazione unitaria che si articola in due operazioni: in primo luogo vengono combinati tra loro, in relazione alla parte dei gradi di libertà interni, i vari termini di stati di base che compongono lo stato complessivo del sistema; in secondo luogo si esegue il movimento del sistema nelle varie direzioni spaziali, evolvendo ogni stato di base secondo i propri valori dei gradi di libertà interni. Questo tipo di processo viene anche comunemente detto *quantum coin toss*, per mettere in evidenza che esso costituisce la controparte quantistica dell'evento che meglio rappresenta l'evoluzione probabilistica del RW (nella sua forma unidimensionale), ossia il lancio della moneta. Se viene fatto avanzare per un certo tempo il sistema quantistico in questo modo e solo alla fine dell'evoluzione si esegue su di esso una misurazione, le distribuzioni di probabilità della posizione del sistema che vengono ottenute presentano delle caratteristiche peculiari ed interessanti, che le differenziano notevolmente dai risultati ottenibili in regime classico.

In questo capitolo, viene inizialmente introdotto il modello formale del QRW su un dominio unidimensionale e ne viene descritta la dinamica di evoluzione [14, 19]:

si presentano lo spazio di Hilbert del sistema e gli operatori che ne definiscono il movimento nel tempo. In seguito, per motivi analoghi a quelli relativi al RW discussi nell'introduzione al capitolo 2, viene approfondito lo studio del QRW a tempo discreto su un reticolo 1D finito [11], vedendo che forma particolare assume la dinamica e ricavandone la relazione di dispersione [6]. Sempre in questa parte, viene definita la distribuzione di probabilità della posizione del *walker* e si descrive il *coin* di Hadamard. La successiva sezione ha come scopo un'analisi più dettagliata del QRW di Hadamard, sia relativamente al caso asimmetrico che a quello simmetrico. Questo tipo di cammino è oggetto anche dell'ultima parte, nella quale vengono derivati teoremi che permettono di spiegare alcune proprietà dell'associata distribuzione di probabilità [2]. In questo contesto, si procede ad uno studio della dinamica nel dominio di Fourier, si calcolano i momenti della distribuzione e si esamina il tempo di mescolamento. Nel seguito verrà utilizzata la formulazione bra-ket-operatore di Dirac della meccanica quantistica e in tutto il capitolo (e anche in quelli successivi) si assumerà per semplicità $\hbar = 1$.

2.1 Generalità sul QRW 1D

Si consideri un sistema quantistico che è in grado di muoversi in un dominio spaziale unidimensionale e che possiede un grado di libertà interno che può assumere solo due valori. Definiamo come \mathcal{H}_P e \mathcal{H}_C gli spazi di Hilbert relativi rispettivamente agli stati di posizione e di grado di libertà interno. Il pedice C sta per *coin* e si riferisce al fatto che il grado di libertà interno nel QRW ha un ruolo analogo a quello che possiede la moneta nel RW unidimensionale, ovvero quello di stabilire in che direzione avviene il movimento del *walker*. Lo spazio \mathcal{H}_P sarà generato dagli stati di base $|x\rangle$, dove x è la variabile che identifica le varie posizioni nel dominio unidimensionale, mentre lo spazio \mathcal{H}_C sarà generato dagli stati di base $|0\rangle$ e $|1\rangle$, dove 0 e 1 identificano i due valori possibili per il grado di libertà interno. Lo stato complessivo del sistema, dunque, sarà definito da un elemento dello spazio $\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_P$ dato dal prodotto tensoriale tra i due spazi di Hilbert. Un sistema quantistico a due stati il cui spazio di Hilbert è bidimensionale come \mathcal{H}_C viene detto *qubit* [14]. In generale, quindi, lo stato (puro) di un qubit è esprimibile come combinazione lineare degli stati di base:

$$a|0\rangle + b|1\rangle, \quad (2.1)$$

con $a, b \in \mathbb{C}$ tali che $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Come suggerisce il nome, il *qubit* rappresenta l'analogo quanto-meccanico del *bit* e quindi costituisce l'unità di informazione quantistica. Dunque, il *walker* corrisponde ad un *qubit* che è in grado di muoversi

nel dominio spaziale e, più concretamente, si può identificare con una particella di spin $s = \frac{1}{2}$ che può cambiare la propria posizione. In questo caso, il grado di libertà interno è lo *spin* e i due valori possibili sono quelli della sua terza componente, per cui gli stati di base $|0\rangle$ e $|1\rangle$ possono essere identificati con gli stati di *spin* $|\uparrow\rangle$ (*spin up*) e $|\downarrow\rangle$ (*spin down*), secondo le corrispondenze $|0\rangle = |\uparrow\rangle$ e $|1\rangle = |\downarrow\rangle$. Lo spazio di Hilbert \mathcal{H}_C diventa quindi lo spazio di tutti gli stati di *spin* accessibili alla particella. In alternativa alla particella con *spin* $\frac{1}{2}$, si può considerare come *qubit* anche un fotone con grado di libertà interno a due valori dato dalla polarizzazione.

2.1.1 Operatore di evoluzione

Come anticipato nell'introduzione al presente capitolo, l'evoluzione del *walker* quantistico è rappresentata da un operatore unitario \hat{U} che è dato dall'azione successiva di due operatori \hat{C} e \hat{S} , precisamente $\hat{U} = \hat{S}(\hat{C} \otimes \hat{1})$ dove $\hat{1}$ è l'operatore identico. In particolare, \hat{C} (chiamato *quantum coin*) è un operatore unitario che agisce sulle componenti di *spin* dello stato combinandole tra loro, mentre \hat{S} è un operatore di traslazione condizionata che esegue una traslazione spaziale dello stato dipendente dal valore della sua parte di *spin*.

Operatore *quantum coin* \hat{C}

In generale, \hat{C} dipende da tre parametri e nella base $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ ha la forma matriciale:

$$C = \begin{bmatrix} e^{i\chi} \cos \frac{\theta}{2} & e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \\ -e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} & e^{-i\chi} \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix}, \quad (2.2)$$

dove θ , φ e χ sono variabili angolari reali tali che $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi, \chi \leq 2\pi$. In particolare, come si vedrà, θ e φ sono connessi agli angoli sferici che identificano sulla sfera di Bloch i vettori tridimensionali associati agli stati puri di un *qubit*. La (2.2) può essere derivata a partire dalla teoria dei sistemi a due stati in meccanica quantistica [19], che viene di seguito richiamata. Nel proseguio si indica con il simbolo \hat{C} l'operatore quanto-meccanico e con la semplice lettera C la matrice che lo rappresenta in una data base, e questa convenzione verrà adottata per tutti gli operatori che saranno descritti.

Lo stato generico di un *qubit* è espresso dalla (2.1) e quindi è definito dalla scelta di quattro numeri reali. Tuttavia, la condizione di normalizzazione dei coefficienti nella combinazione lineare e il fatto che le fasi globali in uno stato quantistico non hanno significato fisico implicano che, in realtà, sono sufficienti solo due numeri reali.

Soddisfacendo questi due vincoli, dunque, lo stato generico $|\Psi\rangle$ del *qubit* potrà essere espresso (nella base $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$) come:

$$|\Psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |\uparrow\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} |\downarrow\rangle, \quad (2.3)$$

con $0 \leq \theta \leq \pi$ e $0 \leq \phi \leq 2\pi$ (che per il momento non sono legati a θ e ϕ nella (2.2)). Il fatto che siano sufficienti solo due parametri per definire $|\Psi\rangle$ nella base, implica che è possibile costruire una corrispondenza biunivoca tra gli stati puri (a meno di fasi) accessibili al *qubit* e i punti di una sfera di raggio unitario nello spazio tridimensionale, detta sfera di Bloch. In particolare, fissando una base ortonormale dello spazio tridimensionale $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ e \mathbf{e}_3 , gli angoli θ e ϕ possono essere interpretati come gli angoli sferici che individuano il vettore unitario $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ sulla sfera associato allo stato $|\Psi\rangle$, come si vede nella seguente figura.

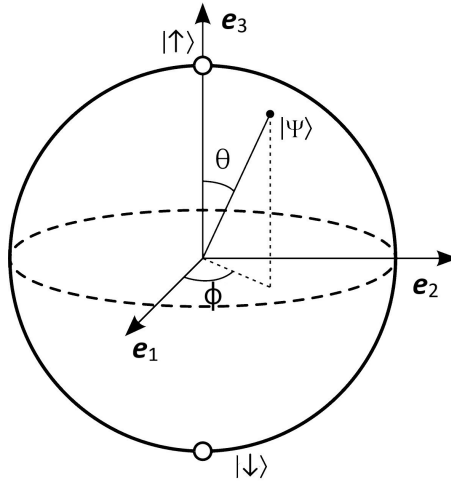


Figura 2.1: Rappresentazione della sfera di Bloch per un singolo *qubit*, in cui si può visualizzare il ruolo degli angoli θ e ϕ nella combinazione lineare di $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ che fornisce $|\Psi\rangle$ come in (2.3). Gli stati di base ortogonali $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ corrispondono rispettivamente ai vettori $\mathbf{e}_3 = (0, 0, 1)$ e $-\mathbf{e}_3 = (0, 0, -1)$ ai due poli della sfera.

Data la corrispondenza tra lo stato $|\Psi\rangle$ e il vettore associato \mathbf{n} illustrata in figura 2.1, è possibile indicare $|\Psi\rangle$ con la notazione $|\mathbf{n}\rangle$. L'evoluzione dallo stato $|\mathbf{n}\rangle$ ad uno stato $|\mathbf{m}\rangle$ è implementata da una rotazione tra i corrispondenti vettori unitari sulla sfera ed è realizzata dall'operatore:

$$\exp\left(i\frac{\alpha}{2}\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) = \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)\hat{1} + i\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad (2.4)$$

dove \mathbf{k} è il vettore unitario normale al piano generato dai vettori \mathbf{n} e \mathbf{m} (indica quindi l'asse attorno al quale avviene la rotazione), α è l'angolo tra di essi e $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3)$

è il vettore operatoriale di Pauli. Le espressioni di \mathbf{k} e α sono date da:

$$\cos \alpha = \mathbf{m} \cdot \mathbf{n}, \quad (2.5a)$$

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{m} \times \mathbf{n}}{|\mathbf{m} \times \mathbf{n}|}. \quad (2.5b)$$

Dunque vale la relazione:

$$|\mathbf{m}\rangle = \exp\left(i\frac{\alpha}{2}\mathbf{k} \cdot \hat{\sigma}\right) |\mathbf{n}\rangle. \quad (2.6)$$

Scrivendo la (2.4) nella base di stati $\{|\uparrow\rangle = |\mathbf{e}_3\rangle, |\downarrow\rangle = |-\mathbf{e}_3\rangle\}$, che sono autostati dell'operatore $\hat{\sigma}_3$, si ottiene la rappresentazione matriciale dell'operatore di rotazione:

$$\begin{bmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} + ik_3 \sin \frac{\alpha}{2} & (ik_1 + k_2) \sin \frac{\alpha}{2} \\ (ik_1 - k_2) \sin \frac{\alpha}{2} & \cos \frac{\alpha}{2} - ik_3 \sin \frac{\alpha}{2} \end{bmatrix}. \quad (2.7)$$

Le variabili α e \mathbf{k} , ricordando che $\|\mathbf{k}\| = 1$, possono essere espresse in funzione degli angoli θ e ϕ di rotazione tra \mathbf{n} e \mathbf{m} sulla sfera e di un terzo angolo χ secondo le relazioni:

$$\sin \frac{\theta}{2} = \sqrt{(k_1^2 + k_2^2) \sin^2 \frac{\alpha}{2}}, \quad (2.8a)$$

$$\tan \phi = -\frac{k_1}{k_2}, \quad (2.8b)$$

$$\tan \chi = k_3 \tan \frac{\alpha}{2}. \quad (2.8c)$$

Se si utilizzano le (2.8) si può riscrivere la (2.7) nelle variabili θ , ϕ e χ e se si considera il nuovo angolo $\varphi = \pi - \phi$ si ricava esattamente la (2.2). Dunque, il θ nella (2.2) corrisponde effettivamente all'angolo zenitale sulla sfera di Bloch, mentre φ non coincide proprio con l'angolo azimutale ϕ in quanto è spostato rispetto ad esso di π . Si è scelto per comodità di utilizzare l'espressione di \hat{C} data dalla (2.2) nel proseguio, anche se era equivalente impiegare quella in cui compare direttamente ϕ senza fare il cambio di variabile a φ .

Nel caso particolare in cui $\mathbf{n} = \mathbf{e}_3$ (o equivalentemente $\mathbf{n} = -\mathbf{e}_3$) si ha che $k_3 = 0$ e $\chi = 0$, per cui la matrice di rotazione può scriversi come:

$$\begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix}, \quad (2.9)$$

la quale se applicata a $|\uparrow\rangle$ fornisce, come ci si aspetta, l'espressione di $|\mathbf{n}\rangle$ data dalla (2.3).

L'operatore \hat{C} , quindi, trasforma uno stato di *spin* in un nuovo stato in cui le componenti di *spin* dello stato di partenza sono accoppiate in base ai valori degli angoli θ , φ e χ . In particolare, data la natura unitaria di \hat{C} verificabile direttamente dalla (2.2), quando esso agisce su una base ortonormale di stati di *spin* (come $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$) restituisce un'altra base ortonormale.

Operatore di traslazione condizionata \hat{S}

In meccanica quantistica, l'espressione dell'operatore unitario di traslazione spaziale in una dimensione è data da:

$$\hat{T}(\lambda) = \exp(-i\lambda\hat{p}), \quad (2.10)$$

dove λ è la variabile che indica l'entità della traslazione e \hat{p} è l'operatore di quantità di moto. Si può verificare facilmente che l'azione della (2.10) su autostati $|x\rangle$ dell'operatore posizione \hat{q} è data da [19]:

$$\hat{T}(\lambda)|x\rangle = |x + \lambda\rangle. \quad (2.11)$$

Poiché \hat{S} deve esprimere una traslazione condizionata in base al valore dello stato di *spin*, si può indovinare facilmente che una sua possibile espressione generale può essere data da:

$$\hat{S} = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes \exp(-i\lambda\hat{p}) + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \otimes \exp(i\lambda\hat{p}). \quad (2.12)$$

L'operatore (2.12) trasforma gli stati di base $|\uparrow\rangle \otimes |x\rangle$ e $|\downarrow\rangle \otimes |x\rangle$ rispettivamente in $|\uparrow\rangle \otimes |x + \lambda\rangle$ e $|\downarrow\rangle \otimes |x - \lambda\rangle$. La scelta di traslare a destra gli stati con *spin up* e a sinistra quelli con *spin down* è assolutamente arbitraria, per cui si sarebbe potuto fare la scelta opposta in modo equivalente. Tuttavia, nel seguito si considererà la particolare traslazione condizionata rappresentata dalla (2.12). L'espressione più generale di \hat{S} in questa forma è in realtà $\exp(-2i\hat{S}_z \otimes \lambda\hat{p})$, dalla quale si ricava la (2.12) scrivendo l'operatore \hat{S}_z nella base dei suoi autostati $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ come:

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|) \quad (2.13)$$

e sviluppando in serie l'esponenziale. In ogni caso, è più immediato impiegare l'espressione (2.12), poiché $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ sono gli stati di base di *spin* che effettivamente si considerano.

2.2 QRW a tempo discreto su un reticolo 1D finito

In un reticolo 1D finito \mathcal{H}_P sarà generato dagli stati di base $|n\rangle$ dove n è la variabile intera che identifica le varie posizioni sulla linea tra i due estremi $-N$ e N , ovvero stati che appartengono all'insieme $\{|n\rangle : n \in \mathbb{Z}, -N \leq n \leq N \text{ con } N \in \mathbb{Z}\}$, per cui lo spazio \mathcal{H}_P è a dimensione finita. Si assume che la finitezza del dominio spaziale non abbia nessuna conseguenza rilevante sulla dinamica del QRW. L'evoluzione avviene per intervalli di tempo discreti e si considera che il movimento ad ogni passo sia di ampiezza costante e consista in un salto tra due siti adiacenti. In queste condizioni, l'operatore \hat{S} assume la forma:

$$\hat{S} = |\uparrow\rangle \langle \uparrow| \otimes \sum_m |m+1\rangle \langle m| + |\downarrow\rangle \langle \downarrow| \otimes \sum_m |m-1\rangle \langle m|, \quad (2.14)$$

dove la sommatoria in m scorre tra $-N$ e N . Gli operatori $\sum_m |m \pm 1\rangle \langle m|$ nella (2.14) rivestono il ruolo degli operatori $\exp(\pm i\lambda\hat{p})$ nella (2.12) relativamente alla traslazione di un sito reticolare. Gli stati di base $|\uparrow\rangle \otimes |n\rangle$ e $|\downarrow\rangle \otimes |n\rangle$ vengono quindi trasformati dalla (2.14) rispettivamente in $|\uparrow\rangle \otimes |n+1\rangle$ e $|\downarrow\rangle \otimes |n-1\rangle$.

La struttura di \mathcal{H}_C e l'espressione di \hat{C} , invece, rimangono uguali a quelle già introdotte nella sezione 2.1.

2.2.1 Equazioni di evoluzione e relazione di dispersione

Impiegando l'espressione (2.2) per \hat{C} e la (2.14) per \hat{S} , è possibile scrivere l'equazione generale di evoluzione del QRW su reticolo 1D a tempo discreto. Partendo da uno stato generico $|\Psi^t\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\Psi_\uparrow^t\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |\Psi_\downarrow^t\rangle$ all'istante t , dove $|\Psi_\uparrow^t\rangle$ e $|\Psi_\downarrow^t\rangle$ sono le componenti dello stato di posizione con *spin up* e *spin down*, è possibile scrivere in modo generale l'espressione dello stato $|\Psi^{t+1}\rangle$ all'istante di tempo successivo come:

$$\begin{aligned} |\Psi^{t+1}\rangle &= \hat{U} |\Psi^t\rangle = \hat{S}(\hat{C} \otimes \hat{1})(|\uparrow\rangle \otimes |\Psi_\uparrow^t\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |\Psi_\downarrow^t\rangle) \\ &= \hat{S} \left\{ |\uparrow\rangle \otimes \left(|\Psi_\uparrow^t\rangle e^{i\chi} \cos \frac{\theta}{2} + |\Psi_\downarrow^t\rangle e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \right) \right. \\ &\quad \left. + |\downarrow\rangle \otimes \left(-|\Psi_\uparrow^t\rangle e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} + |\Psi_\downarrow^t\rangle e^{-i\chi} \cos \frac{\theta}{2} \right) \right\} \\ &= |\uparrow\rangle \otimes \left(\sum_m |m+1\rangle \langle m| \Psi_\uparrow^t \right) e^{i\chi} \cos \frac{\theta}{2} + |\uparrow\rangle \otimes \left(\sum_m |m+1\rangle \langle m| \Psi_\downarrow^t \right) e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \\ &\quad + |\downarrow\rangle \otimes \left(-\sum_m |m-1\rangle \langle m| \Psi_\uparrow^t \right) e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} + |\downarrow\rangle \otimes \left(\sum_m |m-1\rangle \langle m| \Psi_\downarrow^t \right) e^{-i\chi} \cos \frac{\theta}{2}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Scrivendo l'equazione precedente per le ampiezze di probabilità e utilizzando la rappresentazione vettoriale tramite spinori:

$$\begin{aligned}\Psi^{n,t} &= (\hat{1} \otimes \langle n|) |\Psi^t\rangle = |\uparrow\rangle \otimes \langle n|\Psi_{\uparrow}^t\rangle + |\downarrow\rangle \otimes \langle n|\Psi_{\downarrow}^t\rangle \\ &= \begin{bmatrix} \langle n|\Psi_{\uparrow}^t\rangle \\ \langle n|\Psi_{\downarrow}^t\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Psi_{\uparrow}^{n,t} \\ \Psi_{\downarrow}^{n,t} \end{bmatrix},\end{aligned}\quad (2.16)$$

è possibile riformulare la (2.15) come un sistema di equazioni accoppiate che esprime una ricorrenza bidimensionale:

$$\begin{cases} \Psi_{\uparrow}^{n,t+1} = e^{i\chi} \cos \frac{\theta}{2} \Psi_{\uparrow}^{n-1,t} + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \Psi_{\downarrow}^{n-1,t} \\ \Psi_{\downarrow}^{n,t+1} = -e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \Psi_{\uparrow}^{n+1,t} + e^{-i\chi} \cos \frac{\theta}{2} \Psi_{\downarrow}^{n+1,t}. \end{cases}\quad (2.17a)$$

$$\quad (2.17b)$$

Si può cercare una soluzione di questo sistema del tipo $[\Psi_{\uparrow}^{n,t}, \Psi_{\downarrow}^{n,t}]^T = [\Psi_{\uparrow} e^{ikn-iEt}, \Psi_{\downarrow} e^{ikn-iEt}]^T$ con $\Psi_{\uparrow}, \Psi_{\downarrow} \in \mathbb{C}$ costanti di normalizzazione e $k, E \in \mathbb{R}$, ovvero tali che la dipendenza dalla posizione n e dal tempo t è interamente racchiusa in un fattore di fase. Le grandezze k e E hanno il ruolo di vettore d'onda ed energia del *walker* e, analogamente a n e t , si considerano adimensionali. Dal momento che $|\Psi^t\rangle$ deve essere normalizzato per ogni t , per le ampiezze deve valere la relazione:

$$\sum_{n=-N}^N |\Psi_{\uparrow}^{n,t}|^2 + |\Psi_{\downarrow}^{n,t}|^2 = 1,\quad (2.18)$$

che nel caso delle particolari $\Psi_{\uparrow}^{n,t}$ e $\Psi_{\downarrow}^{n,t}$ considerate diventa un primo vincolo sulle costanti di normalizzazione:

$$2N(|\Psi_{\uparrow}|^2 + |\Psi_{\downarrow}|^2) = 1.\quad (2.19)$$

Se si inserisce la soluzione ipotizzata dentro le (2.17), si ottiene il sistema di equazioni:

$$\begin{cases} e^{-iE} = \cos \frac{\theta}{2} e^{i(\chi-k)} + \frac{\Psi_{\downarrow}}{\Psi_{\uparrow}} \sin \frac{\theta}{2} e^{i(\varphi-k)} \end{cases}\quad (2.20a)$$

$$\begin{cases} e^{-iE} = -\frac{\Psi_{\uparrow}}{\Psi_{\downarrow}} \sin \frac{\theta}{2} e^{i(k-\varphi)} + \cos \frac{\theta}{2} e^{i(k-\chi)}. \end{cases}\quad (2.20b)$$

Il secondo vincolo su Ψ_{\uparrow} e Ψ_{\downarrow} si ottiene dall'imporre che il coefficiente di e^{-ik} nella (2.20a) (o analogamente quello di e^{ik} nella (2.20b)) abbia modulo unitario. Dalle (2.20) si può ricavare la relazione di dispersione:

$$\cos E = \cos \frac{\theta}{2} \cos(k - \chi) + \frac{1}{2} \sin \frac{\theta}{2} \operatorname{Re} \left\{ \left(\frac{\Psi_{\downarrow}}{\Psi_{\uparrow}} e^{i(\varphi-k)} - \frac{\Psi_{\uparrow}}{\Psi_{\downarrow}} e^{i(k-\varphi)} \right) \right\}.\quad (2.21)$$

Con i valori $\varphi = \pi/2$ e $\chi = 0$, ovvero se si ha un *coin* che non fa interferire gli stati di base (si veda la sezione 2.3.1), si ha $\Psi_{\uparrow} = \Psi_{\downarrow}$ e la (2.21) si semplifica in:

$$\cos E = \cos \frac{\theta}{2} \cos k. \quad (2.22)$$

Con la precedente relazione di dispersione si ha un'alternanza di bande energetiche separate da *gap*, date da $j\pi + \theta/2 < E < (j+1)\pi - \theta/2$ con $j \in \mathbb{Z}$. Nel caso particolare di $\theta = 0$, i *gap* tra le bande si chiudono e si formano coni di Dirac 1D.

2.2.2 Implementazione e distribuzione di probabilità

Oltre a risolvere in forma chiusa l'equazione di evoluzione, si può implementare un QRW con un certo numero di passi T applicando l'operatore $\hat{U}^T = (\hat{S}(\hat{C} \otimes \hat{1}))^T$ a partire da un dato stato iniziale. Se viene fatto ciò senza eseguire misure sul sistema durante l'evoluzione, lo stato finale $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_P$ sarà rappresentato da una certa sovrapposizione degli stati di base $|\uparrow\rangle \otimes |n\rangle$ e $|\downarrow\rangle \otimes |n\rangle$ con n variabile, corrispondenti alle varie posizioni con i due diversi valori di *spin*. Se ora viene eseguita una misura dello stato complessivo del *walker*, le probabilità di trovarlo nelle varie posizioni con diversi valori di *spin* saranno fornite dai moduli quadri dei coefficienti con cui compaiono i corrispondenti stati di base nella combinazione lineare. In particolare, se si è interessati alla probabilità $p(n, T)$ di occupazione di una posizione n dopo T passi indipendentemente dallo *spin*, per ciascun sito n si dovranno considerare le probabilità $p_{\uparrow}(n, T)$ e $p_{\downarrow}(n, T)$ per entrambi gli stati $|\uparrow\rangle \otimes |n\rangle$ e $|\downarrow\rangle \otimes |n\rangle$ ovvero:

$$p(n, T) = p_{\uparrow}(n, T) + p_{\downarrow}(n, T) = |(\langle \uparrow | \otimes \langle n |) |\Psi\rangle|^2 + |(\langle \downarrow | \otimes \langle n |) |\Psi\rangle|^2. \quad (2.23)$$

La (2.23) al variare di n fornisce la distribuzione di probabilità della posizione per il QRW dopo T passi, la quale presenta delle caratteristiche peculiari ed interessanti che la differenziano notevolmente dall'analoga distribuzione (1.2) ottenuta nel caso classico. Ciò è dovuto essenzialmente alla possibilità, propria solo della meccanica quantistica, di fare interferire tra loro i vari stati di base presenti all'interno dello stato complessivo del *walker*. Questa possibilità non viene sfruttata nel caso in cui, al contrario, si esegue una misurazione ad ogni passo, facendo collassare continuamente la funzione d'onda del sistema. In questo caso, il risultato che si ottiene partendo da un stato con posizione e *spin* definiti è quello del RW 1D, con probabilità di avanzare nelle due direzioni ad ogni passo date da $\cos^2(\theta/2)$ e $\sin^2(\theta/2)$. È interessante notare che, mentre nell'implementazione del RW per definire le probabilità di occupazione delle varie posizioni sono necessari molteplici *walker*, per il QRW, grazie al meccanismo della sovrapposizione quantistica, le probabilità sono contenute tutte all'interno dello stato di un singolo *walker*.

2.2.3 Coin di Hadamard

Le proprietà di un QRW dipendono fortemente dalla scelta del *quantum coin* \hat{C} che, come si vede nella (2.2), può avere varie forme in base ai valori di θ , φ e χ . Uno dei *coin* maggiormente impiegati è quello di Hadamard \hat{H} , che ha l'espressione matriciale:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}, \quad (2.24)$$

la quale è ricavabile direttamente dalla (2.2) ponendo $\theta = \varphi = \chi = \pi/2$ e fattorizzando fuori dalla matrice una fase globale i che non ha alcuna rilevanza fisica. Come si può verificare impiegando le (2.8), la (2.24) rappresenta una rotazione di π sulla sfera di Bloch attorno all'asse $\mathbf{k} = (\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_3)/\sqrt{2}$.

La caratteristica rilevante di \hat{H} è quella di agire sugli stati di base $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ combinandoli tra loro con uguale peso e per questa sua peculiarità costituisce un cosiddetto *coin* bilanciato. A causa di ciò, nel limite classico di misurazione ad ogni passo, il risultato a cui si giunge con $\hat{C} = \hat{H}$ è un RW *unbiased*, il quale per $T \rightarrow \infty$ presenta una distribuzione Gaussiana con media μ data dalla posizione iniziale e varianza $\sigma^2 = T$. Infatti, partendo per esempio dallo stato $|\uparrow\rangle \otimes |n\rangle$, la misura dell'evoluto con $\hat{U} = \hat{S}(\hat{H} \otimes \hat{1})$ di questo stato fornisce con uguale probabilità i due stati $|\uparrow\rangle \otimes |n+1\rangle$ e $|\downarrow\rangle \otimes |n-1\rangle$. L'operatore \hat{H} è anche ampiamente usato nel campo della computazione quantistica come porta logica agente sui *qubit* e in questo contesto ha il nome di porta di Hadamard.

2.3 QRW di Hadamard

2.3.1 Caso asimmetrico

Si analizzano ora i risultati che si ottengono implementando un QRW con $\hat{C} = \hat{H}$ (chiamato QRW di Hadamard) a partire da uno stato iniziale $|\Psi_{in}\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |0\rangle$. Lo schema di applicazione ripetuta dell'operatore \hat{U} è riportato di seguito:

$$\begin{aligned} |\Psi_{in}\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |0\rangle &\xrightarrow{\hat{U}} \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle \otimes |1\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |-1\rangle) \\ &\xrightarrow{\hat{U}} \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle \otimes |2\rangle + (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \otimes |0\rangle - |\downarrow\rangle \otimes |-2\rangle) \\ &\xrightarrow{\hat{U}} \frac{1}{2\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle \otimes |3\rangle + 2|\uparrow\rangle \otimes |1\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |1\rangle \\ &\quad - |\uparrow\rangle \otimes |-1\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |-3\rangle) \\ &\xrightarrow{\hat{U}} \dots \end{aligned} \quad (2.25)$$

In analogia con il RW, si possono calcolare le probabilità di occupazione delle varie posizioni n in funzione del numero di passi T , riportati nella seguente tabella.

$T \backslash n$	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
0						1					
1					$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{2}$				
2				$\frac{1}{4}$		$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{4}$			
3			$\frac{1}{8}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{5}{8}$		$\frac{1}{8}$		
4		$\frac{1}{16}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{5}{8}$		$\frac{1}{16}$	
5	$\frac{1}{32}$		$\frac{5}{32}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{17}{32}$		$\frac{1}{32}$
...

Tabella 2.1: Valori delle probabilità che il *walker* si trovi nelle posizioni n con $-5 \leq n \leq 5$ dopo $T \leq 5$ passi con *coin* di Hadamard a partire dallo stato $|\uparrow\rangle \otimes |0\rangle$.

Inoltre, per avere una visione più globale delle proprietà del QRW, risulta significativo analizzare il grafico della distribuzione di probabilità di occupazione della posizione n per un certo T , che viene illustrato nella prossima figura.

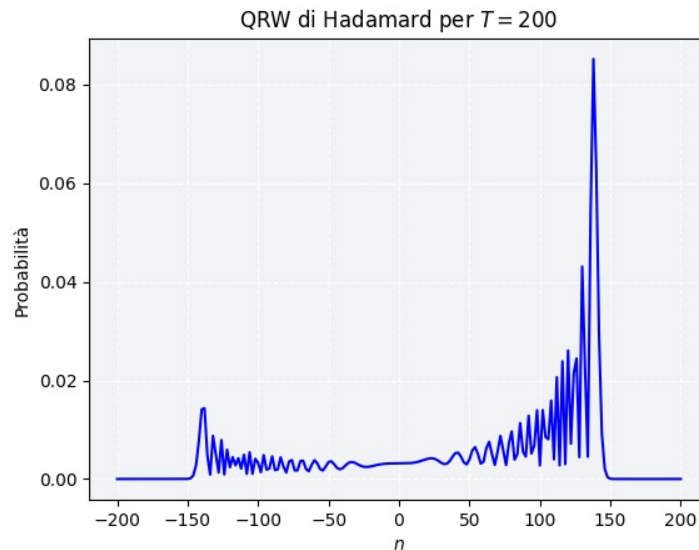


Figura 2.2: Grafico della distribuzione di probabilità $p(n, T)$ che il *walker* si trovi nella posizione n dopo $T = 200$ passi con *coin* di Hadamard a partire dallo stato iniziale $|\uparrow\rangle \otimes |0\rangle$. Sono rappresentate solo le probabilità nei siti con n pari, dal momento che quelle nelle posizioni con n dispari sono nulle (poiché T è pari).

Confrontando la tabella 2.1 con la tabella 1.1 si nota che il comportamento del QRW comincia a differire da quello del RW a partire da $T = 3$, in corrispondenza del quale l'andamento delle probabilità del QRW inizia ad essere asimmetrico con, in generale, valori di probabilità maggiori verso le posizioni con $n > 0$. Questa peculiarità è ben visibile anche dal grafico di figura 2.2, il quale mostra chiaramente che la distribuzione di probabilità del QRW ha forma asimmetrica. Ulteriori caratteri distintivi della distribuzione sono dati dalla sua natura bimodale e dal tipico comportamento oscillante, che è più marcato nelle posizioni estreme raggiunte e si smorza vicino al sito di partenza (in questo caso l'origine). Dunque, la distribuzione del QRW è in generale molto più complessa della più semplice Gaussiana che si ottiene nel caso del RW per T elevati.

Questi aspetti notevoli della distribuzione quantistica derivano necessariamente dal fenomeno dell'interferenza degli stati e l'asimmetria, in particolare, è connessa al fatto che \hat{H} in realtà non tratta $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ esattamente nel medesimo modo. Come è stato già anticipato, è vero che con l'azione di \hat{H} i due stati di base vengono moltiplicati per la medesima costante numerica $1/\sqrt{2}$, ma tuttavia \hat{H} genera con fase -1 solo stati con componente $|\downarrow\rangle$. Questo, evidentemente, ha l'effetto di provocare una maggiore interferenza distruttiva tra gli stati nelle posizioni verso sinistra (n decrescenti) e una maggiore interferenza costruttiva tra quelli nelle posizioni verso destra (n crescenti). È importante, comunque, specificare che l'asimmetria verso destra della distribuzione è dipendente dalla scelta dello stato iniziale, per cui, se il *walker* fosse partito dallo stato $|\downarrow\rangle \otimes |0\rangle$, si sarebbe ottenuta una distribuzione che è la riflessione speculare rispetto all'asse delle ordinate di quella in figura 2.2.

2.3.2 Caso simmetrico

Da ciò che è stato detto nel paragrafo precedente si può dedurre che, per ottenere una distribuzione simmetrica, ovvero che sia una funzione pari, è necessario avere come stato iniziale una sovrapposizione degli stati di base tale che questi non interferiscano nell'evoluzione temporale. Una possibile scelta per questo stato di partenza è rappresentata da $(1/\sqrt{2})(|\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle) \otimes |0\rangle$ poiché, dal momento che \hat{H} non introduce nessuna ampiezza complessa, gli stati che si originano da $|\uparrow\rangle \otimes |0\rangle$ rimarranno sempre reali e quelli che derivano da $i|\downarrow\rangle \otimes |0\rangle$ resteranno sempre immaginari, escludendo quindi la possibilità di interferenza reciproca. Nella seguente figura, dunque, si illustra il grafico della distribuzione di probabilità di occupazione della posizione n con un dato T che si genera con un QRW di Hadamard con condizione iniziale data dallo stato riportato sopra.

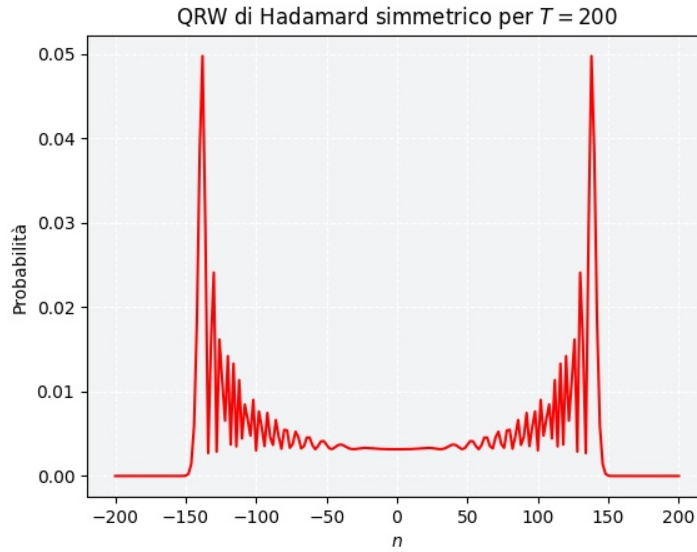


Figura 2.3: Grafico della distribuzione simmetrica di probabilità $p(n, T)$ che il *walker* si trovi nella posizione n dopo $T = 200$ passi con *coin* di Hadamard a partire dallo stato iniziale $(1/\sqrt{2})(|\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle) \otimes |0\rangle$. Sono rappresentate solo le probabilità nei siti con n pari, dal momento che quelli con n dispari presentano probabilità nulle (poiché T è pari).

Come si può notare dal grafico in figura 2.3, la distribuzione ottenuta in questo caso è perfettamente simmetrica.

In alternativa, un'altra soluzione per eliminare l'asimmetria del QRW è quella di usare un diverso *coin* \hat{Y} , che per costruzione è in grado di non fare interferire gli stati di base a partire da qualunque condizione iniziale. L'operatore \hat{Y} , in generale, ha l'espressione matriciale:

$$Y = \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & i \sin \frac{\theta}{2} \\ i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix}, \quad (2.26)$$

ottenibile dalla (2.2) per $\varphi = \pi/2$ e $\chi = 0$. \hat{Y} esegue una rotazione di θ sulla sfera di Bloch nel piano generato da \mathbf{e}_2 e \mathbf{e}_3 e, per $\theta = \pi/2$, è anche un *coin* bilanciato.

2.4 Studio della distribuzione di probabilità

È interessante analizzare più in dettaglio la dinamica del QRW, con lo scopo di ricavare dei risultati che possano spiegare alcune delle caratteristiche delle distribu-

zioni di probabilità che si sono ottenute, concentrandosi in particolare sul caso di QRW di Hadamard asimmetrico.

2.4.1 I tre teoremi

Si possono derivare almeno tre teoremi riguardo il comportamento della distribuzione in figura 2.2. Nei loro enunciati si assume che n identifichi solo i siti nei quali la probabilità è non nulla per un dato T e, in analogia al RW, si introduce la variabile discreta t che rappresenta il tempo. In generale, data l'equidistanza temporale tra i passi, si ha che $T \propto t$, tuttavia si può assumere semplicemente che $T = t$, ossia che avvenga un passo ad ogni variazione unitaria del tempo. Inoltre, sempre per semplicità di trattazione, nel seguito si considera il reticolo 1D come infinito, ovvero tale che $N \rightarrow \infty$. Si definisce infine la variabile $\alpha = n/t$, che rappresenta la posizione normalizzata rispetto al tempo trascorso.

Teorema 1. *Sia $n = \alpha t$ con $|\alpha| \in [1/\sqrt{2}, 1]$, allora nel limite $t \rightarrow \infty$ esiste una costante $c > 1$ tale che $p_{\downarrow}(n, t) = \mathcal{O}(c^{-|n|})$ e $p_{\uparrow}(n, t) = \mathcal{O}(c^{-|n|})$.*

Questo teorema esprime matematicamente il fatto che la distribuzione di probabilità decresce in modo rilevante all'esterno dell'intervallo $[-1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}]$ per α , come si può chiaramente vedere in figura 2.2 dove il grafico va a zero molto rapidamente per $|n| > 200/\sqrt{2}$.

Teorema 2. *Sia $\epsilon > 0$ una costante e $\alpha \in [-1/\sqrt{2} + \epsilon, 1/\sqrt{2} - \epsilon]$, allora nel limite $t \rightarrow \infty$ si ha:*

$$p_{\downarrow}(n, t) \approx \frac{2(1 + \alpha)}{\pi t(1 - \alpha)\sqrt{1 - 2\alpha^2}} \cos^2\left(-\omega t + \frac{\pi}{4}\right), \quad (2.27a)$$

$$p_{\uparrow}(n, t) \approx \frac{2}{\pi t\sqrt{1 - 2\alpha^2}} \cos^2\left(-\omega t + \frac{\pi}{4} - \rho\right), \quad (2.27b)$$

dove $\omega = \alpha\rho + \theta$, $\rho = \arg(-B + \sqrt{\Delta})$, $\theta = \arg(B + 2 + \sqrt{\Delta})$, $B = 2\alpha/(1 - \alpha)$ e $\Delta = B^2 - 4(B + 1)$.

Dal precedente risultato si possono derivare numerose conseguenze. In primo luogo, se si integrano le (2.27) per $\alpha \in [-1/\sqrt{2} + \epsilon, 1/\sqrt{2} - \epsilon]$ si ottiene che in questo intervallo è concentrata la quantità di probabilità $1 - 2\epsilon/\pi - \mathcal{O}(1)/t$, ossia quasi la totalità per t grande e ϵ piccolo. Da ciò si deduce che le proprietà statistiche più rilevanti della distribuzione di probabilità del QRW possono essere studiate restringendosi all'intervallo in questione. In secondo luogo, nel limite $t \rightarrow \infty$ ci sono posizioni n limitate inferiormente da t in cui i coseni quadrati nelle (2.27) sono

vicini a 1 e quindi le espressioni di $p_{\downarrow}(n, t)$ e $p_{\uparrow}(n, t)$ dell'enunciato del teorema 2 sono limitate inferiormente da $1/t$. Ciò ha come conseguenza che, come si vedrà anche più in dettaglio nel proseguio, il fenomeno di diffusione del *walker* nel dominio spaziale avviene in un tempo lineare. Quest'ultimo risultato viene espresso proprio nel terzo teorema.

Teorema 3. *Sia $\pi_t(n)$ la distribuzione uniforme su $\mathbb{Z} \cap [-t/\sqrt{2}, t/\sqrt{2}]$, allora esiste una costante $\delta < 1$ tale che per almeno un t sufficientemente grande si ha $\|p(\cdot, t) - \pi_t\| \leq \delta$. La metrica $\|\cdot\|$ è la distanza di variazione totale e, date due distribuzioni di probabilità P e Q , essa corrisponde a $\sup_{A \in \mathcal{F}} |P(A) - Q(A)|$, dove \mathcal{F} è un sottoinsieme dello spazio degli eventi delle due distribuzioni.*

Il teorema 3 afferma che nel limite di grandi t la distribuzione del QRW si diffonde in maniera uniforme nell'intervallo $n \in [-t/\sqrt{2}, t/\sqrt{2}]$ e ciò si può osservare già nella figura 2.2, dove l'uniformità è più marcata al centro dell'intervallo in prossimità dell'origine. Questo è un aspetto di notevole differenza rispetto al caso classico, dove si ha una distribuzione piccata ad un valore centrale e che decade velocemente quando ci si allontana da esso.

I teoremi 1 e 2 possono essere dimostrati attraverso due metodi, uno che impiega una versione discreta della formulazione della meccanica quantistica attraverso l'integrale sui cammini (in inglese *path integral*) e l'altro che si basa su un'analisi di Fourier dell'evoluzione tipica della meccanica ondulatoria alla Schrödinger. Il primo approccio consente di dimostrare il teorema 1 e una versione del teorema 2 con una garanzia di convergenza più debole, mentre il secondo permette di ricavare il teorema 2 e una versione meno forte del teorema 1. I due approcci sono in un certo senso complementari e nella seguente trattazione si adotterà il secondo di essi, con la consapevolezza che per ricavare in modo esatto gli enunciati dei due teoremi bisogna combinare i due metodi. Il teorema 3 è ottenibile a partire dai risultati a cui si giunge attraverso il teorema 2.

2.4.2 Analisi di Fourier del QRW di Hadamard

L'approccio alla Schrödinger si basa sul fatto che l'evoluzione temporale del QRW di Hadamard ha una descrizione semplice nel dominio di Fourier, nel quale è possibile risolvere facilmente la dinamica per poi ritornare nello spazio reale di partenza con la trasformata inversa. Questa proprietà del particolare QRW che viene analizzato è dovuta al fatto che esso gode della simmetria di invarianza traslazionale. Il sistema (2.17) ricavato per un *coin* \hat{C} generale, può essere riscritto per il caso particolare di

$\hat{C} = \hat{H}$ in rappresentazione vettoriale come:

$$\begin{aligned}\Psi^{n,t+1} &= \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{\uparrow}^{n-1,t} \\ \Psi_{\downarrow}^{n-1,t} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{\uparrow}^{n+1,t} \\ \Psi_{\downarrow}^{n+1,t} \end{bmatrix} \\ &= H_{\uparrow} \Psi^{n-1,t} + H_{\downarrow} \Psi^{n+1,t}.\end{aligned}\quad (2.28)$$

Data la funzione nel dominio delle posizioni $\Psi^{n,t} = \Psi(n, t)$, se ne può calcolare la trasformata di Fourier $\tilde{\Psi}(k, t)$ con $k \in [-\pi, \pi]$ come:

$$\tilde{\Psi}(k, t) = \sum_n \Psi(n, t) e^{ikn}.\quad (2.29)$$

Dalla dinamica di $\Psi(n, t)$ espressa dalla (2.28) si può ricavare quella di $\tilde{\Psi}(k, t)$:

$$\begin{aligned}\tilde{\Psi}(k, t+1) &= \sum_n (H_{\uparrow} \Psi(n-1, t) + H_{\downarrow} \Psi(n+1, t)) e^{ikn} \\ &= e^{ik} H_{\uparrow} \sum_n \Psi(n-1, t) e^{ik(n-1)} + \\ &\quad + e^{-ik} H_{\downarrow} \sum_n \Psi(n+1, t) e^{ik(n+1)} \\ &= (e^{ik} H_{\uparrow} + e^{-ik} H_{\downarrow}) \tilde{\Psi}(k, t),\end{aligned}\quad (2.30)$$

dove l'ultima uguaglianza è possibile perché l'indice n della sommatoria scorre su un insieme infinito di valori, dal momento che si assume che lo spazio delle posizioni non sia limitato. La ricorrenza nel dominio di Fourier si può quindi scrivere come:

$$\tilde{\Psi}(k, t+1) = H_k \tilde{\Psi}(k, t),\quad (2.31)$$

dove:

$$H_k = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} e^{ik} & e^{ik} \\ e^{-ik} & -e^{-ik} \end{bmatrix}.\quad (2.32)$$

A partire dallo stato iniziale $\tilde{\Psi}(k, 0)$, dopo un tempo t lo stato sarà dunque dato da:

$$\tilde{\Psi}(k, t) = H_k^t \tilde{\Psi}(k, 0).\quad (2.33)$$

É possibile calcolare H_k^t attraverso l'espressione della matrice unitaria H_k in funzione dei suoi autovalori $(\lambda_{k,1}, \lambda_{k,2})$ e dei suoi autovettori $(\Phi_{k,1}, \Phi_{k,2})$ come:

$$H_k^t = \lambda_{k,1}^t \Phi_{k,1} \Phi_{k,1}^+ + \lambda_{k,2}^t \Phi_{k,2} \Phi_{k,2}^+, \quad (2.34)$$

dove $(\Phi_{k,1}, \Phi_{k,2})$ sono intesi come vettori colonna e $\Phi_{k,1/2} \Phi_{k,1/2}^+$ indica il prodotto esterno del vettore $\Phi_{k,1/2}$ con se stesso. Si ricava che gli autovalori di H_k sono dati

da $\lambda_{k,1} = e^{i\omega_k}$ e $\lambda_{k,2} = -e^{-i\omega_k}$, dove $\sin(\omega_k) = \sin(k)/\sqrt{2} \in [-1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}]$, mentre gli autovettori hanno espressione:

$$\Phi_{k,1} = \frac{1}{\sqrt{2N(\pi - k)}} \begin{bmatrix} e^{ik} \\ \sqrt{2}e^{i\omega_k} - e^{ik} \end{bmatrix}, \quad (2.35a)$$

$$\Phi_{k,2} = \frac{1}{\sqrt{2N(k)}} \begin{bmatrix} e^{ik} \\ -\sqrt{2}e^{-i\omega_k} - e^{ik} \end{bmatrix}, \quad (2.35b)$$

dove il fattore $N(k)$ è dato da:

$$N(k) = (1 + \cos^2 k) + \cos k \sqrt{1 + \cos^2 k}. \quad (2.36)$$

Se lo stato di partenza al tempo $t = 0$ è dato da $|\Psi_{in}\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |0\rangle$, allora si può scrivere $\Psi(0,0) = [1, 0]^T$ e $\Psi(n,0) = [0, 0]^T$ se $n \neq 0$, per cui, in base alla (2.29), si ha $\tilde{\Psi}(k,0) = [1, 0]^T \forall k$. A partire da questa condizione iniziale ed impiegando le (2.33), (2.34) e (2.35) si ricava:

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}_{\uparrow}(k,t) &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\cos k}{\sqrt{1 + \cos^2 k}} \right) e^{i\omega_k t} + \\ &+ \frac{(-1)^t}{2} \left(1 - \frac{\cos k}{\sqrt{1 + \cos^2 k}} \right) e^{-i\omega_k t}, \end{aligned} \quad (2.37a)$$

$$\tilde{\Psi}_{\downarrow}(k,t) = \frac{e^{-ik}}{2\sqrt{1 + \cos^2 k}} \left(e^{i\omega_k t} - (-1)^t e^{-i\omega_k t} \right). \quad (2.37b)$$

A questo punto, è possibile applicare la trasformata di Fourier inversa alle (2.37) per ottenere le soluzioni nello spazio delle posizioni, che possono essere scritte a meno di fasi come:

$$\Psi_{\uparrow}(n,t) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \left(1 + \frac{\cos k}{\sqrt{1 + \cos^2 k}} \right) e^{-i(\omega_k t - kn)}, \quad (2.38a)$$

$$\Psi_{\downarrow}(n,t) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{-ie^{ik}}{\sqrt{1 + \cos^2 k}} e^{-i(\omega_k t - kn)}. \quad (2.38b)$$

Si può utilizzare il metodo della fase stazionaria [2, 4] per trovare espressioni asintotiche delle (2.38), e quindi delle probabilità $p_{\uparrow}(n,t) = |\Psi_{\uparrow}(n,t)|^2$ e $p_{\downarrow}(n,t) = |\Psi_{\downarrow}(n,t)|^2$, nel limite $t \rightarrow \infty$. In particolare, studiando il caso $|\alpha| \in [1/\sqrt{2} + \epsilon, 1]$ con $\epsilon > 0$, si dimostra una versione più debole del teorema 1 con $\mathcal{O}(1/|n|^d)$ per d arbitrario, piuttosto che con $\mathcal{O}(c^{-|n|})$. Applicando, invece, l'approssimazione per $\alpha \in [-1/\sqrt{2} + \epsilon, 1/\sqrt{2} - \epsilon]$ con $\epsilon > 0$, si ottengono le forme asintotiche di $p_{\uparrow}(n,t)$ e $p_{\downarrow}(n,t)$ dell'enunciato del teorema 2. I calcoli relativi in dettaglio sono riportati nella sezione 4.5.

A questo punto, si possono mettere a confronto, scegliendo un t sufficientemente

grande, il grafico della distribuzione esatta $p(n, t)$ del QRW e quello della distribuzione approssimata ottenuta a partire dalle espressioni (2.27), come viene illustrato nella prossima figura.

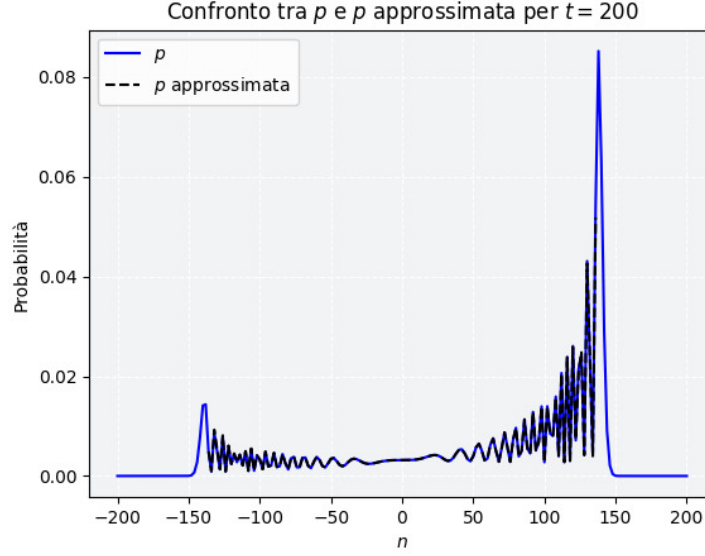


Figura 2.4: Grafici per $t = 200$ della distribuzione $p(n, t)$ esatta (in blu) e di quella approssimata con il metodo della fase stazionaria (in nero tratteggiata). Per quest'ultima il dominio considerato è l'intervallo $n \in [-136, 136]$, dal momento che l'approssimazione per p è valida se $n \in [(-1/\sqrt{2} + \epsilon)t, (1/\sqrt{2} - \epsilon)t]$ con $\epsilon > 0$.

L'accordo tra le due distribuzioni in figura 2.4 è visibilmente elevato, come anche dimostra il valore del chi-quadrato, per il quale la p esatta fornisce le probabilità attese e quella approssimata le probabilità osservate: $\chi^2 = 0.000413$ (con un numero di gradi di libertà $N_{d.o.f.} = 136$).

2.4.3 Momenti della distribuzione

Per caratterizzare ancora meglio la distribuzione del QRW è utile calcolarne alcuni momenti, restringendosi all'intervallo $n \in [-t/\sqrt{2}, t/\sqrt{2}]$ dove, come già visto, è concentrata la maggioranza della probabilità nel limite $t \rightarrow \infty$. Per fare ciò, è conveniente separare la distribuzione esatta $p(n, t)$ nell'intervallo in due componenti:

$$p(n, t) = p_{slow}(n, t) + p_{fast}(n, t) \quad (2.39)$$

dove:

$$p_{slow}(n, t) = \frac{t}{\pi(t-n)\sqrt{t^2 - 2n^2}} \quad (2.40)$$

è la parte non oscillante che varia lentamente, mentre p_{fast} è la rimanente componente che oscilla con rapidità. Questa scomposizione è utile, poiché i contributi di p_{fast} ai momenti della distribuzione sono di un ordine inferiore in t rispetto a quelli di p_{slow} . In sostanza, quindi, p_{slow} rappresenta il comportamento medio della distribuzione che determina le proprietà statistiche più rappresentative, mentre p_{fast} costituisce solo una modulazione oscillante di questo andamento principale.

Quando t è pari, si ha che p è non nulla solo nei siti con n pari e quindi, in questi casi, se si vuole confrontare con p solo la componente lenta, bisogna in realtà considerare $p'_{slow} = 2 \cdot p_{slow}$ definita solo per n pari. Il motivo di ciò è che p_{slow} ha come dominio di base sia le posizioni con n pari che dispari, dunque, per convertirla in una funzione che sia non nulla solo per n pari, vanno rimossi i valori nei siti con n dispari e bisogna riscalarla la funzione solo su quelli con n pari. Un'alternativa più semplice a questo procedimento, dal momento che p_{slow} è una funzione regolare e variabile lentamente, consiste nello spostare la probabilità delle posizioni con n dispari sulle successive con n pari. In particolare, dato che per le proprietà di p_{slow} è ragionevole assumere che $p_{slow}(n, t) \approx p_{slow}(n + 1, t)$, per ricavare p'_{slow} è sufficiente moltiplicare per 2 i valori di p_{slow} con n pari e azzerare quelli con n dispari. Se si fa ciò, dovrà essere cambiata anche la forma di p_{fast} , così da garantire che per t pari la probabilità totale sia non nulla e normalizzata solo sui siti con n pari. Le distribuzioni $p(n, t)$ e $p'_{slow}(n, t)$ sono confrontate graficamente nella seguente figura.

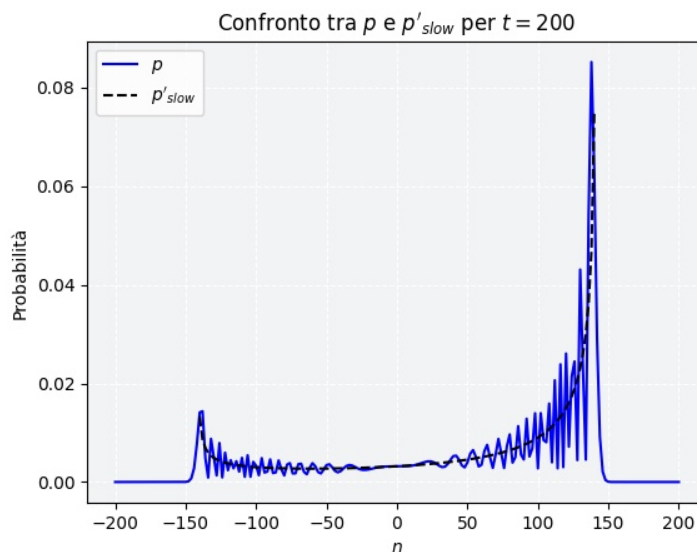


Figura 2.5: Grafici delle distribuzioni $p(n, t)$ (in blu) e $p'_{slow}(n, t)$ (in nero tratteggiata) per $t = 200$.

Dalla figura 2.5 si può osservare che p'_{slow} rappresenta bene l'andamento medio di p sia negli intervalli in cui quest'ultima ha un profilo più costante che in quelli in cui è molto oscillante.

A questo punto, si possono calcolare i momenti della distribuzione p_{slow} nell'intervallo $n \in [-t/\sqrt{2}, t/\sqrt{2}]$. Nel fare ciò, è utile passare alla funzione di distribuzione $p_{slow,\alpha}(\alpha, t) = tp_{slow}(n, t)$, che ci permette nel limite di grandi t di approssimare la sommatoria per p_{slow} da utilizzare nel calcolo dei momenti in un integrale per $p_{slow,\alpha}$ con $\alpha \in [-1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}]$. I momenti così ottenuti solo per la parte lenta possono essere confrontati con quelli ricavati dal calcolo esatto a partire dalla distribuzione p completa. I risultati sono raccolti nella seguente tabella.

Momento	$p_{slow,\alpha}$	p
$\langle \alpha \rangle$	$1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \approx 0.293$	0.291
$\langle \alpha \rangle$	$\frac{1}{2}$	0.500
$\langle \alpha^2 \rangle$	$1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \approx 0.293$	0.293
σ_α	$\sqrt{\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2}} \approx 0.455$	0.456

Tabella 2.2: Valori dei momenti nella variabile α ottenuti dall'integrazione di $p_{slow,\alpha}$ e dal calcolo esatto con p per $t = 200$. Nel caso di p si sono considerate tutte le posizioni con $\alpha \in [-1, 1]$, dal momento che non si è usato un valore molto elevato di t e quindi la probabilità all'esterno di $[-1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}]$ non era totalmente trascurabile.

Come si può osservare in tabella 2.2, la posizione media è spostata a destra rispetto all'origine, coerentemente con ciò che ci si aspetterebbe. Inoltre, se si considera $n_{rms} = \sqrt{\langle n^2 \rangle} = t\sqrt{\langle \alpha^2 \rangle}$ con $\langle \alpha^2 \rangle$ non dipendente da t , si verifica che per grandi t il processo di diffusione del *walker* nel dominio per il QRW avviene in modo quadraticamente più veloce rispetto al RW, dove infatti si ha $n_{rms} = \sqrt{t}$ (si veda la (1.6)).

2.4.4 Tempo di mescolamento

Il fatto che n_{rms} cresca linearmente con il tempo è intimamente connesso al risultato del teorema 3, tuttavia se si vuole ricavare precisamente quest'ultimo è necessario introdurre il concetto di tempo di mescolamento, definito come:

$$\tau_\epsilon = \min_t \{t : \|p(\cdot, t') - \pi_{t'}\| \leq \epsilon \quad \forall t' \geq t\}, \quad (2.41)$$

dove $\|\cdot\|$ è la distanza di variazione totale tra le due distribuzioni su un dato dominio e π_t è la distribuzione uniforme sul medesimo dominio. In parole semplici, il tempo

di mescolamento è il minimo valore di t tale che la distanza secondo questa metrica tra $p(\cdot, t)$ e π_t è limitata da ϵ in ogni tempo successivo. Una versione più debole della definizione (2.41) è quella in cui si rilassa la condizione di prossimità con la distribuzione π_t in tutti gli istanti futuri $t' > t$ ed è quindi data da:

$$\tau_\epsilon = \min_t \{t : \|p(\cdot, t) - \pi_t\| \leq \epsilon\}. \quad (2.42)$$

Il teorema 3, dunque, afferma che esiste una costante $\delta < 1$ tale che si ha un tempo di mescolamento τ_δ come quello definito dalla (2.42) internamente al dominio $n \in [-t/\sqrt{2}, t/\sqrt{2}]$, ovvero dice in sostanza che il QRW si diffonde con un tempo lineare secondo un regime balistico. Per il RW, al contrario, è possibile dimostrare che il tempo di mescolamento è quadratico in t e quindi, come già visto per n_{rms} , quantisticamente la diffusione avviene con una velocità che è quadratica rispetto a quella che si ha nel caso classico.

Per verificare il teorema 3 è sufficiente mostrare che una frazione costante $\beta > 0$ delle posizioni nell'intervallo $n \in [-t/\sqrt{2}, t/\sqrt{2}]$ ha una probabilità compresa tra $c/t\sqrt{2}$ e $1/t\sqrt{2}$ per una costante $c > 0$. Infatti, questo implica che la distanza di $p(\cdot, t)$ da π_t è al massimo pari a $1 - \beta c$, quantità che può essere assunta essere il $\delta < 1$. Se ci si restringe all'interno dell'intervallo $n \in [(-1/\sqrt{2} + \epsilon)t, (1/\sqrt{2} - \epsilon)t]$ si ha che $p(\cdot, t)$ è limitata superiormente dal valore $1/t\sqrt{2}$ e, come detto in precedenza, la probabilità totale è data da $1 - 2\epsilon/\pi - \mathcal{O}(1)/t$, che è una costante maggiore di 0. Questo valore di probabilità non può essere raggiunto se non c'è almeno una frazione costante $\beta = 1 - 2\epsilon/\pi - c$ di posizioni nell'intervallo che hanno una probabilità almeno pari a $c/t\sqrt{2}$ con $0 < c < 1 - 2\epsilon/\pi$, e ciò prova dunque il risultato del teorema 3.

I valori presenti nelle tabelle 2.1 e 2.2 e i grafici delle figure da 2.2 a 2.5 sono stati generati mediante simulazioni numeriche svolte con codice Python, appositamente sviluppato e reperibile nel *repository* GitHub [16].

Capitolo 3

Localizzazione di Anderson

Il comportamento di una particella, come per esempio un elettrone, in un reticolo cristallino nel quale è soggetta ad un potenziale periodico nello spazio è un problema molto studiato in meccanica quantistica [8, 19]. In particolare, il teorema di Bloch afferma che la forma dell'autofunzione della particella deve essere quella di un'onda piana modulata da una funzione periodica con la medesima periodicità del reticolo. Infatti, l'andamento del potenziale di interazione determinato dalla successione regolare degli ioni altera il moto libero della particella, in modo tale che l'ampiezza della sua autofunzione non può essere costante, ma deve cambiare in accordo con la struttura reticolare periodica. La distribuzione di probabilità della posizione derivante da un'autofunzione di questa forma è in ogni caso estesa su tutto il reticolo, per cui la particella è delocalizzata nello spazio. Uno dei modelli più semplici per il potenziale di un cristallo unidimensionale, che tuttavia permette di cogliere le caratteristiche più rilevanti del problema, è quello di Kronig-Penney. Esso consiste nell'utilizzare l'approssimazione di una successione ripetuta di buche e muri rettangolari di potenziale, con le buche in corrispondenza delle posizioni degli ioni e i muri tra due ioni consecutivi. Partendo da questo modello, che ha il vantaggio di essere risolvibile analiticamente in modo esplicito, si mostra che lo spettro energetico della particella nel reticolo risulta formato da bande separate da *gap* proibiti. Questo tipo di spettro è alla base della struttura elettronica a bande nei solidi.

La materia nello stato non cristallino, come per esempio metalli amorfi e semiconduttori o aggregati molecolari, non è invece caratterizzata da una disposizione spaziale di atomi o molecole con ordine a lungo *range*. In questi casi, il teorema di Bloch non è applicabile e quindi ci si attende che l'autofunzione della particella non sia quella valida per i reticoli ordinati. Il modello più semplice che descrive lo stato di una particella nella materia disordinata è stato introdotto da Anderson nel 1958

[3], il quale ha considerato un reticolo con energia che varia in modo casuale da sito a sito e ha scoperto che in un mezzo dotato di disordine come questo può avvenire il fenomeno della localizzazione (detta in seguito “di Anderson”) della particella. Con localizzazione si intende il fatto che l’autofunzione della particella è apprezzabilmente diversa da zero solo in una regione finita del dominio. In particolare, Anderson ha ipotizzato che, se il disordine è abbastanza elevato, la localizzazione avviene indipendentemente dalla dimensione d del sistema. In seguito, è stato provato sia con calcoli teorici che con metodi numerici che nei casi $d = 1, 2$ la localizzazione si verifica sempre, non importa quanto piccolo sia il grado di disordine. Dunque, il caso $d = 3$ è l’unico in cui si ha anche la delocalizzazione e, in aggiunta, il livello critico di disordine che separa localizzazione e delocalizzazione dipende dall’energia dell’autostato. La localizzazione di Anderson rappresenta un fenomeno fisico rilevante nella determinazione della struttura della materia e, nonostante sia stata scoperta più di 60 anni fa, offre ancora numerosi stimoli in termini di ricerca ed applicazioni.

In questo capitolo si tratta la localizzazione di Anderson a partire dal modello *tight-binding* di un elettrone in un reticolo, che viene introdotto in modo generale nella prima sezione [7]. Inizialmente, si affronta il caso in assenza di disordine, per il quale si ricava la corrispondente relazione di dispersione e si stima la probabilità di ritorno [10]. In seguito, viene introdotto nel sistema il disordine e in questo caso è utile studiare l’evoluzione nello spazio di Fourier, così da ottenere informazioni sullo spettro di energia e sulla lunghezza di localizzazione degli autostati meno energetici [7]. L’ultima sezione è dedicata alla descrizione ed illustrazione di tutte le simulazioni con cui si è verificata numericamente la localizzazione nel modello *tight binding* disordinato. In particolare, si sono impiegati i seguenti metodi computazionali: diagonalizzazione esatta della Hamiltoniana per il calcolo di autostati ed autovalori [10], dai quali si sono esaminati la lunghezza di localizzazione e il rapporto di partecipazione inversa (IPR); matrici di trasferimento ed analisi dell’esponente di Lyapunov associato [5]; evoluzione temporale di pacchetti d’onda di autostati [10].

3.1 Modello *tight-binding*

Si consideri un elettrone che si muove in un reticolo cristallino, soggetto ad un potenziale complessivo che è la sovrapposizione dei potenziali di interazione con tutti gli atomi del reticolo. L’equazione di Schrödinger indipendente dal tempo può quindi essere scritta come:

$$\left[-\frac{1}{2m}\nabla^2 + \sum_k V_k(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \quad (3.1)$$

dove m è la massa dell'elettrone, $\Psi(\mathbf{r})$ la sua autofunzione, E il suo autovalore energetico, \mathbf{r}_k la posizione del k -esimo atomo e $V_k(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k)$ il potenziale di interazione dell'elettrone con il k -esimo atomo. La sommatoria in k scorre su tutti gli atomi del reticolo. Si può cercare una soluzione della (3.1) in accordo con il metodo LCAO (*Linear Combination of Atomic Orbitals*) della forma:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_j \psi_j \phi_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (3.2)$$

dove $\phi_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$ è l'orbitale atomico del j -esimo atomo e ψ_j la sua ampiezza nella sovrapposizione. Dal momento che la (3.2) deve essere normalizzata, vale il vincolo sulle ampiezze:

$$\sum_j |\psi_j|^2 = 1. \quad (3.3)$$

Le $\phi_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$ soddisfano l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo per il singolo atomo:

$$\left[-\frac{1}{2m} \nabla^2 + V_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \right] \phi_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) = \epsilon_j \phi_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (3.4)$$

dove ϵ_j è l'energia dell'elettrone nell'atomo j -esimo isolato. Se si sostituisce la (3.2) nella (3.1) e si usa la (3.4) si ottiene:

$$\sum_j \left(\epsilon_j - E + \sum_{k \neq j} V_k(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k) \right) \psi_j \phi_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) = 0. \quad (3.5)$$

Per avere un'equazione per l'ampiezza ψ_j si può moltiplicare a sinistra la (3.5) per $\phi_l^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l)$ e fare l'integrazione sul volume, ottenendo così:

$$\left(\sum_j (\epsilon_j - E) S_{l,j} + \sum_{k \neq j} J_{j,k,j} + \sum_{j \neq l} \sum_{k \neq j} T_{l,k,j} \right) \psi_j = 0, \quad (3.6)$$

dove:

$$S_{l,j} = \int d^3r \phi_l^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) \phi_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (3.7a)$$

$$J_{j,k,j} = \int d^3r \phi_j^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) V_k(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k) \phi_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (3.7b)$$

$$T_{l,k,j} = \int d^3r \phi_l^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) V_k(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k) \phi_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j). \quad (3.7c)$$

$S_{l,j}$ esprime la sovrapposizione tra gli orbitali atomici, $J_{j,k,j}$ quantifica lo *shift* nell'energia di un orbitale a causa dei potenziali degli orbitali vicini, mentre $T_{l,k,j}$ corrisponde all'energia di interazione interatomica tra orbitali diversi. Le (3.7) sono

valide in generale per qualsiasi forma dei potenziali atomici $V_k(\mathbf{r}-\mathbf{r}_k)$. La risoluzione generale della (3.6) è molto complessa soprattutto se il numero di atomi del reticolo è elevato, per cui si adottano due approssimazioni che riducono notevolmente il numero di coefficienti coinvolti.

La prima approssimazione consiste nel considerare l'elettrone nel singolo orbitale come fortemente legato a quel dato atomo (da cui la denominazione *tight-binding*), per cui si può trascurare la sovrapposizione tra gli orbitali di atomi non contigui. Matematicamente questo si esprime come $S_{l,j} = \delta_{l,j}$, dove $\delta_{l,j}$ è la delta di Kronecker. Ciò implica che gli orbitali ϕ_j sono una base ortonormale dello spazio di Hilbert delle autofunzioni dell'elettrone, per cui la probabilità di trovare l'elettrone in una data posizione l è data da $|\psi_l|^2$. La seconda approssimazione risiede nel trascurare le interazioni tra orbitali che non siano primi vicini, per cui gli unici coefficienti $T_{l,k,j}$ non nulli sono quelli dati da $T_{l,l+l+z}$, dove z identifica i siti primi vicini. Un'ulteriore semplificazione che si può adottare è quella di assumere che il valore di $T_{l,l+l+z}$ non cambi con l , bensì sia costante e con segno che si può considerare negativo senza perdere di generalità, ovvero $T_{l,l+l+z} = -g$ con g costante positiva.

Per quanto riguarda il termine $J_{j,k,j}$, invece, esso contribuisce solo a modificare con un *offset* l'energia di ogni singolo atomo e non descrive l'interazione tra orbitali differenti, per cui il suo valore sommato su $k \neq j$ può essere inglobato dentro ϵ_j . In molte situazioni questo termine può essere addirittura trascurato, dal momento che ogni orbitale sente molto debolmente l'influenza dei potenziali degli atomi vicini.

Con queste approssimazioni e assunzioni, la (3.5) diventa:

$$\epsilon_l \psi_l - g \sum_z \psi_{l+z} = E \psi_l, \quad (3.8)$$

dove la somma scorre sui siti primi vicini. In questo modello il disordine è introdotto facendo variare le energie ϵ_l per ogni sito reticolare e questo tipo di disordine, come si vedrà meglio in seguito, viene detto diagonale. Nel proseguio vengono analizzati prima il caso privo di disordine in dimensione arbitraria e poi quello 1D disordinato.

3.2 Assenza di disordine

Nel caso limite in cui l'energia di ogni sito è la medesima, ovvero non è presente disordine, si è nella situazione di un reticolo cristallino ideale. In questo caso, si può scrivere $\epsilon_l = \bar{\epsilon} \forall l$, dove $\bar{\epsilon}$ è l'energia costante dell'elettrone che è legato ad un singolo atomo nel reticolo ordinato e che non interagisce con gli altri atomi. Si consideri, in particolare, un semplice reticolo cubico in uno spazio di dimensione d

con N atomi lungo ciascuna direzione spaziale, così che il numero totale di atomi è N^d . La variabile l che identifica i vari siti reticolari corrisponde ora alla d -upla di coordinate $\mathbf{l} = (l_1, \dots, l_d)$ con $0 \leq l_j \leq N - 1$ per $1 \leq j \leq d$. Detta a la costante del reticolo, dunque, il vettore posizione dell'elettrone sarà dato da $a\mathbf{l}$. È importante anche notare che in questo reticolo cubico i vettori primitivi sono dati da $a\mathbf{e}_j$ con $1 \leq j \leq d$, dove \mathbf{e}_j è il j -esimo vettore della base canonica in d dimensioni.

Per questo problema, assumendo condizioni periodiche al contorno, si può cercare una soluzione della (3.8) in accordo con il teorema di Bloch della forma (scrivendo la dipendenza funzionale da \mathbf{l} tra parentesi):

$$\psi_{\mathbf{K}}^0(\mathbf{l}) = \frac{1}{N^{d/2}} \exp(ia\mathbf{K} \cdot \mathbf{l}), \quad (3.9)$$

dove $\mathbf{K} = (2\pi/Na)(k_1, \dots, k_d)$, per il quale i k_j rispettano le stesse restrizioni di l_j prima descritte, è il vettore d'onda nel reticolo reciproco riscalato con N . Il fattore $1/N^{d/2}$ nella (3.9) serve per garantire la normalizzazione dell'autofunzione in accordo con la (3.3). L'apice "0" nella (3.9) sta ad indicare che essa è la soluzione in assenza di disordine e, infatti, la probabilità $|\psi_{\mathbf{K}}^0(\mathbf{l})|^2$ di trovare l'elettrone in un particolare sito \mathbf{l} è costante e uguale a $1/N^d$, ovvero l'elettrone è delocalizzato su tutto il reticolo. Se si inserisce la (3.9) nella (3.8) si ottiene la relazione di dispersione:

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{K}}^0 &= \bar{\epsilon} - g \sum_z \exp(ia\mathbf{K} \cdot \mathbf{z}) \\ &= \bar{\epsilon} - g \sum_{j=1}^d \exp(ia\mathbf{K} \cdot \mathbf{e}_j) + \exp(-ia\mathbf{K} \cdot \mathbf{e}_j) \\ &= \bar{\epsilon} - 2g \sum_{j=1}^d \cos \kappa_j, \end{aligned} \quad (3.10)$$

dove $\kappa_j = 2\pi k_j/N$.

Probabilità di ritorno

L'autofunzione $\psi_{\mathbf{K}}^0(\mathbf{l})$ dell'elettrone evolverà nel tempo nel seguente modo:

$$\psi_{\mathbf{K}}^0(\mathbf{l}, t) = \psi_{\mathbf{K}}^0(\mathbf{l}, t = 0) \exp(-itE_{\mathbf{K}}^0), \quad (3.11)$$

dove $\psi_{\mathbf{K}}^0(\mathbf{l}, t = 0)$ è l'autofunzione all'istante iniziale. Se come stato di partenza si considera un'autofunzione $\psi(\mathbf{l}, t = 0)$ data da una combinazione lineare delle $\psi_{\mathbf{K}}^0(\mathbf{l})$ che descrive l'elettrone localizzato nella posizione $\mathbf{l} = (0, \dots, 0) = \mathbf{0}$, ossia:

$$\psi(\mathbf{l}, t = 0) = \frac{1}{N^d} \sum_{\boldsymbol{\kappa}} \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{l}) = \delta_{\mathbf{l}, \mathbf{0}}, \quad (3.12)$$

dove la sommatoria in $\boldsymbol{\kappa} = a\mathbf{K} = 2\pi\mathbf{k}/N$ scorre su tutti i siti del reticolo individuati da \mathbf{k} , allora, dal momento che le $\boldsymbol{\kappa}$ autofunzioni nella (3.12) evolvono nel tempo in modo indipendente l'una dall'altra, si ottiene:

$$\psi(\mathbf{l}, t) = \frac{e^{-it\bar{\epsilon}}}{N^d} \sum_{\boldsymbol{\kappa}} \prod_{j=1}^d \exp(i\kappa_j l_j + 2igt \cos \kappa_j). \quad (3.13)$$

Nel limite termodinamico di $N \rightarrow \infty$ si ha che le componenti di $\boldsymbol{\kappa} = (\kappa_1, \dots, \kappa_d)$ possono essere approssimate con variabili continue nell'intervallo $[0, 2\pi]$, per cui la sommatoria nella (3.13) può essere sostituita da un integrale:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{l}, t) &\approx \frac{e^{-it\bar{\epsilon}}}{(2\pi)^d} \int_{\boldsymbol{\kappa} \in [0, 2\pi]^d} d^d \boldsymbol{\kappa} \prod_{j=1}^d \exp(i\kappa_j l_j + 2igt \cos \kappa_j) \\ &= \exp\left(-it\bar{\epsilon} + i\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^d l_j\right) \prod_{j=1}^d J_{l_j}(2gt), \end{aligned} \quad (3.14)$$

dove $J_n(z)$ è la funzione di Bessel del primo tipo di ordine n che è data da:

$$J_n(z) = \frac{1}{2\pi i^n} \int_0^{2\pi} d\theta e^{in\theta} e^{iz \cos \theta} = \frac{i^{-n}}{\pi} \int_0^\pi d\theta \cos(n\theta) e^{iz \cos \theta}. \quad (3.15)$$

A partire dalla (3.14) si può calcolare la probabilità di ritorno, ovvero la probabilità che dopo un certo tempo l'elettrone si trovi di nuovo nella posizione di partenza:

$$|\psi(\mathbf{l} = \mathbf{0}, t)|^2 = |J_0(2gt)^d|^2. \quad (3.16)$$

Si può ottenere un'espressione più esplicita della (3.16) nel limite $t \rightarrow \infty$, applicando a $J_0(2gt)$ il metodo della fase stazionaria già usato nella sezione 2.4 del capitolo precedente ed esposto nell' sezione 4.5:

$$J_0(2gt) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\theta e^{i2gt \cos \theta} \approx \frac{1}{\sqrt{tg\pi}} \cos\left(2gt - \frac{\pi}{4}\right). \quad (3.17)$$

Per ricavare l'approssimazione si è diviso l'intervallo di integrazione di $J_0(2gt)$ in $[0, \pi/2]$ e $[\pi/2, \pi]$ e, in seguito, si sono applicate ai singoli integrali le (4.12) con $p = 2$ e con ϕ dato da $\phi(\theta, g) = 2g \cos \theta$. Inserendo la (3.17) nella (3.16) si ottiene che, dal momento che il coseno è una funzione limitata, l'andamento asintotico per $t \rightarrow \infty$ della probabilità di ritorno è:

$$|\psi(\mathbf{l} = \mathbf{0}, t)|^2 \sim \frac{1}{t^d}, \quad (3.18)$$

ovvero man mano che il tempo passa la probabilità di ritorno decresce a zero e quindi l'elettrone è delocalizzato nel reticolo. Inoltre, nel limite termodinamico che

è stato considerato, lo spettro energetico per questo caso in assenza di disordine è totalmente continuo. Infatti, come si può vedere dalla (3.10), lo spettro ha una larghezza data da $4gd$ che è indipendente da N . Nel limite $N \rightarrow \infty$, quindi, gli autovalori riempiono densamente l'intervallo tra $\bar{\epsilon} - 2gd$ e $\bar{\epsilon} + 2gd$ originando uno spettro che è continuo. Questo fatto è rilevante, poichè la natura discreta o continua dello spettro è un indice della presenza o meno del fenomeno di localizzazione, come si vedrà anche in seguito.

3.3 Caso disordinato 1D

Si analizza ora il sistema con l'introduzione del disordine, limitandosi per semplicità ad una sola dimensione, per cui la (3.8) diventa:

$$\epsilon_l \psi_l - g\psi_{l+1} - g\psi_{l-1} = E\psi_l. \quad (3.19)$$

La precedente equazione definisce come sono legate tra loro le ampiezze nei vari siti adiacenti e verrà impiegata in seguito per ricavare numericamente la localizzazione degli autostati nel reticolo. Per studiare, invece, la localizzazione in termini dello spettro energetico, è utile analizzare la (3.19) nel dominio di Fourier. L'utilità nel fare ciò sta nel potersi ricondurre ad un'equazione agli autovalori senza assumere condizioni al contorno e nel poter studiare in modo mirato le differenze tra le energie del caso disordinato e quelle del caso ordinato.

Per procedere in questo, si può introdurre la variabile $D_l = \epsilon_l - \bar{\epsilon}$ che rappresenta la deviazione dell'energia di ogni sito da quella che si ha in ciascuna posizione in un reticolo cristallino ideale. Si assumerà che D_l sia una grandezza non correlata tra siti differenti e distribuita secondo una certa distribuzione di probabilità $p(D_l)$. La forma di $p(D_l)$ può essere di vario tipo e, dal momento che nelle simulazioni presentate successivamente verrà adottata una distribuzione uniforme, si considererà ora per completezza una distribuzione Gaussiana:

$$p(D_l) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{D_l^2}{2\sigma^2}\right), \quad (3.20)$$

con media $\langle D_l \rangle = 0$ e deviazione standard $\sigma = \sqrt{\langle D_l^2 \rangle}$. A questo punto, se si fa la trasformata di Fourier discreta di entrambi i termini della (3.19) si ottiene:

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{N-1} D_l \psi_l \frac{e^{iKla}}{\sqrt{N}} + \bar{\epsilon} \sum_{l=0}^{N-1} \psi_l \frac{e^{iKla}}{\sqrt{N}} - g e^{-iKa} \sum_{l=0}^{N-1} \psi_{l+1} \frac{e^{iK(l+1)a}}{\sqrt{N}} - \\ - g e^{iKa} \sum_{l=0}^{N-1} \psi_{l-1} \frac{e^{iK(l-1)a}}{\sqrt{N}} = E \sum_{l=0}^{N-1} \psi_l \frac{e^{iKla}}{\sqrt{N}}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

dove la sommatoria in l scorre sempre su tutti i siti del reticolo. Se si considera il limite termodinamico di $N \rightarrow \infty$, la precedente equazione diventa:

$$\sum_{l=0}^{N-1} D_l \psi_l \frac{e^{iKla}}{\sqrt{N}} = (E - \bar{\epsilon} + 2g \cos(Ka)) \sum_{l=0}^{N-1} \psi_l \frac{e^{iKla}}{\sqrt{N}}, \quad (3.22)$$

che può essere infine riscritta come:

$$\sum_{k'=0}^{N-1} W_{kk'} \tilde{\psi}(k') = (E - E_k^0) \tilde{\psi}(k), \quad (3.23)$$

dove $E_k^0 = E_K^0$ è dato dalla (3.10) per $d = 1$ e valgono:

$$\tilde{\psi}(k) = \sum_{l=0}^{N-1} \psi_l \frac{e^{iKla}}{\sqrt{N}} = \sum_{l=0}^{N-1} \psi_l \frac{e^{2\pi ikl/N}}{\sqrt{N}}, \quad (3.24a)$$

$$W_{kk'} = \frac{1}{N} \sum_{l=0}^{N-1} D_l e^{2\pi i(k-k')l/N}. \quad (3.24b)$$

La (3.23) è l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo in una base dello spazio di Fourier $|k\rangle$ con $0 \leq k \leq N-1$. Infatti, si verifica che $\tilde{\psi}(k) = \langle k | \tilde{\psi} \rangle$ e $W_{kk'} = \langle k | \hat{W} | k' \rangle$ con $|\tilde{\psi}\rangle$ ket di stato e \hat{W} operatore Hamiltoniano nello spazio di Fourier. Gli autovalori dell'equazione sono dati da $(E - E_k^0)$.

3.3.1 Analisi dello spettro energetico

Guardando che struttura hanno gli autovalori della (3.23), si comprende che l'Hamiltoniana dell'equazione descrive solo la componente di energia di differenza con il caso privo di disordine. Dunque, gli elementi diagonali W_{kk} forniscono lo *shift* nell'energia degli stati identificati da k nel mezzo disordinato rispetto a quella dei corrispondenti stati nel reticolo ideale. In particolare, il valore di:

$$W_{kk} = \frac{1}{N} \sum_{l=0}^{N-1} D_l \quad (3.25)$$

risulta essere indipendente da k , ma dipendente dalla particolare realizzazione della variabile casuale D_l . Si possono calcolare il valore medio e la varianza di W_{kk} sulla distribuzione di probabilità $p(D_l)$, ottenendo:

$$\langle W_{kk} \rangle = 0, \quad (3.26a)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{W_{kk}}^2 &= \langle W_{kk}^2 \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_{l=0}^{N-1} \sum_{l'=0}^{N-1} \langle D_l D_{l'} \rangle \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{l=0}^{N-1} \langle D_l^2 \rangle = \frac{\sigma^2}{N}, \end{aligned} \quad (3.26b)$$

dove si è usato il fatto che $\langle D_l D_{l'} \rangle = 0$ per $l' \neq l$.

I termini non diagonali $W_{kk'}$, invece, rappresentano la differenza tra l'energia di interazione degli stati k e k' nel reticolo con disordine e quella dei relativi stati nel caso non disordinato. Questi elementi di matrice sono quelli responsabili della localizzazione e, calcolando anche per essi il valore medio e la varianza (considerando il modulo quadro), si ha:

$$\langle W_{kk'} \rangle = 0, \quad (3.27a)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{W_{kk'}}^2 &= \langle |W_{kk'}|^2 \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_{l=0}^{N-1} \sum_{l'=0}^{N-1} \langle D_l D_{l'} \rangle e^{2\pi i(k-k')(l'-l)/N} \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{l=0}^{N-1} \langle D_l^2 \rangle = \frac{\sigma^2}{N}, \end{aligned} \quad (3.27b)$$

dove la varianza è uguale a quella dello *shift* di energia riportata nella (3.26). La quantità $\sigma_{W_{kk'}} = \sigma/\sqrt{N}$, dunque, rappresenta la fluttuazione tipica dell'accoppiamento tra i diversi stati k dato da $W_{kk'}$. Per valutare l'entità del disordine, si può confrontare $\sigma_{W_{kk'}}$ con la scala energetica tipica della distanza tra i livelli di energia per il reticolo ideale δE^0 . Nel caso in cui:

$$\delta E^0 \gg \frac{\sigma}{\sqrt{N}}, \quad (3.28)$$

allora il disordine è una piccola perturbazione e gli stati sono poco combinati tra loro, rimanendo delocalizzati nel reticolo. Se si ha, invece, la disuguaglianza opposta rispetto alla (3.28), allora è presente un elevato grado di disordine che comporta il verificarsi della localizzazione. Nella transizione tra i due regimi si arriva alla condizione (detta in seguito di *onset*) $\delta E^0 = \sigma/\sqrt{N}$, in corrispondenza della quale si ha che la lunghezza di localizzazione, intesa come porzione del dominio in cui gli stati sono apprezzabilmente diversi da zero, comincia ad essere inferiore alla lunghezza di reticolo. Si può dimostrare che in ogni caso gli stati sono localizzati nel limite termodinamico, attraverso lo studio di come scalano $\sigma_{W_{kk'}}$ e δE_k^0 con N , dove δE_k^0 è la differenza di energia tra l'autovalore indicizzato da k e quello successivo nel caso senza disordine con cui si stima δE^0 . Mentre $\sigma_{W_{kk'}} \propto 1/\sqrt{N}$, per $\delta E_k^0 = E_{k+1}^0 - E_k^0$ si ottiene:

$$\delta E_k^0 = 2g \left(\sin\left(\frac{2\pi k}{N}\right) \frac{2\pi}{N} + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{2\pi k}{N}\right) \frac{4\pi^2}{N^2} - \frac{1}{6} \sin\left(\frac{2\pi k}{N}\right) \frac{8\pi^3}{N^3} + \dots \right), \quad (3.29)$$

dove si è sviluppato E_{k+1}^0 attorno a k . Dalla (3.29) si vede che nel limite $N \rightarrow \infty$ la grandezza δE_k^0 decresce a zero almeno come $1/N^2$, ossia più rapidamente di $\sigma_{W_{kk'}}$. Dunque, per reticoli 1D sufficientemente grandi viene soddisfatta la disuguaglianza $\delta E^0 \ll \sigma_{W_{kk'}}$, per cui si verifica sempre localizzazione.

3.3.2 Stima della lunghezza di localizzazione degli autostati a bassa energia

Per sistemi grandi con elevato grado di disordine, per i quali si ha localizzazione, si può valutare la lunghezza di localizzazione degli autostati corrispondenti ai livelli di energia inferiori. In particolare, si fa l'ipotesi che questi autostati siano localizzati in segmenti di dimensione N^* che non si sovrappongono, ma che tuttavia possono essere comuni a più autostati. L'idea per valutare N^* è quella di considerare i livelli di energia più bassi all'interno di ogni segmento come quelli di un reticolo ideale di grandezza N^* , per cui sarà valida la (3.10) ma con N sostituito da N^* . Inoltre, si può assumere valida la condizione di *onset* in cui δE^0 è valutata per i livelli di energia inferiore attraverso la (3.29), in cui si considera $k \ll 1$ e si tiene solo il termine di secondo ordine. Facendo ciò, la lunghezza N^* si può stimare come:

$$N^* = \left(\frac{4\pi^2 g}{\sigma} \right)^{2/3}. \quad (3.30)$$

Il ragionamento che è stato fatto è valido con condizioni al contorno periodiche, ovvero tali per cui la posizione $l = N$ coincide con $l = 0$, dal momento che non sono trattati diversamente eventuali autostati localizzati sugli estremi del dominio. Con condizioni al contorno diverse, il fattore costante $(4\pi^2)^{2/3}$ sarebbe differente.

3.4 Risultati numerici

Questa sezione riguarda lo studio della localizzazione nel reticolo tramite l'uso di metodi numerici. Tutte le simulazioni realizzate, con le quali si sono generati i grafici riportati nel proseguio, sono state implementate con codice Python, appositamente sviluppato e reperibile nel *repository* GitHub [16].

3.4.1 Diagonalizzazione esatta

Autostati e autovalori

Il primo metodo che viene impiegato è la risoluzione della (3.19) che, assumendo condizioni al contorno periodiche, può essere scritta in forma matriciale come:

$$E \begin{bmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \epsilon_0 & -g & \dots & 0 & -g \\ -g & \epsilon_1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \epsilon_{N-2} & -g \\ -g & 0 & \dots & -g & \epsilon_{N-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \end{bmatrix}. \quad (3.31)$$

La (3.31) è l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo in una base dello spazio reale $|l\rangle$ con $0 \leq l \leq N - 1$, dove le componenti ψ_l dei vettori sono date da $\langle l|\psi\rangle$ con $|\psi\rangle$ ket di stato nello spazio reale e gli elementi di matrice corrispondono a $\langle l|\hat{H}|l'\rangle$ con \hat{H} operatore Hamiltoniano. Dunque, ciò che deve essere risolto è il problema agli autovalori della matrice nella (3.31) che, in accordo con quello detto in precedenza, si chiama matrice Hamiltoniana con disordine diagonale. Quest'ultima è reale simmetrica, per cui avrà autovalori reali ed autovettori ortonormali reali.

È stata calcolata la soluzione del problema agli autovalori considerando $g = -1$ ed estraendo le energie ϵ_l da una distribuzione uniforme nell'intervallo $[-W/2, W/2]$, con W scala di energia che misura il livello di disordine. Sono stati adottati questo valore di g e questa distribuzione per le ϵ_l anche nelle due sottosezioni seguenti. Nella prossima figura, dunque, si riportano i grafici dei moduli quadrati degli autostati ottenuti con differenti valori di W , per analizzarne le proprietà di localizzazione al variare del disordine.

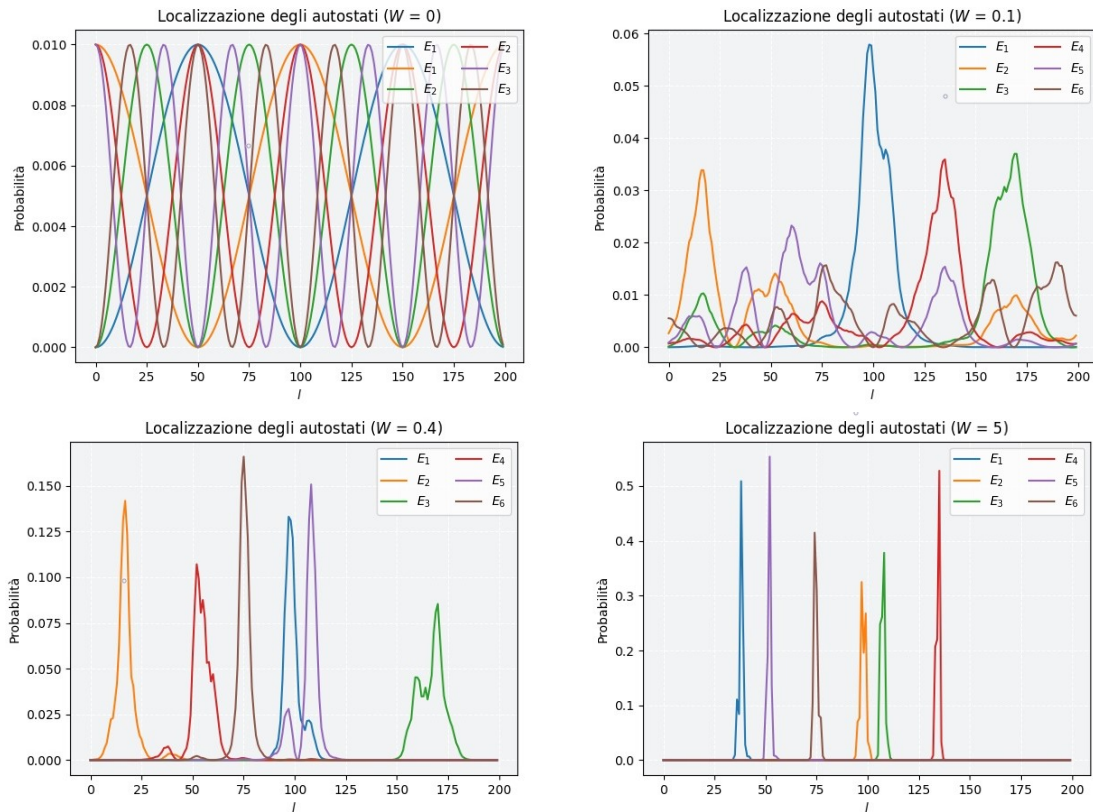


Figura 3.1: Grafici delle probabilità di localizzazione di alcuni autostati dei livelli meno energetici (escluso quello con l'energia minima E_0) in un reticolo di dimensione $N = 200$ con diversi gradi di disordine. Quest'ultimo è crescente da sinistra verso destra e dall'alto verso il basso con valori $W = 0$, $W = 0.1$, $W = 0.4$ e $W = 5$.

Come si può vedere in figura 3.1, all'aumentare di W le distribuzioni di probabilità diventano sempre più localizzate in una regione del dominio ristretta, fino a divenire delle delte di Dirac completamente localizzate nel limite di W infinito. Per $W = 0$, in particolare, le distribuzioni hanno gli andamenti di onde stazionarie con nodi e ventri. Tutti gli autovalori per $W = 0$ sono doppiamente degeneri, ad eccezione di quelli ai limiti dello spettro che sono non degeneri. Per $W \neq 0$, invece, tutti gli autovalori diventano non degeneri, quindi il disordine rimuove la degenerazione. Inoltre, dal momento che l'ampiezza dello spettro energetico cresce con W , per ogni N grande a piacere esisterà un valore del disordine sufficientemente elevato tale che si avrà uno spettro discreto, che quindi è indicazione del verificarsi della localizzazione.

Lunghezza di localizzazione

Un autostato $(\psi_0, \dots, \psi_{N-1})$ è localizzato quando decresce in modo esponenziale nello spazio allontanandosi dalla posizione del suo valore massimo, ovvero vale:

$$|\psi_l| \sim |\psi_{l^*}| e^{-|l-l^*|/\xi}, \quad (3.32)$$

dove l^* individua la posizione del massimo dell'autostato e ξ è la scala spaziale caratteristica del decadimento esponenziale, che può essere identificata con la lunghezza di localizzazione dell'autostato. ξ può essere stimata mediante la seguente espressione [5, 9]:

$$\xi = - \left(\lim_{l \rightarrow \infty} \frac{1}{l} \langle \ln |\psi_l| \rangle \right)^{-1}, \quad (3.33)$$

dove la media è effettuata sulle diverse possibili realizzazioni del disordine e ha lo scopo di evitare fluttuazioni. Nel caso limite di uno stato completamente delocalizzato, ossia tale che $\psi_l = 1/\sqrt{N} \forall l$ con $0 \leq l \leq N-1$, si ha che ξ diverge. Al contrario, per un sistema totalmente localizzato, ovvero tale che $\psi_l = \delta_{l,l_0}$ con $0 \leq l, l_0 \leq N-1$, la lunghezza ξ è nulla.

È stata valutata ξ attraverso un calcolo numerico della (3.33), dove si è considerata la media in un certo numero di realizzazioni differenti di un dato livello di disordine. Dal momento che il dominio è limitato, il valore massimo di l che si è potuto impiegare per approssimare il limite nell'espressione di ξ è stato quello all'estremo del reticolo, per cui la precisione del risultato dipende dalla grandezza di N . In primo luogo, fissato il valore di W , si sono ricavati gli autostati e gli autovalori di diverse realizzazioni del problema agli autovalori (3.31) che si differenziavano nella sequenza di ϵ_l per quel dato disordine. Si è poi calcolato il valore medio di ogni autovalore e di $\ln |\psi_N|$ per ogni autostato su tutte le realizzazioni, così da poter

ricavare N valori unici dell'energia e gli N valori di ξ per quel determinato W . Questo procedimento è stato infine ripetuto cambiando il valore di W , per analizzare la dipendenza della lunghezza di localizzazione dal grado di disordine. I risultati ottenuti sono graficati nella seguente figura.

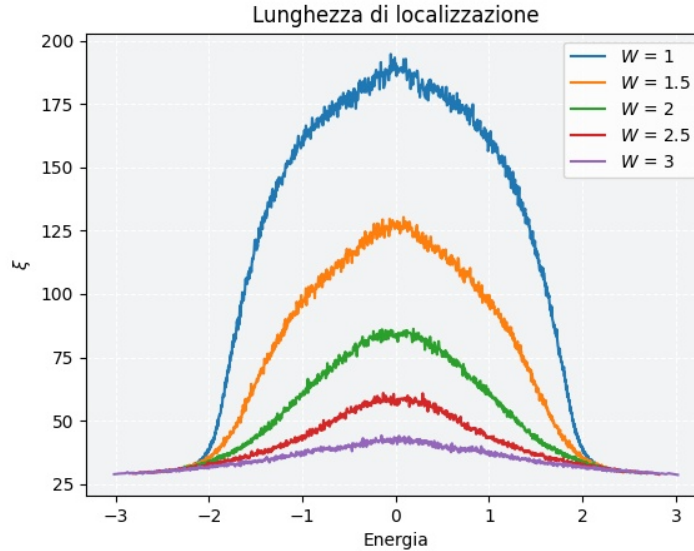


Figura 3.2: Grafici della lunghezza di localizzazione ξ in funzione dell'energia in un reticolo di dimensione $N = 1000$ con cinque diversi gradi di disordine. Per il calcolo dei valori medi sono state ripetute 1000 realizzazioni diverse per ogni disordine.

Dalla figura 3.2 si può notare che gli autostati sono più localizzati man mano che ci si allontana dal centro dello spettro energetico e ci si avvicina ai bordi, ossia in corrispondenza degli autovalori con valore assoluto maggiore. Si vede, inoltre, che all'aumentare del disordine i valori di ξ alle varie energie in generale diminuiscono, con una decrescita maggiore al centro dello spettro che rende la differenza di localizzazione tra bordi e centro sempre meno marcata.

IPR

Per quantificare il livello di localizzazione degli autostati si può usare anche il rapporto di partecipazione inversa, in sigla inglese IPR (*Inverse Participation Ratio*) [10, 13], definito per ogni autostato come:

$$\text{IPR}(i) = \sum_{l=0}^{N-1} |\psi_{i,l}|^4, \quad (3.34)$$

dove $\psi_i = (\psi_{i,0}, \dots, \psi_{i,N-1})$ è l'autostato i -esimo. L'IPR è una misura della porzione del dominio nella quale l'ampiezza degli autostati differisce da zero in modo rilevante. Studiando anche per esso i casi limite, si vede che per uno stato assolutamente delocalizzato l'IPR ha un valore pari a $1/N$, ossia va a zero nel limite termodinamico, mentre nella situazione opposta di completa localizzazione si ottiene $\text{IPR} = 1$. Dunque, da ciò si deduce che l'IPR è inversamente correlato alla lunghezza di localizzazione.

È stato calcolato l'IPR per ogni livello energetico con un dato disordine attraverso la (3.34), mediando i risultati di un certo numero di realizzazioni diverse del problema agli autovalori per limitare le fluttuazioni, in modo analogo a come è stato fatto in precedenza con la lunghezza di localizzazione per ogni disordine. Il calcolo, infine, è stato replicato per molteplici valori di N sempre con il medesimo W , per studiare come dipende la localizzazione dalla dimensione del reticolo, e i risultati che si sono ricavati sono illustrati nella prossima figura.

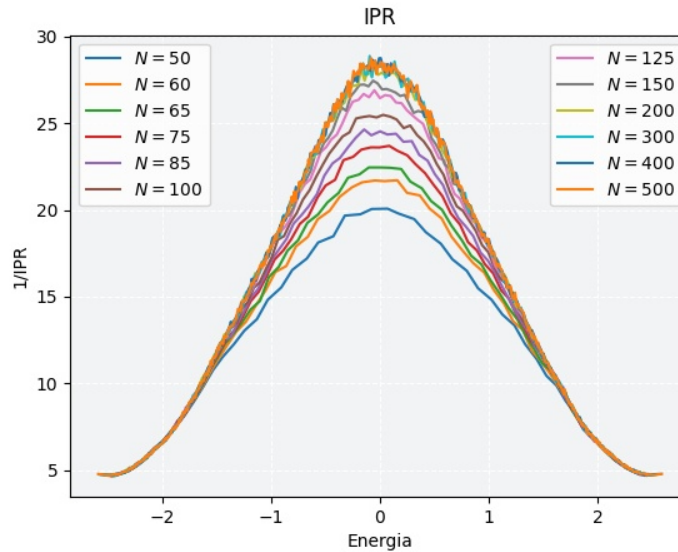


Figura 3.3: Grafici del reciproco dell'IPR in funzione dell'energia per dodici reticoli di dimensione N diversa con $W = 2$. Si sono considerate 2000 realizzazioni differenti del problema agli autovalori per il calcolo dei valori medi.

Dalla figura 3.3 si può osservare che per N crescente la delocalizzazione degli autostati in generale aumenta, soprattutto al centro dello spettro energetico, e le curve del reciproco dell'IPR tendono ad una certa distribuzione limite. Inoltre, coerentemente con ciò che si è ricavato dallo studio di ξ , la localizzazione è dominante ai bordi dello spettro.

Risulta ora interessante analizzare come scala funzionalmente l'IPR con N a parità di energia. Per fare ciò, si possono graficare i valori di $1/\text{IPR}$ corrispondenti ad una medesima energia all'interno dello spettro per reticoli di dimensione diversa in funzione di N . In realtà, i valori di energia considerati per i diversi reticoli non saranno gli stessi ma solo simili, perché gli autovalori dipendono da N . Il grafico ottenuto è rappresentato nella seguente figura.

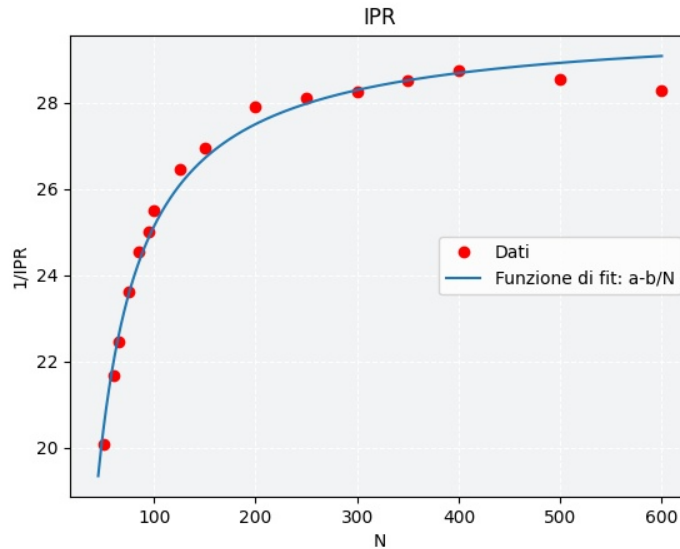


Figura 3.4: Grafico del reciproco dell'IPR per un dato valore di energia in funzione della dimensione N del reticolo con relativo *fit*. Si sono considerati sia i dati della figura precedente che i risultati di altre simulazioni analoghe per avere più punti. Come energia di riferimento a cui valutare $1/\text{IPR}$ si è scelta quella al centro dello spettro, sempre mediato sulle varie realizzazioni del disordine, di ogni reticolo.

Il *fit* in figura 3.4 è stato svolto tramite la funzione $f(N) = a - b/N$ e per i parametri si sono ricavate le stime $a = 29.87 \pm 0.15$ e $b = 474 \pm 15$, con errori percentuali rispettivamente di circa 0.507% e 3.18%. Il chi-quadrato ridotto ottenuto, pari a $\tilde{\chi}^2 = 0.115$ ($N_{d.o.f.} = 14$), testimonia un buon accordo tra i dati e la funzione di *fit*. I punti più problematici per il *fit* sono quelli ad N più elevato e ciò è dovuto al fatto che, come è possibile vedere in figura 3.3, per N grande l'IPR presenta fluttuazioni più ampie. Queste ultime sono dovute a statistica scarsa per quei valori di N e sarebbero attenuate con una media su un numero maggiore di realizzazioni. Per $N \rightarrow \infty$ si ha che $1/\text{IPR}$ presenta un asintoto orizzontale (con valore limite stimato da a), in accordo con il comportamento asintotico verso una distribuzione limite visibile in figura 3.3.

3.4.2 Matrici di trasferimento

La relazione di ricorrenza (3.19) può essere riscritta in forma matriciale come:

$$\begin{bmatrix} \psi_{l+1} \\ \psi_l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\epsilon_l - E}{g} & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_l \\ \psi_{l-1} \end{bmatrix}, \quad (3.35)$$

dove la matrice è detta matrice di trasferimento e viene indicata con T_l . La precedente equazione dice che a partire dalla conoscenza delle ampiezze di due siti adiacenti, come per esempio ψ_0 e ψ_1 , è possibile ottenere quelle di tutti gli altri siti applicando matrici di trasferimento in modo iterativo, secondo la relazione:

$$\begin{bmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{bmatrix} = \prod_{l=1}^n T_l \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \end{bmatrix}. \quad (3.36)$$

Le matrici T_l sono matrici *random* indipendenti e identicamente distribuite e sul loro prodotto sono noti una serie di risultati rilevanti [5]. Vale infatti il teorema di Fürstenberg, secondo il quale esiste sempre il limite:

$$\lambda_1 = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \left\| \prod_{l=1}^n T_l \right\|, \quad (3.37)$$

dove $\|\cdot\|$ indica la norma matriciale. λ_1 è detto esponente caratteristico di Lyapunov massimo della sequenza di matrici *random* e si verifica che, se le matrici sono uniformemente distribuite e hanno determinante unitario (come le T_l), allora $\lambda_1 > 0$. In particolare, esiste una sottoclasse Ω di sequenze di matrici per le quali la norma nella (3.37) viene saturata e, quindi, un vettore generico $\mathbf{z} \in \mathbb{C}^2$ a cui sono applicate ha una variazione esponenziale con tasso λ_1 . Per $(A_1, \dots, A_n) \in \Omega$ si ha:

$$\lambda_1 = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \left| \prod_{l=1}^n A_l \mathbf{z} \right|, \quad (3.38)$$

dove $|\cdot|$ è la norma vettoriale. Le matrici T_l appartengono alla sottoclasse Ω e se si considera come \mathbf{z} il vettore $[\psi_1, \psi_0]^T$ vale:

$$|\psi_n| \sim |\psi_0| e^{\lambda_1 n}, \quad (3.39)$$

in cui λ_1 è dato da:

$$\lambda_1 = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \left\langle \ln \left(\sqrt{\psi_{n+1}^2 + \psi_n^2} \right) \right\rangle, \quad (3.40)$$

dove il valore medio è calcolato sempre sulle diverse realizzazioni del disordine. Nel limite ideale $n \rightarrow \infty$ non sarebbe necessario considerare la media per il logaritmo, dal

momento che λ_1 è una grandezza non *random*, tuttavia quando si usa un n finito nella stima numerica di λ_1 la media è utile sempre per evitare fluttuazioni. Nell'ambito dell'approccio basato sulle matrici di trasferimento, l'inverso di λ_1 fornisce una stima della lunghezza di localizzazione ξ [5, 18]. La relazione esistente tra queste due grandezze, però, sarà spiegata più precisamente in seguito.

È stata impiegata la (3.40) per valutare λ_1 in modo analogo a come che è stato fatto per ξ , ovvero sempre con vari gradi di disordine e considerando per ognuno di essi valori medi in un certo numero di realizzazioni diverse. L'unica differenza sta nel fatto che i valori degli stati nelle posizioni estreme del reticolo, ossia in questo caso ψ_{n+1} e ψ_n con $n = N-2$, non sono stati ricavati dal problema agli autovalori, ma sono stati calcolati applicando un dato numero di matrici di trasferimento a partire da uno stato iniziale non nullo. In particolare, le energie E sono state estratte da una distribuzione uniforme in un certo intervallo e le varie realizzazioni di un dato disordine consistevano nelle diverse ϵ_i all'interno delle matrici di trasferimento. I risultati complessivamente ottenuti sono illustrati nella seguente figura.

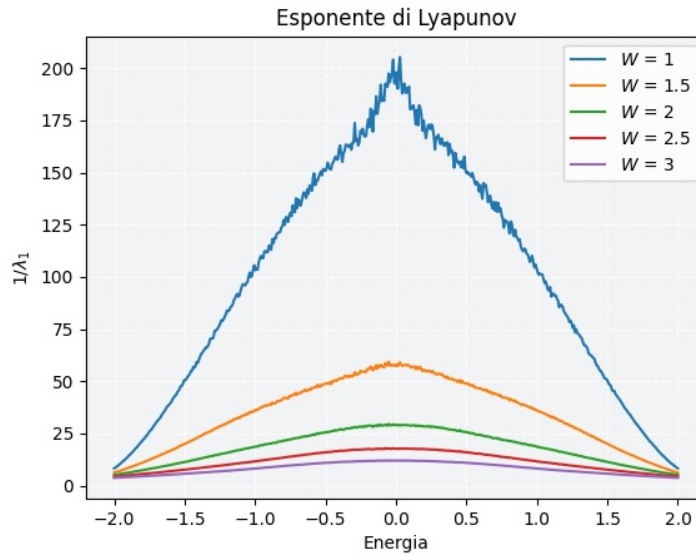


Figura 3.5: Grafici dell'inverso dell'esponente di Lyapunov λ_1 in funzione dell'energia in un reticolo di dimensione $N = 1000$ con cinque diversi gradi di disordine. Si sono considerati 500 valori di energia uniformemente distribuiti nell'intervallo $[-2, 2]$ e come stato iniziale si è scelto $\psi_0 = 0.01$ e $\psi_1 = 0$. I valori medi sono stati calcolati su 1000 realizzazioni diverse per ogni disordine.

Dalla figura 3.5 si vede che l'andamento qualitativo di $1/\lambda_1$ riprende le caratteristiche principali di quello di ξ mostrato in figura 3.2. Si discute ora brevemente in

che modo sono legate tra loro le quantità λ_1 e ξ .

Dalla (3.39) si vede che ψ_n cresce esponenzialmente con l'aumentare di n , invece che decrescere come afferma la (3.32). Ciò è dovuto al fatto che uno stato $(\psi_0, \dots, \psi_l, \dots)$ costruito tramite le matrici di trasferimento secondo la (3.36), non è in generale un autostato $(\psi_0, \dots, \psi_l, \dots, \psi_{N-1})$ dell'Hamiltoniana ricavato dalla (3.31). Infatti un autostato, oltre a risolvere la relazione di ricorrenza (3.19) derivata dall'equazione di Schrödinger, rispetta anche delle condizioni al contorno che quantizzano le energie accessibili al sistema. La relazione tra il tasso di crescita esponenziale di uno stato generico creato con le matrici di trasferimento, fornito da λ_1 , e la lunghezza caratteristica della decrescita esponenziale di un autostato quando localizzato, ovvero ξ , è espressa dalla cosiddetta congettura di Borland [5, 9]. Quest'ultima afferma che l'inverso dell'esponente di Lyapunov λ_1 , valutato ad una arbitraria energia E , corrisponde alla lunghezza di localizzazione ξ di un autostato se E coincide con l'autovalore energetico di quell'autostato. Dunque, nel limite di N grande e di W non troppo elevato, dal momento che lo spettro ha larghezza dipendente da W e all'aumentare di N esso viene riempito densamente dagli autovalori, se si considerano energie uniformemente distribuite nello spettro, allora $1/\lambda_1$ costituisce una stima per ξ con precisione tanto maggiore quanto più è elevato N a W fissato.

3.4.3 Evoluzione temporale

Un ulteriore modo per verificare che l'entità del disordine nel reticolo incide sulla localizzazione è quello di studiare l'evoluzione temporale di un pacchetto d'onda formato da autostati. Per fare ciò, è stata risolta inizialmente la (3.31) con un certo valore di W , per avere a disposizione una base di autostati, e in seguito è stata espressa la funzione d'onda del pacchetto, che si è considerato Gaussiano all'istante iniziale, nella base secondo l'espansione:

$$\sum_{i=0}^{N-1} c_i \psi_i, \quad (3.41)$$

dove $\psi_i = (\psi_{i,0}, \dots, \psi_{i,N-1})$ è l'autostato i -esimo e c_i è il coefficiente di Fourier della funzione d'onda del pacchetto relativo ad esso, calcolabile come:

$$c_i = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \sum_{l=0}^{N-1} \psi_{i,l} e^{-(l-\mu)^2/4\sigma^2}, \quad (3.42)$$

con μ e σ media e deviazione standard della Gaussiana. A questo punto, quindi, si può studiare l'evoluzione temporale della funzione d'onda del pacchetto sapendo che

essa è esprimibile dalla combinazione (3.41) e che ogni autostato cambia nel tempo in modo indipendente secondo:

$$\psi_i(t) = \psi_i(t=0) \exp(-itE_i), \quad (3.43)$$

dove E_i è l'autovalore dell'autostato ψ_i . Viene infine calcolata la distribuzione di probabilità del pacchetto ad un certo $t > 0$, facendo il modulo quadrato della funzione d'onda in ogni posizione a quell'istante temporale. Il procedimento descritto è stato ripetuto con differenti livelli di disordine, ossia con una base di autostati di una Hamiltoniana costruita con diversi valori di W . Per studiare la dipendenza dell'evoluzione temporale dal disordine, nella prossima figura si illustrano i grafici delle distribuzioni di probabilità di tre pacchetti d'onda formati da autostati relativi a tre differenti W ad un tempo $t > 0$, dopo che sono stati tutti preparati nella stessa forma Gaussiana iniziale a $t = 0$.

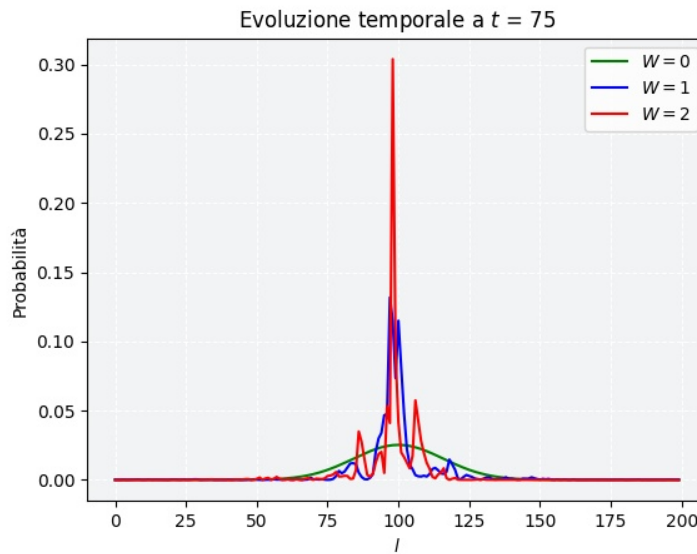


Figura 3.6: Grafici dell'evoluzione temporale a $t = 75$ (in unità inverse dell'energia) delle distribuzioni di probabilità di tre pacchetti d'onda di autostati con tre diversi gradi di disordine. Il reticolo considerato ha dimensione $N = 200$ e sono stati scelti $\mu = N/2$ e $\sigma = 5$ per le Gaussiani all'istante iniziale.

Dalla figura 3.6 si può notare che, con l'aumentare di W , il pacchetto risulta complessivamente maggiormente localizzato in corrispondenza di $l = \mu$. Nel caso $W = 0$ il pacchetto evolve mantenendo sempre una forma Gaussiana, ma con una deviazione standard crescente nel tempo.

Capitolo 4

Localizzazione di Anderson per un QRW 1D disordinato

A questo punto, è possibile coniugare i concetti esaminati separatamente nei capitoli 2 e 3 per studiare il fenomeno della localizzazione di Anderson per un QRW 1D disordinato [6].

Il disordine che viene inserito nel modello di QRW è un caso particolare di disordine statico e consiste in un rimescolamento delle componenti di *spin* nelle equazioni di evoluzione tramite l'aggiunta di un fattore di fase casuale. Inizialmente, in analogia a ciò che è stato fatto nel capitolo 3 in relazione alle simulazioni, si utilizza la diagonalizzazione esatta per ricavare numericamente gli autostati e lo spettro di autovalori e, conseguentemente, analizzare l'IPR come indice della localizzazione al variare dei parametri rilevanti. Successivamente, si passa ad uno studio più dettagliato del modello teorico, nell'ambito del quale si formula l'evoluzione attraverso una matrice tridiagonale e si ricava la ricorrenza della variabile di Riccati che compare nell'espressione dell'esponente di Lyapunov per il sistema, il quale permette di stimare la lunghezza di localizzazione. A partire da questi risultati, viene considerato dunque il caso notevole di disordine completo, per il quale si ottiene a partire dalla mappa un'espressione analitica dell'esponente di Lyapunov, e quindi della lunghezza di localizzazione, in funzione dell'angolo di accoppiamento. Si verifica, quindi, che i valori forniti dalla formula sono perfettamente concordi con ciò che si ottiene dai calcoli numerici. In conclusione, viene indagata la condizione di disordine debole, per la quale è possibile svolgere un calcolo perturbativo da cui si ricava la relazione che descrive la dipendenza spettrale dell'esponente di Lyapunov. Analogamente anche per questo caso, il risultato teorico è confrontato con gli esiti delle simulazioni numeriche e viene confermata l'esistenza di un ottimo accordo tra di essi.

Ciò che distingue la localizzazione di Anderson per un QRW con disordine dal medesimo fenomeno nel modello *tight binding* disordinato, descritto nel capitolo 3, è che per il QRW un accoppiamento più intenso tra le componenti non inibisce la localizzazione, ma al contrario la favorisce. Ciò ha come conseguenza che il *walker* può essere localizzato nel dominio spaziale anche quando il livello di disordine è piccolo, ma l'accoppiamento è sufficientemente forte. Questo fatto ha un effetto rilevante sulla *performance* di dispositivi che sfruttano il QRW per aumentare la velocità di computazione quantistica.

4.1 Evoluzione di un QRW con disordine di fase

Un modo per introdurre disordine in un QRW è quello di moltiplicare la matrice C del *coin* per un'ulteriore matrice $\text{diag}(e^{i\phi_\uparrow(n)}, e^{i\phi_\downarrow(n)})$, dove $\phi_{\uparrow/\downarrow}(n)$ sono fasi casuali che in generale dipendono dalla posizione n . Con questo tipo di aggiunta, le equazioni di evoluzione del sistema (2.17) vengono modificate, mediante la moltiplicazione del membro di destra della (2.17a) per il fattore $e^{i\phi_\uparrow(n)}$ e di quello di destra della (2.17b) per il termine $e^{i\phi_\downarrow(n)}$. Ridefinendo $\theta/2$ come θ per alleggerire la notazione, una soluzione stabile del sistema può quindi essere trovata risolvendo il seguente problema agli autovalori associato:

$$\begin{cases} z\Psi_\uparrow^{n,t} = e^{i\phi_\uparrow(n)} \left(e^{i\chi} \cos \theta \Psi_\uparrow^{n-1,t} + e^{i\varphi} \sin \theta \Psi_\downarrow^{n-1,t} \right) \end{cases} \quad (4.1a)$$

$$\begin{cases} z\Psi_\downarrow^{n,t} = e^{i\phi_\downarrow(n)} \left(-e^{-i\varphi} \sin \theta \Psi_\uparrow^{n+1,t} + e^{-i\chi} \cos \theta \Psi_\downarrow^{n+1,t} \right), \end{cases} \quad (4.1b)$$

ottenibile sostituendo nel sistema $[\Psi_\uparrow^{n,t+1}, \Psi_\downarrow^{n,t+1}]^T$ con $[z\Psi_\uparrow^{n,t}, z\Psi_\downarrow^{n,t}]^T$, dove $z \in \mathbb{C}$ è l'autovalore. In tutto il proseguio si considererà per semplicità di trattazione $\chi = 0$, dal momento che questo angolo non riveste un ruolo rilevante nella determinazione della dinamica del *walker*.

4.1.1 Diagonalizzazione esatta

Autostati e autovalori

Se si assumono condizioni al contorno periodiche, il sistema (4.1) che rappresenta il problema agli autovalori può essere scritto, analogamente a come è stato fatto per la (3.19), in forma matriciale. In particolare, poichè la matrice di evoluzione ottenuta è unitaria, si avrà che gli autovalori z hanno modulo pari a 1 e quindi varrà $z = e^{-i\beta}$ con $\beta \in \mathbb{R}$. Indicando i coefficienti di $\Psi_\uparrow^{n-1,t}$, $\Psi_\downarrow^{n-1,t}$, $\Psi_\uparrow^{n+1,t}$ e $\Psi_\downarrow^{n+1,t}$ nelle (4.1) (con

$\chi = 0$) rispettivamente come a , b , c e d , numerando le posizioni del reticolo da 0 a $N - 1$ e tralasciando gli apici temporali, si può formulare il sistema come:

$$z \begin{bmatrix} \Psi_{\uparrow}^0 \\ \Psi_{\downarrow}^0 \\ \vdots \\ \Psi_{\uparrow}^{N-1} \\ \Psi_{\downarrow}^{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & a & b \\ 0 & 0 & c & d & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a & b & 0 & 0 \\ c & d & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{\uparrow}^0 \\ \Psi_{\downarrow}^0 \\ \vdots \\ \Psi_{\uparrow}^{N-1} \\ \Psi_{\downarrow}^{N-1} \end{bmatrix}. \quad (4.2)$$

È stato risolto il precedente problema agli autovalori con dati θ e φ considerando per ogni n valori di $\phi_{\uparrow/\downarrow}(n)$ estratti da una distribuzione uniforme nell'intervallo $[-W/2, W/2]$. In analogia al capitolo precedente, dunque, la grandezza W è quella che quantifica il livello di disordine. Le distribuzioni di probabilità degli autostati che si sono ricavate vengono riportate nella seguente figura.

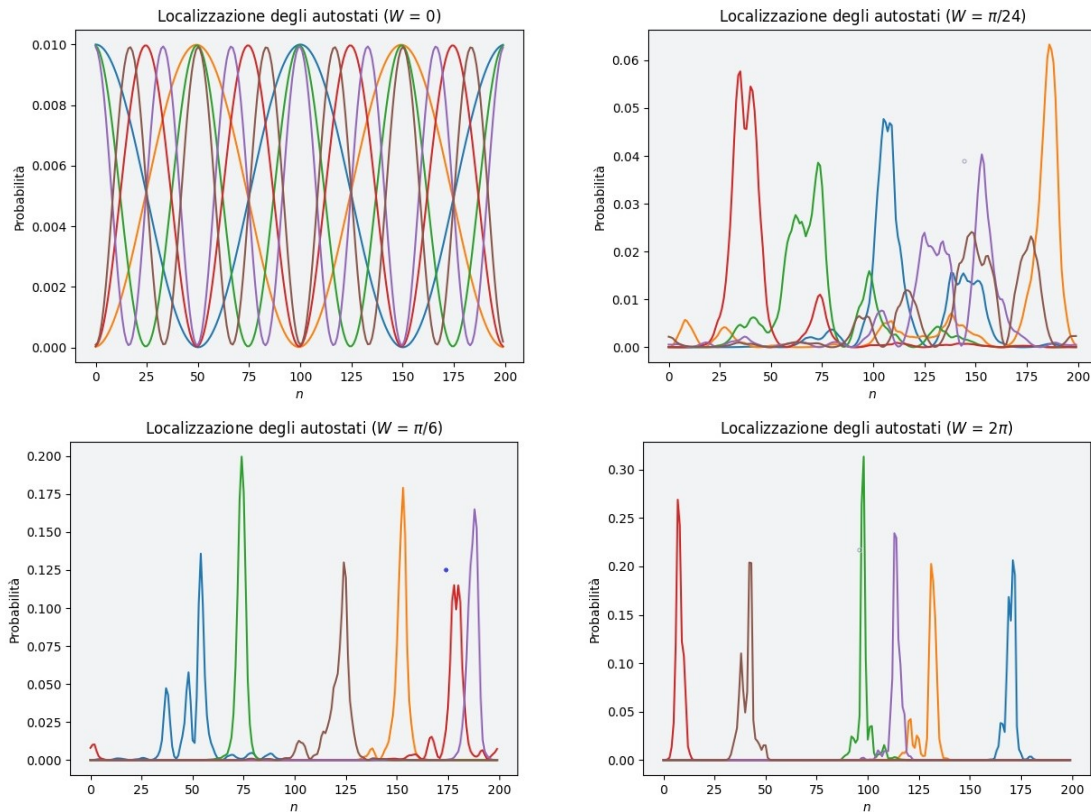


Figura 4.1: Grafici delle probabilità di localizzazione di alcuni autostati per il QRW in un reticolo di dimensione $N = 200$ con diversi gradi di disordine di fase. Si sono considerati $\theta = \pi/4$ e $\varphi = \pi/2$. Il disordine è crescente da sinistra verso destra e dall'alto verso il basso con valori $W = 0$, $W = \pi/24$, $W = \pi/6$ e $W = 2\pi$.

I risultati di figura 4.1 sono molto simili a quelli ottenuti nella sezione 3.4.1 per il modello *tight-binding* sempre con il metodo della diagonalizzazione esatta, come si può vedere in figura 3.1. In particolare, il caso $W = 0$ presenta autostati proprio identici a quelli del corrispondente caso studiato nel capitolo precedente. Tuttavia, è da notare che la matrice nella (4.2), diversamente da quella nella (3.31), non presenta disordine esclusivamente sulla diagonale principale.

Dalle simulazioni numeriche si nota che il sistema, indipendentemente dal livello di disordine, presenta la simmetria $|\Psi_{\downarrow}^n\rangle = |\Psi_{\uparrow}^{n+1}\rangle$ (esclusi i siti al bordo $n = 0, N-1$). Ciò comporta che, in realtà, è sufficiente studiare le proprietà di localizzazione di una sola componente dello *spin*, piuttosto che quelle degli autostati completi.

Oltre alle distribuzioni di probabilità degli autostati, è interessante vedere come cambiano gli autovalori al variare del disordine, per cui se ne riporta lo spettro per differenti valori di W nella prossima figura.

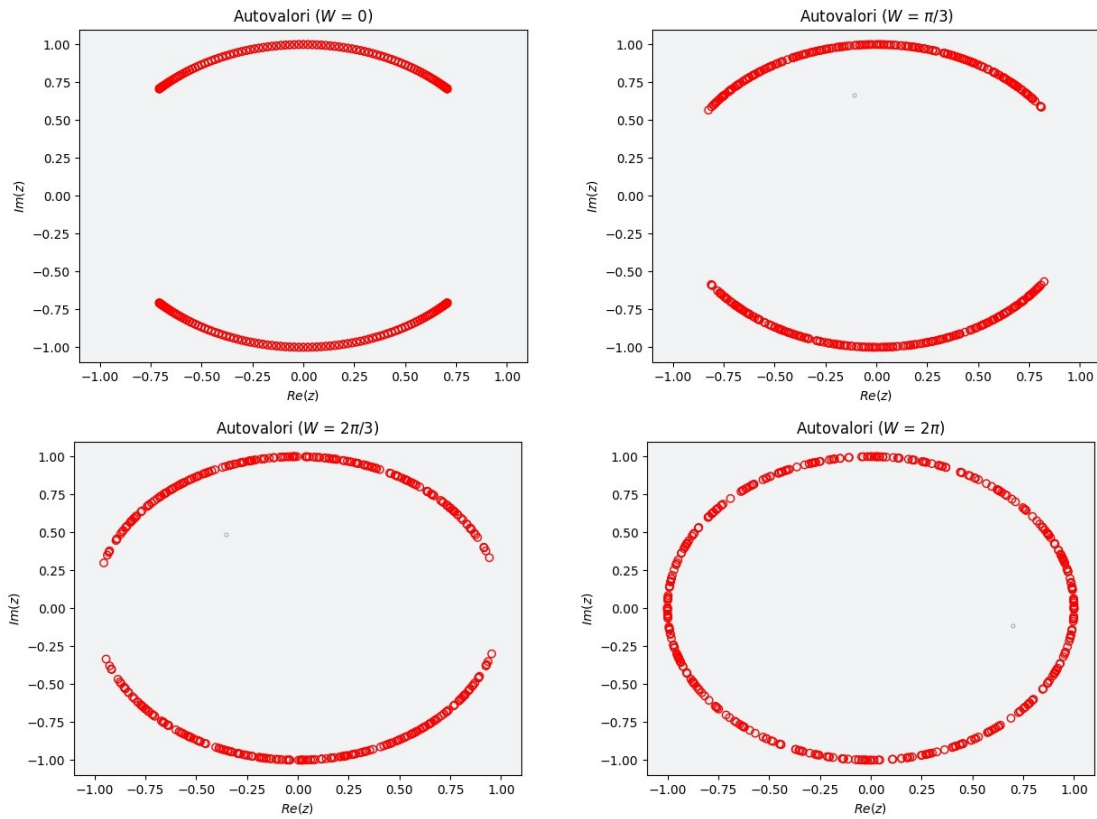


Figura 4.2: Grafici nel piano complesso dello spettro degli autovalori per il QRW in un reticolo di dimensione $N = 200$ con diversi gradi di disordine di fase. Si sono posti sempre $\theta = \pi/4$ e $\varphi = \pi/2$. Il disordine è crescente da sinistra verso destra e dall'alto verso il basso con valori $W = 0$, $W = \pi/3$, $W = 2\pi/3$ e $W = 2\pi$.

Dalla figura 4.2 si vede che, in generale, gli autovalori sono disposti su due bande simmetriche rispetto all'origine del piano e all'aumentare di W queste bande si allargano andando a coprire intervalli sempre più ampi della fase β degli autovalori. In particolare, per $W = 2\pi$, le due bande si uniscono tra loro e gli autovalori giacciono sull'intera circonferenza unitaria. Si può osservare, inoltre, che per $W = 0$ la distribuzione degli autovalori sulle due bande è abbastanza regolare, con punti di accumulazione in corrispondenza degli estremi delle bande stesse, mentre per $W \neq 0$ le distribuzioni sono disordinate e, quindi, casuali. Con il crescere di N , come è intuibile, gli autovalori riempiono in modo denso le due bande per ciascun valore di W .

Il fatto che nel caso $W = 2\pi$ della figura 4.2 le due bande di autovalori si congiungano deriva dal fatto che 2π è il primo valore di W a partire da 0 per il quale $e^{i\phi_{\uparrow/\downarrow}}$ possono giacere, sempre in maniera uniforme, su qualsiasi punto della circonferenza unitaria, dal momento che l'intervallo in cui le relative fasi possono variare diventa $[-\pi, \pi]$. Per queste sue caratteristiche singolari, $W = 2\pi$ viene detto caso di disordine completo.

IPR

La grandezza W non è la sola che determina le proprietà di localizzazione degli autostati, poichè esse dipendono in modo rilevante anche dall'angolo θ che definisce l'accoppiamento tra le componenti di *spin*. Infatti, quando $\theta = 0$, le componenti non sono combinate tra di loro e in questo caso non si verifica localizzazione indipendentemente dall'intensità del disordine, per cui tutti gli autostati sono completamente estesi nel dominio. Al contrario, nella situazione opposta di $\theta = \pi/2$, il *cross-coupling* è massimo e tutti gli autostati sono totalmente localizzati, ovvero hanno la forma di delte di Dirac centrate in un dato sito, anche quando $W \ll 1$. È interessante studiare il comportamento del sistema nei punti intermedi dello spazio dei parametri W e θ , quantificando il grado di localizzazione degli autostati attraverso l'IPR, definito in precedenza nella (3.34).

In primo luogo, fissato φ e con dati W e θ , si sono calcolati i valori dell'IPR per un certo numero di realizzazioni diverse del problema agli autovalori (4.2). In seguito, sono stati selezionati i valori minimi dell'IPR nelle varie realizzazioni e si è ricavato la media di essi per avere un unico valore di IPR per quei dati W e θ che fosse meno dipendente dalle fluttuazioni. Per ogni realizzazione si è considerato il valore minimo, poichè è quello relativo all'autostato meno localizzato di quella certa realizzazione, così che se si ha localizzazione per esso allora si può già sapere che si verificherà, anche in misura maggiore, per tutti gli altri autostati. Il procedimento

per il calcolo dell'IPR descritto è stato ripetuto per valori differenti di W e θ . I risultati complessivamente ottenuti sono illustrati nella seguente figura.

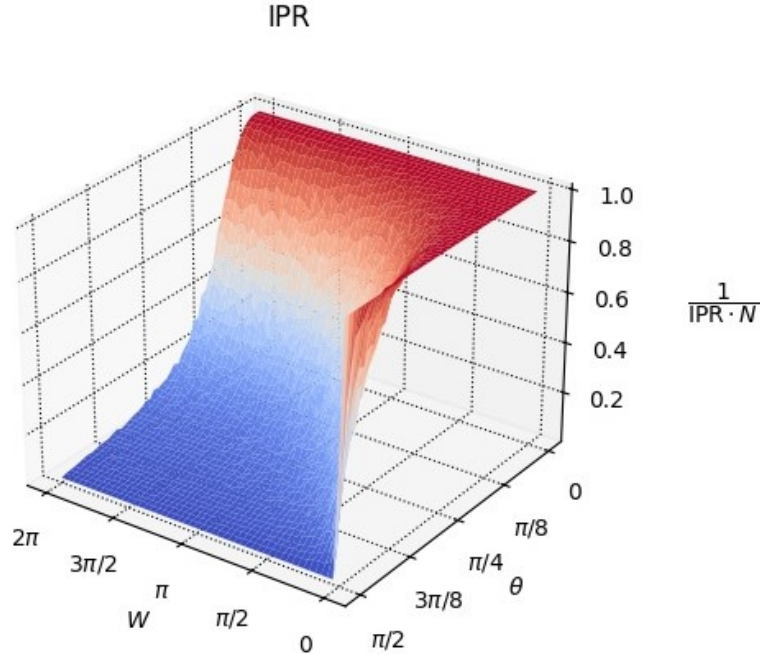


Figura 4.3: Grafico 3D dell'inverso dell'IPR normalizzato con N per diversi valori di W e θ . Il reticolo ha dimensione $N = 100$ e si sono considerate 10 realizzazioni per ognuna delle $50 \cdot 50$ coppie (W, θ) per il calcolo dei valori medi. L'angolo φ è stato fissato a $\pi/2$.

Dalla figura 4.3 si osserva che, all'aumentare del disordine e dell'accoppiamento, $1/(\text{IPR} \cdot N)$ in generale diminuisce e quindi gli autostati si localizzano. In particolare, è possibile notare che, coerentemente con ciò che è stato detto in precedenza, se $\theta = 0$ si ha delocalizzazione indipendentemente dal valore di W , mentre se θ è prossimo a $\pi/2$ si verifica localizzazione anche per $W \ll 1$.

4.2 Rappresentazione tridiagonale e variabile di Riccati

A partire dalle (4.1), si possono ricavare equazioni per le singole componenti non accoppiate, valide in tutte le posizioni ad eccezione dei bordi. In questo modo, si può studiare più semplicemente la dinamica di una sola componente ma, in accordo con quanto detto prima, ottenere ugualmente informazioni sulla localizzazione del-

l'intero sistema. Se, per esempio, si sostituisce Ψ_{\downarrow}^{n-1} ricavato dalla (4.1b) nella (4.1a) e poi si riutilizza quest'ultima per eliminare Ψ_{\downarrow}^n , si ottiene un'equazione solo per la componente Ψ_{\uparrow}^n . Chiaramente, ciò può essere fatto in modo completamente equivalente anche per l'altra componente. Inoltre, dal momento che nello studio della localizzazione è rilevante la distribuzione di probabilità degli autostati, che rimane invariata con la moltiplicazione per un fattore di modulo unitario, si può definire la trasformazione $\tilde{\Psi}_{\uparrow}^n = \Psi_{\uparrow}^n e^{-i\phi_{\uparrow}(n)}$, che permette di riscrivere l'equazione per la sola componente di *spin up* (sempre considerando $\chi = 0$) come:

$$\cos \theta e^{i\phi_{\downarrow}(n-1)} \tilde{\Psi}_{\uparrow}^{n+1} - z^{-1} e^{i\phi_{\downarrow}(n-1) + i\phi_{\uparrow}(n)} \tilde{\Psi}_{\uparrow}^n + \cos \theta e^{i\phi_{\uparrow}(n-1)} \tilde{\Psi}_{\uparrow}^{n-1} = z \tilde{\Psi}_{\uparrow}^n. \quad (4.3)$$

Dalla precedente equazione, si comprende che l'angolo φ non è rilevante nella dinamica e, quindi, può essere posto a zero. Si nota che la (4.3), una volta fissate le opportune condizioni al contorno, è rappresentabile come un'equazione vettoriale dove la matrice coinvolta è analoga a quella presente nella (3.31) del modello *tight-binding*, con la differenza che in questo caso il disordine è presente sia sulla diagonale principale che su quelle subito sotto e subito sopra. A parte gli elementi che sono dovuti alle condizioni al contorno scelte, dunque, la matrice con cui si esprime la (4.3), che viene indicata con H perché ha il ruolo di Hamiltoniana del sistema, è una matrice tridiagonale e, in particolare, non Hermitiana. L'equazione (4.3), inoltre, non rappresenta proprio un normale problema agli autovalori, dal momento che z compare anche nel termine di sinistra. Tuttavia, se z è un autovalore del problema iniziale (4.1), allora lo spettro di H conterrà sia z che $N - 1$ autovalori spuri.

Per analizzare le proprietà di localizzazione è utile impiegare l'esponente di Lyapunov, già introdotto in una sua forma nella sezione 3.4.2 in merito al prodotto di matrici *random*, ed ora definito per questo problema in dipendenza da z come:

$$\lambda(z) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left| \tilde{\Psi}_{\uparrow}^{N+1} \right| = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ln |r_n|, \quad (4.4)$$

dove $r_n = e^{-i\phi_{\uparrow}(n)} \tilde{\Psi}_{\uparrow}^{n+1} / \tilde{\Psi}_{\uparrow}^n$ è la cosiddetta variabile di Riccati. I valori di $\tilde{\Psi}^n$ sono ottenuti iterando la (4.3) a partire da un dato stato iniziale, analogamente a come è stato fatto con le matrici di trasferimento nella sezione 3.4.2. Se z , dunque, è un autovalore della matrice H , allora il reciproco di $\lambda(z)$ fornisce una stima della lunghezza di localizzazione ξ degli autostati associati, come evidenziato in [17] e come discusso similmente nella sezione 3.4.2.

Manipolando algebricamente la (4.3), si può ottenere per r_n la ricorrenza a valori complessi:

$$r_{n+1} = \frac{1}{\cos \theta} \left[z^{-1} + z e^{-i\chi_n} - \frac{\cos \theta e^{-i\chi_n}}{r_n} \right], \quad \chi_n \equiv \phi_{\uparrow}(n+1) + \phi_{\downarrow}(n). \quad (4.5)$$

Da questa mappa per r_n si vede che le proprietà statistiche dell'esponente di Lyapunov, e quindi della lunghezza di localizzazione, dipendono solo dalla fase efficace χ_n . Nella situazione particolare di disordine completo, la statistica di $\chi_n \pmod{2\pi}$ è la stessa di $\phi_{\uparrow}(n)$ e $\phi_{\downarrow}(n)$ da sole, per cui è sufficiente che una sola componente sia soggetta a disordine di fase e si può porre $\phi_{\uparrow}(n)$ o $\phi_{\downarrow}(n)$ a zero per ogni n .

Nelle due sezioni seguenti si affrontano in dettaglio i casi di disordine completo e di disordine debole, per i quali si possono derivare espressioni esplicite di λ e ξ .

4.3 Disordine completo

Si può notare che se $\tilde{\Psi}_{\uparrow}^n$ è una soluzione della (4.3) con $z = e^{-i\beta}$, allora $z\tilde{\Psi}_{\uparrow}^n$ è una soluzione della medesima equazione con $z = 1$ e disordine di fase traslato come $\phi_{\uparrow/\downarrow} \rightarrow \phi_{\uparrow/\downarrow} + \beta$. Tuttavia, nel caso di disordine completo, la statistica delle soluzioni è invariante per traslazioni di disordine di fase e ciò significa che per tutti gli stati sulla circonferenza unitaria si ha il medesimo valore dell'esponente di Lyapunov, per esempio $\lambda(1)$, che quindi risulta indipendente da z . Questo fatto può essere verificato anche numericamente stimando $\lambda(z)$ attraverso la (4.4), con un elevato N e r_n ricavato dalla (4.5) per valori differenti di z . Il calcolo può essere ripetuto anche variando θ e si può provare che per ogni valore di quest'ultimo, considerando per esempio $N = 10^7$ e 100 valori di z , la differenza percentuale tra il valore massimo e minimo di λ sui 100 punti spettrali risulta sempre inferiore a 1%, discrepanza che può essere attribuita a statistica insufficiente e ad errori numerici.

L'esponente di Lyapunov è una cosiddetta grandezza auto-mediante (in inglese *self-averaging*) e, grazie a questa proprietà, è possibile calcolare il suo valore come $\lambda(z) = \langle \ln |r_N(z)| \rangle$, dove la media è effettuata sulla distribuzione di probabilità della variabile di Riccati che viene assunta essere non dipendente da N nel limite termodinamico. In base a queste considerazioni, quindi, si può trovare in modo analitico un limite inferiore per l'esponente di Lyapunov direttamente dalla (4.5), stimandolo attraverso la media condizionata $E(\ln |r_{n+1}| | r_n)$ sulla fase χ_n assumendo un valore fisso di r_n dalla precedente iterazione, dal momento che χ_n è statisticamente indipendente da r_n . Svolgendo questo calcolo, dunque, si giunge alla seguente espressione [6]:

$$E(\ln |r_{n+1}| | r_n) = \Theta\left(\left|1 - \frac{\cos \theta}{r_n}\right| - 1\right) \cdot \ln\left|1 - \frac{\cos \theta}{r_n}\right| - \ln \cos \theta, \quad (4.6)$$

dove $\Theta(x)$ è la funzione a gradino di Heaviside che vale 1 se $x \geq 0$ e 0 se $x < 0$. Grazie proprio a Θ , il primo termine nel membro di destra della (4.6) è sempre

non negativo, per cui vale la disuguaglianza $\lambda(z) \geq |\ln \cos \theta|$. Fintanto che $\theta > 0$, questo limite inferiore per λ rimane non nullo e quindi ξ non diverge a ∞ , per cui nel limite termodinamico tutti gli autostati sono localizzati se si è nel regime di disordine completo con $\theta > 0$, come si vedrebbe anche nelle simulazioni numeriche di figura 4.3 per $N \rightarrow \infty$.

Si dimostra ora che questo limite inferiore è in realtà il valore esatto dell'esponente di Lyapunov nel caso $W = 2\pi$. Per fare ciò, è necessario studiare la distribuzione stazionaria della variabile di Riccati, che può essere ottenuta numericamente iterando un certo numero di volte la (4.5) con $z = 1$ (per quello detto in precedenza) a partire da un'arbitraria condizione iniziale r_0 , fino a collezionare un numero sufficiente di occorrenze di r_n tali da raggiungere una distribuzione limite stabile. In particolare, si sono considerate 10^7 iterazioni e, per essere certi di eliminare la memoria sulle condizioni iniziali, sono state scartate le prime 10^6 . L'insieme dei valori di r_n così ottenuto è stato rappresentato in un istogramma tridimensionale nel piano complesso. Questo procedimento è stato ripetuto per diversi θ e nella seguente figura si riportano i risultati solo per due di essi, poiché per gli altri le distribuzioni ottenute erano analoghe.

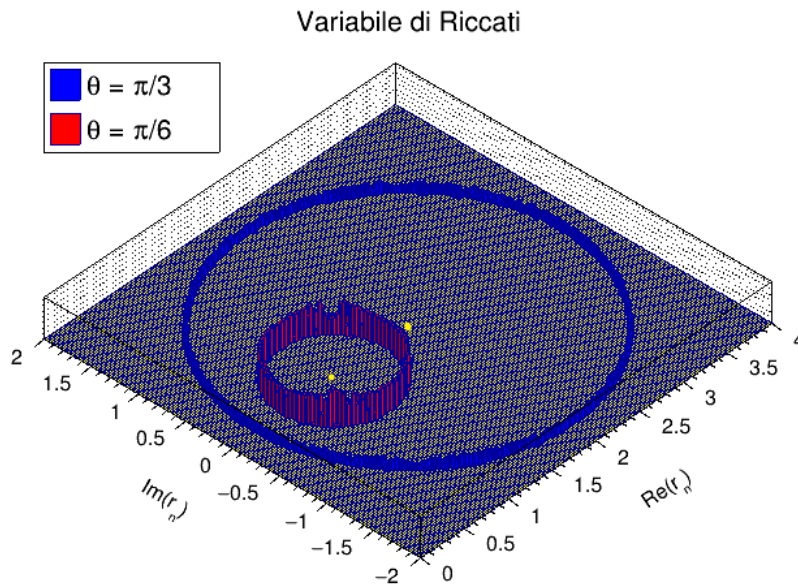


Figura 4.4: Istogrammi 3D della variabile di Riccati nel piano complesso con i valori $\theta = \pi/3, \pi/6$. Ciascun istogramma contiene $9 \cdot 10^6$ occorrenze e il numero totale di *bin* bidimensionali è $4 \cdot 10^4$, equamente suddivisi sui due assi di $\text{Re}(r_n)$ e $\text{Im}(r_n)$. La condizione iniziale è stata fissata a $r_0 = 1$.

Come si può osservare nella figura 4.4, la varietà limite della mappa (4.5) ha la

forma di una circonferenza con raggio e centro dipendenti da θ , sulla quale i valori di r_n sono uniformemente distribuiti con buona approssimazione. La posizione del centro della varietà può essere immediatamente ricavata calcolando la media della (4.5) rispetto alla fase casuale χ_n e, facendo ciò, si ottiene $R_0 = 1/\cos\theta$. I punti sul piano corrispondenti ai valori di R_0 per i due θ sono marcati in giallo nella figura 4.4 e si vede che ciascuno di essi si colloca con ottima precisione al centro della rispettiva distribuzione numerica. Per trovare l'espressione del raggio, invece, è utile riscrivere la (4.5) con $z = 1$ per la variabile traslata $R_n = r_n - R_0$, ottenendo così la ricorrenza:

$$R_{n+1} = e^{-i\chi_n} \left(\frac{R_n + (\cos\theta)^{-1} - \cos\theta}{\cos\theta R_n + 1} \right). \quad (4.7)$$

Il termine tra parentesi costituisce una trasformazione lineare fratta di Möbius del piano complesso, che ha come punti fissi gli R_n tale che $|R_n| = \tan\theta$. Il fattore $e^{-i\chi_n}$ davanti alla trasformazione non altera la simmetria, bensì ha il solo effetto di rendere uniforme la distribuzione della fase di R_n nell'intervallo $[0, 2\pi]$. Dunque, si può concludere che il raggio della varietà limite è proprio dato da $R = \tan\theta$. È possibile constatare che, analogamente a R_0 , anche l'espressione ottenuta per R è coerente con i valori dei raggi che si possono osservare per le distribuzioni numeriche in figura 4.4.

A questo punto, se si considera il limite di n elevato nel quale la variabile di Riccati si trova sulla varietà circolare, per cui si può scrivere $r_n = Re^{i\gamma_n} + R_0$ dove γ_n è una fase tale che $0 \leq \gamma_n \leq 2\pi$, allora si riesce a dimostrare che $|1 - (\cos\theta)/r_n|$ nella (4.6) è uguale a $\sin\theta$ e, quindi, che il primo termine nel membro di destra della stessa equazione è nullo, dal momento che l'argomento di Θ è negativo. Ciò comporta, dunque, che l'esponente di Lyapunov coincide in realtà con il limite inferiore prima ricavato per esso, per cui si ottiene che la lunghezza di localizzazione nel caso di disordine completo vale:

$$\xi = \frac{1}{|\ln \cos\theta|}. \quad (4.8)$$

Era possibile arrivare alla stessa conclusione anche mediando $\ln|r_n|$ sulla circonferenza limite, considerando su di essa una distribuzione di r_n uniforme. Applicando la (4.8) al caso specifico di *coin* bilanciato, per il quale $\theta = \pi/4$ (si ricordi che θ è stato ridefinito come metà di quello considerato nel capitolo 2), si ottiene $\xi = 2/\ln 2 \approx 2.88$, che è consistente con i risultati in figura 4.1.

Si è verificato che il risultato analitico (4.8) è in perfetto accordo con ciò che si ottiene calcolando numericamente λ attraverso la (4.4) per diversi valori di θ , come illustrato nella prossima figura.

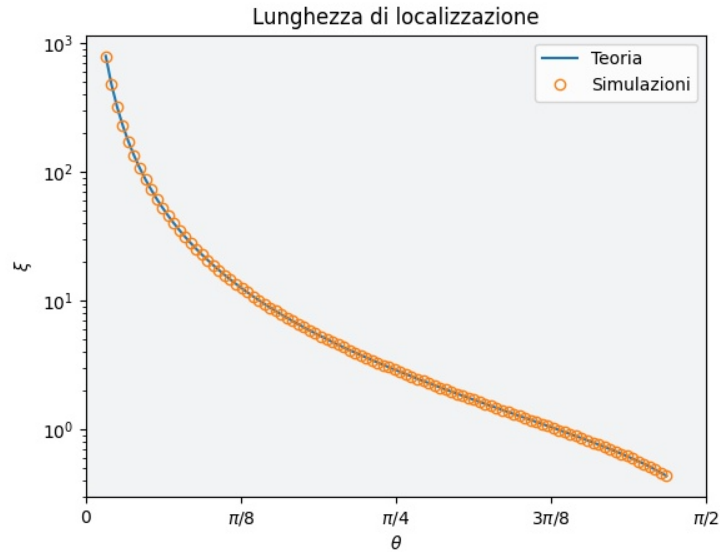


Figura 4.5: Grafico in scala semilogaritmica del confronto tra formula analitica e risultati numerici per la lunghezza di localizzazione ξ in funzione di θ . Per ognuno dei 100 valori diversi di θ , si sono effettuate 10^7 iterazioni della ricorrenza di r_n (sempre con $r_0 = 1$) e il valore di λ per ricavare ξ è stato calcolato scartando le prime 10^6 , così da assicurarsi di essere a convergenza sulla distribuzione limite.

Dalla figura 4.5 si vede che l'accordo tra teoria e simulazioni per $\xi(\theta)$ è molto elevato, come testimonia anche il chi-quadrato $\chi^2 = 0.0463$ ($N_{d.o.f.} = 99$).

Come già detto, nel caso di disordine completo λ e ξ non dipendono dall'autovalore z e ciò consente di dare ai risultati ricavati per $z = 1$ una validità generale. Infatti, se si ripete per un $z = e^{-i\beta}$ generico il procedimento che è stato svolto, la varietà limite di r_n che si genera è la stessa circonferenza di $z = 1$ ma ruotata di β attorno all'origine. Questa modifica, tuttavia, non ha effetti sul valore di λ , dato che la rotazione non provoca conseguenze osservabili su $\langle \ln |r_n| \rangle$. Se, invece, si ha disordine non completo $W < 2\pi$, si ottengono risultati decisamente differenti da quelli per $W = 2\pi$. In quel caso, infatti, l'isotropia viene persa, per cui la distribuzione di r_n sulla circonferenza diventa non uniforme e una rotazione rispetto all'origine non lascia invariata la statistica, implicando una forte dipendenza di λ da z .

4.4 Disordine debole

Si analizza ora la situazione di disordine debole $W \ll 1$, per la quale si può svolgere un calcolo perturbativo applicato alla matrice tridiagonale non Hermitiana

H che compare nel membro di sinistra della (4.3), con lo scopo di trovare la dipendenza spettrale di λ . L'Hamiltoniana imperturbata H_0 sarà costituita dalla matrice che compare nell'equazione di evoluzione del QRW senza disordine, ottenibile da H ponendo $\phi_{\uparrow/\downarrow} = 0$, per cui la perturbazione sarà data dalla matrice $H_{pert} = H - H_0$. In generale, sia H_0 che H_{pert} sono anch'esse matrici tridiagonali. Si può notare che un generico elemento non nullo di H_{pert} sarà proporzionale al fattore $\epsilon_n = e^{i\phi_{\uparrow/\downarrow}} - 1$, che costituisce il termine perturbativo nel quale verrà fatta l'espansione della (4.5). L'altro parametro rilevante nel calcolo è la varianza delle fasi casuali $\phi_{\uparrow/\downarrow}$ che, se si assume una distribuzione uniforme delle fasi, è data da $\langle \phi_{\uparrow/\downarrow}^2 \rangle = W^2/12$ (indicata in seguito semplicemente come $\langle \phi^2 \rangle$ per brevità). Svolgendo quindi l'espansione perturbativa, si può ottenere come risultato finale la relazione [6]:

$$\lambda(\beta) = \frac{\langle \phi^2 \rangle}{4} \frac{\sin^2 \theta}{\cos^2 \theta - \cos^2 \beta}, \quad (4.9)$$

che fornisce la dipendenza dell'esponente di Lyapunov dalla fase dell'autovalore.

Esiste un eccellente accordo tra la (4.9) e i risultati derivati dal calcolo numerico di λ mediante la (4.4) al variare di β e per diversi θ , come mostra la seguente figura.

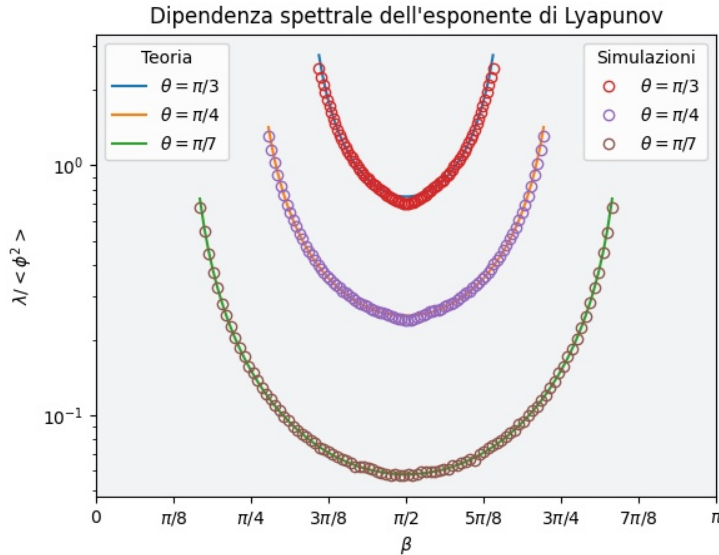


Figura 4.6: Grafico in scala semilogaritmica del confronto tra espressione analitica ed analisi numerica per l'esponente di Lyapunov λ , normalizzato con la varianza delle fasi casuali, in funzione di β per $\theta = \pi/3, \pi/4, \pi/7$. Il livello di disordine è $W = 0.6$ e i β sono in numero 86 per $\theta = \pi/3$, 90 per $\theta = \pi/4$ e 94 per $\theta = \pi/7$. Nel calcolo numerico di λ , come prima, si sono considerati i 9/10 di 10^7 iterazioni.

In figura 4.6 per ogni θ i valori di β variano nell'intervallo $[\theta + \epsilon, \pi - \theta - \epsilon]$ con $\epsilon > 0$ piccolo, dal momento che $\lambda(\beta)$ diverge per $\beta = \theta, \pi - \theta$, come si vede dalla sua espressione perturbativa. Osservando la figura si verifica che per tutti e tre i valori di θ adottati esiste un ottimo accordo tra teoria e simulazioni nel calcolo di $\lambda(\beta)$, come dimostrano anche i valori dei chi-quadrati $\chi^2(\theta = \pi/3) = 0.184$ ($N_{d.o.f.} = 85$), $\chi^2(\theta = \pi/4) = 0.0284$ ($N_{d.o.f.} = 89$) e $\chi^2(\theta = \pi/7) = 0.0103$ ($N_{d.o.f.} = 93$). Inoltre, si può notare che in generale λ ha valori più elevati per θ maggiore, coerentemente con quello che ci si aspetterebbe, e che raggiunge un minimo per $\beta = \pi/2$ per ogni θ . Dalla figura 4.6 si può vedere in modo chiaro il rapporto esistente tra l'angolo di accoppiamento e la localizzazione. Infatti, dal momento che il valore minimo di λ in corrispondenza di $\beta = \pi/2$ è $(\langle \phi^2 \rangle \tan^2 \theta)/4$, come si può ricavare dalla (4.9), allora si può dire che, quando θ tende a $\pi/2$, si verifica localizzazione per tutti gli stati in un sistema di dimensione N se è soddisfatta la relazione $\langle \phi^2 \rangle \tan^2 \theta \gg 1/N$, poiché $1/N$ è il valore che possiede λ quando ξ coincide con la dimensione del reticolo e si ha delocalizzazione.

Tutte le simulazioni numeriche realizzate con cui si sono generati i grafici delle figure da 4.1 a 4.3, 4.5 e 4.6 sono state implementate integralmente con codice Python, appositamente sviluppato e reperibile nel *repository* GitHub [16]. Per la figura 4.4, invece, i dati sono stati prodotti sempre attraverso Python, mentre il grafico è stato creato con il *software* ROOT.

Conclusion

Il QRW è un modello quantomeccanico che mette in risalto la profonda diversità esistente tra le leggi proprie del mondo quantistico e quelle della realtà classica. La sua importanza è rilevante sia nel campo della fisica che in quello della *computer science* e mostra le applicazioni più promettenti negli ambiti della computazione quantistica e della teoria dell'informazione quantistica. Nel presente elaborato viene esposto il modello teorico del QRW, concentrandosi sugli aspetti di maggiore rilevanza e ponendo l'accento sulle caratteristiche di somiglianza e di differenza rispetto al suo analogo classico, introdotto in precedenza. In particolare, risulta significativa l'analisi della distribuzione di probabilità del QRW di Hadamard condotta a partire dallo studio della dinamica nel dominio di Fourier, da cui si possono ricavare teoremi che descrivono certe proprietà caratteristiche della distribuzione.

La localizzazione di Anderson è un fenomeno che si verifica per sistemi fisici, quantistici e non, in mezzi disordinati, le cui implicazioni in fisica della materia sono molteplici e di notevole interesse. Essa viene trattata in questo elaborato relativamente ad una particella in un reticolo, sia dal punto di vista analitico che numerico, mettendo in evidenza il ruolo del disordine e dei parametri rilevanti nella determinazione della localizzazione. A questo proposito, sono significativi i risultati, ottenuti tramite simulazioni, che riguardano gli autostati e la lunghezza di localizzazione al variare del livello di disordine e quelli relativi all'IPR in funzione della dimensione del reticolo. Anche lo studio della diffusione nel tempo di pacchetti d'onda di autostati è molto esplicativo dell'effetto del disordine sul comportamento del sistema.

I due nuclei tematici principali vengono coniugati nell'ultima parte della trattazione, dedicata appunto alla localizzazione di Anderson per un QRW 1D disordinato. Anche in questo capitolo si adotta un approccio sia teorico che numerico. Nell'ambito di quest'ultimo, risulta rilevante l'analisi della localizzazione ricavando gli autostati e lo spettro di autovalori al variare del disordine e calcolando l'IPR in funzione del disordine e dell'angolo di accoppiamento. Per quanto concerne lo studio teorico, invece, si procede ad una formulazione dell'equazione di evoluzione in una rappresentazione tridiagonale e si ricava la ricorrenza della variabile di Riccati che

compare nella definizione dell'esponente di Lyapunov del sistema, con il quale si può caratterizzare la localizzazione. In seguito, vengono approfonditi nel dettaglio i casi rilevanti di disordine completo e di disordine debole, per i quali si derivano formule esplicite relative all'esponente di Lyapunov e, quindi, alla lunghezza di localizzazione. Queste espressioni analitiche vengono infine confrontate con esito positivo con i risultati ottenuti a partire dai calcoli numerici dell'esponente di Lyapunov.

Possibili sviluppi futuri di questo elaborato potrebbero essere studiare il processo di QRW su altri domini rispetto a quello lineare unidimensionale, come per esempio su grafi generici, e con tempo continuo invece che discreto [11]. Inoltre, un'estensione immediata alla seconda sezione sarebbe quella di trattare la localizzazione di Anderson in sistemi 2D e 3D, dove si possono impiegare considerazioni di teoria di scala basate sul gruppo di rinormalizzazione e si può utilizzare il metodo dell'espansione del localizzatore (in inglese *locator expansion*) per il risolvente usando le funzioni di Green [10]. Successivamente, in relazione all'ultima parte, sarebbe interessante analizzare se nei modelli di QRW più complessi su grafi e/o a tempo continuo, qualora venga aggiunta una forma di disordine, possono verificarsi localizzazione o fenomeni di natura analoga [1]. Infine, in generale, si potrebbe esaminare l'effetto del disordine e della conseguente localizzazione nell'implementazione di algoritmi quantistici basati sul modello del QRW [11, 15].

Appendice

4.5 Forma asintotica delle funzioni d'onda con il metodo della fase stazionaria

Il metodo della fase stazionaria [2, 4] è una tecnica base dell'analisi asintotica per il calcolo di integrali oscillatori, che si basa sull'idea di cancellare termini oscillanti che possiedono una fase che varia con rapidità. Nel caso delle (2.38), la forma dell'integrale a cui si è interessati valida sia per Ψ_{\uparrow} che per Ψ_{\downarrow} è:

$$I(\alpha, t) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} g(k) e^{i\phi(k, \alpha)t}, \quad (4.10)$$

dove $g(k)$ è una funzione analitica e periodica di periodo 2π che può essere sia pari che dispari, $\phi(k, \alpha) = -\omega_k + \alpha k$ con $\alpha \in [-1, 1]$. Il metodo della fase stazionaria afferma che per grandi t i contributi più rilevanti nella (4.10) sono quelli degli intervalli in cui la funzione integranda è meno oscillante, ovvero degli intorno dei punti stazionari della funzione $\phi(k, \alpha)$. Dunque, nel caso in cui $\phi(k, \alpha)$ abbia un unico punto stazionario $k_0 \in [-\pi, \pi]$, nel limite $t \rightarrow \infty$ si può approssimare in serie di Taylor $\phi(k, \alpha)$ attorno a k_0 fino al primo termine non costante diverso da zero e considerare $g(k = k_0)$. È concesso fare ciò poiché i contributi portati all'integrale da parti della funzione lontane da $k = k_0$, e quindi oscillanti con rapidità, sono trascurabili nel limite considerato. Sempre per questo motivo, dunque, è anche possibile estendere gli estremi di integrazione in un intervallo più ampio che contiene k_0 .

È utile studiare l'applicazione di questo metodo sui casi particolari in cui uno dei due estremi di integrazione coincide con l'unico punto stazionario k_0 , ovvero:

$$I_+(\alpha, t) = \int_{k_0}^{k_+} \frac{dk}{2\pi} g(k) e^{i\phi(k, \alpha)t}, \quad (4.11a)$$

$$I_-(\alpha, t) = \int_{k_-}^{k_0} \frac{dk}{2\pi} g(k) e^{i\phi(k, \alpha)t}, \quad (4.11b)$$

dove $k_- < k_0 < k_+$ e $[k_-, k_0], [k_0, k_+] \subseteq [-\pi, \pi]$. Per i precedenti due integrali, il metodo della fase stazionaria fornisce nel limite $t \rightarrow \infty$ le approssimazioni:

$$I_+(\alpha, t) \approx \frac{g(k_0)}{2\pi} \exp\left(i\phi(k_0, \alpha)t + \operatorname{sgn}(\phi^{(p)}(k_0, \alpha))\frac{i\pi}{2p}\right). \quad (4.12a)$$

$$\cdot \left(\frac{p!}{t|\phi^{(p)}(k_0, \alpha)|}\right)^{1/p} \frac{\Gamma(1/p)}{p},$$

$$I_-(\alpha, t) \approx \frac{g(k_0)}{2\pi} \exp\left(i\phi(k_0, \alpha)t + \xi(p)\operatorname{sgn}(\phi^{(p)}(k_0, \alpha))\frac{i\pi}{2p}\right). \quad (4.12b)$$

$$\cdot \left(\frac{p!}{t|\phi^{(p)}(k_0, \alpha)|}\right)^{1/p} \frac{\Gamma(1/p)}{p},$$

con $p \in \mathbb{N}$ tale che:

$$\phi^{(p)}(k_0, \alpha) \neq 0 \text{ e } \phi^{(p-1)}(k_0, \alpha) = \dots = \phi'(k_0, \alpha) = 0 \quad (4.13)$$

e dove $\Gamma(z)$ è la funzione gamma di Eulero e $\xi(z)$ una funzione a due valori definite come:

$$\Gamma(z) = \int_0^{+\infty} t^{z-1} e^{-t} dt, \quad (4.14a)$$

$$\xi(z) = \begin{cases} +1 & \text{se } z \text{ è pari} \\ -1 & \text{se } z \text{ è dispari} \end{cases}. \quad (4.14b)$$

A questo punto, è possibile studiare il comportamento asintotico nel limite di grandi t della (4.10) con diversi valori di α .

Nel caso in cui $|\alpha| \in [1/\sqrt{2} + \epsilon, 1]$, $\phi(k, \alpha)$ non ha punti stazionari e quindi non è possibile utilizzare il metodo appena descritto, tuttavia integrando ripetutamente per parti la (4.10) si ottiene che $I(\alpha, t)$ decresce più velocemente di qualsiasi polinomio inverso in t quando $t \rightarrow \infty$. Quest'ultimo risultato è dimostrabile anche tramite il cosiddetto lemma di Riemann-Lebesgue. Applicando questo ragionamento generale ai due casi particolari della (2.38) e ricordando che $t = n/\alpha$, si dimostra quindi una versione meno forte del teorema 1 con $\mathcal{O}(1/|n|^d)$ per d arbitrario invece che $\mathcal{O}(e^{-|n|})$.

Nei casi in cui $\alpha = 1/\sqrt{2}, -1/\sqrt{2}$, si hanno dei punti stazionari di $\phi(k, \alpha)$ nell'intervallo $[-\pi, \pi]$: $k_0 = 0$ con $\alpha = 1/\sqrt{2}$ e $k_0 = -\pi, \pi$ con $\alpha = -1/\sqrt{2}$. Per $I(1/\sqrt{2}, t)$ e $I(-1/\sqrt{2}, t)$ è necessario suddividere il dominio di integrazione in due sottointervalli, per esempio $[-\pi, 0]$ e $[0, \pi]$, in modo da ricondursi ai casi delle (4.11) e poi bisogna applicare le (4.12) ai singoli integrali. Dal momento che tutti e tre i punti stazionari considerati sono di ordine 2, bisogna utilizzare sempre $p = 3$ e, sapendo che $\phi(0, 1/\sqrt{2}) = 0$, $\phi(\pm\pi, -1/\sqrt{2}) = \mp\pi/\sqrt{2}$,

$\phi'''(0, 1/\sqrt{2}) = 2^{-3/2}$ e $\phi'''(\pm\pi, -1/\sqrt{2}) = -2^{-3/2}$, si può verificare che si ottengono le espressioni approssimate:

$$I\left(\frac{1}{\sqrt{2}}, t\right) \approx \frac{g(0)}{3\pi} \sqrt{\frac{3}{2}} \Gamma(1/3) \left[\frac{6}{t}\right]^{1/3}, \quad (4.15a)$$

$$I\left(\frac{-1}{\sqrt{2}}, t\right) \approx \frac{g(\pi)}{3\pi} \Gamma(1/3) \sqrt{2} \left[\frac{6}{t}\right]^{1/3} \cos\left(\frac{\pi}{\sqrt{2}}t - \frac{\pi}{6}\right). \quad (4.15b)$$

Infine, quando $\alpha \in [-1/\sqrt{2} + \epsilon, 1/\sqrt{2} - \epsilon]$, $\phi(k, \alpha)$ ha due punti stazionari k_α e $-k_\alpha$ di ordine 1, dove $k_\alpha \in [0, \pi]$ e:

$$\cos k_\alpha = \frac{\alpha}{\sqrt{1 - \alpha^2}}. \quad (4.16)$$

Prima di usare l'approssimazione per questo caso, è utile semplificare la (4.10) a seconda se la funzione $g(k)$ è pari o dispari. Infatti se $g(k)$ è pari si può scrivere:

$$\begin{aligned} I(\alpha, t) &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi dk g(k) \cos(\phi(k, \alpha)t) \\ &= \frac{1}{2\pi} \left(\int_0^\pi dk g(k) e^{i\phi(k, \alpha)t} + \int_0^\pi dk g(k) e^{-i\phi(k, \alpha)t} \right), \end{aligned} \quad (4.17)$$

mentre se $g(k)$ è dispari si ha:

$$\begin{aligned} I(\alpha, t) &= \frac{i}{\pi} \int_0^\pi dk g(k) \sin(\phi(k, \alpha)t) \\ &= \frac{1}{2\pi} \left(\int_0^\pi dk g(k) e^{i\phi(k, \alpha)t} - \int_0^\pi dk g(k) e^{-i\phi(k, \alpha)t} \right). \end{aligned} \quad (4.18)$$

A questo punto, è possibile applicare il metodo della fase stazionaria ciascuno degli integrali nella (4.17) e nella (4.18), per ciascuno dei quali sarà necessario dividere l'intervallo di integrazione $[0, \pi]$ in $[0, k_\alpha]$ e $[k_\alpha, \pi]$. Dunque, se si considera che $\phi''(k_\alpha, \alpha) = -\omega''_{k_\alpha} > 0$ e si utilizzano le (4.12) con $p = 2$, allora le espressioni approssimate per le (4.17) e (4.18) sono date da:

$$I(\alpha, t) \approx g(k_\alpha) \sqrt{\frac{2}{\pi t |\omega''_{k_\alpha}|}} \cdot \begin{cases} \cos(\phi(k_\alpha, \alpha)t + \pi/4) & \text{se } g(k) \text{ è pari} \\ i \sin(\phi(k_\alpha, \alpha)t + \pi/4) & \text{se } g(k) \text{ è dispari.} \end{cases} \quad (4.19)$$

Le (4.19) sono le approssimazioni che consentono di ottenere le forme asintotiche nel limite di $t \rightarrow \infty$ delle espressioni di $\Psi_\uparrow(n, t)$ e $\Psi_\downarrow(n, t)$ con le quali si ricava il risultato del teorema 2. In particolare, sapendo che $|\omega''_{k_\alpha}| = (1 - \alpha^2)\sqrt{1 - 2\alpha^2}$, considerando per ciascuna ampiezza di probabilità la corrispondente forma della

$g(k)$ in base alle (2.38) e dividendo la $g(k)$ della $\Psi_{\downarrow}(n, t)$ in una parte pari e in una dispari, si ottiene:

$$\Psi_{\uparrow}(n, t) \approx \sqrt{\frac{2(1+\alpha)}{\pi t(1-\alpha)\sqrt{1-2\alpha^2}}} \cos\left(-\omega_{k_{\alpha}} t + \alpha t k_{\alpha} + \frac{\pi}{4}\right), \quad (4.20a)$$

$$\Psi_{\downarrow}(n, t) \approx -i \sqrt{\frac{2}{\pi t\sqrt{1-2\alpha^2}}} \cos\left(-\omega_{k_{\alpha}} t + (\alpha t + 1)k_{\alpha} + \frac{\pi}{4}\right). \quad (4.20b)$$

Facendo il modulo quadro delle (4.20) e ponendo $\theta \equiv \omega_{k_{\alpha}}$ e $\rho \equiv -k_{\alpha}$, si possono ricavare le espressioni approssimate per $p_{\uparrow}(n, t)$ e $p_{\downarrow}(n, t)$ date dalle (2.27) e quindi dimostrare l'enunciato del teorema 2.

Bibliografia

- [1] A. Ahlbrecht, V. B. Scholz, and A. H. Werner. Disordered quantum walks in one lattice dimension. *Journal of Mathematical Physics*, 52(10):102201, 2011.
- [2] A. Ambainis, E. Bach, A. Nayak, A. Vishwanath, and J. Watrous. One-Dimensional Quantum Walks. In *Proceedings of the thirty-third annual ACM symposium on Theory of computing*, pages 37–49, 2001.
- [3] P. W. Anderson. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. *Physical review*, 109(5):1492, 1958.
- [4] C.M. Bender and S.A. Orszag. *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers I: Asymptotic Methods and Perturbation Theory*. Springer, 1999.
- [5] A. Crisanti, G. Paladin, and A. Vulpiani. *Products of Random Matrices in Statistical Physics*, volume 104 of *Springer Series in Solid-State Science*. Springer, 2012.
- [6] S. Derevyanko. Anderson localization of a one-dimensional quantum walker. *Scientific Reports*, 8(1):1–11, 2018.
- [7] F. Domínguez-Adame and V.A. Malyshev. A simple approach to Anderson localization in one-dimensional disordered lattices. *American Journal of Physics*, 72(2):226–230, 2004.
- [8] R. Eisberg and R. Resnick. *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles*. John Wiley & Sons, 1974.
- [9] J. Ghosh. Simulating Anderson localization via a quantum walk on a one-dimensional lattice of superconducting qubits. *Physical Review A*, 89(2):022309, 2014.
- [10] C. Guan and X. Guan. A brief introduction to Anderson Localization (<https://web.mit.edu/8.334/www/grades/projects/projects19/GuanChenguang.pdf>).

-
- [11] J. Kempe. Quantum random walks - an introductory overview. *Contemporary Physics*, 44(4):307–327, 2003.
- [12] M. P. Kennett. *Essential Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2020.
- [13] B. Kramer and A. MacKinnon. Localization: theory and experiment. *Reports on Progress in Physics*, 56(12):1469–1564, 1993.
- [14] J. Preskill. Lecture Notes for Physics 229: Quantum Information and Computation (<http://theory.caltech.edu/~preskill/ph229/>) .
- [15] N. Shenvi, J. Kempe, and K. B. Whaley. A Quantum Random Walk Search Algorithm. *Physical Review A*, 67(5):052307, 2003.
- [16] A. Sinibaldi. QRW_and_Anderson_localization, *repository* GitHub con url: https://github.com/AlessandroSinibaldi/QRW_and_Anderson_localization, 2021.
- [17] D. J. Thouless. Percolation and localization. In *Ill-Condensed Matter: Les Houches Session XXXI*, pages 1–62. North Holland, 1979.
- [18] I. Vakulchyk, M. V. Fistul, P. Qin, and S. Flach. Anderson localization in generalized discrete-time quantum walks. *Physical Review B*, 96(14):144204, 2017.
- [19] R. Zucchini. Quantum Mechanics: Lecture Notes. 2021.

Ringraziamenti

Vorrei dedicare lo spazio finale di questo elaborato a coloro che mi hanno supportato e affiancato in questo percorso di studio e di crescita personale.

In primo luogo, ringrazio infinitamente i miei genitori e mio fratello, le persone che più di tutte mi hanno costantemente sostenuto in questo importante viaggio, appoggiando ogni mia singola decisione ed affiancandomi in tutti i miei passi. In questi tre anni per me intensi, mi hanno sempre dato man forte in ciascun momento di necessità e hanno creduto in me in continuazione fornendomi la forza di proseguire con tenacia. Un grazie a mia madre per la sua sconfinata bontà d'animo, a mio padre per la sua nobile integrità morale e a mio fratello per la sua preziosa lucida concretezza.

Un ringraziamento speciale è rivolto ai miei nonni, per il loro essenziale contributo nell'aiutarmi nelle piccole cose giorno dopo giorno, per la loro inesauribile solarità da un lato e la loro profonda saggezza dall'altro.

Voglio in seguito ringraziare la mia fidanzata, per la sua vivacità con cui colora anche i giorni più bui e la sua dolcezza, e tutti i miei amici, da quelli insostituibili con cui condividi le esperienze di vita a quelli che frequenti meno spesso ma che sono sempre pronti ad accoglierti, da quelli relativi al mondo della musica con cui suonare assieme a quelli conosciuti sui banchi dell'Università e del Collegio con cui trascorrere giornate di studio e fare progetti.

Un ringraziamento va naturalmente alla mia relatrice, per la sua immensa disponibilità e il suo straordinario impegno nel seguirmi assiduamente durante le fasi di questo lavoro di tesi.

Infine, desidero ringraziare tutti i professori dell'Università di Bologna che sono stati testimoni del mio percorso accademico, dal momento che ognuno di essi è riuscito ad arricchire la mia formazione con un proprio originale contributo.