

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE PONTA GROSSA
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS
PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM CIÊNCIAS
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: FÍSICA

ELISANGELA MEIRA DOS SANTOS

CONSTRUÇÃO DA FUNÇÃO DE GREEN EXATA PARA GRAFOS
QUÂNTICOS UTILIZANDO A MATRIZ DE ADJACÊNCIA

PONTA GROSSA
2016

ELISANGELA MEIRA DOS SANTOS

**CONSTRUÇÃO DA FUNÇÃO DE GREEN EXATA PARA GRAFOS
QUÂNTICOS UTILIZANDO A MATRIZ DE ADJACÊNCIA**

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Ciências - Área de Concentração: Física da Universidade Estadual de Ponta Grossa como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em ciências.

Orientador: Prof. Dr. Fabiano Manoel de Andrade.

**PONTA GROSSA
2016**

Ficha Catalográfica
Elaborada pelo Setor de Tratamento da Informação BICEN/UEPG

S237 Santos, Elisangela Meira dos
Construção da função de Green exata
para grafos quânticos utilizando a matriz
de adjacência/ Elisangela Meira dos
Santos. Ponta Grossa, 2016.
55f.

Dissertação (Mestrado em Ciências -
Área de Concentração: Física),
Universidade Estadual de Ponta Grossa.

Orientador: Prof. Dr. Fabiano Manoel de
Andrade.

1.Espalhamento. 2.Amplitudes Quânticas.
3.Ressonância. I.Andrade, Fabiano Manoel
de. II. Universidade Estadual de Ponta
Grossa. Mestrado em Ciências. III. T.

CDD: 536.7

TERMO DE APROVAÇÃO

ELISANGELA MEIRA DOS SANTOS

“Construção da Função de Green Exata para grafos quânticos utilizando a matriz de adjacência”

Dissertação aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre no Programa de Pós-Graduação em Ciências - Física da Universidade Estadual de Ponta Grossa, pela seguinte banca examinadora.

Orientador:


Prof. Dr. Fabiano Manoel de Andrade
Departamento de Matemática, UEPG/PR


Prof. Dr. Marcos de Oliveira Ribas
Departamento de Física, UTFPR - Curitiba


Prof. Dr. José Danilo Szezech Júnior
Departamento de Matemática, UEPG/PR

Ponta Grossa, 15 de dezembro de 2016.

AGRADECIMENTOS

A Deus por ter me dado forças.

Ao meu orientador Dr. Fabiano Manoel de Andrade pela ajuda em todos os aspectos do trabalho.

À Josecler Lepinski pela força e pelo apoio no desenvolvimento do trabalho.

Aos professores que me acompanharam durante esse período de formação.

Ao Programa de Pós-Graduação em Ciências da Universidade Estadual de Ponta Grossa.

Aos professores Dr. André Maurício Brinatti e Dr. José Danilo Szezech Júnior pelas sugestões e leitura crítica da dissertação.

À CAPES pelo apoio financeiro

RESUMO

Neste trabalho revisamos os diferentes aspectos distintos associados à dinâmica quântica em grafos. A abordagem utilizada é aquela das funções de Green definidas no domínio da energia. Nessa técnica as funções de Green são obtidas através da soma de todos os possíveis caminhos clássicos, ao estilo das integrais de caminho de Feynman. Os efeitos quânticos locais são incluídos através da utilização das amplitudes quânticas de reflexão e transmissão definidas em cada um dos vértices do grafo. Mostramos que para obtermos a função de Green exata podemos utilizar a matriz de adjacência do grafo, a qual define as ligações existentes entre os vértices do grafo. Essa abordagem garante que todos os caminhos foram contabilizados e tem a vantagem de fornecer uma classificação única para as diferentes famílias de caminhos que podem ser definidas em um dado grafo. Uma aplicação do método para o estudo ressonâncias em grafos é também apresentada.

Palavras-Chave: Espalhamento, Amplitudes Quânticas, Ressonância

Abstract

In this work we review the different distinct aspects associated with quantum dynamics in graphs. The approach used is that of the Green's functions, defined in the field of energy. In this technique the Green's functions are obtained through the sum of all possible classical paths connecting the initial and final points, the style of Feynman path integrals. Local quantum effects are included through the use of quantum amplitudes for reflection and transmission are defined in each of the vertices of the graph. We show that in order to get the exact Green function can use the adjacency matrix of the graph, which sets the links between the vertices of the graph. This approach ensures that all paths have been accounted for and has the advantage of providing a rating only for the various families of paths that can be defined in a given graph. An application of the method to study resonances in graphs is also presented.

keywords : Scattering, Quantum Amplitudes, Resonance.

Sumário

1	Introdução	7
2	Grafos: Aspectos Gerais	10
2.1	A matriz de adjacência	10
2.2	Grafos Quânticos	14
2.2.1	Grafos Métricos	14
2.3	A equação de Schrödinger independente do tempo para Grafos	15
2.4	Os vértices como Interações Pontuais	18
3	Função de Green para Grafos Quânticos	20
3.1	Caso Usual em 1D	20
3.2	A função de Green exata como uma expressão semiclássica generalizada	21
3.3	Obtendo a função de Green para grafos quânticos	23
3.4	Construindo a função de Green: um exemplo simples	23
3.5	Mais detalhes do procedimento de Simplificação	27
3.5.1	Reagrupando o caminho de espalhamento em famílias: um estudo do caso grafo em forma de cruz	27
3.5.2	Estudo do caso grafo árvore	31
3.5.3	Soluções para função de Green, eliminando, redefinindo ou reagrupamento amplitudes de espalhamento	33
4	Construção da Função de Green Usando a Matriz de Adjacência	38
4.1	Método Utilizando a Matriz de Adjacência	38
4.1.1	Regras para Construir a Função de Green Exata para Grafos Quânticos	39
4.2	Estudo de alguns grafos com topologias distintas	41
4.2.1	Grafo Linear	41
4.2.2	Grafo Triangular	44
4.2.3	Grafo Anel	45
4.2.4	Grafo Anel Utilizando a Matriz de Adjacência	46
4.3	Autoestados e Estados de Espalhamento em Grafos Quânticos	48
5	Conclusão	51

Lista de Figuras

1.1	Representação do mapa de Königsberg, com suas duas ilhas conectadas por setes pontes	8
1.2	Um grafo com $V = 4$ vértices e $L = 7$ arestas, conhecido como diagrama de Euler	8
2.1	Grafo de cinco vértices com um respectivo subgrafo	12
2.2	Representação de um grafo simples, com seus vértices e ligações identificados	13
2.3	Exemplos de grafos: (a) grafo estrela, (b) grafo anel, (c) grafo v -regular, (d) grafo completo, (e) grafo árvore	14
2.4	Grafos quânticos (a) aberto (b) fechado (c) estrela com um único vértice $V(\Gamma) = \{1\}$ conectado a $L(\Gamma) = \{l_1, \dots, l_m\}$ arestas	16
2.5	grafo com $V(\Gamma) = \{1, 2, 3, 4, 5\}$ e $L(\Gamma) = \{\{1, 2\}, \{2, 3\}, \{3, 4\}, \{3, 5\}\}$. . .	18
3.1	Grafo simples com dois vértice, A e B , e uma arestas finita conectando ambos	24
3.2	Grafo em forma de cruz com $V = 3$ vértices e $L = 2$ arestas, e duas ligações semi-infinitas.	28
3.3	Grafo em árvore. Tomando a região $C-O-B$ com um único vértice D , o grafo original e reduzido a um grafo linear	32
3.4	(a) Grafo com três ligações, (b) o mesmo grafo (a) com o uma estrutura interna no vértice A , (c) um pequeno grafo complexo, (d) e (e) são exemplos de grafos onde a solução do primeiro pode ser usada no segundo.	34
4.1	Representação das famílias de trajetórias	41
4.2	Grafo linear com 3 vértices e sem ligações semi-infinitas	43
4.3	Grafo triangular	44
4.4	Grafo anel com dois vértices	46
4.5	Grafo anel com inserção dos vértices 3 e 4	47
4.6	Probabilidade de espalhamento para o grafo anel com quatro ligações da Figura 4.5	49

Capítulo 1

Introdução

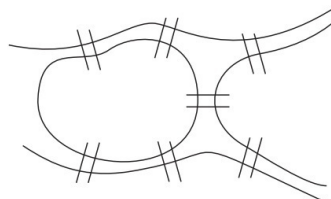
O conceito de grafos quânticos está presente em diversas aplicações práticas de física, inclusive originando problemas fundamentais em mecânica quântica. Dessa forma o estudo de grafos é facilmente motivado. O objetivo principal desse trabalho consiste no estudos de grafos através de funções de Green.

O desenvolvimento da teoria dos grafos se deu a partir de problemas envolvendo jogos e quebra cabeças, tais problemas intrigavam alguns matemáticos, pois a pesar de aparente trivialidade inicial apresentavam resultados teóricos com variedade e profundidade (1).

Leonard Euler (1707-1783), foi o primeiro matemático que escreveu um documento sobre a teoria dos grafos, ele iniciou seu estudos tentando resolver o conhecido problema das pontes de Königsberg. Esse problema teve origem na região da Prússia (até 1945, atual Kaliningrado), onde ficava situado a cidade de Königsberg. Essa região era localizada entre as margens do rio Pregel e duas de suas ilhas, as quais estavam ligada por sete pontes conforme mostra a Figura 1.1. A discussão que originou o problema surgiu entre os moradores que se perguntavam se era possível sair de sua casa atravessar cada ponte apenas uma vez retornando para o mesmo local.

Esse problema foi proposto em um artigo publicado em 1736, e para solucioná-lo Euler usou um raciocínio simples que consistia em transformar os caminhos em retas e sua intersecções em pontos, criando dessa forma um diagrama parecido com o que está ilustrado na Figura 1.2. Ele percebeu que para obter a solução do problema a cada número ímpar de caminhos deveria haver dois pontos conectados, ou nenhum ponto conectado, já que a cada ponto é necessário um número par de caminhos sendo um de entrada e outro de saída, como no diagrama em questão isso não ocorre em todos os caminhos, o problema não admitia solução, ou seja, não havia possibilidade de percorrer as sete pontes exatamente uma vez cada e retornar ao ponto de partida.

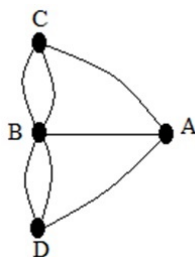
Figura 1.1: Representação do mapa de Königsberg, com suas duas ilhas conectadas por setes pontes



Fonte: A autora

Essa representação consiste em pontos (vértices) conectados à algumas ligações (arestas) que hoje denominamos grafos, esse termo, porém, só foi utilizado a primeira vez pelo matemático inglês James Josheph Sylvester (1814–1897) em um artigo publicado em 1877 (1).

Figura 1.2: Um grafo com $V = 4$ vértices e $L = 7$ arestas, conhecido como diagrama de Euler



Fonte: A autora

Quando Euler propôs o problema, na época, ele foi considerado desinteressante e sem aplicações práticas, e durante praticamente um século ficou esquecido, até que Kirchoff em 1847 desenvolveu a teoria de árvores para trabalhar com aplicações em circuitos elétricos (2). Desde então os grafos tem sido amplamente aplicados em diversas áreas da ciência e engenharia como: planejamentos de projetos, identificação de compostos químicos, cibernética, genética, verificação de comprimentos de caminhos, linguística, estrutura de bancos de dados digitais, redes de neurônios etc. Dessa forma os grafos são estruturas matemáticas com grande aplicabilidade no dia a dia (1).

O termo grafo quântico refere-se a um sistema no qual um dado grafo está associado a um operador linear, dependendo do aspecto particular a ser estudado esses sistemas recebem outros nomes como fios quânticos ou redes quânticas. Sua primeira aplicação na

física foi com Pauling no contexto de modelos de elétrons livres em moléculas orgânicas, seguido por transporte de elétrons em moléculas como proteínas e polímeros (1). Desde então os grafos quânticos têm sido estudados em conexão com supercondutores desordenados (3), transição de Anderson em fios desordenados (4), sistemas Hall quânticos (5), super-redes (6), e sistemas quânticos mesoscópicos (7). Na área experimental também houveram aplicações através de redes de microondas (8), e tecnologia de tomografia laser (9).

Na mecânica quântica os grafos tem se tornado uma ferramenta poderosa para estudar por exemplo: propriedades espectrais de bandas em rede (10), espalhamento caótico e difuso (11) e relação de órbitas periódicas e teoria de localização (12). Uma das grandes surpresas no estudo desses sistemas é que possibilitam obter soluções analíticas exatas mesmo quando apresentam um comportamento caótico.

Esse trabalho está organizado da seguinte maneira. No capítulo 2 definimos grafos do ponto de vista topológico, enfatizando a matriz de adjacência que é objeto importante no nosso estudo e definimos grafos quânticos onde um operador diferencial é definido para o sistema. No capítulo 3 fazemos uma revisão bibliográfica sobre a técnica de função de Green para grafos quânticos, que é escrita em termos das amplitudes das interações pontuais gerais nos vértices dos grafos. no capítulo 4 Apresentamos uma técnica para construção da função de Green com a utilização da Matriz de Adjacência do Grafo, e fazemos uma análise dos resultados comparando com um artigo de Waltner e Smilansky (13). Finalmente no capítulo 5 apresentamos a conclusão bem como as perspectivas futuras para o prosseguimento do trabalho.

Capítulo 2

Grafos: Aspectos Gerais

De um modo geral um grafo é um par de conjuntos, composto por um conjunto finito de pontos chamados de vértices, e um conjunto finito de ligações chamado arestas (3).

Matematicamente definimos um grafo como uma estrutura $G = (V, L)$, onde V é um conjunto finito e não vazio cujos elementos são denominados vértices e L é um conjunto de subconjuntos que conectam elementos de V , os quais são denominados arestas. As variáveis v e l indicam, respectivamente, o número de vértices e o número de arestas de G . O número de vértices também é conhecido como ordem do grafo e o número de arestas que incidem em um vértice é denominado grau do vértice.

Duas arestas são ditas adjacentes se possuírem um vértice em comum. Se existirem arestas ligando um vértice a ele mesmo ou arestas distintas incidem em um mesmo par de vértices temos o que chamamos de laço ou arestas paralelas respectivamente. Um grafo é dito orientado se suas arestas possuírem uma dada orientação. Porém, nesse trabalho consideramos apenas grafos simples, que são aqueles sem arestas paralelas, sem laços e sem orientação.

2.1 A matriz de adjacência

A topologia de um grafo, ou seja, o modo como os vértices e arestas estão conectados é dado por meio de uma matriz quadrada, real e simétrica de ordem igual ao número de vértices do grafo, conhecida por matriz de adjacência $A_{i,j}$ de dimensões $V \times V$ definida como:

$$A_{i,j}(X) = \begin{cases} 1, & \text{se } \{i, j\} \in L(X), \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.1)$$

Devido ao fato de diversas propriedades dos grafos serem deduzidas a partir do espectro de matrizes associadas a ele, esse ramo da Teoria do Grafos é chamado Teoria espectral dos grafos e teve sua motivação na Química com a representação de uma molécula de hidrocarboneto por um grafo em 1931, onde Hückel verificou que os autovalores do grafo estavam relacionados com a energia dos elétrons (4).

A expressão abaixo representa a matriz de adjacência do grafo mostrado na Figura 1.2:

$$A_{i,j} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.2)$$

O grau ou a valência v_i de um vértice i corresponde ao número de conexões a vértices j ligados a i , com pesos dados pelo número de ligações paralelas (laços). Em termos da matriz de adjacência:

$$v_i = \sum_{j=1}^V A_{i,j}. \quad (2.3)$$

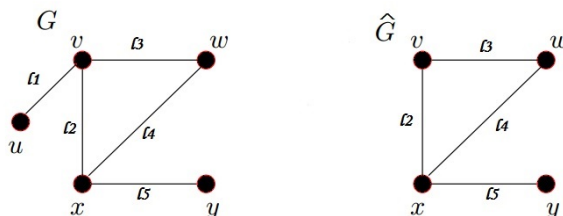
Ainda utilizando a matriz de adjacência o número de ligações é expresso por:

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^V \sum_{j=1}^V A_{i,j}. \quad (2.4)$$

Dizemos que um subgrafo \hat{G} de um grafo G é o grafo que se e somente se, $V(\hat{G}) \subseteq V(G)$ e $L(\hat{G}) \subseteq L(G)$. Dessa forma, G é um supergrafo de $V(\hat{G})$ Conforme representação na figura abaixo. Definimos ainda a vizinhança Γ_i do vértice i , que consiste nos vértices

j conectados a i , e o contorno de um sub-grafo $\hat{G} \subset G$, $\Gamma(\hat{G})$, consiste dos vértices que não estão em \hat{G} , mas que estão na união das vizinhanças dos vértices de \hat{G} .

Figura 2.1: Grafo de cinco vértices com um respectivo subgrafo



Fonte: A autora

Consideraremos nesse trabalho sempre grafos conexos, para os quais os vértices não podem ser divididos em dois subconjuntos não vazios de tal forma que não exista ligações conectando os dois subconjuntos, ou seja, um grafo conectado a matriz de adjacência não pode se apresentar na forma de blocos diagonais pela permutação dos vértices (7).

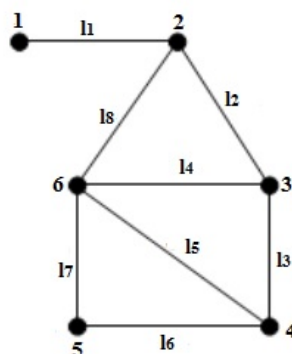
Com base em propriedades da conectividade a literatura distingue diversas classes de grafos:

- Grafos simples são aqueles que não possuem múltiplas ligações entre dois vértices e também não contém laços; para todo i e j , $A_{i,j} \in \{0, 1\}$, como esses grafos não tem laços todos os elementos diagonais são nulos $A_{i,i} = 0$. Para grafos simples, a cardinalidade que é dada pelo número de vértices de Γ_i é a valência, isto é, o número de arestas incidentes para cada vértice.

Temos na Figura 2.2 um exemplo de grafo simples, com o conjunto do vértice $V = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ e o conjunto de arestas $L = \{l_1, l_2, l_3, l_4, l_5, l_6, l_7, l_8\}$, observe que na ligação identificada como l_1 os extremos são os vértices 1 e 2, como essa aresta incide em ambos eles são ditos adjacentes, se observamos os vértices 1 e 5, percebemos que não existe uma ligação incidente em ambos, portanto, não são adjacentes. O vértice 4 tem 3 arestas conectadas a ele, dessa forma dizemos que esse vértice tem grau 3, já o vértice 6 tem grau 4, pois a ele estão conectadas 4 ligações. Quando temos duas ou mais arestas incidentes no mesmo vértice dizemos que são adjacente, como por exemplo l_5 e l_4 .

- Grafos v -regulares são grafos simples com vértices que possuem mesma valência v , Os grafos anéis com $v = 2$ são os mais simples dessa classe. Um anel não trivial tem

Figura 2.2: Representação de um grafo simples, com seus vértices e ligações identificados



Fonte: Adaptado de Graph Theory (2).

ao menos dois vértices. Um grafo v -regular é dito completo quando $v = V - 1$;

- Grafos árvore são conexo (existe caminho entre quaisquer dois de seus vértices) e acíclico (não possui ciclos).
- Grafos estrela são árvores que consistem em um vértice principal (central) com valência v , conectado a v vértices periféricos de valência 1.

Todas as ligações que emergem de um vértice i formam a estrela,

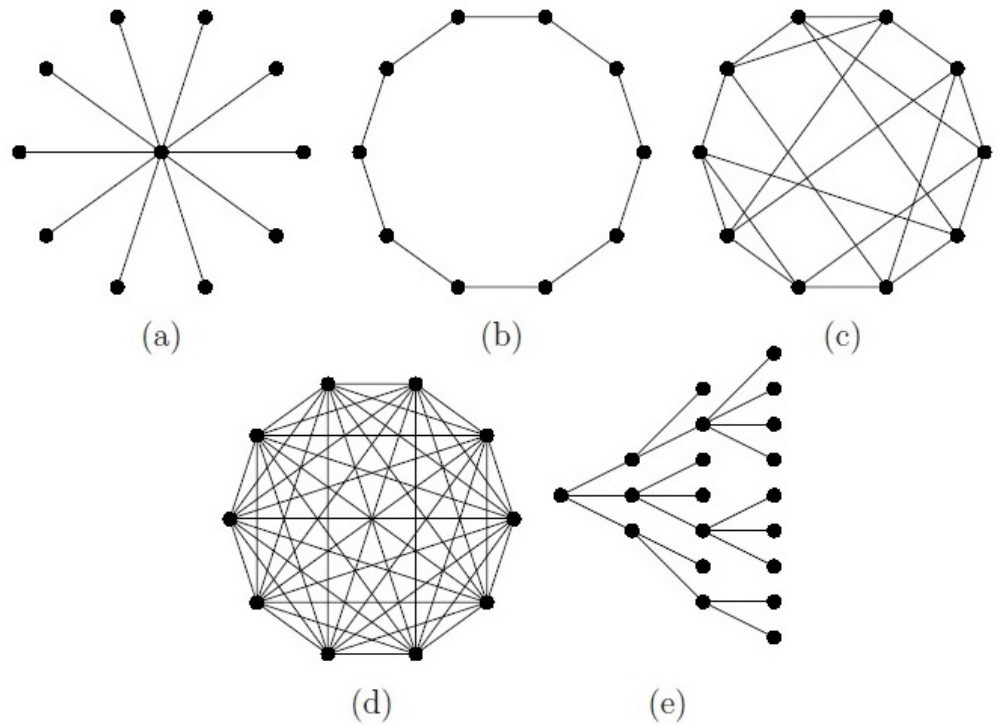
$$S^{(i)} = \bigcup_{j \in \Gamma_i} (i, j) \quad (2.5)$$

Em geral, denotamos uma ligação pelos vértices aos quais estão conectados, se o grafo é simples, podemos usar os pontos finais das ligações como seus índices $l = (i, j) = (j, i)$. Se um grafo não é simples, ou seja, possui vértices multiconectados, (i, j) denotará o conjunto de todas as ligações que conectam os vértices i e j . Usamos os parênteses para denotar conjuntos com ligações não direcionais.

Ligações direcionais (também chamadas de arcos na literatura) são aquelas que se especifica uma direção. Neste caso podemos nos referir como $\vec{l} \equiv (Min(i, j), Max(i, j))$ ou por $\overleftarrow{l} \equiv (Max(i, j), Min(i, j))$. Para grafos não simples, \vec{l} é o conjunto de todas as

ligações direcionais começando em i e terminando em j (8).

Figura 2.3: Exemplos de grafos: (a) grafo estrela, (b) grafo anel, (c) grafo v -regular, (d) grafo completo, (e) grafo árvore



Fonte: Métodos de função de Green na análise de grafos quânticos e caminhadas quânticas (1).

Na figura 2.3 mostramos alguns exemplos das classes de grafos que aparecem com mais frequência na literatura, seja por seu maior interesse ou por sua aplicabilidade.

2.2 Grafos Quânticos

2.2.1 Grafos Métricos

Na seção anterior foi abordado conceitos de grafos a partir de um ponto de vista topológico, onde o foco são conceitos como conectividade e vizinhança. No entanto para

discutir sobre grafos quânticos é necessário discorrer sobre grafos métricos que permitem definir o operador de Schrödinger no grafo.

A ideia intuitiva de grafo métrico é que ao invés de se imaginar as arestas como relações abstratas entre os vértices, elas devem consideradas como ligações físicas (5). Um grafo é dito métrico se:

1. A cada aresta l é atribuído um comprimento positivo $L_l \in (0, \infty)$, já que muitas vezes é necessário considerar arestas com comprimento infinito, ou seja, com apenas um vértice, chamadas de ligações semi-infinitas;
2. A coordenada x_l é atribuída a cada aresta $\in [0, L_l]$ sendo que em um vértice assume o valor 0 e no outro L_l (5).

Grafo métrico em linhas gerais é um grafo à cujas ligações são atribuídos comprimentos positivos, ele é dito equilátero se todos os comprimentos de suas ligações forem iguais (9).

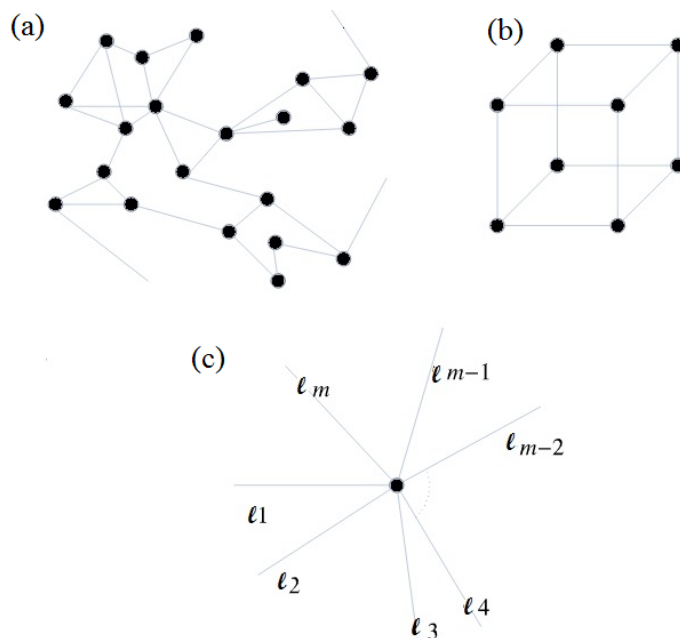
Essa estrutura introduzida de grafo métrico, permite interpretar o grafo como um espaço topológico onde a união de todas as arestas com suas extremidades correspondendo aos mesmos vértices a serem identificados (5).

Neste esse estudo os grafos utilizados, são apenas aqueles caracterizados como simples sem múltiplas ligações, sem ligações paralelas e sem laços, considerando que esta situação é a mais estudada na mecânica quântica conforme observamos na literatura.

2.3 A equação de Schrödinger independente do tempo para Grafos

Um grafo quântico é uma estrutura de grafo métrico $G(V, L)$, sobre a qual podemos definir um operador diferencial H (geralmente o Hamiltoniano), juntamente com condições de contorno nos vértices (14). Ou seja, um grafo quântico é uma rede de vértices e arestas com uma partícula quântica movendo-se ao longo de suas ligações, onde a função de onda e os níveis de energia dessa partícula sobre o grafo são definidos pela equação de Schrödinger unidimensional correspondente. Apesar da aparente simplicidade do sistema,

Figura 2.4: Grafos quânticos (a) aberto (b) fechado (c) estrela com um único vértice $V(\Gamma) = \{1\}$ conectado a $L(\Gamma) = \{l_1, \dots, l_m\}$ arestas



Fonte: Adaptado de Métodos de função de Green na análise de grafos quânticos e caminhadas quânticas (1).

grafos quânticos têm provado ser uma fonte rica de percepção física. Do ponto de vista matemático, as propriedades espectrais de operadores de Schrödinger em grafos são altamente não triviais e têm sido amplamente investigada na literatura matemática (10).

O comportamento de uma partícula num grafo quântico tem uma dinâmica rica pois a cada vez que a partícula encontra um vértice do grafo, ela pode se espalhar com probabilidades diferentes para a frente ou para trás ao longo de qualquer uma das ligações que emanam do vértice. Como um sistema físico simples análogo pode se imaginar um feixe de luz viajando ao longo de uma rede de fibras ópticas. Em cada conjunto das fibras as ondas de luz dispersam de tal modo que o fluxo total de energia é conservada. Como um resultado das múltiplas possibilidades de espalhamento nos vértices, a dinâmica de uma partícula num grafo é complexa e o número de possíveis órbitas periódicas traçadas pela partícula aumenta exponencialmente com os seus comprimentos.

Em outras palavras um problema envolvendo grafos quânticos $\Gamma(V, L)$ é definido por

$\{\Gamma(V, L), \text{operador Hamiltoniano } H \text{ em } L(\Gamma), \text{ condições de contorno para } V(\Gamma)\}$.

Um grafo quântico é chamado fechado se o grafo métrico respectivo é compacto, ou seja, todas as ligações estão conectadas a dois vértices, caso contrário, ele é chamado de grafo aberto, possuindo pelo menos uma ligação semi-infinita que é conectada apenas em um vértice. Exemplos de grafos quânticos (16) estão representado na Figura 2.4. A função de onda total Ψ do grafo quântico é um vetor com s componentes.

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_{l_1}(x_{l_1}) \\ \psi_{l_2}(x_{l_2}) \\ \vdots \\ \psi_{l_s}(x_{l_s}) \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

O operador Hamiltoniano em $L(\Gamma)$ consiste no seguinte operador diferencial unidimensional definido em cada ligação l_s (17,18,19).

$$H_{l_s}(x_{l_s}) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx_{l_s}^2} + V_{l_s}(x_{l_s}). \quad (2.7)$$

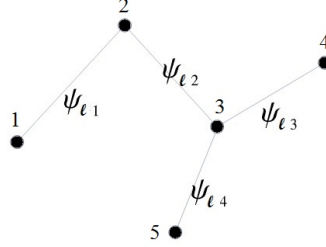
Onde μ é a massa da partícula, \hbar é a constante de planck, e $V_{l_s}(x_{l_s})$ é o potencial assumido como sendo não-negativo no intervalo $0 < x_{l_s} < \ell_{l_s}$. Na literatura, mesmo em trabalhos que discutem caos quântico como em (20-26), é normal ter para quaisquer l_s que $V_{l_s} = 0$ (o caso assumido aqui). Os componentes $\psi_{l_s}(x_{l_s})$ da função de onda total é a solução de ($k = \sqrt{2\mu E}/\hbar$), onde E refere-se a energia.

$$-\frac{d^2\psi_{l_s}}{dx_{l_s}^2} = k^2\psi_{l_s}(x_{l_s}) \Rightarrow \psi_{l_s}(x_{l_s}) = c_{+,l_s} \exp[+i k x_{l_s}] + c_{-,l_s} \exp[-i k x_{l_s}], \quad (2.8)$$

com c sendo uma constante. Todas estas funções de onda devem satisfazer condições de contorno apropriadas nos vértices, assegurando a continuidade da função de onda e a conservação da probabilidade de corrente.

Tecnicamente, satisfazer as condições de contorno em cada vértice é o passo mais complicado para obter a função de onda completa Ψ que é o conjunto das funções de onda que aparecem na Figura 2.5

Figura 2.5: grafo com $V(\Gamma) = \{1, 2, 3, 4, 5\}$ e $L(\Gamma) = \{\{1, 2\}, \{2, 3\}, \{3, 4\}, \{3, 5\}\}$



Fonte: Adaptado de Métodos de Função de Green na Análise de Grafos Quânticos e Caminhadas Quânticas (1).

Além disso, impor as condições de contorno torna o operador Hamiltoniano auto-adjunto. De modo geral as condições de contorno do vértice para grafos quânticos são determinadas pela técnica de extensão auto-adjunta. Denotada por $\Psi_j = (\psi_{l_{j_1}}, \psi_{l_{j_2}}, \dots, \psi_{l_{j_{v_j}}})^T$ e $\Psi'_j = (\psi'_{l_{j_1}}, \psi'_{l_{j_2}}, \dots, \psi'_{l_{j_{v_j}}})^T$, respectivamente a função de onda e sua derivada associadas a aresta v_j ligada ao vértice j . Logo as condições de contorno especificam as matrizes $v_j \times v_j$: \mathcal{A}_j e \mathcal{B}_j , com $\mathcal{A}_j \Psi_j = \mathcal{B}_j \Psi'_j$ em j garante um extensão auto-adjunta do Hamiltoniano, impondo a conservação da probabilidade de corrente $\Psi_j^\dagger \Psi'_j = \Psi_j^\dagger \Psi_j$ (27-29).

2.4 Os vértices como Interações Pontuais

A partir da discussão anterior, em um grafo quântico qualquer arestas l_s podem ser vistas como direções espaciais unidimensionais com comprimento l_s e os vértices como estruturas pontuais (0D), cuja ação é impor as condições de contorno adequadas sobre as ψ 's. Um exemplo clássico é o potencial delta de Dirac que simplesmente determina, por sua localização, as condições de contorno específicas para a função de onda (30-32).

Assim, para descrever a dinâmica quântica ao longo do grafo podemos tomar os j 's como interações arbitrárias, uma abordagem totalmente coerente com o tratamento geral das condições de contorno descrito na Sec. 2.3. Além disso, assumir os vértices como potenciais tem uma vantagem importante: os j 's tornam-se espalhadores. Como tal, eles são completamente caracterizados pelas suas características de espalhamento, dada em termos de amplitudes de reflexão e transmissão (33).

Por exemplo, este é exatamente o caso de uma função delta, para o qual pode ser obtido sem considerar quaisquer condições de contorno, em vez disso, um tratamento

puramente de espalhamento resolve o problema. Interações pontuais gerais são muito diferentes em suas propriedades de espalhamento. Por exemplo, os aspectos intrigantes de transmissão e reflexão de interações pontuais têm sido discutidas em contextos distintos, tais como, potenciais dependentes do tempo (34) e equação não linear de Schrödinger (35,36).

Na verdade, para uma interação pontual na linha (por exemplo, em $x_0 = 0$), determinar quais as condições de contorno para impor à sua função de onda, em $x = 0$, é inteiramente equivalente especificar os respectivos elementos da matriz de espalhamento \mathcal{S} . Isto é válido quando o vértice, está conectado à ligações semi-infinitas esquerda ($-\infty < x < 0$) e direita ($0 < x < +\infty$) (para o caso em uma dimensão como na Figura 2.3 (c)). Em seguida, pode-se definir para cada vértice j a matriz \mathcal{S}_j , de elementos $\mathcal{S}_j^{(s,s)}(k) = r_j^{(s)}(k)$ e $\mathcal{S}_j^{(s,r)}(k) = t_j^{(s,r)}(k)$. Assim

- $t_j^{(s,r)}(k)$ é a amplitude quântica de uma onda plana, com um número de onda k , a partir da aresta (entrada) s em direção ao vértice j para ser transmitida para aresta r através de j .
- $r_j^{(s)}(k)$ é a amplitude quântica para uma onda plana, com número de onda k , recebida a partir da ligação s para o vértice j e ser refletida até a aresta s de saída por j .

As condições necessárias para auto-adjunticidade (isto é, a conservação do fluxo de probabilidade) ao longo de todo o grafo, exige que $\mathcal{S}(k)\mathcal{S}^\dagger(k) = \mathcal{S}^\dagger(k)\mathcal{S}(k) = \mathbf{1}$ e $\mathcal{S}(k) = \mathcal{S}^\dagger(-k)$, de modo que

$$\sum_{l=1}^{v_j} \mathcal{S}_j^{(s,l)}(k) \mathcal{S}_j^{(r,l)*}(k) = \sum_{l=1}^{v_j} \mathcal{S}_j^{(l,s)}(k) \mathcal{S}_j^{(l,r)*}(k) = \delta_{sr}, \quad \mathcal{S}_j^{(s,r)}(k) = \mathcal{S}_j^{(r,s)*}(-k). \quad (2.9)$$

Dependendo das condições de contorno impostas nos vértices do grafo, eventualmente obtemos estados ligados. Na descrição de espalhamento, os coeficientes quânticos R e T têm polos na metade superior do plano complexo k , correspondendo aos possíveis autovalores. As auto funções pode então ser obtidas a partir de uma extensão adequada dos estados de espalhamento para valores de k (37).

Capítulo 3

Função de Green para Grafos Quânticos

Recentemente houve desenvolvimentos bem sucedidos na obtenção de funções de Green e propagadores. Tanto a função de Green, quanto o propagador, é um recurso cada vez mais valorizado no estudo do comportamento de um sistema quântico, pois possibilita uma melhor observação da dinâmica do mesmo (1).

O propagador é a transformada de Fourier da função de Green. Neste trabalho consideramos a função de Green para a equação de Schrodinger independente do tempo para resolvermos problemas de valores de contorno. Delineando sua solução através do método de funções de Green utilizando uma expansão espectral independente tempo (38,39).

3.1 Caso Usual em 1D

Para o caso unidimensional habitual, a função de Green pode ser definida pelas soluções da equação diferencial não homogênea

$$[E - H(x_f)]G(x_f, x_i; E) = \delta(x_f - x_i), \quad (3.1)$$

em que também $G(x_f, x_i; E)$ é submetido às condições de contorno adequadas. Suponha que temos um conjunto completo de autoestados normalizados $\psi_s(x)$ ($s = 0, 1, \dots$, espectro discreto) e $\psi_\sigma(x)$ ($\sigma > 0$, espectro contínuo), com

$$H \psi_s = E_s \psi_s, \quad H \psi_\sigma = \frac{\hbar^2 \sigma^2}{2\mu} \psi_\sigma. \quad (3.2)$$

Em seguida, a solução da equação (3.1) é formalmente dada por

$$G(x_f, x_i; E) = \sum_s \frac{\psi_s(x_f) \psi_s^*(x_i)}{(E - E_s)} + \int_0^\infty d\sigma \frac{\psi_\sigma(x_f) \psi_\sigma^*(x_i)}{(E - \hbar^2 \sigma^2 / (2\mu))}. \quad (3.3)$$

Assim, a partir da Eq. (3.3) podemos identificar os pólos da função de Green com os autoestados de energia e os resíduos em cada pólo com um produto tensorial da autofunção do estado ligado. A parte contínua do espectro corresponde a uma linha de ramificação $G(x_f, x_i; E)$ (40,41). Dada a Eq. (3.3), o limite abaixo pode ser usado para extrair os estados ligados discretos a partir de G

$$\lim_{E \rightarrow E_s} (E - E_s) G(x_f, x_i; E) = \psi_s(x_f) \psi_s^*(x_i). \quad (3.4)$$

3.2 A função de Green exata como uma expressão semiclássica generalizada

Existem basicamente três métodos para calcular a função de Green (31): resolver a equação diferencial em (3.1); somar a representação espectral (3.3); ou realizar a expansão de integrais de caminho de Feynman para o propagador na representação de energia (32,33). Em particular, para contextos semelhantes ao presente trabalho, a última abordagem tem sido utilizada para estudar o espalhamento por vários potenciais em 1D (34,35), para calcular os auto valores de múltiplos potenciais (36), para estudar espalhamento quântico (37,38), e para a construção de função de Green exata para potenciais retangulares (39,40).

A função de Green exata para uma matriz arbitrária finita de potenciais de suporte compacto foi obtida em (34), com uma extensão para os casos mais gerais apresentados em (35). Para as derivações em (34), é necessário que o r e o t de cada potencial sejam localizados para atender as condições.

Vale notar que as interações pontuais constituem uma classe particular de potenciais de suporte compacto (34). Assim, com base nesse trabalho é possível calcular a função de Green para interações pontuais gerais usando as correspondentes amplitudes de reflexão e transmissão, que são quantidades com uma interpretação física muito clara e de modo concebível, passíveis de serem determinadas através de experiências (41,42).

Assim, para este conjunto geral de potenciais, de acordo com refs. (34,36) a função de Green *exata* (em contraste com aproximações semiclássicas habituais) para uma partícula de energia fixa E e os pontos x_i e x_f é dada por

$$G(x_f, x_i; E) = \frac{\mu}{i\hbar^2 k} \sum_{ce} W_{ce} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{ce}(x_f, x_i; k)\right]. \quad (3.5)$$

A soma acima é realizada sobre todos os caminhos de espalhamento saindo de x_i e terminando em x_f . O caminho de espalhamento (ce) representa uma trajetória em que a partícula deixa x_i , percorrendo múltiplos caminhos de espalhamento e, finalmente, chega em x_f . Para cada caminho, S_{ce} é a ação clássica, ou seja, $S_{ce} = k L_{ce}$, com L_{ce} , sendo o comprimento trajetória. O termo W_{ce} é a amplitude de espalhamento quântico (ou peso), construído como se segue: cada vez que a partícula atinge um potencial V_n localizado, quanticamente ela pode ser refletida ou transmitida pelo potencial. No primeiro caso, W_{ce} recebe um fator r_n e, no segundo, W_{ce} recebe um fator t_n . A W_{ce} total é então o produto de todos os coeficientes quânticos r_n 's e t_n 's adquiridos ao longo da trajetória de espalhamento.

A extensão direta da Eq. (3.5) muitas vezes chamada semiclássica, formula a função de Green generalizada porque a sua forma funcional é natural para grafos quânticos. Na verdade, os dois ingredientes principais necessárias na derivação rigorosa (43,44) da Eq. (3.5), ou seja, unidimensionalidade e potenciais localizadas, são por construção presentes nos grafos quânticos. Em primeiro lugar, uma vez que a evolução quântica tem lugar ao longo das arestas do grafo, independentemente da topologia, a dinâmica é essencialmente 1D. Em segundo lugar, os potenciais são os vértices, que, como vimos, podem ser tratados como interações pontuais, ou seja, uma classe particular de potenciais suporte compacto (45).

Diferentes técnicas podem ser usadas para identificar e resumir todos os caminhos de espalhamento. Assim, $V(\Gamma)$ e $L(\Gamma)$ (ambos finitos) ligando em uma direção grafos quânticos simples, em princípio, sempre se pode obter uma expressão analítica fechada para G . Portanto, uma vez que qualquer informação sobre um sistema quântico pode ser extraído diretamente da função de Green correspondente, esses resultados constituem uma ferramenta muito poderosa na análise de muitos aspectos distintos de grafos quânticos.

3.3 Obtendo a função de Green para grafos quânticos

A fórmula na Eq. (3.5) fornece a função de Green exata para grafos quânticos simples conectados arbitrariamente. No entanto, ele não tem utilidade prática universal, nem sempre somos capazes de identificar todos os possíveis caminhos de espalhamento pois esse pode ter uma dinâmica rica, dificultando essa identificação. Então, aqui descrevemos diferentes protocolos para lidar com Eq. (3.5), permitindo escrever a G exata como uma expressão analítica fechada. Para manter a discussão o mais acessível possível, começamos com alguns exemplos ilustrativos simples. Na sequência, estendemos a análise para obter mais situações gerais.

Nós adotamos a seguinte notação:

- $r_j^{(s)}$ e $t_j^{(s,r)}$ são as amplitudes de reflexão e transmissão para o vértice j descrita anteriormente.
- P_l representa a contribuição de toda uma família infinita l de ce para a Eq.(3.5), de modo que a l de ce para Eq. (3.5), de modo a $G = \mu/(i\hbar^2k) \sum_l P_l$.
- $G_{sr}(x_f, x_i; k)$ é a função de Green para uma partícula de energia $E = \hbar^2k^2/2\mu$, cujo ponto inicial x_i está na ligação l_s e o ponto final x_f na aresta l_r .

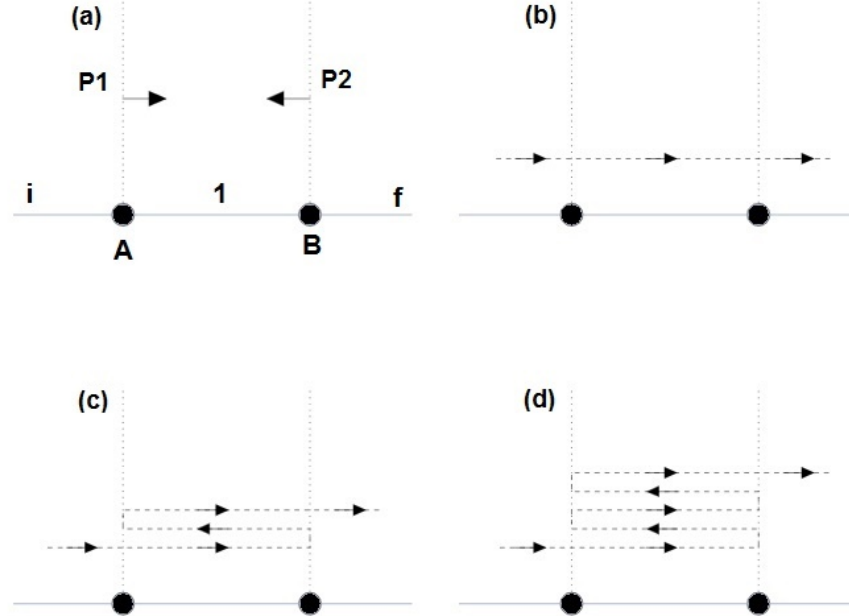
Também, para que não haja espaço para dúvidas, por simplicidade vamos representar arestas por s (em vez de l_s) e vértices por letras maiúsculas, A, B, etc.

3.4 Construindo a função de Green: um exemplo simples

Considere o grafo aberto mostrado na Figura 3.1(a). Ele tem dois vértices, A e B, uma ligação finita (de comprimento l_1), e duas arestas semi-infinitas, rotuladas de i e f .

Ao assumir $-\infty < x_i < 0$ em i e $0 < x_f < +\infty$ em f , a função de Green $G_{if}(x_f, x_i; k)$ essencialmente descreve a transmissão através da estrutura de grafo completo, ou seja, a partir da esquerda para a direita. Para obter G precisamos somar todos os possíveis caminhos de espalhamento de uma partícula quântica partindo de x_i , em i , passando por múltiplas reflexões entre os vértices A e B, e, finalmente, terminando no ponto x_f , em f . A Eq (3.5) produz uma série geométrica convergente, a qual, por conseguinte, pode ser somada de forma exata. (34-36,45-47).

Figura 3.1: Grafo simples com dois vértice, A e B , e uma arestas finita conectando ambos



Fonte: Adaptado de métodos de função de Green na análise de grafos quânticos e caminhadas quânticas (1).

Na Fig. 3.1 (b)-(d) é representado alguns exemplos de caminhos. Considere o caminho de espalhamento em 3.1 (b), representando a propagação direta de x_i para x_f . A partícula começa deixando x_i em direção a A . A partir deste primeiro trecho da trajetória, obtém-se um fator $\exp[-ikx_i]$ para G . Ao bater no vértice, a partícula é então transmitido através de A . Este processo produz um fator de $t_A^{(i,1)}$ para G . Em seguida, a partícula passa para a localização do vértice B , que conduz a um fator de $\exp[ik\ell_1]$. Uma vez no ponto B , a partícula é então transmitida através de B , resultando assim em $t_B^{(1,f)}$. Finalmente, para a trajetória final (B para x_f), obtém-se $\exp[ikx_f]$. Reunindo tudo isso, os caminhos de espalhamento da Fig. 3.1 (b), contribui para a (3.5) com $W_{ce} = t_A^{(i,1)} t_B^{(1,f)}$ e $L_{ce} = (x_f - x_i) + \ell_1 = |x_f| + |x_i| + \ell_1$ (daí o comprimento deste caminho de espalhamento). Seguindo o mesmo tipo de análise, para os outros dois exemplos na Fig.3.1 temos:

$$(c) \exp[-ikx_i] t_A^{(i,1)} \exp[ik\ell_1] r_B^{(1)} \exp[ik\ell_1] r_A^{(1)} \exp[ik\ell_1] t_B^{(1,f)} \exp[ikx_f] :$$

$$W_{sp} = r_A^{(1)} r_B^{(1)} t_A^{(i,1)} t_B^{(1,f)}, \quad L_{sp} = (x_f - x_i) + 3\ell_1;$$

$$(d) \exp[-ikx_i] t_A^{(i,1)} \exp[ik\ell_1] r_B^{(1)} \exp[ik\ell_1] r_A^{(1)} \exp[ik\ell_1] r_B^{(1)} \exp[ik\ell_1] r_A^{(1)} \exp[ik\ell_1] t_B^{(1,f)} \exp[ikx_f] :$$

$$W_{sp} = (r_A^{(1)})^2 (r_B^{(1)})^2 t_A^{(i,1)} t_B^{(1,f)}, \quad L_{sp} = (x_f - x_i) + 5\ell_1.$$

Assim, a função de Green exata é escrita como uma soma sobre todos os termos existentes da forma acima, ou

$$G_{if}(x_f, x_i; k) = \frac{\mu}{i\hbar^2 k} \exp[-ikx_i] t_A^{(i,1)} \left(\sum_{n=0}^{\infty} [r_A^{(1)}]^n [r_B^{(1)}]^n \exp[ik(2n+1)\ell_1] \right) t_B^{(1,f)} \exp[ikx_f]. \quad (3.6)$$

A equação (3.6) é, de fato, uma série geométrica e uma vez que para as amplitudes quântica temos que $|r_j^{(s)}|^2 \leq 1$ e $|t_j^{(s,r)}|^2 \leq 1$, a soma da Eq. (3.6) sempre converge. Assim, a função de Green se lê

$$G_{if}(x_f, x_i; k) = \frac{\mu}{i\hbar^2 k} T_{if} \exp[ik(x_f - x_i + \ell_1)], \quad (3.7)$$

com

$$T_{if} = \frac{t_A^{(i,1)} t_B^{(1,f)}}{1 - r_A^{(1)} r_B^{(1)} \exp[2ik\ell_1]}. \quad (3.8)$$

Note que a Eq. (3.8) pode ser reconhecida como a amplitude de transmissão para todo o sistema (34). Isso ilustra o fato de que, reagrupando adequadamente vários vértices, eles podem ser tratados como um 'único' vértice, contribuindo efetivamente com amplitudes de reflexão e transmissão para G . Como discutiremos em detalhes na Sec.3.5, existe uma abordagem que simplifica fortemente o cálculo da função de Green para sistemas mais complicados.

Identificar todos os possíveis caminhos de espalhamento é relativamente direta quando se trata de um grafo pequeno, mais quando o número de vértices e arestas aumenta, isso

pode se tornar um processo tedioso e complicado. Felizmente, a tarefa pode ser realizada por meio de um esquema de classificação esquemática, simples, separando os caminhos de espalhamento em famílias.

Para exemplificar isto, consideremos novamente G_{if} para o grafo da Figura 3.1. Para qualquer caminho de espalhamento, necessariamente no início da ligação x_i , a partícula passa em A , e, em seguida, é transmitida através de A . Uma vez tunelando para $x_1 = 0^+$ (sempre com a velocidade positiva), existem inúmeras possibilidades que se seguem (em alguns exibida Figura 3.1 (b) -(d)). Então, esquematicamente representam todas as trajetórias que vão para a direita, com partida $x_1 = 0^+$, que são a família P_1 , Fig. 3.1 (a). Agora, um caminho em P_1 inicia o trajeto de A para B . Então, em B pode-se atravessar o vértice B , chegando finalmente ao ponto final x_f , ou ser refletida de B , inverter a sua direção de movimento (em $x_1 = \ell_1^-$). Para esta última situação, todas as trajetórias subsequentes de $x_1 = \ell_1^-$ podem ser representadas como a família P_2 , Fig. 3.1 (a). Mas exatamente o mesmo raciocínio mostra que para qualquer caminho de espalhamento em P_2 , deixa a partícula B em direção a A , que é refletida de A , e torna-se então um dos caminhos em P_1 . Por isso, esse procedimento leva à função de Green

$$G_{if}(x_f, x_i; k) = \frac{\mu}{ik\hbar^2} \exp[-ikx_i] t_A^{(i,1)} P_1, \quad (3.9)$$

com

$$P_1 = \exp[ik\ell_1] \left\{ \begin{array}{l} r_B^{(1)} P_2 \\ t_B^{(1,f)} \exp[ikx_f], \end{array} \right. \quad (3.10)$$

e

$$P_2 = \exp[ik\ell_1] r_A^{(1)} P_1. \quad (3.11)$$

Na Eq. (3.10), ‘{’ representa a possível divisão para o ce na família P_1 . A equação algébrica equivalente a Eq. (3.10) é

$$P_1 = \exp[ik\ell_1] \left(r_B^{(1)} P_2 + t_B^{(1,f)} \exp[ikx_f] \right). \quad (3.12)$$

Assim, resolvendo as Equações (3.11) e (3.12) para P_1 , obtém-se

$$P_1 = \frac{t_B^{(1,f)} \exp[ik\ell_1] \exp[ikx_f]}{1 - r_A^{(1)} r_B^{(1)} \exp[2ik\ell_1]}, \quad (3.13)$$

que por substituição direta para Eq. (3.9), conduz a G exata na Eq. (3.7). Deste modo, a identificação e a soma de um número infinito de ce é reduzida para a solução de um simples sistema de equações algébricas lineares. É tão forte a natureza recursiva dos caminhos de dispersão em grafos quânticos que constitui um processo chave para resolver os problemas mais complicados.

3.5 Mais detalhes do procedimento de Simplificação

A partir do exemplo anterior, é evidente que dois protocolos que simplificam drasticamente os cálculos para G são: (a) reagrupar infinitas caminhos de dispersão em número finito de famílias de trajetórias; e (b) dividir um grafo grande em blocos menores, para resolver os blocos individuais, e, em seguida, ligar as peças completamente.

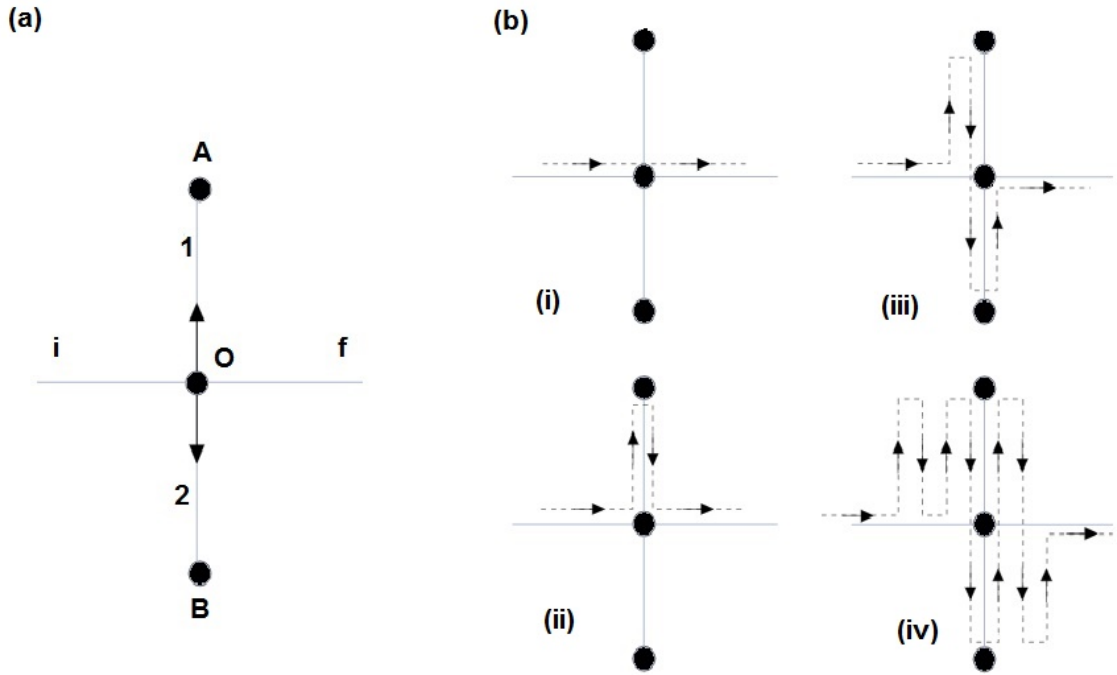
Assim, dada a sua importância, vamos elaborar mais (a) e (b), enfatizando alguns aspectos técnicos, revelando que não são necessários para um grafo simples como visto na Seção anterior. Por isso, explicamos em dois diferentes sistemas: Uma estrutura em forma de cruz, útil para ilustrar detalhes sobre (a), e um gráfico quântico árvore, sistema cuja solução é consideravelmente facilitada pela técnica de separação de bloco de (b).

3.5.1 Reagrupando o caminho de espalhamento em famílias: um estudo do caso grafo em forma de cruz

O grafo em forma de cruz é mostrado na Fig. 3.2. Composto por três vértices, duas ligações e duas arestas. Observe-se que o vértice O é a origem (final) da ligação f (i). Vamos primeiro discutir a função de Green para a partícula deixando $-\infty < x_i < 0$, ao longo do ponto i , e chegar a $0 < x_f < +\infty$, ao longo do ponto f . Na soma Eq. (3.5), o ce são todas as trajetórias a partir de i , sofrendo múltiplas transmissões e reflexões entre as arestas 1 e 2 (ℓ_1 e ℓ_2), e chegada no f . Na Fig. 3.2 (b) mostra exemplos esquemáticos de possível ce: (i) a transmissão direta de i para f através do vértice O

central, de modo que $W_{ce} = t_O^{(i,f)}$ e $L_{ce} = x_f - x_i$; (ii) a transmissão de i para o aresta 1, uma reflexão no vértice A , e uma transmissão final do vértice central para o ponto f , então, $W_{ce} = t_O^{(i,1)} r_A^{(1)} t_O^{(1,f)}$ e $L_{ce} = x_f - x_i + 2\ell_1$; (iii) a transmissão da aresta 1, uma reflexão de A , em seguida, uma transmissão da extremidade 2, uma nova reflexão, desta vez do vértice B , e finalmente em O de uma transmissão para levar a f , desta forma $W_{ce} = t_O^{(i,1)} r_A^{(1)} t_O^{(1,2)} r_B^{(2)} t_O^{(2,f)}$ e $L_{ce} = x_f - x_i + 2(\ell_1 + \ell_2)$; (iv) a transmissão para a aresta 1, um salto duplo dentro de aresta 1, então a transmissão para a aresta 2, uma reflexão do vértice B , uma transmissão para a aresta 1, uma reflexão do vértice A , outra transmissão para a aresta 2, uma reflexão do vértice B e, finalmente, uma transmissão para levar a f a partir da extremidade 2 (através do vértice O), assim $W_{ce} = t_O^{(i,1)} [r_A^{(1)}]^3 r_O^{(1)} [t_O^{(1,2)}]^2 [r_B^{(2)}]^2 t_O^{(2,1)} t_O^{(2,f)}$ e $L_{ce} = x_f - x_i + 6\ell_1 + 4\ell_2$.

Figura 3.2: Grafo em forma de cruz com $V = 3$ vértices e $L = 2$ arestas, e duas ligações semi-infinitas.



Fonte: Adaptado de Métodos de função de Green na análise de grafos quânticos e caminhadas quânticas (1).

Tal proliferação de infinitos caminhos pode ser fatorado de uma forma simples. Com efeito, uma vez que para qualquer ce que tem inicialmente uma propagação de x_i para O ao longo de i e, finalmente, uma propagação de O para x_f ao longo de f , podemos escrever;

$$G_{if}(x_f, x_i; k) = \frac{\mu}{i\hbar^2 k} T_{if} \exp[ik(x_f - x_i)]. \quad (3.14)$$

Aqui T_{if} compreende todas as contribuições resultantes do caminho de espalhamento na região $A-O-B$ do grafo, ou

$$T_{if} = \left\{ \begin{array}{l} t_O^{(i,f)} \\ t_O^{(i,1)} P_1 \\ t_O^{(i,2)} P_2 \end{array} \right. . \quad (3.15)$$

Como antes, o símbolo ‘{’ representa a divisão de trajetórias, onde se lê

$$T_{if} = t_O^{(i,f)} + t_O^{(i,1)} P_1 + t_O^{(i,2)} P_2. \quad (3.16)$$

O primeiro termo é apenas a amplitude para o caminho direto, ou seja, um tunelamento simples de i para f através de O . O segundo termo representa o tunelamento de i para a ligação 1 (2) e todas as subsequentes trajetórias possíveis que a partícula pode seguir até atingir o ponto f , representados por P_1 e P_2 , a Fig. 3.2 (a).

O raciocínio para obter as duas famílias de trajetórias, P_1 e P_2 , é bastante simples. Tomemos, por exemplo, P_1 : todos esses caminhos começam em $x_1 = 0^+$, viajam ao longo da ligação 1 em direção ao vértice A , sofrendo uma reflexão em A , e depois retornando ao vértice O . Esta parte dos resultados trajetórias em termos $r_A^{(1)} \exp[2ik\ell_1]$. Uma vez que remonta vértice O que pode, ser refletida a partir dele, então vai para o conjunto de caminhos P_1 novamente, ou tunela para a aresta 2, indo assim para a família de caminhos P_2 , ou ainda de tunela para chegar em f , assim, que encerra a parte $A-O-B$. O mesmo tipo de análise é feito para P_2 , então:

$$\left\{ \begin{array}{l} P_1 = r_A^{(1)} \exp[2ik\ell_1] \\ P_2 = r_B^{(2)} \exp[2ik\ell_2] \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} r_O^{(1)} P_1 \\ t_O^{(1,2)} P_2 \\ t_O^{(1,f)} \\ r_O^{(2)} P_2 \\ t_O^{(2,1)} P_1 \\ t_O^{(2,f)} \end{array} \right\}, \quad (3.17)$$

que conduz à equação algébrica

$$\left\{ \begin{array}{l} P_1 = r_A^{(1)} \exp[2ik\ell_1] \left(r_O^{(1)} P_1 + t_O^{(1,2)} P_2 + t_O^{(1,f)} \right) \\ P_2 = r_B^{(2)} \exp[2ik\ell_2] \left(r_O^{(2)} P_2 + t_O^{(2,1)} P_1 + t_O^{(2,f)} \right), \end{array} \right. \quad (3.18)$$

cuja solução é

$$\begin{aligned} lP_1 &= \frac{1}{g} \left\{ r_A^{(1)} t_O^{(1,f)} \exp[2ik\ell_1] + r_A^{(1)} r_B^{(2)} \left(t_O^{(1,2)} t_O^{(2,f)} - r_O^{(2)} t_O^{(1,f)} \right) \exp[2ik(\ell_1 + \ell_2)] \right\} \\ P_2 &= \frac{1}{g} \left\{ r_B^{(2)} t_O^{(2,f)} \exp[2ik\ell_2] + r_A^{(1)} r_B^{(2)} \left(t_O^{(2,1)} t_O^{(1,f)} - r_O^{(1)} t_O^{(2,f)} \right) \exp[2ik(\ell_1 + \ell_2)] \right\}, \end{aligned}$$

para

$$g = \left(1 - r_A^{(1)} r_O^{(1)} \exp[2ik\ell_1] \right) \left(1 - r_B^{(2)} r_O^{(2)} \exp[2ik\ell_2] \right) - r_A^{(1)} r_B^{(2)} t_O^{(1,2)} t_O^{(2,1)} \exp[2ik(\ell_1 + \ell_2)]. \quad (3.19)$$

Da mesma forma, podemos considerar tanto os pontos iniciais e finais na ligação i ($-\infty < x_i, x_f < 0 \in i$), para o qual G_{ii} é dada por

$$G_{ii}(x_f, x_i; k) = \frac{\mu}{i\hbar^2 k} \left\{ \exp[ik|x_f - x_i|] + R_{ii} \exp[-ik(x_f + x_i)] \right\}. \quad (3.20)$$

Neste caso

$$R_{ii} = r_O^{(i)} + t_O^{(i,1)} P_1 + t_O^{(i,2)} P_2. \quad (3.21)$$

As expressões que conduzem à correta P 's de são aqueles em 3.19, onde devemos fazer a substituição óbvia de $t_O^{(s,f)}$ por $t_O^{(s,i)}$ ($s = 1, 2$).

Finalmente, considera-se o ponto final x_f em uma das aresta, por exemplo aresta 1. Assumindo que a origem dessa aresta é pelo vértice O , de modo $0 < x_f < \ell_1$. Então, temos que

$$G_{i1}(x_f, x_i; k) = \frac{\mu}{i\hbar^2 k} \exp[-ikx_i] \left(t_O^{(i,1)} P_1 + t_O^{(i,2)} P_2 \right). \quad (3.22)$$

Claro que aqui não devemos levar em conta qualquer ce para os quais os tunelamentos da partícula chegam a aresta f . Assim, temos para os P 's de:

$$\begin{cases} P_1 = \exp[ikx_f] + r_A^{(1)} \exp[2ik\ell_1] \left(\exp[-ikx_f] + r_O^{(1)} P_1 + t_O^{(1,2)} P_2 \right) \\ P_2 = r_B^{(2)} \exp[2ik\ell_2] \left(r_O^{(2)} P_2 + t_O^{(2,1)} P_1 \right). \end{cases} \quad (3.23)$$

Ao resolver o sistema anterior e substituindo na expressão (3.22), obtemos

$$\begin{aligned} G_{1i}(x_f, x_i; k) = \frac{\mu}{i\hbar^2 kg} \left\{ t_O^{(i,1)} + r_B^{(2)} \left(t_O^{(i,2)} t_O^{(2,1)} - r_O^{(2)} t_O^{(i,1)} \right) \exp[2ik\ell_2] \right\} \\ \times \left\{ \exp[ik(x_f - x_i)] + r_A^{(1)} \exp[ik(2\ell_1 - x_f - x_i)] \right\}, \end{aligned} \quad (3.24)$$

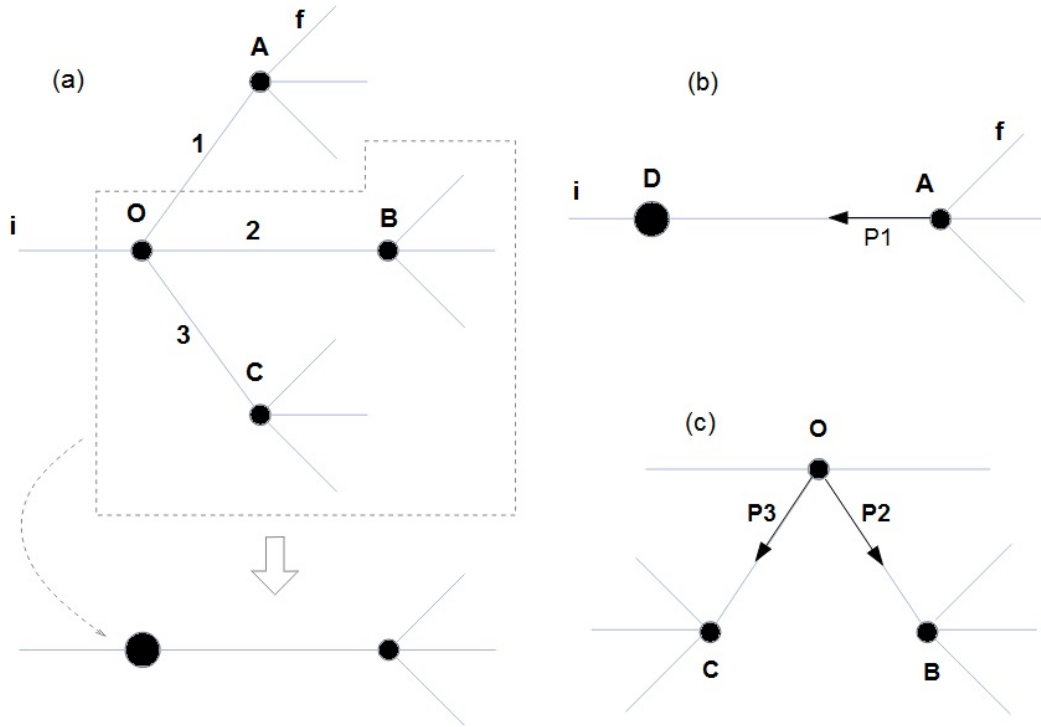
com g dada pela Eq. (3.19)

3.5.2 Estudo do caso grafo árvore

Em seguida discutimos como diminuir os cálculos para um grande grafo quântico decompondo-o em blocos. Por isso, consideramos o exemplo mostrado na Fig. 3.3 (a), um grafo árvore relativamente simples: uma ligação semi-infinita conectada ao vértice O , a partir do qual saem três arestas 1, 2 e 3, que terminando respectivamente, nos vértices

A , B e C . Cada um destes vértices, por sua vez, está ligados a três ligações semi-infinitas.

Figura 3.3: Grafo em árvore. Tomando a região $C—O—B$ com um único vértice D , o grafo original e reduzido a um grafo linear



Fonte: Adaptado de métodos de função de Green na análise de grafos quânticos e caminhadas quânticas (1).

Aqui analisamos a função de Green somente para a posição inicial $-\infty < x_i < 0$ na ligação i e a posição final $0 < x_f < +\infty$ na ligação f , que está conectada ao vértice A , ver Fig. 3.3 (a). Observe que, nesta situação particular, nós não precisamos considerar qualquer caminho de espalhamento que vai para outra ligação antes de f . Pois, nesse caso, a partícula sairia do grafo, sendo impossível voltar a f .

O primeiro passo para simplificar o problema é considerar o bloco inteiro indicado na Fig. 3.3 (a) como um único vértice D . Qualquer informação sobre a estrutura interna dessa região estarão contidas nas amplitudes quânticas do vértice $t_D^{(i,1)}$ e $r_D^{(1)}$. Deste modo, podemos reduzir o gráfico original para um grafo simples ilustrado na Fig. 5 3.3 (b). A partir da dessa figura, temos que a função de Green pode ser escrito como,

$$G_{if}(x_f, x_i; k) = \mu / (i\hbar^2 k) T_{if} \exp[ik(x_f - x_i)],$$

com

$$T_{if} = t_D^{(i,1)} \exp[ik\ell_1] \left(r_A^{(1)} P_1 + t_A^{(1,f)} \right).$$

Em seguida, com base em nossas discussões anteriores, rapidamente percebemos que a família de trajetórias P_1 é dada por

$$P_1 = r_D^{(1)} \exp[2ik\ell_1] \left(r_A^{(1)} P_1 + t_A^{(1,f)} \right),$$

ou

$$P_1 = \frac{r_D^{(1)} t_A^{(1,f)} \exp[2ik\ell_1]}{1 - r_D^{(1)} r_A^{(1)} \exp[2ik\ell_1]}. \quad (3.25)$$

Resta determinar a coeficientes $t_D^{(i,1)}$ e $r_D^{(1)}$. Para isso, podemos fazê-lo com a ajuda do grafo quântico auxiliar da Fig. 3.3 (c). Lembrando que $t_D^{(i,1)}$ e $(r_D^{(1)})$ representam a contribuição para do ce para a partícula ir da ligação semi-infinita i (ligação 1) para a aresta 1 no bloco $B—O—C$. Comparando a Fig.3.3 (c), vemos que $t_D^{(i,1)} = t_O^{(i,1)} + t_O^{(i,3)} P_3 + t_O^{(i,2)} P_2$ e $r_D^{(1)} = r_O^{(1)} + t_O^{(1,3)} P_3 + t_O^{(1,2)} P_2$, onde pelas P 's,

$$\begin{cases} P_3 = r_C^{(3)} \exp[2ik\ell_3] \left(r_O^{(3)} P_3 + t_O^{(3,2)} P_2 + t_O^{(3,1)} \right) \\ P_2 = r_B^{(2)} \exp[2ik\ell_2] \left(r_O^{(2)} P_2 + t_O^{(2,3)} P_3 + t_O^{(2,1)} \right). \end{cases} \quad (3.26)$$

A solução da Eq. (3.26) é dada pela Eq. (3.19) com as substituições apropriadas temos $A \rightarrow C$, $1 \rightarrow 3$ e $f \rightarrow 1$.

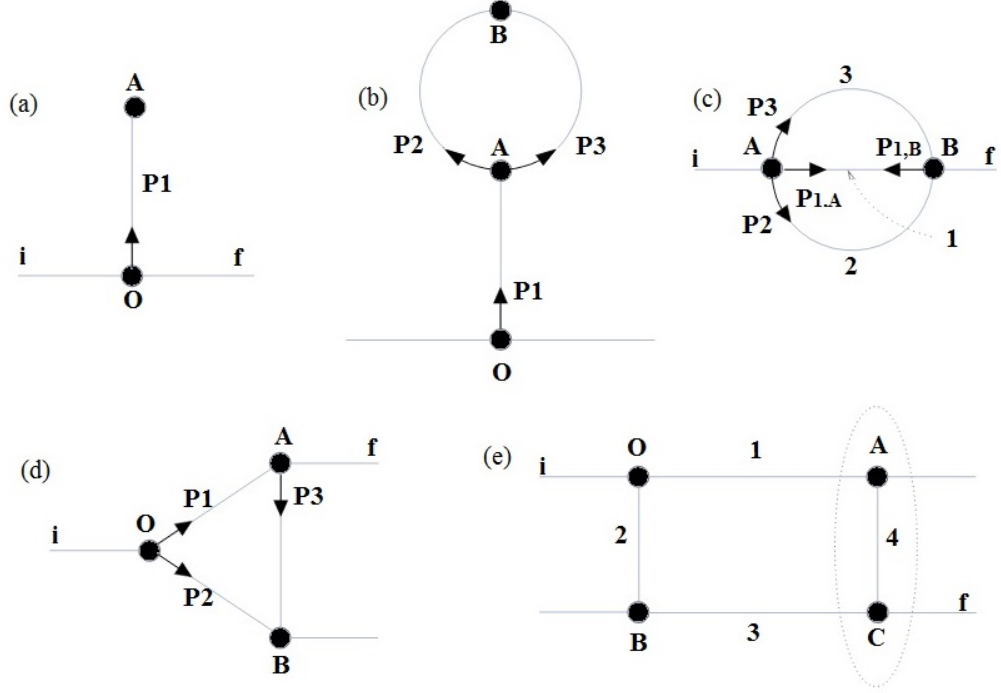
3.5.3 Soluções para função de Green, eliminando, redefinindo ou reagrupamento amplitudes de espalhamento

Uma grande vantagem de escrever a função de Green em termos das amplitudes gerais de espalhamento para cada vértice é que, definindo valores apropriados para o reagrupamento destas quantidades, podemos obter G para alguns grafos com base nas soluções para outras topologias.

Para um vértice j ligado a duas arestas (l_{j1} e l_{j2}), definimos $r_j^{(s)} = 0$ e $t_j^{(s,r)} = 1$ ($s, r = 1, 2$) é equivalente a remover do grafo o vértice j . Por outro lado, se para todos os nós (l_{js}) definirmos $t_j^{(s,r)} = 0$ para os dois vértices j ligados à aresta semi-infinita l_{jr} , em seguida eliminamos l_{jr} a partir da estrutura. Por exemplo, considere o grafo na Fig.

3.4 (a). Obtemos sua função de Green exata G_{if} , G_{ii} e G_{i1} apenas assumindo $t_O^{(i,2)} = t_O^{(1,2)} = 0$ para as soluções do grafo transversal da Fig. 3.2.

Figura 3.4: (a) Grafo com três ligações, (b) o mesmo grafo (a) com o uma estrutura interna no vértice A, (c) um pequeno grafo complexo, (d) e (e) são exemplos de grafos onde a solução do primeiro pode ser usada no segundo.



Fonte: Adaptado de métodos de função de Green na análise de grafos quânticos e caminhadas quânticas (1).

Como para o agrupamento, as funções G 's para o grafo na Fig. 3.4 (b) - se x_i e x_f não estão nas ligações 2 e 3 é obtida da função de Green exata para o grafo na Figura 3.4 (a), basta supor que toda a região A-B-A, é um único vértice, por exemplo C, e fazendo a substituição de $r_A^{(1)} \rightarrow r_C^{(1)}$. A partir da fig. 3.4 (b), vemos que $r_C^{(1)}$ é dada por $r_C^{(1)} = r_A^{(1)} + t_A^{(1,2)} P_2 + t_A^{(1,3)} P_3$, com os P 's obtidos de:

$$\begin{cases} P_2 = r_B^{(2)} \exp[2ik\ell_2] \left(r_A^{(2)} P_2 + t_A^{(2,3)} P_3 + t_A^{(2,1)} \right) \\ \quad + t_B^{(2,3)} \exp[ik(\ell_2 + \ell_3)] \left(r_A^{(3)} P_3 + t_A^{(3,2)} P_2 + t_A^{(3,1)} \right) \\ P_3 = r_B^{(3)} \exp[2ik\ell_3] \left(r_A^{(3)} P_3 + t_A^{(3,2)} P_2 + t_A^{(3,1)} \right) \\ \quad + t_B^{(3,2)} \exp[ik(\ell_2 + \ell_3)] \left(r_A^{(2)} P_2 + t_A^{(2,3)} P_3 + t_A^{(2,1)} \right). \end{cases} \quad (3.27)$$

Consideremos agora o caso apresentado na Fig. 3.4 (c), e G_{11} em que ambos os pontos final e inicial estão na ligação 1, isto é, $0 < x_i, x_f < \ell_1$. Nós definimos $r_C^{(1)}$ ($t_C^{(1,1)}$) como a amplitude quântica resultante para uma partícula chegar ao vértice A pela ligação 1, e sofrer todo o múltiplo espalhamento nas ligações 2 e 3, finalmente sair pelo vértice A(B) pela ligação 1. De maneira análoga definimos $r_D^{(1)}$ e $t_D^{(1,1)}$ para a partícula que chega no vértice B. Então, temos que

$$G_{11}(x_f, x_i; k) = \frac{\mu}{i\hbar^2 k} \left\{ \exp[ik|x_f - x_i|] + \exp[ik(\ell_1 - x_i)] \left(r_D P_{1,B} + t_D P_{1,A} \right) \right. \\ \left. + \exp[ikx_i] \left(r_C P_{1,A} + t_C P_{1,B} \right) \right\}$$

com

$$\begin{cases} P_{1,A} = \exp[ikx_f] + \exp[ik\ell_1] \left(r_D P_{1,B} + t_D P_{1,A} \right) \\ P_{1,B} = \exp[ik(\ell_1 - x_f)] + \exp[ik\ell_1] \left(r_C P_{1,A} + t_C P_{1,B} \right). \end{cases} \quad (3.28)$$

Resolvendo esse sistema a função de Green é escrita como

$$G_{11}(x_f, x_i; k) = \frac{\mu}{i\hbar^2 kg} \left\{ g \exp[ik|x_f - x_i|] + r_C \exp[ik(x_f + x_i)] + r_D \exp[ik(2\ell_1 - x_f + x_i)] \right. \\ + r_C r_D \exp[ik(2\ell_1 + x_f - x_i)] + r_C r_D \exp[ik(2\ell_1 - x_f + x_i)] \\ + \left(1 - t_C \exp[ik\ell_1] \right) \exp[ik(\ell_1 + x_f - x_i)] \\ \left. + \left(1 - t_D \exp[ik\ell_1] \right) \exp[-ik(\ell_1 - x_f + x_i)] \right\}, \quad (3.29)$$

onde $g = \left(1 - t_C \exp[ik\ell_1] \right) \left(1 - t_D \exp[ik\ell_1] \right) - r_C r_D \exp[2ik\ell_1]$.

Finalmente as amplitudes são dadas por $r_C = r_A^{(1)} + t_A^{(1,2)} P_2 + t_A^{(1,3)} P_3$, com P_2 e P_3 sendo

$$\left\{ \begin{array}{l} P_2 = r_B^{(2)} \exp[2ik\ell_2] \left(r_A^{(2)} P_2 + t_A^{(2,3)} P_3 + t_A^{(2,1)} \right) \\ \quad + t_B^{(2,3)} \exp[ik(\ell_2 + \ell_3)] \left(r_A^{(3)} P_3 + t_A^{(3,2)} P_2 + t_A^{(3,1)} \right) \\ P_3 = r_B^{(3)} \exp[2ik\ell_3] \left(r_A^{(3)} P_3 + t_A^{(3,2)} P_2 + t_A^{(3,1)} \right) \\ \quad + t_B^{(3,2)} \exp[ik(\ell_2 + \ell_3)] \left(r_A^{(2)} P_2 + t_A^{(2,3)} P_3 + t_A^{(2,1)} \right) \end{array} \right. . \quad (3.30)$$

e $t_C = t_A^{(1,2)} P_2 + t_A^{(1,3)} P_3$, onde agora os P 's satisfazem o sistema de equações

$$\left\{ \begin{array}{l} P_2 = r_B^{(2)} \exp[2ik\ell_2] \left(r_A^{(2)} P_2 + t_A^{(2,3)} P_3 \right) \\ \quad + t_B^{(2,3)} \exp[ik(\ell_2 + \ell_3)] \left(r_A^{(3)} P_3 + t_A^{(3,2)} P_2 \right) + \exp[ik\ell_2] t_B^{(2,1)} \\ P_3 = r_B^{(3)} \exp[2ik\ell_3] \left(r_A^{(3)} P_3 + t_A^{(3,2)} P_2 \right) \\ \quad + t_B^{(3,2)} \exp[ik(\ell_2 + \ell_3)] \left(r_A^{(2)} P_2 + t_A^{(2,3)} P_3 \right) + \exp[ik\ell_3] t_B^{(3,1)} \end{array} \right. . \quad (3.31)$$

As amplitudes r_D e t_D são obtidas das mesmas expressões para r_C e t_C pela troca dos índices $A \leftrightarrow B$.

E, se para ambos os grafos da fig. 3.4 (d) e (e), assumindo que os pontos inicial e final estão nas ligações semi-infinitas i e f , respectivamente, a função de Green é:

$$G_{fi}(x_f, x_i; k) = \frac{\mu}{i\hbar^2 k} T_{if} \exp[ik(x_f - x_i)]. \quad (3.32)$$

O Coeficiente T_{if} é dado por $T_{if} = t_O^{(i,1)} P_1 + t_O^{(i,2)} P_2$.

Para o caso da Figura 3.4 (d), P_1 e P_2 são obtidos dos seguinte sistema

$$\left\{ \begin{array}{l} P_1 = r_A^{(1)} \exp[2ik\ell_1] \left(r_O^{(1)} P_1 + t_O^{(1,2)} P_2 \right) + \exp[ik\ell_1] \left(t_A^{(1,3)} P_3 + t_A^{(1,f)} \right) \\ P_2 = r_B^{(2)} \exp[2ik\ell_2] \left(r_O^{(2)} P_2 + t_O^{(2,1)} P_1 \right) \\ \quad + t_B^{(2,3)} \exp[ik(\ell_2 + \ell_3)] \left(r_A^{(3)} P_3 + t_A^{(3,f)} \right) \\ \quad + t_B^{(2,3)} t_A^{(3,1)} \exp[ik(\ell_1 + \ell_2 + \ell_3)] \left(r_O^{(1)} P_1 + t_O^{(1,2)} P_2 \right) \\ P_3 = r_B^{(3)} \exp[2ik\ell_3] \left(r_A^{(3)} P_3 + t_A^{(3,f)} \right) \\ \quad + t_B^{(3,2)} \exp[ik(\ell_2 + \ell_3)] \left(r_O^{(2)} P_2 + t_O^{(2,1)} P_1 \right) \\ \quad + r_B^{(3)} t_A^{(3,1)} \exp[ik(\ell_1 + 2\ell_3)] \left(r_O^{(1)} P_1 + t_O^{(1,2)} P_2 \right), \end{array} \right. \quad (3.33)$$

com P_3 uma família auxiliar de trajetórias infinitas, introduzidas apenas para ajudar nas definições recursivas de P_1 e P_2 (ver Fig. 3.4 (d)). A solução do sistema acima colocado na expressão para T_{if} produz a função de Green exata final.

Para G_{if} no grafo da Fig. 3.4 (e) nós podemos usar o mesmo conjunto de equações acima, se nós tratamos a região que compreende os vértices A e C da Fig.3.4 (e) como um único vértice como é ilustrado pelas linhas pontilhadas.

Portanto, usando a análise anterior, descobrimos que precisamos apenas fazer as seguintes substituições na expressão da função de Green para o grafo da Fig. 3.4 (d):

$$\begin{aligned} r_A^{(1)} &\rightarrow r_A^{(1)} + t_A^{(1,4)} r_C^{(4)} t_A^{(4,1)} \exp[2ik\ell_4]/g, \\ t_A^{(1,f)} &\rightarrow t_A^{(1,4)} t_C^{(4,f)} \exp[ik\ell_4]/g, \\ t_A^{(1,3)} &\rightarrow t_A^{(1,4)} t_C^{(4,3)} \exp[ik\ell_4]/g, \\ r_A^{(3)} &\rightarrow r_C^{(3)} + t_C^{(3,4)} r_A^{(4)} t_C^{(4,3)} \exp[2ik\ell_4]/g, \\ t_A^{(3,f)} &\rightarrow t_C^{(3,f)} + t_C^{(3,4)} r_A^{(4)} t_C^{(4,f)} \exp[2ik\ell_4]/g, \\ t_A^{(3,1)} &\rightarrow t_C^{(3,4)} t_A^{(4,1)} \exp[ik\ell_4]/g, \end{aligned}$$

$$\text{com } g = 1 - r_A^{(4)} r_C^{(4)} \exp[2ik\ell_4].$$

Capítulo 4

Construção da Função de Green Usando a Matriz de Adjacência

Nesse Capítulo, apresentaremos a construção da função de Green exata para casos particulares de grafos, utilizando a matriz de adjacência do grafo. Esse método representa a primeira contribuição inédita do nosso trabalho.

Apresentamos no capítulo anterior um método para a construção da função de Green exata, porem nesse método a construção das famílias de trajetórias acontece de acordo com a escolha do autor, ou seja, não há um padrão que mapeie a construção dessas famílias, existe uma liberdade no critério de escolha para somar todos os possíveis caminhos.

Esse novo método para construção das famílias é feito baseado na matriz de adjacência do grafo e podemos construir a função de Green exata para um grafo arbitrário simples, independente da complexidade do sistema, seguindo as mesmas regra e um único processo.

4.1 Método Utilizando a Matriz de Adjacência

Tomemos um grafo $G(V, L)$ que consiste em v vértices conectados por l arestas. Enfatizando trabalhamos aqui com grafos simples, ou seja, sem laços ou vários vértices conectados. Como descrevemos anteriormente, ressaltamos aqui para maior clareza a topologia do grafo, ou seja, a maneira pela qual os vértices estão ligados é dado pela sua matriz de adjacência.

$$A_{i,j} = \begin{cases} 1, & \text{se } (i,j) \in L, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (4.1)$$

A valência do vértice é descrita por

$$v_i = \sum_{j=1}^{|V|} A_{i,j}. \quad (4.2)$$

O grau do vértice fornece o número de famílias de trajetórias em cada vértice e o número de famílias de trajetórias é o dobro do número de arestas.

$$\text{número de P's} = 2|L| = \sum_i v_i = \sum_{i,j=1}^{|V|} A_{i,j}. \quad (4.3)$$

4.1.1 Regras para Construir a Função de Green Exata para Grafos Quânticos

1. Em cada vértice i está associada uma família de trajetórias P_{ij} para cada aresta conectada a este vértice;
2. Na aresta onde estão x_i e x_j , devemos trabalhar separadamente. Quando x_i e x_f estão na mesma aresta, temos a contribuição $e^{ik|x_f-x_i|}$;
3. A matriz de adjacência fornece o número de família de trajetórias em cada vértice;
4. Na aresta entre os vértices i e j , as famílias de trajetórias são dadas por

$$P_{ij} = e^{ikl_{ij}} \left(r_j^{[(i,j),(j,i)]} A_{ji} P_{ji} + \sum_{k \neq i} t_j^{[(i,j),(j,k)]} A_{jk} P_{jk} \right),$$

$$= e^{ikl_{ij}} \sum_{k=1}^{|V|} S_j^{[(i,j),(j,k)]} A_{jk} P_{jk},$$

onde

$$S_j^{[(i,j),(j,i)]} = r_j^{[(i,j),(j,i)]}, \quad S_j^{[(i,j),(j,k)]} = t_j^{[(i,j),(j,k)]}.$$

5. Para grafos fechados, ou seja, aqueles sem ligações semi-infinita, a função de Green é dada por

$$G(x_i, x_f; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \left\{ \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\rho} e^{ik|x_f - x_i|} + e^{ikx_i} \sum_{k=1}^{|V|} S_{\alpha}^{[(i,j),(j,k)]} A_{\alpha k} P_{\alpha k} e^{ik(l_{\alpha\beta}) - x_i} + e^{ikx_i} \sum_{k=1}^{|V|} S_{\beta}^{[(i,j),(j,k)]} A_{\beta k} P_{\beta k} \right\}.$$

6. Para espalhamento em grafos abertos a função de Green é

$$G(x_i, x_f; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} e^{ik(x_i + x_f)} + \sum_{k=1}^{|V|} S_{\alpha}^{[(i,j),(j,k)]} A_{\alpha k} P_{\alpha k}. \quad (4.4)$$

Podemos definir uma matriz $n \times n$ das famílias de trajetórias dado por

$$P = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots & P_{1n} \\ P_{21} & P_{22} & \dots & P_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P_{n1} & P_{n2} & \dots & P_{nn} \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

A matriz de grafo específico pode ser escrita usando o produto Hadamard. Dada duas matrizes $m \times n$ o produto Hadamard é definido por:

$$(M \circ N)_{ij} = (M)_{ij} (N)_{ij} \quad (4.6)$$

Então, nós temos

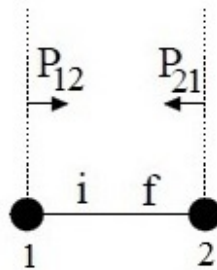
$$\begin{aligned}
 P_G = P \circ A &= \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots & P_{1n} \\ P_{21} & P_{22} & \dots & P_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P_{n1} & P_{n2} & \dots & P_{nn} \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} \end{pmatrix} = & (4.7) \\
 &= \begin{pmatrix} A_{11}P_{11} & A_{12}P_{12} & \dots & A_{1n}P_{1n} \\ A_{21}P_{21} & A_{22}P_{22} & \dots & A_{2n}P_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1}P_{n1} & A_{n2}P_{n2} & \dots & A_{nn}P_{nn} \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

4.2 Estudo de alguns grafos com topologias distintas

4.2.1 Grafo Linear

Considerando novamente caso onde a partícula é transmitida através de dois vértices como na Figura 4.1

Figura 4.1: Representação das famílias de trajetórias



Fonte: A autora

Para obtermos a função de Green, devemos somar todos os caminhos possíveis de espalhamento para a partícula sair do ponto x_i e chegar ao ponto x_f .

A partícula está inicialmente em i na figura 4.1 ela deixa esse ponto e vai até o vértice 1 onde ela será refletida, (pois nesse caso ela não possui uma ligação mesmo que semi-infinita que faria ela tunelar) e $W_{c.e.}$ ganha a contribuição $r_1^{[(2,1),(1,2)]}$, ou seja, o coeficiente de reflexão quando a partícula percorre o caminho no sentido do vértice 2 para o vértice 1, onde é refletida fazendo a trajetória de volta de 1 para 2. Quando a partícula chega no vértice 2, novamente é refletida e $W_{c.e.}$ ganha a contribuição $r_2^{[(1,2),(2,1)]}$, entre os dois vértices a partícula pode sofrer múltiplas reflexões.

Para obter a função de Green exata vimos que é necessário encontrar todos os infinitos caminhos possíveis que iniciam em x_i e terminam em x_f para identificar as amplitudes de espalhamento ao longo de cada caminho e finalmente somar todas as contribuições como indicado na equação 3.5.

Em um grafo quântico geral, esta tarefa pode ser bastante complicada. Porém, utilizamos um procedimento que simplifica drasticamente o cálculo, reagrupando os infinitos caminhos possíveis em famílias finitas de espalhamento P_{ij} . A escolha dessas famílias como mencionado anteriormente é feita através da matriz adjacência que além de nos permitir a escolha de forma genérica garante-nos que realmente estamos somando todos os caminhos possíveis.

Então para o grafo apresentado na Figura 4.1, temos a matriz de adjacência:

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Que fornece a função de Green

$$G(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \left\{ e^{ik|x_f-x_i|} + e^{ikx_i} r_1^{[(2,1),(1,2)]} A_{12} P_{12} + e^{ik(l_{12}-x_i)} r_2^{[(1,2),(2,1)]} A_{21} P_{21} \right\}. \quad (4.8)$$

Com suas respectivas famílias de trajetórias:

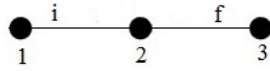
$$P_{12} = e^{ikx_f} + e^{ik(l_{12}-x_f)} r_2^{[(1,2),(2,1)]} A_{21} P_{21}. \quad (4.9)$$

$$P_{21} = e^{ik(l_{12}-x_f)} + e^{ikx_f} r_1^{[(2,1),(1,2)]} A_{12} P_{12}. \quad (4.10)$$

Optamos por manter a notação com o coeficiente $A_{i,j}$, apenas para fins didáticos, já que os correspondentes desses elementos na matriz de adjacência é 1, pois os elementos que são nulos não contribuem para nossa construção.

No próximo exemplo, ainda consideramos um grafo linear, porém, ao invés de 2 vértices esse grafo possui 3 vértices, conforme a Figura 4.2

Figura 4.2: Grafo linear com 3 vértices e sem ligações semi-infinitas



Fonte: A autora

Nesse caso a partícula que está no ponto x_i sob a aresta l_{12} , vai até o vértice 1, onde é refletida e $W_{c.e.}$ ganha a contribuição r_1 e continua sob a ligação l_{12} , quando ela chega no vértice 2, pode ser refletida novamente r_2 voltando pela mesma ligação, ou pode tunelar o vértice 2, nesse caso $W_{c.e.}$ adquire a contribuição do coeficiente de transmissão t^2 e percorre a ligação l_{23} até encontrar o ponto x_f , ou chegar no vértice 3, onde poderá ser refletida novamente com a contribuição r_3 . Como no caso anterior utilizaremos a matriz de adjacência para somar todos os caminhos possíveis e escrever sua função de Green exata.

A matriz de adjacência para este grafo, é dada então por:

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Podemos escrever a função de Green em termos de seus coeficientes de reflexão e transmissão, como na expressão abaixo

$$G(x_f, x_i; k) = \frac{\mu}{i\hbar^2 k} \left\{ e^{ikx_i} r_1^{[(2,1),(1,2)]} A_{12} P_{12} + e^{ik(l_{12}-x_i)} (r_2^{[(1,2),(2,1)]} + t_2^{[(1,2),(2,3)]} A_{23} P_{23}) \right\}. \quad (4.12)$$

Onde as respectivas famílias são:

$$P_{12} = e^{ikl_{12}} (r_2^{[(1,2),(2,1)]} A_{21} P_{21} t_2^{[(1,2),(2,3)]}). \quad (4.13)$$

$$P_{21} = e^{ik(l_{12} r_1^{[(2,1),(1,2)]} A_{12} P_{12}) \quad (4.14)$$

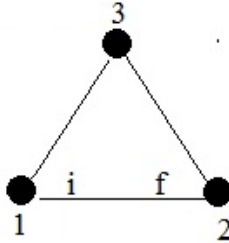
$$P_{23} = e^{ikx_f} + e^{ik(l_{23} r_3^{[(2,3),(3,2)]} A_{32} P_{32}$$

$$P_{32} = e^{ik(l_{23}-x_f)} + e^{ikl_{23}} (r_2^{[(3,2),(2,3)]} A_{23} P_{23} + t_2^{[(3,2),(2,1)]} A_{21} P_{21})$$

4.2.2 Grafo Triangular

Agora nesse próximo exemplo escolhemos um grafo que também contém três vértices, porém, tem três ligações conforme a Figura 4.3, percebemos que embora a matriz de adjacência possua o mesmo número de linhas e colunas, afinal estamos calculando para grafos com o mesmo número de vértices, o número de famílias de trajetórias será diferente pois nesse caso a partícula tem maior número de possibilidades para percorrer o caminho partindo de x_i para chegar em x_f

Figura 4.3: Grafo triangular



Fonte: A autora

A partícula parte do ponto x_i e percorre todas as trajetórias possíveis para alcançar o ponto x_f , que nesse caso se encontra na mesma aresta que x_i . Como apresentamos nas

regras para construção da função de Green, quando isso ocorre temos a contribuição de $e^{ik|x_f-x_i|}$.

Observe que quando a partícula sai do ponto x_1 chegando no vértice 1, ela pode ser tanto refletida r_1 quanto transmitida t_1 , no primeiro caso ela retorna pela mesma ligação l_{12} para alcançar o vértice 2, ou o ponto x_f , no segundo caso a partícula tunela o vértice 1 passando para a ligação l_{13} até alcançar o vértice 3, onde novamente a partícula pode ser refletida r_3 ou transmitida t_3 , esse processo pode ocorrer repetidas vezes, vamos então calcular todos os possíveis caminho através de:

Matriz de Adjacência

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

Sua função de Green fica

$$G(x_f, x_i; k) = \frac{\mu}{i\hbar^2 k} \left\{ e^{ik|x_f-x_i|} e^{ikx_i} (r_1^{[(2,1),(1,2)]} A_{12} P_{12} + t_1^{[(2,1),(1,3)]}) \right. \\ \left. + e^{ik(l_{12}-x_i)} (r_2^{[(1,2),(2,1)]} + t_2^{[(1,2),(2,3)]} A_{23} P_{23}) \right\}$$

Com

$$P_{12} = e^{ikx_f} + e^{ikl_{12}} (r_2^{[(1,2),(2,1)]} A_{21} P_{21} t_2^{[(1,2),(2,3)]}) \quad (4.16)$$

$$P_{21} = e^{ik(l_{12}-x_f)} + e^{ikl_{12}} (r_1^{[(2,1),(1,2)]} A_{12} P_{12} + t_1^{[(2,1),(1,3)]} A_{13} P_{13}) \quad (4.17)$$

$$P_{13} = e^{ikl_{13}} (r_3^{[(1,3),(3,1)]} A_{31} P_{31} + r_3^{[(1,3),(3,1)]} A_{31} P_{31} t_3^{[(1,3),(3,2)]} A_{32} P_{32}), \quad (4.18)$$

$$P_{31} = e^{ikl_{13}} (r_1^{[(3,1),(1,3)]} A_{13} P_{13} + r_1^{[(3,1),(1,3)]} A_{13} P_{13} + t_1^{[(3,1),(1,2)]} A_{12} P_{12}), \quad (4.19)$$

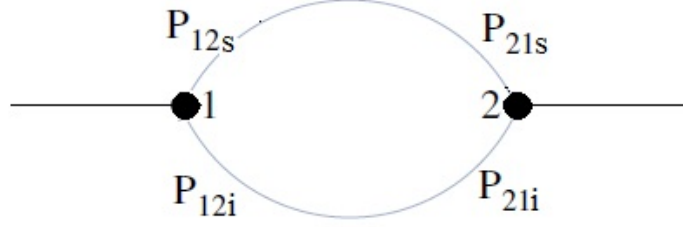
$$P_{32} = e^{ikl_{23}} (r_2^{[(3,2),(2,3)]} A_{23} P_{23} + t_2^{[(3,2),(2,1)]} A_{21} P_{21}), \quad (4.20)$$

$$P_{23} = e^{ikl_{23}} (r_3^{[(2,3),(3,2)]} A_{32} P_{32} + t_3^{[(2,3),(3,1)]} A_{31} P_{31}) \quad (4.21)$$

4.2.3 Grafo Anel

Nessa figura consideramos uma grafo do tipo anel, possuindo dois vértices ligados por duas arestas, ou seja, ele não é um grafo simples Nesse grafo anel o ponto inicial x_i está em uma ligação semi-infinita, então quando a partícula se desloca para chegar ao

Figura 4.4: Grafo anel com dois vértices



Fonte: A autora

vértice 1 ela será apenas transmitida t_1 , pois se for refletida ela irá para o infinito nunca mais retornando à ligação de maneira que possibilite esta encontrar o ponto x_f , um vez que a partícula é transmitida através do vértice 1, ela pode escolher a aresta superior P_{ijs} ou a ligação inferior P_{iji} para alcançar o vértice 2, em ambos os casos quando chegar em 2 ela poderá ser transmitida t_2 alcançando x_f ou refletida r_2 e novamente fazer opção entre as ligações inferior e superior. Nesse caso a função de Green poderia ser escrita da seguinte forma:

$$G(x_f, x_i; k) = \frac{\mu}{i\hbar^2 k} T_{if} e^{ik(x_f+x_i)},$$

com

$$T_{if} = t_1^{[(i,1),(1,2)_s]} P_{12}^s + t_1^{[(i,1),(1,2)_i]} P_{12}^i,$$

$$P_{12}^s = e^{ikt_{12}^s} (r_2^{[(1,2)_s,(2,1)_s]} P_{21}^s t_2^{[(1,2)_s,(2,1)_i]} P_{21}^i + t_2^{[(1,2)_s,(2,f)]}), \quad (4.22)$$

$$P_{12}^i = e^{ikt_{12}^i} (r_2^{[(1,2)_i,(2,1)_i]} P_{21}^i t_2^{[(1,2)_i,(2,1)_s]} P_{21}^s + t_2^{[(1,2)_s,(2,f)]}), \quad (4.23)$$

$$P_{21}^s = e^{ikt_{12}^s} (r_1^{[(2,1)_s,(1,2)_s]} P_{12}^s t_1^{[(1,2)_2,(2,1)_i]} P_{12}^i, \quad (4.24)$$

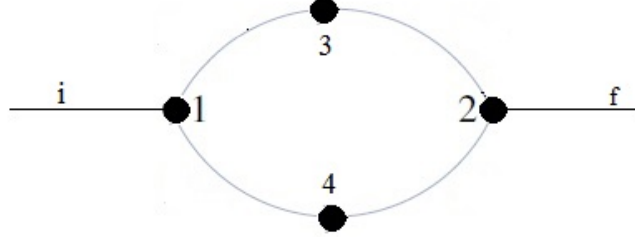
$$P_{21}^i = e^{ikt_{12}^i} (r_1^{[(2,1)_i,(1,2)_i]} P_{12}^i t_1^{[(2,1)_i,(1,2)_s]} P_{12}^s). \quad (4.25)$$

4.2.4 Grafo Anel Utilizando a Matriz de Adjacência

Para escrever a função de Green para esse grafo utilizando a matriz adjacência como estamos propondo acrescentamos dois vértices, sendo um na ligação superior e um

na ligação inferior, transformando dessa forma um grafo não simples em um grafo simples, veja na Figura 4.5 como fica essa representação.

Figura 4.5: Grafo anel com inserção dos vértices 3 e 4



Fonte: A autora

Podemos agora escrever a matriz de adjacência do grafo, que usaremos na construção de sua função de Green.

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & A_{14} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & A_{24} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & A_{34} \\ A_{41} & A_{42} & A_{43} & A_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.26)$$

E a função de Green para esse caso é

$$G(x_f, x_i; k) = \frac{\mu}{i\hbar^2 k} \left\{ e^{ik(x_i+x_f)} (t_1^{[(i,1),(1,3)]} A_{13} P_{13} + r_3^{[(1,3),(3,1)]} A_{31} P_{31} \right. \\ + t_3^{[(3,2),(2,4)]} A_{24} P_{24} + t_3^{[(3,2),(2,f)]}) + t_1^{[(i,1),(1,4)]} A_{14} P_{14} \\ \left. + r_4^{[(4,1),(1,4)]} A_{14} P_{14} + (t_4^{[(4,2),(2,3)]} A_{23} P_{23} + t_2^{[(4,2),(2,f)]}) \right\} \quad (4.27)$$

Com

$$P_{13} = e^{ikl_{13}} (r_3^{[(1,3),(3,1)]} A_{31} P_{31} + t_3^{[(1,3),(3,2)]} A_{32} P_{32}) \quad (4.28)$$

$$P_{32} = e^{ikl_{23}} (r_2^{[(3,2),(2,3)]} A_{23} P_{23} + t_2^{[(3,2),(2,4)]} A_{24} P_{24} + t_2^{[(3,2),(2,f)]}) \quad (4.29)$$

$$P_{24} = e^{ikl_{24}} (r_4^{[(2,4),(4,2)]} A_{42} P_{42} + t_4^{[(2,4),(4,1)]} A_{41} P_{41}) \quad (4.30)$$

$$P_{41} = e^{ikl_{14}} (r_1^{[(4,1),(1,4)]} A_{14} P_{14} + t_1^{[(4,1),(1,3)]} A_{13} P_{13} + t_1^{[(4,1),(1,f)]}) \quad (4.31)$$

$$P_{31} = e^{ikl_{13}} (r_1^{[(3,1),(1,3)]} A_{13} P_{13} + t_1^{[(3,1),(1,4)]} A_{14} P_{14}) \quad (4.32)$$

$$P_{23} = e^{ikl_{23}} (r_3^{[(2,3),(3,2)]} A_{32} P_{32} + t_3^{[(2,3),(3,1)]} A_{31} P_{31}) \quad (4.33)$$

$$P_{42} = e^{ikl_{24}} (r_2^{[(4,2),(2,4)]} A_{24} P_{24} + t_2^{[(4,2),(2,3)]} A_{23} P_{23} + t_2^{[(4,2),(2,f)]}) \quad (4.34)$$

$$P_{14} = e^{ikl_{14}} (r_4^{[(1,4),(4,1)]} A_{41} P_{41} + t_4^{[(1,4),(4,2)]} A_{42} P_{42}) \quad (4.35)$$

Dessa forma percebemos que o método é válido mesmo quando estamos trabalhando com um grafo não simples, pois poderemos adicionar a eles vértices que irão nos auxiliar na descrição. Vale enfatizar que os vértices adicionados não interferem na dinâmica quântica do grafo, pois eles são do tipo Neumann de valência 2, sendo que nesse caso $r=0$ e $t=1$.

4.3 Autoestados e Estados de Espalhamento em Grafos Quânticos

Existem diferentes técnicas que permitem a obtenção da função de Green, Porém, em determinados contextos o cálculo da função de onda pode ser demorado. Assim, a pergunta natural é com que facilidade podemos extrair de G , o sistema de auto valores, auto estados e estados de espalhamento, o que permitiria ignorar a abordagem mais tradicional de resolver diretamente a equação de Schrödinger.

As experiências envolvendo espalhamento e tunelamento quântico apresentam resultados que embasam boa parte do conhecimento possuído atualmente sobre a estrutura dos átomos, núcleos e da natureza das partículas com suas interações (47). Os dados obtidos nestas experiências são usados para testar as previsões feitas por modelos baseados na mecânica quântica, nos quais alguma forma para o potencial de interação é assumida como atuante, ou seja, esses modelos assumem formas que podem ser divididas em regiões espaciais para os potenciais de interação entre as partículas onde eles podem ser aproximados por patamares constantes.

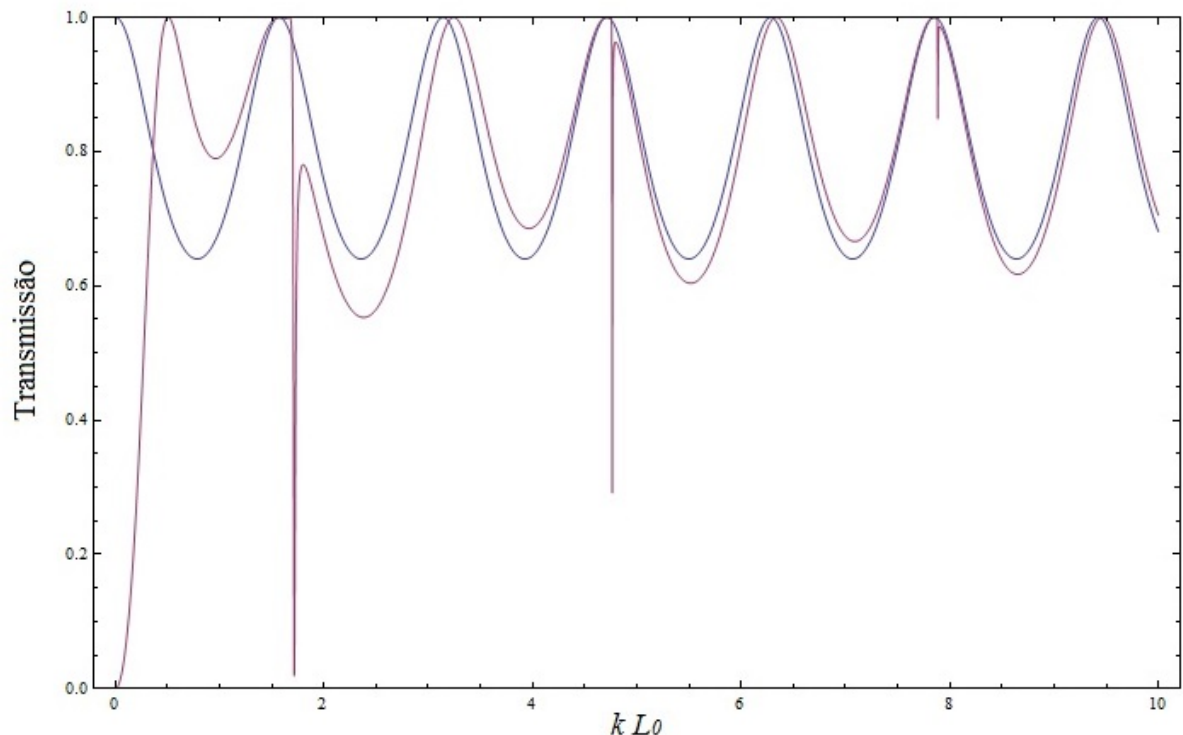
Para estudar as propriedades ondulatórias associadas a propagação de uma partícula que incide sobre um potencial $V(x)$ e se movimenta unidimensionalmente com energia E , normalmente se resolve a equação de Schrödinger independente do tempo

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (4.36)$$

Se o potencial em questão for real então a única possibilidade de a partícula incidir nele é através de reflexão e transmissão, esses coeficientes são comumente encontrados calculando o fluxo de probabilidade.

Para validar o método estudado, fizemos um comparativo com um trabalho de Walter e Smilansky (14) publicado em 2013, nesse artigo os autores calculam as amplitudes de espalhamento para o grafo anel mencionado na seção 4.2.3, utilizando o método de resolução da equação de Schrödinger e fazem um estudo de ressonância no grafo, então, reproduzimos a mesma análise, porém, com uso do método da função de Green e a matriz de adjacência do grafo consideramos o grafo simples da Figura 4.5, e inserimos nele dois vértices nas arestas superior e inferior respectivamente, ressaltando que estes não interferem na dinâmica do sistema por se tratarem de vértices de Neumann acabam não contribuindo para o resultado da função de Green. O caso utilizado possui ligação semi-infinitas onde podemos considerar a função de Green exata como a amplitude total de espalhamento, descrita em (4.17). Com uma possibilidade de entrada no vértice 1 e uma de saída no vértice 4. A probabilidade total depende então unicamente dos coeficientes de transmissão e reflexão de cada vértice, onde uma partícula pode ser transmitida ou refletida da ligação semi-infinita i para a ligação semi-infinita j .

Figura 4.6: Probabilidade de espalhamento para o grafo anel com quatro ligações da Figura 4.5



Fonte: A autora

As amplitudes de transmissão e reflexão são as entradas da matriz de espalhamento para o grafo anel e da mesma forma que Walter e Smilansky identificamos ressonâncias como os polos da matriz de espalhamento. As partes reais destes valores k determinam o

número de onda onde ocorrem as ressonâncias e as partes imaginários são proporcionais às larguras de ressonância.

Percebemos que estrutura de ressonância depende da razão entre o comprimento das arestas do grafo, pois inicialmente consideramos ligações com comprimentos iguais, isto é $l_1 = l_2 = l_3 = l_4 = L_0$. Na Figura 4.6 observamos o conjunto de polos da matriz de espalhamento corresponde aos estados incorporados no espectro contínuo na curva em azul onde se apresenta um conjunto ressonâncias com funções de onda que desaparecem nas arestas e, portanto, também nos vértices. Esse padrão apresentado para a probabilidade de espalhamento da partícula observado na curva em azul, também foi verificado no trabalho dos autores citados

No entanto, quando acrescentamos uma pequena perturbação ao sistema, ou seja consideramos o caso onde as arestas passam a ter comprimentos diferentes, por exemplo sejam: $l_1 = L_0(1 + \epsilon)$; $l_2 = L_0(1 - \epsilon)$; $l_3 = L_0$; $l_4 = L_0$;, com $\epsilon = \frac{\pi}{15}$. Observamos conforme o espectro na curva em vermelho da Figura 4.6 que se $n\epsilon$ for pequeno, a mudança nas ressonâncias vistas anteriormente são pouco afetadas, porém, um novo conjunto de ressonâncias aparece, e a sua posição, coincide aproximadamente, com as primeiras ressonâncias. Ou seja, a partícula fica confinada um tempo maior nos picos observados, da mesma forma que o resultado encontrado na citada referência. Com a ideia de que ϵ é uma pequena perturbação isso pode ser explicado, com $k \approx \frac{n\pi}{L_0}$ existem outros pólos no plano complexo fazem as primeiras ressonâncias mover-se ligeiramente. Os polos que correspondem a estados ligados estão se movendo para longe do eixo real, com pequenas partes imaginárias, levando a oscilações muito estreitas visíveis dentro das amplas ressonâncias.

O mecanismo que produz as ressonâncias presentes na curva vermelha é análogo ao produzir as ressonâncias "Feshbach" (14) na teoria de espalhamento. No nosso caso o parâmetro que é variado e transforma o estado ligado a uma ressonância é a relação entre as ligações do grafo. No entanto, o conjunto completo de ressonâncias que aparece apenas para uma proporção irracional não é uma particularidade do grafo mas é conhecido em vários outros problemas de caos quântico.

Capítulo 5

Conclusão

Nesse trabalho mostramos como obter a função de Green exata para grafos quânticos utilizando a matriz de adjacência. Como a função de Green é dada por uma soma de famílias de trajetórias definidas pelas amplitudes de reflexão e transmissão da partícula quando encontra um vértice, e estas são mostradas na matriz de adjacência do grafo, nosso método permite a construção do conjunto de famílias baseadas nessa matriz, de forma de cada elemento conectado contribui, se observado os conjuntos de famílias, assim como as funções de Green apresentadas no trabalho mostram o coeficiente A_{ij} (ver equação 4.10).

Se a função de Green for construída da forma que apresentamos um dos aspectos importante, é que para qualquer grafo ela é construída de forma única, considerando que na literatura não encontramos regras para construção das famílias que são usadas para obter os coeficientes de transmissão e reflexão, estes são a única dependência para calcular a probabilidade total de espalhamento e observamos as ressonâncias identificadas como polos na matriz de espalhamento. Esse resultado que possibilita a construção da função de Green juntamente com o conjunto de famílias de maneira única elenca algumas possibilidades, sendo uma delas a construção de um programa para o cálculo da função de Green de qualquer grafo simples, já que este pode ser mapeado pela matriz de adjacência, ou seja, a maneira que apresentamos para a construção dessa função é genérica diferentemente dos estudos onde a construção da função de Green é feita para cada caso.

Outro aspecto importante é apresentado na construção de famílias para o caso do grafo anel (seção 4.2.3), em um primeiro momento consideramos um grafo que não é simples, no entanto, ao incluirmos dois vértices como na figura 4.5, transformamos esse grafo em um grafo simples e mostramos que o resultado obtido para esse novo grafo, embora sua matriz seja modificada, é equivalente aquele do grafo anel com dois vértices. Dessa forma sugerimos para trabalhos futuros o estudo de transporte quântico utilizando essa construção da função de Green através da matriz de adjacência do grafo usando evolução de pacotes de onda.

Referências Bibliográficas

(1) F. M. Andrade, Métodos de função de Green na análise de grafos quânticos e caminhadas quânticas, tese de doutorado, Universidade Federal do Paraná (UFPR) (2009).

(2) N. L. Biggs,; E. K. Lloyd, e R. J. Wilson, Graph Theory 1736-1936. 1. ed. New York: Clarendon Press, (1998).

(3) S. Alexander. Superconductivity of networks. A percolation approach to the effects of disorder. Phys. Rev. B 27, 3, 1541 (1983). doi: 10.1103/PhysRevB.27.1541.

(4) P. W. Anderson. New method for scaling theory of localization. II. Multichannel theory of a "wire" and possible expansion to higher dimensionality. Phys. Rev. B 23, 10, 4828 (1981). doi: 10.1103/PhysRevB.23.4828.

(5) B. Shapiro. Renormalization Group Transformation for the Anderson Transition. Phys. Rev. Lett. 48, 12, 823 (1982). doi: 10.1103/PhysRevLett.48.823.

(6) R. Klesse e M. Metzler. Spectral Compressibility at the Metal-Insulator Transition of the Quantum Hall Effect. Phys. Rev. Lett. 79, 4, 721 (1997). doi: 10.1103/PhysRevLett.79.721.

(7) J. Vidal, G. Montambaux e B. Doucot. Transmission through quantum networks. Phys. Rev. B 62, 24, R16294 (2000). doi: 10.1103/PhysRevB.62.R16294.

(8) P. Exner. Contact interactions on graph superlattices. J. Phys. A 29, 87 (1996). doi: 10.1088/0305-4470/29/1/011.

(9) D. Kowal, U. Sivan, O. Entin-Wohlman e Y. Imry. Transmission through multiply- connected wire systems. Phys. Rev. B 42, 14, 9009 (1990). doi: 10.1103/PhysRevB.42.9009.

(10) C. Texier e G. Montambaux. Weak Localization in Multiterminal Networks

of Diffusive Wires. *Phys. Rev. Lett.* 92, 18, 186801 (2004). doi: 10.1103/PhysRevLett.92.186801.

(11) A. G. M. Schmidt, M. G. E. da Luz, Wave-packet dynamics for general contact interactions on a circular setup: revivals, bouncing, and trapping, *Phys. Rev. A* 69 (5) (2004).

(12) S. P. Novikov and A. S. Schwartz, *Usp. Math. Nauk* 54 (3), 147 (1999).

(13) R. Lytel, M. G. Kuzyk, Dressed quantum graphs with optical nonlinearities approaching the fundamental limit, *J. Nonlinear Opt. Phys. Mater.* 22 (04) (2013).

(14) D. Waltnera e U. Smilansky. Scattering from a Ring Graph - A Simple Model for the Study of Resonances. (3) 124 (2013). doi:10.12693/APhysPolA.124.1087

(15) J. M. Harris; J. L. Hirst e M. J. Mossinghoff, *Combinatorics and Graph Theory*. 2. ed. New York: Springer, (2008).

(16) P. Feofiloff e Y. Kohayakawa; Wakabayashi, *Uma Introdução Sucinta à Teoria dos Grafos*. São Paulo,(2009).

(17) S. Gnuzmann e U. Smilansky. *Quantum graphs: Applications to quantum chaos and universal spectral statistics*. *Advances In Physics*,(2006)

(18) C. Godsil, e G. Royle, *Graduate Texts in Mathematics Algebraic Graph Theory*, Springer-Verlag, (2001).

(19) S. P. Novikov and I. A. Dynnikov. *Usp. Math. Nauk* 52 (5), 175 (1997).

(20) P. Exner, P. Seba, Quantum-mechanical splitters: How should one understand them, *Phys. Lett. A* 128 (9) (1988).

(21) P. Exner, P. Seba, Free quantum motion on a branching graph, *Rep. Math. Phys.* 28 (1) (1989).

(22) S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Hoegh-Krohn, H. Holden, *Solvable Models in Quantum Mechanics*, 2nd Edition, AMS Chelsea Publishing, Providence, RI, 2004.

(23) G. Bonneau, J. Faraut, G. Valent, Self-adjoint extensions of operators and the

teaching of quantum mechanics, *Am. J. Phys.* 69 (3) (2001).

(24) S. Flugge, *Practical Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, Berlin, (1999).

(25) G. Baym, *Lectures on quantum mechanics*, Benjamin/Cummings Pub. Co, (1981).

(26) J. Kuhn, F. M. Zanetti, A. L. Azevedo, A. G. M. Schmidt, B. K. Cheng, M. G. E. d. Luz, Time-dependent point interactions and infinite walls: some results for wavepacket scattering, *J. Opt. B: Quantum Semiclassical Opt.* 7 (3) (2005).

(27) V. Caudrelier, M. Mintchev, E. Ragoucy, The quantum nonlinear schrodinger model with point-like defect, *J. Phys. A* 37 (30) (2004).

(28) T. Cheon, P. Exner, P. Seba, Wave function shredding by sparse quantum barriers, *Phys. Lett. A* 277 (1) (2000).

(29) L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, 2nd Edition, McGraw-Hill, New York, 1955.

(30) Ore, O. *Graphs and their Uses*. 2. ed. Washington: The Mathematical Association of America, 1990.

(31) S. Jeff, *Green's Functions and Their Applications to Quantum Mechanics*, (2011).

(32) H. Kleinert, I. Mustapic, Summing the spectral representations of poschl-teller and rosen-morse fixed-energy amplitudes, *J. Math. Phys.* 33 (2) (1992).

(33) H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets*, 4th Edition, World Scientific Publishing Company, Singapore, (2006).

(34) E. N. Economou, *Green's Functions In Quantum Physics*, 3rd Edition, Springer-Verlag, Germany, (2006).

(35) R. P. Feynman, A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals: Emended Edition*, Dover Publications, (2010).

(36) L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integrals*, Dover Publi-

cations, Mineola, New York, (2005).

(37) M. G. E. da Luz, E. J. Heller, B. K. Cheng, Exact form of Green functions for segmented potentials, *J. Phys. A* 31 (1998).

(38) M. G. E. da Luz, B. K. Cheng, M. W. Beims, Asymptotic Green functions: a generalized semiclassical approach for scattering by multiple barrier potentials, *J. Phys. A* 34 (2001).

(39) F. M. Andrade, B. K. Cheng, M. W. Beims, M. G. E. da Luz, A generalized semiclassical expression for the eigenvalues of multiple well potentials, *J. Phys. A* 36 (2003).

(40) F. M. Andrade, M. G. E. da Luz, Green-function approach for scattering quantum walks, *Phys. Rev. A* 84 (4) (2011).

(41) F. M. Andrade, M. G. E. da Luz, Superdiffusivity of quantum walks: A Feynman sum-over-paths description, *Phys. Rev. A* 86 (4) (2012).

(42) M. A. M. de Aguiar, Exact Green's function for the step and square-barrier potentials, *Phys. Rev. A* 48 (4) (1993).

(43) F. M. Andrade, Exact Green's function for rectangular potentials and its application to quasi-bound states, *Phys. Lett. A* 378 (2014).

(44) H.J. Stockmann, J. Stein, "quantum" chaos in billiards studied by microwave absorption, *Phys. Rev. Lett.* 64 (19) (1990).

(45) H. Schanze, E. R. P. Alves, C. H. Lewenkopf, H.J. Stockmann, Transmission fluctuations in chaotic microwave billiards with and without time-reversal symmetry, *Phys. Rev. E* 64 (6) (2001).

(46) Y. Golovaty, 1d schrodinger operators with short range interactions: Two-scale regularization of distributional potentials, *Integr. Equ. Oper. Theory* 75 (3) (2013).

(47) A. G. M. Schmidt, M. G. E. da Luz, Wave-packet dynamics for general contact interactions on a circular setup:revivals, bouncing, and trapping, *Phys. Rev. A* 69 (5) (2004).