

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE PONTA GROSSA
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIAS
MESTRADO EM CIÊNCIAS/ FÍSICA**

ALEXANDRE DRINKO

ESPALHAMENTO EM GRAFOS QUÂNTICOS

**PONTA GROSSA
2020**

ALEXANDRE DRINKO

ESPALHAMENTO EM GRAFOS QUÂNTICOS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciências, área de concentração em Física, da Universidade Estadual de Ponta Grossa, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Ciências/Física.

Orientador: Prof. Dr. Fabiano Manoel de Andrade

PONTA GROSSA

2020

D781 Drinko, Alexandre
Espalhamento em grafos quânticos / Alexandre Drinko. Ponta Grossa, 2020.
60 f.

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

Orientador: Prof. Dr. Fabiano Manoel de Andrade.

1. Grafos quânticos. 2. Espalhamento. 3. Função de Green. I. Andrade,
Fabiano Manoel de. II. Universidade Estadual de Ponta Grossa. Física. III.T.

CDD: 530.1

TERMO DE APROVAÇÃO

Alexandre Drinko

“Espalhamento em grafos quânticos ”

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 - UEPG/PR



Prof. Dr. Marcio Henrique Franco Bettega - UFPR/PR



Prof. Dr. Marciano Pereira - UEPG/PR

Ponta Grossa, 21 de fevereiro de 2020.

Dedicado à minha Família e Amigos

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Prof. Dr. Fabiano Manoel de Andrade pela orientação durante este período de mestrado.

Ao Prof. Dr. Dionisio Bazeia Filho (Universidade Federal da Paraíba-UFPB), pelos trabalhos desenvolvidos.

Ao grupo de Física Quântica e Informação Quântica, pelas discussões e envolvimento.

Agradeço a todos os professores que de alguma forma contribuíram em minha formação, seja em aulas, conversas ou seminários.

Aos meus pais e familiares, principalmente pelo incentivo e apoio durante toda a minha formação.

Aos amigos e colegas pelo apoio e companheirismo durante estes anos.

Em especial minha noiva Rosane, pelo apoio e incentivo durante estes anos.

Também agradeço a CAPES pelo fomento.

*"Existe uma teoria que diz que, se um dia alguém descobrir exatamente para que serve o Universo e por que ele está aqui, ele desaparecerá instantaneamente e será substituído por algo ainda mais estranho e inexplicável. Existe uma segunda teoria que diz que isso já aconteceu."
(Adams, Douglas; O Guia do Mochileiro das Galáxias)*

RESUMO

DRINKO, Alexandre. Espalhamento em Grafos Quânticos. 2020. 60f. Dissertação (Mestrado em Ciências/Física) - Universidade Estadual de Ponta Grossa. Ponta Grossa, 2020.

Neste trabalho estudamos espalhamento em grafos quânticos utilizando a técnica de funções de Green. Mostramos que é possível realizar o estudo de poços e barreiras de potencial por meio do mapeamento destes sistemas em grafos quânticos. Fazendo a extensão analítica para o plano complexo da matriz de espalhamento desses sistemas, analisamos as posições dos seus polos e dos tipos de estados existentes em tais sistemas. Mostramos que os polos da matriz de espalhamento podem ser obtidos através dos polos da função de Green. Também construímos alguns sistemas de espalhamento, os quais podem ser interpretados como dispositivos quânticos, possibilitando a análise da transmissão através destes dispositivos em circuitos dispostos em arranjos em série e paralelo.

Palavras-chave: Grafos Quânticos. Espalhamento. Função de Green.

ABSTRACT

DRINKO, Alexandre. Scattering in Quantum Graphs. 2020. 60p. Dissertação (Mestrado em Ciências/Física) - Universidade Estadual de Ponta Grossa. Ponta Grossa, 2020.

In this work we discuss scattering in quantum graphs using the Green's function approach. We show that is possible to study wells and barriers by mapping such systems into quantum graphs. By making an analytic extension of the scattering matrix to the complex plane, we analyze the position of their poles that provides the types of existent states in such systems. The poles of scattering matrix can be obtained by the Green's function poles. Some scattering systems are built, which are interpreted as quantum devices, allowing the analysis of its transmission in arrangements of these devices in series and parallel.

Keywords: Quantum Graphs. Scattering. Green's Function.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – (a) Grafo com 6 vértices e 6 arestas; (b) Grafo das pontes de Königsberg com 4 vértices e 7 arestas.	15
Figura 2 – Grafo com seis vértices e cinco arestas com suas respectivas funções de onda.	17
Figura 3 – Equivalência entre poço finito assimétrico de potencial e um grafo do tipo caminho.	18
Figura 4 – Equivalência entre potencial do tipo “pente” de Deltas de Dirac e grafo do tipo caminho.	19
Figura 5 – Exemplo de potencial constante por partes, com três pontos de descontinuidade localizados em x_i	21
Figura 6 – Potencial constante por partes, com dois pontos de descontinuidade, representando um poço de potencial finito assimétrico.	22
Figura 7 – Contribuições dos caminhos de espalhamento na obtenção da função de Green para a região II do poço de potencial finito.	22
Figura 8 – Grafo anel ou ciclo com três vértices (C_3), três arestas e duas <i>leads</i> . São apresentados os rótulos dos vértices e as famílias de caminhos.	26
Figura 9 – Coeficiente de transmissão do grafo ciclo com três vértices (C_3) com condição de contorno do tipo Neumann e arestas com mesmo comprimento, em termos do número de onda e do comprimento das arestas $k\ell$ na janela periódica do grafo de $[0, 2\pi]$	28
Figura 10 – Representação de um sistema de espalhamento.	30
Figura 11 – Representação de um poço de potencial (linha contínua) e de uma barreira de potencial (linha pontilhada).	31
Figura 12 – Grafo caminho com três vértices P_3 com os rótulos em seus vértices, juntamente com as famílias de caminhos de espalhamento.	33
Figura 13 – Órbitas periódicas existentes no grafo caminho com três vértices P_3 , que é equivalente ao grafo estrela S_3	35
Figura 14 – Polos da função de Green no plano k -complexo e seus possíveis estados associados para um poço de potencial finito.	36
Figura 15 – Fluxo de polos da função de Green no plano k -complexo para uma barreira de potencial com largura fixa $\ell = 2$	37
Figura 16 – Coeficiente de transmissão para uma barreira de potencial com largura $\ell = 2$ e altura $U = 5$, e seus polos no plano complexo indicando as posições e larguras associados às ressonâncias.	38
Figura 17 – Fluxo de polos do tipo ressonância da Função de Green no plano k -complexo para um poço de potencial com largura fixa $\ell = 2$	39

Figura 18 – Comparação entre o coeficiente de transmissão e os polos de ressonância, com largura do poço $\ell = 2$ e profundidade $U = -10$	39
Figura 19 – Surgimento de estados ligado e antiligado a partir de um par ressonância antirressonância em um poço de potencial com largura fixa $\ell = 2$ e profundidade variável, cuja profundidade está aumentando.	41
Figura 20 – Grafos diamante e hexágono com seus vértices possuindo graus 2 e 3.	42
Figura 21 – Coeficiente de transmissão dos grafos diamante (linha azul sólida) e hexágono (linha vermelha tracejada).	43
Figura 22 – Grafos diamante e hexágono que possuem vértices todos com grau 3.	43
Figura 23 – Grafos diamante e hexágonos, os quais possuem todos os seus vértices com grau 3.	44
Figura 24 – Diferença entre os coeficientes de transmissão entre os grafos diamante (esquerda) e entre os grafos hexagonais (direita).	45
Figura 25 – Representação da construção do arranjo em série dos grafos Q e X ; e seu arranjo em série $S(Q X)$	46
Figura 26 – Probabilidades de transmissão da associação em série dos grafos hexagonais; composição com dois grafos.	47
Figura 27 – Probabilidades de transmissão da associação em série dos grafos hexagonais; composição com três grafos.	48
Figura 28 – Representação da associação em paralelo dos grafos hexagonais.	49
Figura 29 – Probabilidades de transmissão da associação em paralelo dos grafos hexagonais.	50
Figura 30 – Representação de um potencial do tipo degrau.	58

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	12
1.1	Organização da dissertação	13
2	GRAFOS E SUAS DEFINIÇÕES	15
2.1	Definições	15
2.2	Grafos Quânticos	16
2.2.1	Potenciais constantes por partes mapeados em grafos quânticos . . .	18
3	FUNÇÃO DE GREEN PARA POÇOS E GRAFOS	20
3.1	Funções de Green	20
3.1.1	Poço de potencial finito	21
3.1.2	Obtenção da função de onda e estados ligados	24
3.2	Função de Green para Grafos quânticos	25
4	FLUXO DE POLOS	30
4.1	Matriz de Espalhamento \mathcal{S}	30
4.2	Matriz \mathcal{S}: poço/barreira de potencial	31
4.3	Polos da função de Green	32
4.3.1	Polos da Função de Green: barreira de potencial	36
4.3.2	Polos da função de Green: poço de potencial	38
4.3.3	Estados ligado e antiligado provenientes de ressonâncias	40
5	PICOS DE TRANSMISSÃO DE COMPOSIÇÃO DE GRAFOS QUÂN- TICOS	42
5.1	Escolha dos Grafos quânticos	42
5.2	Composição de circuitos	46
5.2.1	Composição de grafos em série	46
5.2.2	Composição de grafos em paralelo	49
5.3	Discussão	50
6	CONCLUSÃO	52
7	PERSPECTIVAS FUTURAS	54
	REFERÊNCIAS	55
	APÊNDICE A – AMPLITUDES DE TRANSMISSÃO E REFLEXÃO PARA POTENCIAIS DO TIPO DEGRAU	58

APÊNDICE B – TRABALHOS PRODUZIDOS DURANTE O MESTRADO	60
---	-----------

1 INTRODUÇÃO

Os primeiros indícios da utilização de grafos ocorreu por volta de 1736, com Leonhard Paul Euler, buscando resolver o problema das pontes de Königsberg: haviam nesta cidade quatro porções de terra que circundam o rio Pregal, sendo estas porções interligadas por sete pontes. O problema consistia em saber se era possível partir de uma das porções de terra, passar por todas as pontes e retornar ao local de partida. Entretanto, cada ponte poderia ser utilizada apenas uma vez. Euler então demonstrou utilizando grafos com a mesma topologia (forma) das pontes e porções de terra que tal feito seria impossível.

De modo geral, um grafo pode ser compreendido um conjunto de elementos (vértices) conectados entre si por meio de alguma relação (arestas), sendo sua estrutura determinada pela forma como os vértices estão conectados entre si. A aplicabilidade de grafos é bastante ampla, podendo ser aplicada em diferentes áreas, uma vez que os vértices e arestas podem ser interpretados de diversas maneiras. Podemos utilizar grafos na descrição de circuitos elétricos, identificação de compostos químicos, redes de pequeno mundo, planejamento em ruas de uma cidade, dentre diversas outras em áreas como linguística, genética, ciências sociais, física e matemática, por exemplo (1, 2).

A utilização de grafos em mecânica quântica, os chamados grafos quânticos, vem ganhando bastante notoriedade nos últimos anos, em áreas como caos quântico (3, 4, 5), espalhamento (6, 7) e sistemas unidimensionais como poços de potenciais (8). Tal interesse em grafos surge devido a ampla abrangência na descrição de sistemas físicos, por exemplo, em experimentos com redes de micro-ondas (9, 10, 11) e construção de redes quânticas com fios nanométricos (12, 13). Entretanto, suas primeiras aplicações em mecânica quântica foram no intuito de modelar moléculas orgânicas (14), metodologia que foi tomando notoriedade em trabalhos subsequentes (15, 16). Neste modelo, as ligações químicas eram descritas por arestas com um potencial adequado, ao qual os elétrons estariam submetidos e os átomos eram descritos pelos vértices os quais agiam como centros espalhadores.

Dada às diversas aplicações de grafos em mecânica quântica, várias técnicas para solução de problemas foram sendo desenvolvidas (17). Nesse sentido, devido à grande versatilidade dos grafos, a construção de uma técnica que possa abranger todas as suas realizações, não é uma tarefa fácil. No entanto, uma técnica bastante interessante para abordar grafos quânticos gerais é o método das funções de Green, proposto por (18), onde mostra-se como construir a função de Green para grafos, dadas as condições de contorno apresentadas.

Em (8) foi mostrado como utilizar as funções de Green na solução de poços quânticos, os quais podem ser interpretados como grafos vestidos, ou seja, onde definimos potenciais nas arestas. Para potenciais constantes por partes, os vértices indicam os pontos de descontinuidade do potencial. No trabalho (19), há uma ampla revisão de algumas técnicas associadas à abordagem de grafos quânticos por meio das funções de Green, descrevendo sua construção, tipos de potenciais que podem ser utilizados, e em (20) é proposto uma sistemática de trabalho nesta mesma linha utilizando a matriz de adjacência dos grafos na construção da função de Green. A

matriz de adjacência pode ser compreendida como uma das quantidades mais elementares de um grafo, pois esta fornece a conectividade do grafo.

O principal foco deste trabalho é a utilização de grafos quânticos, em conjunto com a técnica de funções de Green para estudar a matriz de espalhamento para avaliar o fluxo de polos no plano k -complexo em termos do número de onda (21), a equivalência entre os polos da matriz de espalhamento e da função de Green, os efeitos de transmissões associadas a combinações de grafos simples na obtenção de grafos mais complexos como descrito em (11, 22), em que observamos regiões de supressão total da transmissão para certas estruturas, além de picos finos de ressonância, que se assemelham às ressonâncias do tipo de Feshbach (23, 24, 25). Outro fenômeno que é mencionado é o paradoxo de Braess (26, 27), o qual descreve que se há duas vias de acesso a uma cidade que possuam congestionamento, ao acrescentar uma terceira via pode, em certos casos, aumentar ainda mais o congestionamento.

A forma como desenvolvemos as funções de Green utilizando uma construção de famílias de caminhos de espalhamento existentes no grafo (Capítulo 3), nos permite o estudo de diversos tipos de grafos, sejam eles abertos, fechados, simples, com *loops* e vértices multi-conectados (Capítulo 2), devido à construção de um algoritmo que utiliza a matriz de conectividade do grafo (a qual fornece sua estrutura/topologia) para obtermos a função de Green para grafos.

1.1 Organização da dissertação

Os assuntos que serão abordados nesta dissertação estão dispostos da seguinte forma. No Capítulo 2 apresentamos uma breve introdução sobre grafos com algumas de suas definições, nomenclaturas, estruturas, classificações e quantidades de interesse. Também apresentamos como podemos mapear sistemas quânticos unidimensionais como potenciais constantes em grafos quânticos.

No Capítulo 3 apresentamos a metodologia de funções de Green, como apresentado nos trabalhos (18, 19), em que realizamos a soma sobre todos os caminhos de espalhamento existentes no grafo para construir a função de Green. Tal abordagem será utilizada ao longo de toda a dissertação nas análises dos grafos e poços quânticos na obtenção da função de onda, amplitudes e coeficientes de transmissão e estados de espalhamento.

No Capítulo 4 tratamos dos polos da matriz de espalhamento, que fornece informações sobre estados ligados e antiligados, ressonâncias e antirressonâncias, todos com base na posição do polo no plano k -complexo (21, 28). Mostramos a equivalência entre os polos da matriz de espalhamento, obtida por meio da equação de Schrödinger, e os polos da função de Green (20). Avaliamos como as posições destes polos podem ser alteradas em termos da variação de parâmetros do centro de espalhamento em estudo.

No Capítulo 5 descrevemos o trabalho (22), o qual foi publicado na revista *Physical Review A*, em que utilizamos grafos quânticos com características semelhantes (mesmo número de vértices, arestas e vértices com mesmo grau), entretanto, com topologias diferentes, gerando efeitos interessantes na transmissão. Utilizamos associação de alguns grafos a fim de observar

efeitos de supressão e picos finos de transmissão no interior da região de supressão total da transmissão, devido a arranjos em série e paralelo dos grafos analisados, os quais podemos interpretar como dispositivos quânticos.

Por fim nos capítulos 6 e 7 apresentamos as conclusões desta dissertação e perspectivas futuras em relação ao estudo de grafos quânticos e aplicações.

No Apêndice B encontra-se os trabalhos desenvolvidos durante o período do mestrado, em que um está publicado, enquanto outro em preparação encontra-se disponível em *preprint*.

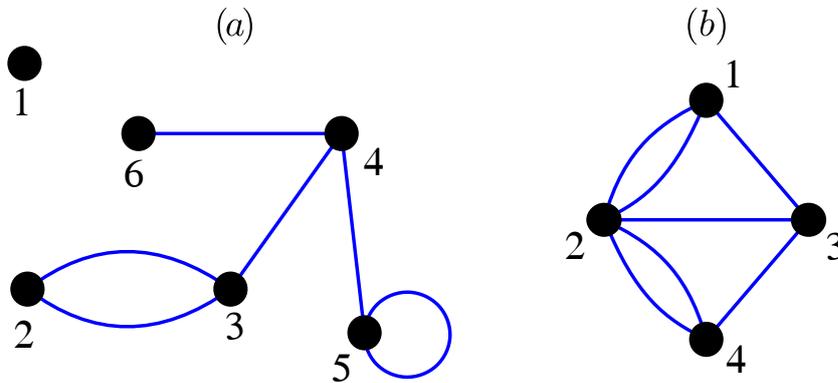
2 GRAFOS E SUAS DEFINIÇÕES

Neste capítulo será discutida uma visão geral sobre grafos, tais como suas características e quantidades de interesse. Também serão apresentadas maneiras de como associar grafos a sistemas quânticos para que estes possam ser utilizados em tal abordagem.

2.1 Definições

Um grafo denotado $G(V, A)$ é uma estrutura constituída por um conjunto de vértices $V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, os quais podem ou não estar conectados entre si por meio de um conjunto de arestas $A(G) = \{a_1, a_2, \dots, a_l\}$ (29). A Figura 1 ilustra um grafo, em que as linhas são as arestas e os pontos os vértices.

Figura 1 – (a) Grafo com 6 vértices e 6 arestas; (b) Grafo das pontes de Königsberg com 4 vértices e 7 arestas.



Fonte: O autor.

Uma quantidade que pode ser analisada em grafos é a matriz de conectividade \mathcal{C} , cuja dimensão é definida por meio do número de vértices n , e seus elementos $c_{i,j}$ representam a existência ou não de uma aresta conectando os vértices v_i e v_j , juntamente com a quantidade de vezes que a ligação ocorre. Assim os elementos da matriz de conectividade são definidos na forma

$$c_{i,j} = \begin{cases} q, & \text{se } v_i \text{ conectado } q \text{ vezes com } v_j, \\ 2\eta, & \text{se } v_i = v_j, \\ 0, & \text{se } v_i \text{ não conectado com } v_j, \end{cases} \quad (2.1)$$

em que η indica número de laços (*loops*) que representa o vértice conectado a ele mesmo, como pode ser observado no vértice 5 da Figura 1. A topologia de um grafo indica o modo como os vértices estão conectados, ou seja, a matriz de conectividade indica a topologia do grafo.

Denomina-se grau ou valência g_i de um vértice a quantidade de arestas nele conectadas, a qual podemos determinar por meio da soma dos elementos da i -ésima linha da matriz de

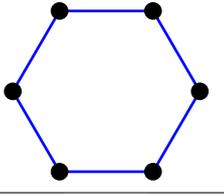
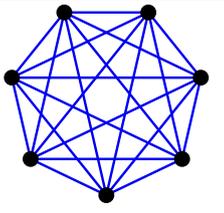
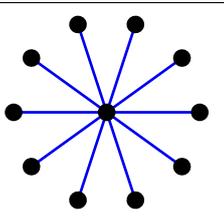
conectividade, a qual corresponde ao vértice v_i .

$$g_i = \sum_{j=1}^n c_{ij}(G). \quad (2.2)$$

Para cada vértice de um grafo podemos definir sua vizinhança Γ_i , que representando todos os vértices conectados ao vértice v_i de interesse.

Na tabela 1 são listados alguns grafos com suas nomenclaturas e formatos:

Tabela 1 – Classificação de grafos.

Grafo caminho (P_3)	
Grafo anel ou ciclo (C_6)	
Grafo completo (K_7)	
Grafo estrela (S_{11})	

Fonte: O autor.

O grafo caminho com n vértices P_n , é um grafo aberto em que os vértices das extremidades possuem grau 1, enquanto os vértices do meio possuem grau 2. O grafo anel com n vértices é do tipo fechado em que todos os vértices possuem grau 2 formando um ciclo. O grafo completo K_n consiste em um grafo com n vértices em que todos estão conectados entre si, em que os vértices todos possuem grau uma unidade menor que o número total de vértices do grafo. O grafo estrela S_n é um grafo com um vértice central com grau $n - 1$ conectado a $n - 1$ vértices de grau 1 que o rodeiam.

No decorrer da dissertação utilizaremos apenas grafos simples (Figura 2), os quais possuem seus vértices conectados (como apresentado na Tabela 1), não possuem *loops* e os vértices tomados a cada 2, não possuem conexões múltiplas, como apresentado nos vértices 2 e 3 da Figura 1.

2.2 Grafos Quânticos

Para utilizarmos grafos em Mecânica Quântica, torna-se necessário definir um grafo métrico $\Gamma(V, A)$, em que as arestas possuem comprimentos finitos positivos, em que a função

de onda do sistema $\Psi(x)$ é um vetor com as funções de onda correspondentes a cada aresta que conecta os vértices v_i e v_j

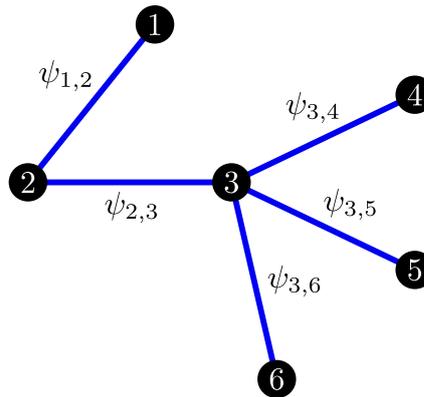
$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_{1,2}(x_{1,2}) \\ \psi_{2,3}(x_{2,3}) \\ \vdots \\ \psi_{i,j}(x_{i,j}) \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

em que $x_{i,j}$ representa o valor de x na aresta que conecta os vértices v_i e v_j . Desta forma, o operador de Schrödinger pode ser aplicado ao longo das arestas, aliado às condições de contorno apropriadas em seus vértices (3, 2). A forma geral do operador de Schrödinger numa aresta que conecta dois vértices v_i e v_j

$$\mathcal{H}_{i,j} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{i,j}(x_{i,j}), \quad (2.4)$$

sendo $V_{i,j}(x_{i,j})$ um potencial arbitrário. A Figura 2 ilustra um grafo com suas funções de onda distribuídas ao longo das arestas, as quais devem satisfazer certas condições de contorno nos vértices.

Figura 2 – Grafo com seis vértices e cinco arestas com suas respectivas funções de onda.



Fonte: O autor.

Como apresentado em (30), uma forma que podemos definir como solução para a equação de Schrödinger em cada aresta é

$$\psi_{i,j}(x) = a_m e^{ik_{i,j}x} + b_m e^{ik_{i,j}(\ell_{i,j}-x)}, \quad (2.5)$$

em que a_m e b_m são as amplitudes quânticas e $\ell_{i,j}$ o comprimento da aresta que liga os vértices v_i e v_j . As condições de contorno podem ser escolhidas de forma arbitrária, desde que a conservação da corrente de probabilidade seja respeitada, tais como Neumann, Dirichlet ou Kirchoff (20, 31). Para condição de contorno do tipo Neumann, a função de onda deve ser contínua e conservar sua probabilidade (associada à conservação da corrente), então nos vértices, onde ocorre encontro das funções de onda, estas devem ser iguais. Enquanto para a conservação da corrente, a soma das derivadas das funções no sentido vértice para aresta deve ser zero,

$$\sum_{n \sim i} \frac{d}{dx} \psi_{i,n}(v_i) = 0, \quad (2.6)$$

em que $n \sim i$ representa as arestas que saem do vértice i . Como um exemplo, considere os vértices v_1 e v_2 da Figura 2, definindo o intervalo $[0, \ell_{1,2}]$ partindo de v_1 em direção a v_2 e $[0, \ell_{2,3}]$ de v_2 para v_3 . Utilizando a continuidade em v_2 ,

$$\psi_{1,2}(\ell_{1,2}) = \psi_{2,3}(0), \quad (2.7)$$

e usando a conservação de fluxo em 1 e 2,

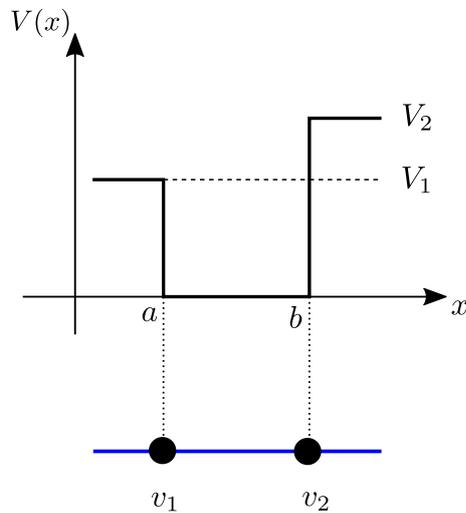
$$\psi'_{1,2}(0) = 0; \quad -\psi'_{1,2}(\ell_{1,2}) + \psi'_{2,3}(0) = 0, \quad (2.8)$$

em que o sinal menos na segunda equação aparece devido a direção de “crescimento” da aresta. Estas definições serão utilizadas no Capítulo 4 para avaliarmos a equivalência entre a função de Green e equação de Schrödinger.

2.2.1 Potenciais constantes por partes mapeados em grafos quânticos

Potenciais constantes por partes podem ser interpretados como grafos. A Figura 3 ilustra como um poço de potencial pode ser representado por um grafo do tipo caminho com dois vértices.

Figura 3 – Equivalência entre poço finito assimétrico de potencial e um grafo do tipo caminho.



Fonte: O autor.

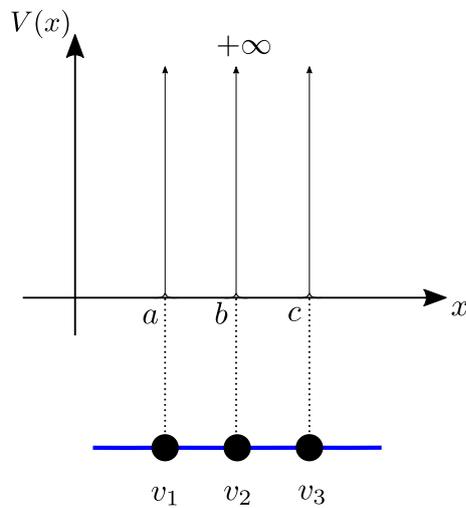
Na associação ilustrada pela Figura 3, temos que os potenciais estão nas arestas e *leads* (arestas semi-infinitas), essenciais no estudo de espalhamento a fim de construir os canais de entrada e saída no centro de espalhamento descrito por meio do grafo, enquanto os vértices v_1 e v_2 são interpretados como os pontos de descontinuidade do potencial em a e b . Este problema será abordado com mais detalhes na seção 3.1.1, em que este sistema é utilizado como exemplo na obtenção da função de Green e suas autofunções associadas. Este mapeamento pode ser estendido a qualquer potencial constante por partes, em que os vértices são os pontos de descontinuidade dos potenciais, os quais são definidos nas arestas e *leads*.

Outra interpretação que pode ser utilizada é como ilustra a Figura 4, em que definimos cada vértice de um grafo caminho P_n como uma Delta de Dirac, definida por

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} 0, & \text{se } x \neq x_0, \\ \infty, & \text{se } x = x_0, \end{cases} \quad (2.9)$$

em que x_0 indica a localização da delta, cujo sistema de espalhamento representado na Figura 4, é denominado “pente” de Dirac (*Dirac comb*).

Figura 4 – Equivalência entre potencial do tipo “pente” de Deltas de Dirac e grafo do tipo caminho.



Fonte: O autor.

Nesta figura as arestas e *leads* possuem potencial nulo, enquanto os vértices $v_i(s)$ representam as Deltas de Dirac $\delta(x - a)$, $\delta(x - b)$ e $\delta(x - c)$.

Utilizando esta interpretação podemos avaliar efeitos de espalhamento no grafo, o qual analisaremos no Capítulo 4, utilizando a abordagem de funções de Green, que podem ser empregadas na análise de grafos e poços quânticos, que será apresentado no Capítulo 3.

3 FUNÇÃO DE GREEN PARA POÇOS E GRAFOS

Neste capítulo apresentamos o método de funções de Green, o qual será empregado durante o trabalho na descrição de grafos quânticos. Tal método pode ser empregado na solução de poços e barreiras de potencial (8), a qual para poços e barreiras constantes por partes possui solução exata, na obtenção das autofunções e determinação das energias associadas a cada tipo de sistema.

3.1 Funções de Green

As funções de Green são amplamente utilizadas no tratamento de equações diferenciais não homogêneas (32). Em (8), descreve-se como utilizar esta metodologia na solução de sistemas de poços quânticos, o qual será descrito nesta seção. Em mecânica quântica a função de Green é apresentada na forma da equação diferencial não homogênea

$$\left[E - \hat{\mathcal{H}} \right] \mathcal{G}(x, x'; E) = \delta(x - x'), \quad (3.1)$$

em que E é a energia da partícula, $\delta(x - x')$ é a Delta de Dirac, que possui valor zero em todo o seu domínio exceto em $x = x'$, $\hat{\mathcal{H}}$ é o hamiltoniano em uma dimensão do sistema descrito por

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x), \quad (3.2)$$

sendo m a massa da partícula, $V(x)$ um potencial arbitrário a qual a partícula está sujeita e \hbar a constante de Planck dividida por 2π .

A equação (3.1) pode ser resolvida de diversas formas (33): resolver diretamente a equação diferencial (3.1); utilizar integrais de trajetória de Feynmann (34); por meio da expansão espectral em termos das energias, na forma

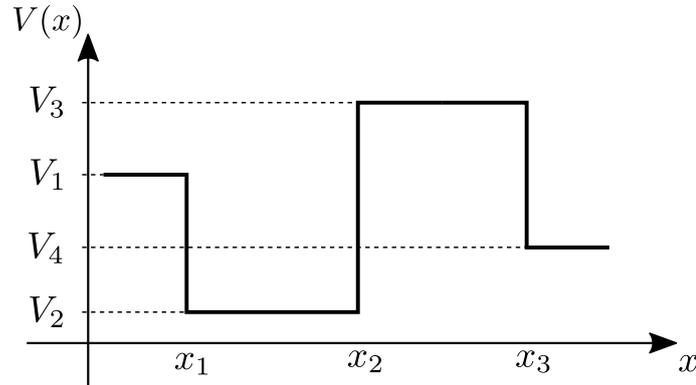
$$\mathcal{G}(x_f, x_i; E) = \sum_n \frac{\psi_n(x_f) \psi_n^*(x_i)}{E - E_n}. \quad (3.3)$$

A abordagem que será utilizada para determinar as funções de Green consiste no método similar às integrais de trajetórias de Feynmann, a qual juntamente com a expansão espectral permite determinar as funções de onda do sistema.

Este método pode ser utilizado na solução de potenciais constantes por partes, o qual fornece solução exata (8). Da mesma forma podemos utilizar esta mesma abordagem em potenciais suaves que não apresentam descontinuidades, no entanto, neste caso, o método fornece resultados aproximados (2). O escopo deste trabalho será condições de contorno do tipo Neumann (equação 2.6) e potenciais constantes por partes, o qual podemos visualizar na Figura 5,

$$V(x) = \begin{cases} V_1, & \text{se } x < x_1, \\ V_2, & \text{se } x_1 < x < x_2, \\ \vdots & \\ V_n, & \text{se } x_{n-1} < x < x_n. \end{cases} \quad (3.4)$$

Figura 5 – Exemplo de potencial constante por partes, com três pontos de descontinuidade localizados em x_i .



Fonte: O autor.

Para determinarmos a função de Green, torna-se necessário estabelecer os pontos inicial x_i e final x_f , para em seguida realizar a soma sobre todos os possíveis caminhos que uma dada partícula pode percorrer partindo de x_i chegando a x_f , com uma dada energia E fixa. Assim, temos que,

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

em que o índice ce indica que a soma é dada em termos dos caminhos de espalhamento, W_{ce} são as amplitudes quânticas, S_{ce} é a ação clássica dada por

$$S_{ce} = \hbar \int_{x_i}^{x_f} k_j dx, \quad (3.6)$$

com

$$k_j = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_j)}, \quad (3.7)$$

sendo os números de onda em termos da energia da partícula e do potencial V_j . Para potenciais constantes por partes, as amplitudes de espalhamento W_{ce} são as amplitudes de transmissão e reflexão (Apêndice A).

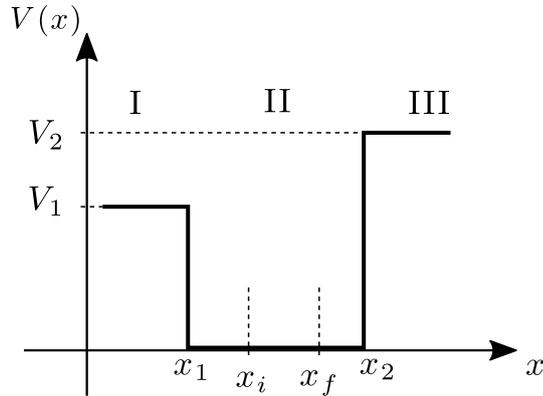
3.1.1 Poço de potencial finito

Para calcular a função de Green de um sistema, utilizaremos como exemplo o poço de potencial finito. Inicialmente definimos os pontos inicial x_i e final x_f , e realizamos a soma sobre todos os caminhos possíveis, como ilustra a Figura 6.

Os pontos x_i e x_f podem ser escolhidos de forma arbitrária, entretanto, para determinar a função de onda para uma dada região é necessário definir um dos pontos na região de interesse. Como os pontos escolhidos estão na região II, a função de onda a ser obtida por meio da função de Green será correspondente a esta região.

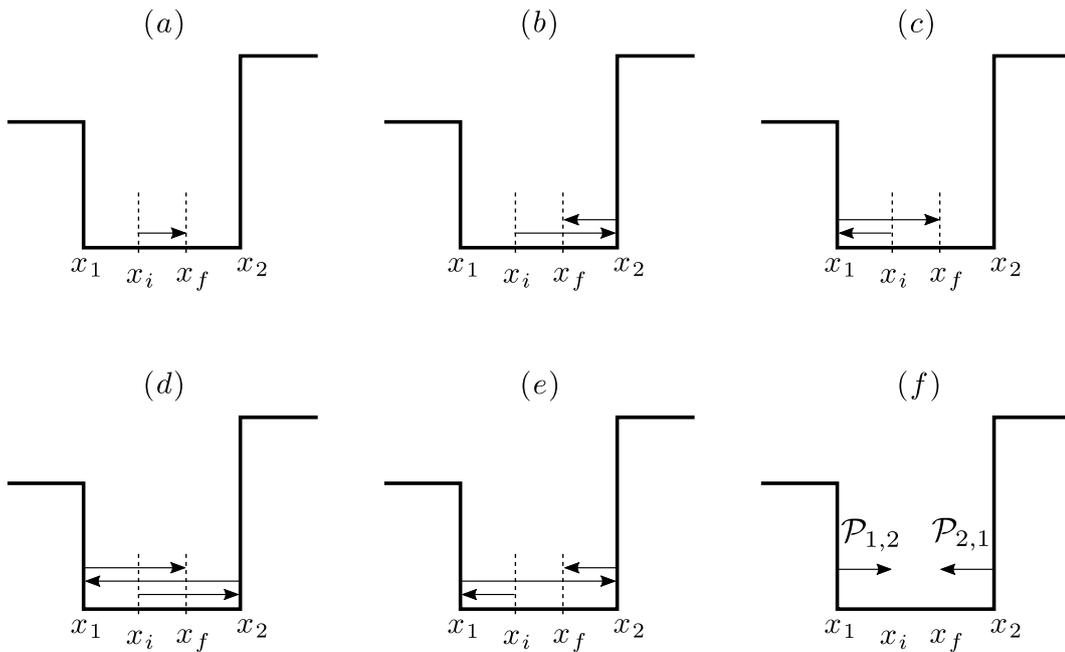
A Figura 7 apresenta as contribuições dos caminhos que compõem a equação (3.5), indicando como são construídas as contribuições associadas a cada caminho.

Figura 6 – Potencial constante por partes, com dois pontos de descontinuidade, representando um poço de potencial finito assimétrico.



Fonte: O autor.

Figura 7 – Contribuições dos caminhos de espalhamento na obtenção da função de Green para a região II do poço de potencial finito.



Fonte: O autor.

- Fig. 7 (a) Caminho direto de x_i a x_f :

$$e^{ik_2(x_f-x_i)};$$

- Fig. 7 (b) Caminho de x_i a x_2 , reflexão em x_2 , caminho de x_2 a x_f :

$$e^{ik_2(x_2-x_i)} r_2^{(+)} e^{-ik_2(x_f-x_2)};$$

- Fig. 7 (c) Caminho de x_i a x_1 , reflexão em x_1 , caminho de x_1 a x_f :

$$e^{-ik_2(x_1-x_i)} r_1^{(-)} e^{ik_2(x_f-x_1)};$$

- Fig. 7 (d) Caminho de x_i a x_2 , reflexão em x_2 , caminho de x_2 a x_1 , reflexão em x_1 , caminho de x_1 a x_f :

$$e^{ik_2(x_2-x_i)} r_2^{(+)} e^{-ik_2(x_1-x_2)} r_1^{(-)} e^{ik_2(x_f-x_1)};$$

- Fig. 7 (e) Caminho de x_i a x_1 , reflexão em x_1 , caminho de x_1 a x_2 , reflexão em x_2 , caminho de x_2 a x_f :

$$e^{-ik_2(x_1-x_i)} r_1^{(-)} e^{ik_2(x_2-x_1)} r_2^{(+)} e^{-ik_2(x_f-x_2)};$$

- Fig. 7 (f) Família de caminhos que são refletidos em x_1 em direção a x_2 ($\mathcal{P}_{1,2}$) e Família de caminhos que são refletidos em x_2 em direção a x_1 ($\mathcal{P}_{2,1}$).

De acordo com as Figuras 7 (a) a (e), podemos observar um padrão para os demais caminhos, os quais terão em suas contribuições as quantidades associadas às reflexões em x_1 e x_2 com o termo de caminho através de todo o potencial, logo a função de Green torna-se

$$\mathcal{G}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{ik_2 \hbar^2} \left\{ e^{ik_2(x_f-x_i)} + \sum_{n=0}^{\infty} \left(r_1^{(-)} r_2^{(+)} e^{2ik_2 \ell} \right)^n \left[e^{-ik_2(x_1-x_i)} r_1^{(-)} \times \right. \right. \\ \left. \left. \left(e^{ik_2(x_f-x_1)} + r_2^{(+)} e^{ik_2 \ell} e^{-ik_2(x_f-x_2)} \right) + e^{ik_2(x_2-x_i)} r_2^{(+)} \times \right. \right. \\ \left. \left. \left(e^{ik_2(x_f-x_2)} + r_1^{(-)} e^{ik_2 \ell} e^{ik_2(x_f-x_1)} \right) \right] \right\}, \quad (3.8)$$

em que ℓ representa a largura do potencial, $\ell = |x_2 - x_1|$, e as reflexões são apresentadas no Apêndice A. A equação (3.8) pode ser simplificada, uma vez que o termo de soma possui a forma de uma série geométrica,

$$\sum_{n=1}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x}, \quad (3.9)$$

para $0 \leq x < 1$. Como o módulo das amplitudes de reflexão são menores que 1 para o poço simples, a função de Green pode ser reescrita na forma

$$\mathcal{G}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{ik_2 \hbar^2} f_a \left(e^{ik_2(x_f-x_1)} + r_2^{(+)} e^{ik_2 \ell} e^{ik_2(x_2-x_f)} \right) \\ \times \left(e^{ik_2(x_1-x_i)} + r_1^{(-)} e^{ik_2 \ell} e^{ik_2(x_i-x_2)} \right), \quad (3.10)$$

em que o termo da soma geométrica é

$$f_a = 1 - r_1^{(-)} r_2^{(+)} e^{2ik_2 \ell}, \quad (3.11)$$

o qual determina os polos da função de Green e será explorado no cálculo das energias associadas aos estados ligados e função de onda.

Outra forma de obter este resultado é utilizando a construção de uma família de caminhos, como ilustra a Figura 7 (f), em que as famílias são dadas por:

- $\mathcal{P}_{1,2}$ Família de caminhos que deixam o ponto x_1 e vão para a direita;
- $\mathcal{P}_{2,1}$ Família de caminhos que deixam o ponto x_2 e vão para a esquerda,

fornecendo o sistema de equações:

$$\begin{cases} \mathcal{P}_{1,2} = e^{ik_2(x_f-x_1)} + e^{ik_2\ell}r_2^{(+)}\mathcal{P}_{2,1}, \\ \mathcal{P}_{2,1} = e^{-ik_2(x_f-x_2)} + e^{ik_2\ell}r_1^{(-)}\mathcal{P}_{1,2}. \end{cases} \quad (3.12)$$

A função de Green possui as contribuições do caminho direto de x_i a x_f (Figura 7(a)), e as contribuições das famílias de caminhos na forma

$$\mathcal{G}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{ik_2\hbar^2} \left(e^{ik_2(x_f-x_i)} + e^{ik_2(x_2-x_i)}r_2^{(+)}\mathcal{P}_{2,1} + e^{-ik_2(x_1-x_i)}r_1^{(-)}\mathcal{P}_{1,2} \right), \quad (3.13)$$

cujas famílias de caminhos são obtidas resolvendo o sistema (3.12),

$$\begin{cases} \mathcal{P}_{1,2} = \frac{1}{f_a} \left(e^{ik_2(x_f-x_1)} + r_2^{(+)}e^{ik_2\ell}e^{ik_2(x_2-x_f)} \right), \\ \mathcal{P}_{2,1} = \frac{1}{f_a} \left(e^{-ik_2(x_f-x_2)} + r_1^{(-)}e^{ik_2\ell}e^{-ik_2(x_1-x_f)} \right), \end{cases} \quad (3.14)$$

e substituindo (3.14) em (3.13), obtemos a equação (3.10).

Desta forma, podemos observar que a construção da função de Green utilizando das famílias de caminhos simplifica o cálculo, possibilitando aplicar este método para sistemas unidimensionais multiconectados como grafos.

Para determinarmos a função de Green para as regiões antes e depois do poço, é necessário definir um dos pontos x_i ou x_f na região desejada e realizar o mesmo processo da soma de todos os possíveis caminhos.

3.1.2 Obtenção da função de onda e estados ligados

Para obtermos os estados ligados e a função de onda a partir da função de Green, precisamos determinar onde ocorrem seus polos, que são pontos onde a função de Green diverge, isso ocorre quando seu denominador é zero, ou seja,

$$1 - r_1^{(-)}r_2^{(+)}e^{2ik_2\ell} = 0. \quad (3.15)$$

Logo, substituindo as amplitudes de reflexão para potenciais do tipo degrau (Apêndice A), que possuem a forma

$$r_j^{(+)} = \frac{k_j - k_{j+1}}{k_j + k_{j+1}}, \quad r_j^{(-)} = -r_j^{(+)}, \quad (3.16)$$

obtemos a equação para os polos da função de Green

$$\left(\frac{k_2^{(n)} - k_1^{(n)}}{k_2^{(n)} + k_1^{(n)}} \right) \left(\frac{k_2^{(n)} - k_3^{(n)}}{k_2^{(n)} + k_3^{(n)}} \right) e^{2ik_2^{(n)}\ell} = 1, \quad (3.17)$$

que ocorre quando a energia da partícula tende aos estados de energia do poço u_j , ou seja, quando $E \rightarrow E^{(n)}$, ou em termos do número de onda, $k \rightarrow k^{(n)}$, em que $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ e

$k_j = \sqrt{2m(E - u_j)/\hbar^2}$. Calculando os resíduos da função de Green, a qual pela expansão espectral em termos de k (equação 3.3), obtemos as funções de onda, na forma

$$\lim_{k \rightarrow k^{(n)}} \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - k^{(n)2}) \mathcal{G}(x_f, x_i; k) = \psi_n^*(x_i) \psi_n(x_f), \quad (3.18)$$

que resulta numa indeterminação removível do tipo zero sobre zero. Assim, aplicando a regra de L'Hospital, obtemos

$$\begin{aligned} \psi_n^*(x_i) \psi_n(x_f) = & \frac{1}{i f_a^{(n)}} \left(e^{-ik_2^{(n)}(x_i - x_1)} + \frac{k_2^{(n)} - k_1^{(n)}}{k_2^{(n)} + k_1^{(n)}} e^{ik_2^{(n)}\ell} e^{-ik_2^{(n)}(x_2 - x_i)} \right) \\ & \times \left(e^{ik_2^{(n)}(x_f - x_1)} + \frac{k_2^{(n)} - k_3^{(n)}}{k_2^{(n)} + k_3^{(n)}} e^{ik_2^{(n)}\ell} e^{ik_2^{(n)}(x_2 - x_f)} \right), \end{aligned} \quad (3.19)$$

em que $f_a^{(n)}$ é a derivada de f_a calculado no limite em que $k \rightarrow k_n$. Fatorando a função de Green podemos obter a função de onda

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{i f_a^{(n)}}} \left(e^{ik_2^{(n)}(x - x_1)} + \frac{k_2^{(n)} - k_3^{(n)}}{k_2^{(n)} + k_3^{(n)}} e^{ik_2^{(n)}(x_2 - x + \ell)} \right), \quad (3.20)$$

que é a função de onda para a região II do poço finito de potencial, cuja solução dada por este método é obtida já normalizada. Uma vez que as funções de onda são obtidas da função de Green, elas estão associadas à região em que foram definidos os pontos inicial e final.

3.2 Função de Green para Grafos quânticos

Como descrito na seção 2.2, podemos mapear um poço de potencial, ou potenciais constantes por partes em um grafo, o que nos permite utilizar a abordagem de função de Green para resolvê-los, ou seja, para obter os autovalores de energia e as autofunções. Uma forma interessante de obtermos o sistema de equações associado às famílias de caminhos, é utilizando a matriz de adjacência do grafo, a qual para grafos simples é a própria matriz de conectividade.

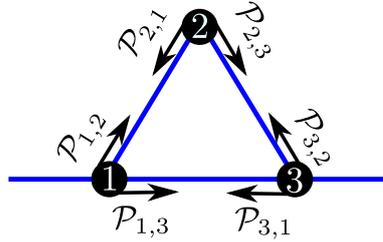
Como exemplo desta construção, utilizaremos o grafo ciclo com três vértices (C_3 , \triangle), o qual podemos visualizar na Figura 8 juntamente com as famílias de caminhos dispostas nas arestas.

Como podemos observar na Figura 8, o número de famílias é o dobro do número de arestas, pois na construção usando a matriz de adjacência definimos duas famílias de trajetórias em cada aresta. A matriz de adjacência para este grafo é escrita na forma

$$\mathcal{A}_{C_3} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.21)$$

Para estudo de espalhamento em grafos, associamos que os pontos inicial e final estão nas *leads*, em que definimos o vértice 1 como canal de entrada e o vértice 3 como canal de saída. Como

Figura 8 – Grafo anel ou ciclo com três vértices (C_3), três arestas e duas *leads*. São apresentados os rótulos dos vértices e as famílias de caminhos.



Fonte: O autor.

mostrado em (20), as famílias de caminhos são dadas por

$$\mathcal{P}_{i,j} = z_{i,j} \left(r_j \mathcal{P}_{j,i} + \sum_{l \in \Gamma_j} t_j \mathcal{A}_{j,l} \mathcal{P}_{j,l} - t_j \mathcal{P}_{j,i} + t_{v_s} \delta_{j,v_s} \right), \quad (3.22)$$

em que $z_{i,j} = e^{ikl_{ij}}$ indica a distância entre os vértices i e j , Γ_j a vizinhança do vértice j , v_s o vértice de saída, $\mathcal{A}_{i,j}$ o i, j -ésimo elemento da matriz de adjacência e δ_{j,v_s} delta de Kronecker. A função de Green em termos da matriz de adjacência possui a forma

$$\mathcal{G}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 \sqrt{k_{x_i} k_{x_f}}} e^{i(k_{x_i} x_i + k_{x_f} x_f)} t_{v_e} \sum_{i=1}^n A_{v_e, i} \mathcal{P}_{v_e, i}, \quad (3.23)$$

em que n é o número de vértices do grafo, k_{x_i} e k_{x_f} são os números de onda nas regiões onde encontram-se x_i e x_f respectivamente.

Para este caso vamos definir que as arestas não possuem potencial, enquanto os vértices são descritos por Deltas de Dirac, qualquer condição de contorno poderia ser utilizada desde que esta conserve a corrente de probabilidade. Desta forma, as amplitudes de reflexão e transmissão dependem apenas da intensidade da delta γ_j no vértice j e do seu grau g_j (19),

$$r_j = \frac{2\gamma_j - (g_j - 2)ik}{g_j ik - 2\gamma_j}, \quad (3.24)$$

$$t_j = \frac{2ik}{g_j ik - 2\gamma_j}, \quad (3.25)$$

em que podemos notar que as reflexões/transmissões à direita e esquerda, de um dado vértice são iguais.

Utilizando a matriz de adjacência do grafo (3.21), a forma explícita da equação (3.22) é

dada por

$$\begin{cases} \mathcal{P}_{1,2} = z_{1,2} (r_2 \mathcal{P}_{2,1} + t_2 \mathcal{P}_{2,3}), \\ \mathcal{P}_{2,1} = z_{2,1} (r_1 \mathcal{P}_{1,2} + t_1 \mathcal{P}_{1,3}), \\ \mathcal{P}_{1,3} = z_{1,3} (r_3 \mathcal{P}_{3,1} + t_3 \mathcal{P}_{3,2} + t_3), \\ \mathcal{P}_{3,1} = z_{3,1} (r_1 \mathcal{P}_{1,3} + t_1 \mathcal{P}_{1,2}), \\ \mathcal{P}_{2,3} = z_{2,3} (r_3 \mathcal{P}_{3,2} + t_3 \mathcal{P}_{3,1} + t_3), \\ \mathcal{P}_{3,2} = z_{3,2} (r_2 \mathcal{P}_{2,3} + t_2 \mathcal{P}_{2,1}), \end{cases} \quad (3.26)$$

cuja solução nos leva à função de Green do grafo, a qual podemos descrever em termos das famílias de caminhos,

$$\mathcal{G}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} e^{i(kx_i + kx_f)} t_1 (\mathcal{P}_{1,2} + \mathcal{P}_{1,3}), \quad (3.27)$$

em que definimos os pontos inicial x_i e final x_f nas *leads* a esquerda e a direita do grafo, respectivamente.

A amplitude de transmissão no grafo, está associada às famílias de caminhos que a partícula encontra após ser transmitida no vértice de entrada v_e do grafo, ou seja,

$$T_\Gamma(k) = t_{v_e} \sum_{i=1}^n \mathcal{A}_{v_e, i} \mathcal{P}_{v_e, i}, \quad (3.28)$$

em que t_{v_e} é a transmissão no vértice de entrada e $\mathcal{A}_{v_e, i}$ o elemento da matriz de adjacência que representa a conexão entre o vértice de entrada v_e e o vértice v_i . A reflexão global do grafo também pode ser calculada, desde que sejam definidos os pontos inicial x_i e final x_f na mesma *lead*, na forma

$$R_\Gamma(k) = t_{v_s} \sum_{i=1}^n \mathcal{A}_{v_s, i} \mathcal{P}_{v_s, i} + r_{v_s}, \quad (3.29)$$

em que v_s indica o vértice de saída, e

$$|T_\Gamma(k)|^2 + |R_\Gamma(k)|^2 = 1, \quad (3.30)$$

que indica a conservação da probabilidade no centro de espalhamento. Para o grafo Δ , as famílias a serem consideradas no cálculo da transmissão são $\mathcal{P}_{1,2}$ e $\mathcal{P}_{1,3}$, como observado na Figura 8,

$$T_\Delta(k) = t_1 (\mathcal{P}_{1,2} + \mathcal{P}_{1,3}), \quad (3.31)$$

em que podemos notar que a equação (3.31) está contida na função de Green (3.28), o qual é a amplitude de transmissão global do grafo.

Resolvendo o sistema de equações em (3.26) e aplicando a condição de contorno de Neumann nos vértices (22), ou seja, a intensidade das deltas nos vértices é nula. Deste modo

podemos obter a amplitude de transmissão para o grafo C_3 (Δ) devido apenas à sua estrutura na forma

$$T_{\Delta}(k) = \frac{4(e^{ik\ell} + e^{2ik\ell} - e^{4ik\ell} - e^{5ik\ell})}{9 + e^{2ik\ell} - 8e^{3ik\ell} - e^{4ik\ell} + e^{6ik\ell}}, \quad (3.32)$$

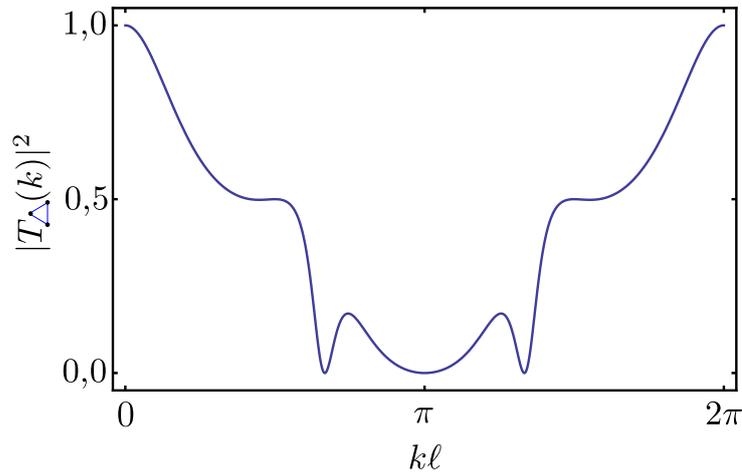
em que definimos o comprimento de todas as arestas do grafo iguais com valor de ℓ .

O coeficiente (probabilidade) de transmissão de um grafo Γ é calculado por meio do módulo quadrado da amplitude de transmissão,

$$\mathcal{T}_{\Gamma}(k) = |T_{\Gamma}(k)|^2, \quad (3.33)$$

o qual pode ser visualizado na Figura 9 em função do número de onda k e do comprimento das arestas ℓ .

Figura 9 – Coeficiente de transmissão do grafo ciclo com três vértices (C_3) com condição de contorno do tipo Neumann e arestas com mesmo comprimento, em termos do número de onda e do comprimento das arestas $k\ell$ na janela periódica do grafo de $[0, 2\pi]$.



Fonte: O autor.

Uma vez definido que as arestas possuem potencial nulo e a intensidade das deltas nos vértices é zero, temos que o coeficiente de transmissão apresenta este efeito (Figura 9) devido apenas a estrutura do grafo, que é resultado da interferência quântica, a qual é construtiva para $k = 2\alpha\pi$ em que α é um número inteiro, enquanto para outros valores ocorre interferência destrutiva, por exemplo, em $k = (2\alpha + 1)\pi$.

A janela escolhida para analisar o comportamento do coeficiente de transmissão foi o de $0 \leq k\ell \leq 2\pi$ devido a periodicidade apresentada dentro deste intervalo.

Se fossem atribuídos valores para as deltas diferente de zero nos vértices, para o grafo C_3 , o coeficiente de transmissão seria atenuado para valores pequenos de $k\ell$. Entretanto ao aumentar o valor de $k\ell$ o efeito da delta torna-se irrelevante na transmissão, que voltaria a assumir o mesmo perfil qualitativo e quantitativo do apresentado na Figura 9.

No capítulo 4 abordaremos a matriz de espalhamento retornando ao método das funções de Green, a fim de obtermos os polos da matriz de espalhamento, por meio da equação de Schrö-

dingier e das funções de Green, além de avaliarmos a equivalência entre estas duas metodologias apresentadas.

4 FLUXO DE POLOS

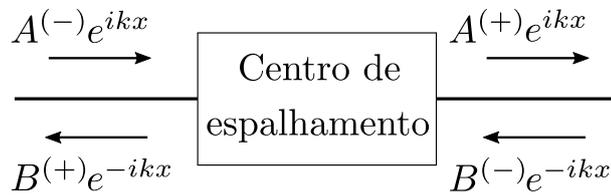
Neste capítulo descrevemos como construir e analisar o fluxo de polos no plano complexo em sistemas de espalhamento. Também propomos analisar os polos da função de Green, utilizando de sua equivalência entre os polos da matriz de espalhamento e como podemos obter a equação para determinar os polos por meio do sistema de equações associado às famílias de caminhos existentes no grafo a ser estudado (20).

4.1 Matriz de Espalhamento \mathcal{S}

No estudo de espalhamento, a ideia central explorada é a conservação da probabilidade. Para obtermos a matriz de espalhamento de um sistema, definimos a equação de Schrödinger incidente num centro de espalhamento e sua forma após sofrer tal processo, como podemos visualizar na Figura (10), em que são apresentadas as soluções assintóticas para o sistema de espalhamento, para uma partícula de número de onda $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ que incide sobre o centro de espalhamento denotado por $(-)$ ou que sai do centro de espalhamento denotado por $(+)$,

$$\psi(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow A^{(\pm)}e^{ikx} + B^{(\mp)}e^{-ikx}. \quad (4.1)$$

Figura 10 – Representação de um sistema de espalhamento.



Fonte: O autor.

A construção da matriz de espalhamento \mathcal{S} conecta as amplitudes quânticas, ou seja, as amplitude de entrada e de saída, as quais estão relacionadas na forma

$$\begin{pmatrix} A^{(+)} \\ B^{(+)} \end{pmatrix} = \mathcal{S} \begin{pmatrix} A^{(-)} \\ B^{(-)} \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

Para obtermos a forma de \mathcal{S} resolvemos o sistema apresentado na Figura 10 utilizando o espalhamento direto e no seu sentido contrário, que equivalem a partícula incidir no centro de espalhamento pela direita ψ_d e pela esquerda ψ_e . Supondo que o centro de espalhamento é definido numa região finita limitada de $-a < x < a$, temos que

$$\psi_e(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r^{(+)}e^{-ikx} & , x < -a, \\ t^{(+)}e^{ikx} & , x > a, \end{cases} \quad (4.3)$$

$$\psi_d(x) = \begin{cases} t^{(-)}e^{-ikx} & , x < -a, \\ e^{-ikx} + r^{(-)}e^{ikx} & , x > a, \end{cases} \quad (4.4)$$

que fornece o sistema de equações

$$\begin{pmatrix} t^{(+)} \\ r^{(+)} \end{pmatrix} = \mathcal{S} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} r^{(-)} \\ t^{(-)} \end{pmatrix} = \mathcal{S} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

em que obtemos

$$\mathcal{S} = \begin{pmatrix} t^{(+)} & r^{(-)} \\ r^{(+)} & t^{(-)} \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

que é a matriz de espalhamento descrita em termos das amplitudes quânticas de reflexão e transmissão.

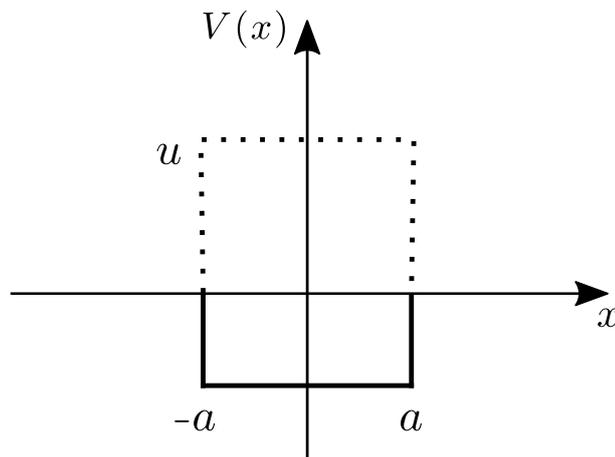
4.2 Matriz \mathcal{S} : poço/barreira de potencial

Como exemplo de aplicação da matriz de espalhamento e do fluxo de polos, será descrito sobre o poço/barreira de potencial finitos, como ilustrado na Figura 6. Considere um/uma poço/barreira simétricos na forma,

$$V(x) = \begin{cases} u, & x \in [-a, a], \\ 0, & x \in (-\infty, -a) \cup (a, +\infty), \end{cases} \quad (4.7)$$

em que $u > 0$ representa uma barreira, enquanto para $u < 0$, representa um poço, como ilustra a Figura 11.

Figura 11 – Representação de um poço de potencial (linha contínua) e de uma barreira de potencial (linha pontilhada).



Fonte: O autor.

As soluções para as regiões são dadas por

$$\psi_i(x) = A_i e^{iK_i x} + B_i e^{-iK_i x}, \quad (4.8)$$

sendo K_1 o número de onda dentro do poço e K_2 fora do poço,

$$K_1 = \sqrt{k^2 - 2U}, \quad K_2 = k, \quad U = \frac{mu}{\hbar^2}, \quad k = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (4.9)$$

Queremos determinar as amplitudes de reflexão e transmissão, que estão associados às amplitudes presentes na função de onda, sendo

$$r = \frac{B_1}{A_1}, \quad t = \frac{A_3}{A_1}. \quad (4.10)$$

É importante salientar que as transmissões e reflexões da partícula incidente no centro de espalhamento pela direita e pela esquerda são iguais. Entretanto, em geral isto não ocorre pois as amplitudes podem diferir por uma fase. As constantes necessárias para determinar (4.10) podem ser determinadas aplicando as condições de continuidade da função de onda

$$\psi_1(x = -a) = \psi_2(x = -a), \quad \psi_2(x = a) = \psi_3(x = a), \quad (4.11)$$

e de sua derivada

$$\psi_1'(x = -a) = \psi_2'(x = -a), \quad \psi_2'(x = a) = \psi_3'(x = a), \quad (4.12)$$

nos pontos de descontinuidade do potencial, juntamente com a condição de normalização.

Trabalhando algebricamente com as equações (4.11), (4.12) e (??), obtemos os elementos da matriz de espalhamento

$$r = \frac{-U \operatorname{sen}(2Ka)e^{-2ika}}{ikK \cos(2Ka) + (k^2 - U) \operatorname{sen}(2Ka)}, \quad (4.13)$$

$$t = \frac{kK e^{-ika}}{kK \cos(2Ka) - i(k^2 - U) \operatorname{sen}(2Ka)}. \quad (4.14)$$

Desta forma, a matriz de espalhamento possui a forma

$$\mathcal{S} = \frac{e^{-2ika}}{kK \cos(2Ka) - i(k^2 - U) \operatorname{sen}(2Ka)} \begin{pmatrix} kK & Ui \operatorname{sen}(2Ka) \\ Ui \operatorname{sen}(2Ka) & kK \end{pmatrix}, \quad (4.15)$$

a qual fornece informações sobre o potencial estudado.

4.3 Polos da função de Green

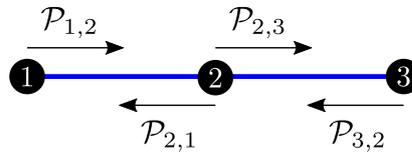
Os polos da função de Green são utilizados para determinar as energias dos estados ligados do sistema e conseqüentemente, por meio do cálculo dos resíduos, a(s) função(ões) de onda correspondente(s). Como a função de Green representa uma quantidade global do sistema, os polos contém toda a informação acessível do sistema da mesma forma que a matriz de espalhamento \mathcal{S} : Estados de ressonância; Estados de antirressonância; Estados ligados; Estados antiligados, os quais serão analisados no decorrer desta dissertação. A equivalência entre equação de Schrödinger e funções de Green é apresentada em (20) para grafos do tipo estrela (S_n). Utilizaremos o grafo do tipo caminho com três vértices P_3 (que é equivalente ao grafo estrela S_3) para avaliar esta equivalência, como ilustra a Figura 12.

Inicialmente as soluções da equação de Schrödinger nas arestas

$$\psi_{1,2}(x) = a_1 e^{ikx} + a_2 e^{ik(\ell_{1,2}-x)}, \quad (4.16)$$

$$\psi_{2,3}(x) = b_1 e^{ikx} + b_2 e^{ik(\ell_{2,3}-x)}, \quad (4.17)$$

Figura 12 – Grafo caminho com três vértices P_3 com os rótulos em seus vértices, juntamente com as famílias de caminhos de espalhamento.



Fonte: O autor.

sendo definidos os comprimentos das arestas do vértice v_1 a v_2 $[0, \ell_{1,2}]$ e v_2 a v_3 $[0, \ell_{2,3}]$, os quais estão sendo utilizados como diferentes para maior generalidade dos resultados, da mesma forma para os números de onda k e κ . Desta forma, utilizando as condições de contorno de continuidade da função

$$\psi'_{1,2}(\ell_{1,2}) = \psi'_{2,3}(0), \quad (4.18)$$

e conservação da corrente,

$$\psi'_{1,2}(0) = 0, \quad (4.19)$$

$$-\psi'_{2,3}(\ell_{2,3}) = 0, \quad (4.20)$$

$$-\psi'_{1,2}(\ell_{1,2}) + \psi'_{2,3}(0) = 0, \quad (4.21)$$

obtemos o sistema de equações que já simplificado torna-se

$$\begin{cases} a_1 = \frac{k-\kappa}{k+\kappa} a_2 z_{1,2} + \frac{2\kappa}{k+\kappa} b_1 z_{2,3}, \\ a_2 = a_1 z_{1,2}, \\ b_1 = b_2 z_{2,3}, \\ b_2 = \frac{2\kappa}{k+\kappa} a_2 z_{1,2} + \frac{k-\kappa}{k+\kappa} b_1 z_{2,3}, \end{cases} \quad (4.22)$$

com $z_{1,2} = e^{ik\ell_{1,2}}$ e $z_{2,3} = e^{i\kappa\ell_{2,3}}$.

Podemos organizar este sistema na forma matricial

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{k-\kappa}{k+\kappa} z_{1,2} & \frac{2\kappa}{k+\kappa} z_{2,3} & 0 \\ z_{1,2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & z_{2,3} \\ 0 & \frac{2\kappa}{k+\kappa} z_{1,2} & \frac{k-\kappa}{k+\kappa} z_{2,3} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}, \quad (4.23)$$

em que podemos decompor a matriz 4x4 nas matrizes

$$S = \begin{pmatrix} 0 & \frac{k-\kappa}{k+\kappa} & \frac{2\kappa}{k+\kappa} & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \frac{2\kappa}{k+\kappa} & \frac{k-\kappa}{k+\kappa} & 0 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} z_{1,2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & z_{1,2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z_{2,3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & z_{2,3} \end{pmatrix}, \quad (4.24)$$

ou seja, a matriz é fatorada numa matriz métrica enquanto outra possui informação sobre espalhamento. Este sistema possui solução para $k \neq 0$ e $\kappa \neq 0$, desta forma,

$$\det [\mathbb{1} - SD] = 0, \quad (4.25)$$

que é o determinante secular cujos zeros fornecem o espectro do grafo (30, 8), ou seja seus polos. A forma explícita para determinar os polos é:

$$1 - \left(\frac{k - \kappa}{k + \kappa}\right) z_{1,2}^2 - \left(\frac{k - \kappa}{k + \kappa}\right) z_{2,3}^2 + \left(\frac{k - \kappa}{k + \kappa}\right)^2 z_{1,2}^2 z_{2,3}^2 - \left(\frac{2\kappa}{k + \kappa}\right)^2 z_{1,2}^2 z_{2,3}^2 = 0. \quad (4.26)$$

Agora utilizando o método de funções de Green, de forma semelhante à apresentada no capítulo 3 para o grafo ciclo com três vértices (C_3, \triangle), montamos o sistema de equações para o grafo caminho P_3 que possui sua matriz de adjacência

$$\mathcal{A}_{\bullet-\bullet-\bullet} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.27)$$

logo o sistema de equações possui a forma

$$\mathcal{P}_{i,j} = z_{i,j} \left(r_j \mathcal{P}_{j,i} + \sum_{l \in \Gamma_j} t_j \mathcal{A}_{j,l} \mathcal{P}_{j,l} - t_j \mathcal{P}_{j,i} \right), \quad (4.28)$$

em que comparando com a equação (3.22) desconsideramos que o grafo é aberto, ou seja, removemos as *leads*, como apresentado na Figura 12. Assim obtemos o sistema de equações para as famílias de caminhos

$$\begin{cases} \mathcal{P}_{1,2} = z_{1,2} (r_2 \mathcal{P}_{2,1} + t_2 \mathcal{P}_{2,3}), \\ \mathcal{P}_{2,1} = z_{2,1} r_1 \mathcal{P}_{1,2}, \\ \mathcal{P}_{2,3} = z_{2,3} r_3 \mathcal{P}_{3,2}, \\ \mathcal{P}_{3,2} = z_{3,2} (r_2 \mathcal{P}_{2,3} + t_2 \mathcal{P}_{2,1}), \end{cases} \quad (4.29)$$

em que $z_{i,j} = z_{j,i} = e^{ik\ell_{i,j}}$ e podemos escrever na forma matricial,

$$\begin{pmatrix} \mathcal{P}_{1,2} \\ \mathcal{P}_{2,1} \\ \mathcal{P}_{2,3} \\ \mathcal{P}_{3,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & z_{1,2} r_2 & z_{1,2} t_2 & 0 \\ z_{1,2} r_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & z_{2,3} r_3 \\ 0 & z_{2,3} t_2 & z_{2,3} r_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{P}_{1,2} \\ \mathcal{P}_{2,1} \\ \mathcal{P}_{2,3} \\ \mathcal{P}_{3,2} \end{pmatrix}. \quad (4.30)$$

Da mesma maneira que apresentado para a equação de Schrödinger, podemos decompor em duas matrizes, em que uma possui a métrica do grafo e outra com a informação sobre o espalhamento

$$D = \begin{pmatrix} z_{1,2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & z_{1,2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z_{2,3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & z_{2,3} \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} 0 & r_2 & t_2 & 0 \\ r_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & r_3 \\ 0 & t_2 & r_2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.31)$$

ou seja, novamente o espectro do grafo pode ser obtido na forma

$$\det [\mathbb{1} - DS] = 0, \quad (4.32)$$

que é a mesma equação obtida para o caso da equação de Schrödinger para o grafo P_3 . De forma explícita

$$1 - z_{1,2}^2 r_1 r_2 - z_{2,3}^2 r_2 r_3 - z_{1,2}^2 z_{2,3}^2 r_1 r_3 t_2^2 + z_{1,2}^2 z_{2,3}^2 r_1 r_2^2 r_3 = 0, \quad (4.33)$$

a qual possui a mesma forma da equação para os polos, uma vez que sejam substituída as reflexões e transmissões para um grafo vestido (grafos que possuem potenciais nas arestas) com diferentes números de onda em suas arestas. Podemos notar que a equação para os polos é escrita em termos das órbitas periódicas (6) existentes no grafo, e suas composições sem que haja sobreposição entre as órbitas.

Figura 13 – Órbitas periódicas existentes no grafo caminho com três vértices P_3 , que é equivalente ao grafo estrela S_3 .



Fonte: O autor.

A forma de uma órbita periódica pode ser avaliada entre dois vértices, indicando o caminho necessário para partir do vértice inicial e retornar a ele, como podemos visualizar na Figura 13, em que à esquerda temos as órbitas entre dois vértices consecutivos, cuja órbita é descrita na forma

$$\mathcal{O}_{1,2} = z^2 r_1 r_2, \quad (4.34)$$

ou seja, reflexão em v_1 (r_1), deslocamento de v_1 para v_2 ($z_{1,2} = z$), reflexão em v_2 (r_2), deslocamento de v_2 para v_1 ($z_{2,1} = z$). Enquanto para vértices não consecutivos, torna-se necessário acrescentar as transmissões nos vértices localizados entre os dois analisados, como à direita,

$$\mathcal{O}_{1,3} = z^4 r_1 r_3 t_2^2, \quad (4.35)$$

em que ocorre reflexão em 1 (r_1), deslocamento de 1 até 3 ($z_{1,2} z_{2,3} = z^2$) sofrendo transmissão em 2 (t_2), reflexão em 3 (r_3) e o caminho de volta de 3 a 1 transmitindo em 2.

Desta forma, utilizando as condições necessárias nos números de onda e consequentemente nas reflexões e transmissões, podemos mapear um poço/ barreira de potencial em um grafo caminho com três vértices, assumindo o vértice central com condição de contorno Neumann, $t_2 = 1$ e $r_2 = 0$, e os vértices das pontas são a descontinuidade de um potencial constante por partes, as reflexões são na forma apresentada no Apêndice A. Utilizando destas informações na equação (4.33), podemos escrever a equação para os polos de um poço/barreira de potencial obtida por meio da função de Green

$$1 - e^{4iKa} \left(\frac{K - k}{K + k} \right)^2 = 0. \quad (4.36)$$

A expressão acima pode ser manipulada algebricamente e leva à mesma forma que o denominador da matriz de espalhamento \mathcal{S} na equação (4.15), mostrando a equivalência entre as duas abordagens.

A forma geral da função de Green para um grafo caminho com n vértices em que as *leads* estão conectadas ao primeiro e último vértices, rotulados sequencialmente, pode ser generalizada na forma

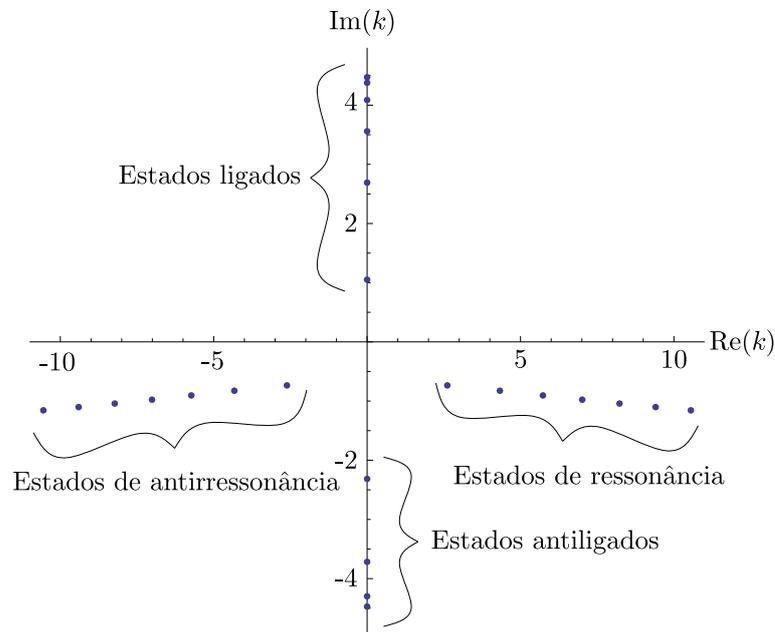
$$\mathcal{G}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 \sqrt{k_{x_f} k_{x_i}}} \frac{t_{ve} e^{ik(x_i+x_f)}}{\det[\mathbb{1} - DS]} \prod_{i=2}^{v_s} t_i \exp[ik_{i-1,i} \ell_{i-1,i}], \quad (4.37)$$

$k_{i-1,i}$ número de onda na aresta correspondente de tamanho $\ell_{i-1,i}$.

4.3.1 Polos da Função de Green: barreira de potencial

Os polos da função de Green (ou da matriz de espalhamento), quando analisados no plano k -complexo, fornecem informações sobre as energias associadas aos estados ligados, antiligados, ressonância e antirressonância, cuja posição no plano complexo identifica qual estado ocorre e sua energia associada (21). A Figura 14 ilustra como os polos são distribuídos no plano complexo em termos do número de onda k (28).

Figura 14 – Polos da função de Green no plano k -complexo e seus possíveis estados associados para um poço de potencial finito.



Fonte: O autor.

As ressonâncias estão localizadas no quarto quadrante do plano k -complexo, que espelhados em torno do eixo imaginário podemos obter as antirressonâncias. Os estados ligados ocorrem quando k é puramente imaginário positivo, enquanto os estados antiligados encontram-se sobre o eixo imaginário negativo (21).

Para o poço de potencial finito, os polos da função de Green ocorrem quando seu denominador tende a zero, ou em termos da matriz \mathcal{S} ocorrem quando o denominador da equação

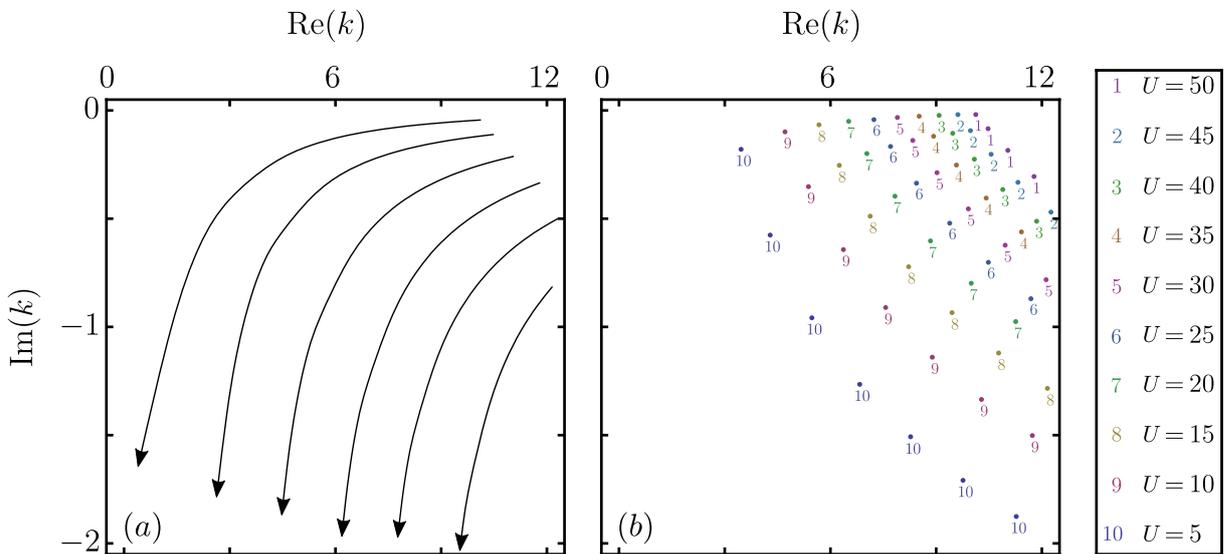
(4.15) tende a zero, ou seja,

$$k\sqrt{k^2 + 2U} \cos\left(2\sqrt{k^2 + 2U}a\right) - i(k^2 + U) \sin\left(2\sqrt{k^2 + 2U}a\right) = 0. \quad (4.38)$$

O fluxo de polos descreve como os pontos observados na Figura 14 alteram sua posição no plano complexo devido à mudanças nos parâmetros do poço, tal com sua profundidade e altura, ou sua largura.

Podemos visualizar na Figura 15 como é o fluxo de polos no plano complexo ao alterarmos a altura de uma barreira de potencial, com uma largura $\ell = 2a$, $a = 1$ fixa e utilizando o sistema natural de unidades em que $\hbar = 1$ e $m = 1$.

Figura 15 – Fluxo de polos da função de Green no plano k -complexo para uma barreira de potencial com largura fixa $\ell = 2$.



Fonte: O autor.

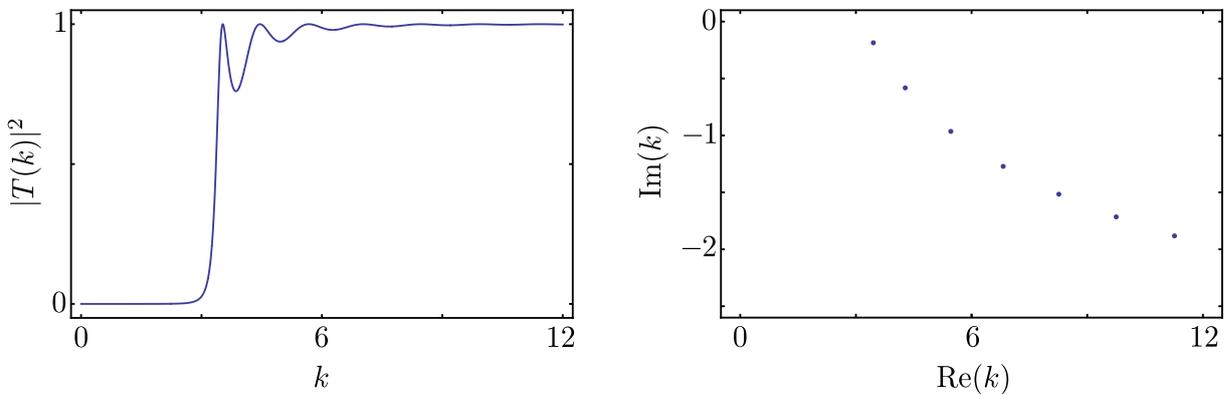
A Figura 15 apresenta como as ressonâncias, que estão no quarto quadrante do plano k -complexo, são alteradas devido a redução na altura da barreira de potencial para uma largura fixa. A Figura 15(a) foi construída com os valores numéricos das ressonâncias, avaliando como ocorre o deslocamento dos polos no plano k complexo ao variarmos a altura do potencial de $U = 50$ até $U \rightarrow 0$. Podemos notar que ao reduzir a altura da barreira, menor a energia necessária para que ocorra uma ressonância (parte real de k). O tempo de vida associado à largura da ressonância, representado no plano complexo por meio da parte imaginária do polo de forma inversamente proporcional (21), ou seja, quanto maior a parte imaginária do polo, maior a largura da ressonância que representa que a partícula sofre menor influência da barreira ao passar pela região de espalhamento.

Já na Figura 15(b) são apresentados alguns exemplos de valores de k que fornecem a distribuição dos polos de ressonância para cada altura do potencial U escolhido, no qual percebemos que para cada valor de altura da barreira, há um conjunto associado de polos do tipo ressonância (Figura 16), os quais são simétricos em torno do eixo imaginário que fornece as antirressonâncias.

As ressonâncias são pontos no qual a probabilidade de transmissão na barreira é máxima, mesmo que a energia da partícula seja menor que a energia da barreira, caracterizando o fenômeno de tunelamento quântico.

Outra forma de avaliar para quais valores de energia ocorrem as ressonâncias é calculando o módulo quadrado da amplitude de transmissão que é o coeficiente de transmissão. Neste caso as ressonâncias apresentam-se como picos nos quais o coeficiente de transmissão é máximo, como é apresentado na Figura 16, em que a esquerda temos o coeficiente de transmissão em função do número de onda k , e a direita os polos de ressonância, para um valor fixo de largura e intensidade da barreira, a fim de avaliarmos como este efeito se manifesta em ambos os casos.

Figura 16 – Coeficiente de transmissão para uma barreira de potencial com largura $\ell = 2$ e altura $U = 5$, e seus polos no plano complexo indicando as posições e larguras associados às ressonâncias.



Fonte: O autor.

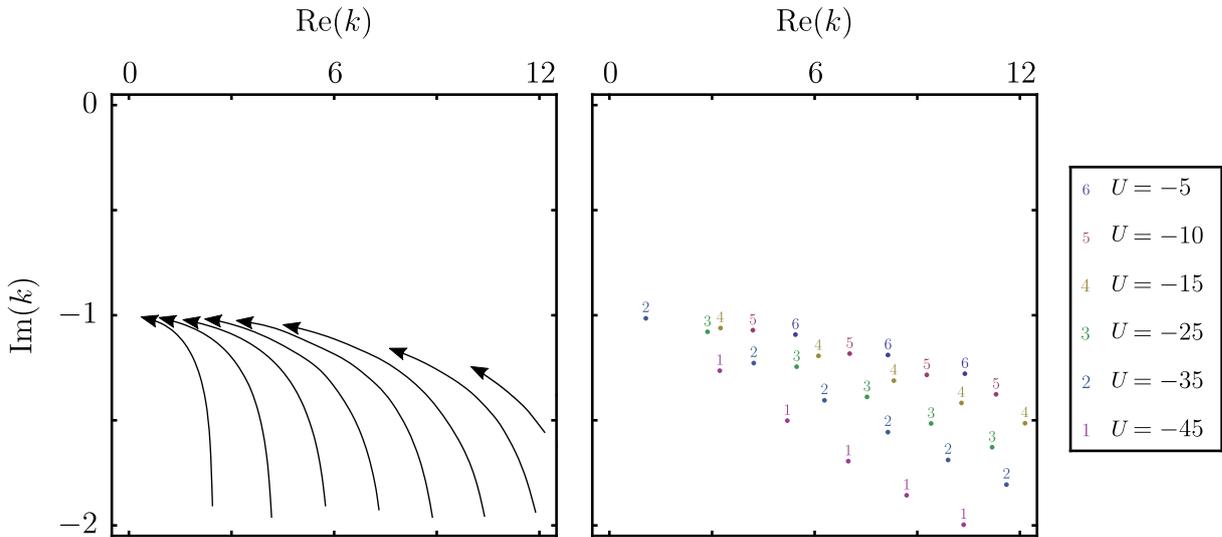
Podemos visualizar que a figura à esquerda possui um platô em zero até um certo valor de energia, indicando que não há probabilidade de transmissão para energias menores que $k = \sqrt{10}$. Após este valor temos os picos de transmissão, que podemos visualizar no plano complexo os pontos na forma $k = x + iy$, em que a x indica o valor de k em que ocorre a ressonância e y refere-se à largura da ressonância, a qual é inversamente proporcional ao tempo de vida de um estado meta-estável (8). Desta forma, podemos notar que quanto mais próximo o ponto estiver do eixo real, menor a largura da ressonância.

Podemos também notar que quanto maior o valor de k , mais largas tornam-se as ressonâncias, o que é esperado uma vez que se a partícula possuir energia maior que a barreira, maior sua probabilidade de transmissão, cujo valor limite é 1.

4.3.2 Polos da função de Green: poço de potencial

A análise realizada para uma barreira pode ser empregada de forma semelhante para o poço de potencial, novamente fixando sua largura e variando sua profundidade, como podemos visualizar na Figura 17, que apresenta como os polos de ressonância são distribuídos no plano k -complexo para cada profundidade do poço de potencial, e como a variação em sua profundidade altera os valores de ressonância.

Figura 17 – Fluxo de polos do tipo ressonância da Função de Green no plano k -complexo para um poço de potencial com largura fixa $\ell = 2$.

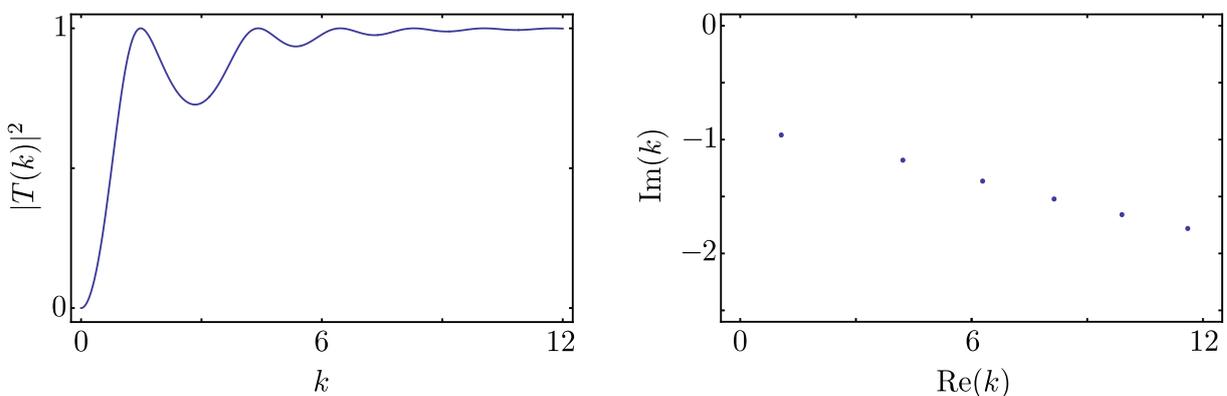


Fonte: O autor.

Neste caso do poço de potencial, ao aumentar a sua profundidade faz com que os polos desloquem-se de $-\infty$ convergindo para o eixo imaginário, os quais ao tocarem o eixo geram dois pontos de estados antiligado, que serão discutidos na seção 4.3.3. Podemos notar como é o deslocamento dos polos desde uma barreira, que ao ser reduzida em sua altura, os polos tendem a menos infinito, que indica o caso de partícula livre, para então a medida que aumentamos a profundidade do poço ocorra este deslocamento de menos infinito convergindo ao eixo imaginário. Ainda na Figura 17 a direita, apresentam-se alguns pontos que representam as ressonâncias para cada valor de profundidade do poço.

A Figura 18 ilustra para o caso do poço, como o coeficiente de transmissão apresenta as ressonâncias e como podemos visualizá-los no plano k -complexo.

Figura 18 – Comparação entre o coeficiente de transmissão e os polos de ressonância, com largura do poço $\ell = 2$ e profundidade $U = -10$.



Fonte: O autor.

Como já citado anteriormente, as ressonâncias são os picos em que o coeficiente de

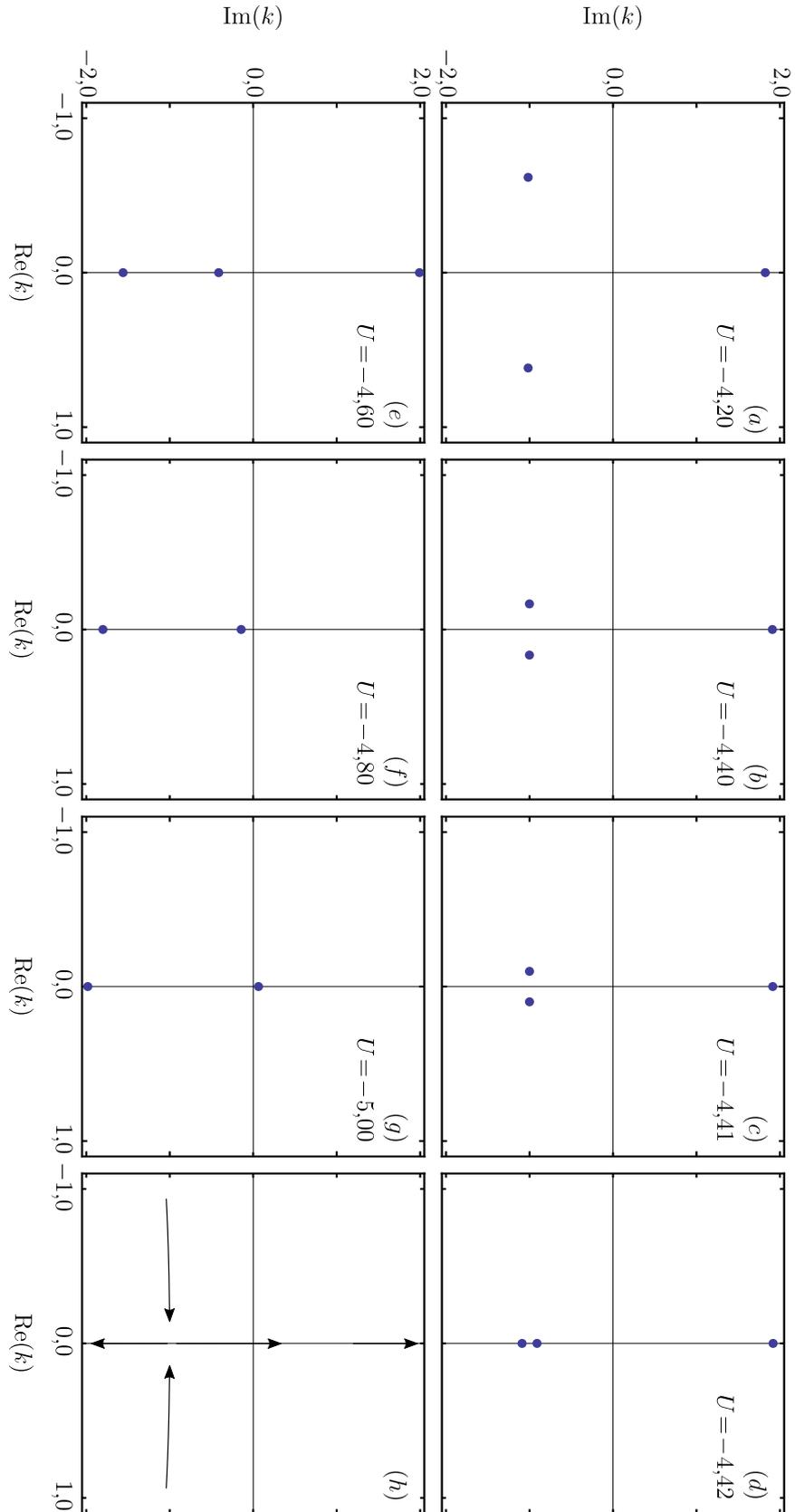
transmissão é máximo, em que sua posição e largura podem ser avaliados por meio da localização dos polos no plano complexo.

4.3.3 Estados ligado e antiligado provenientes de ressonâncias

O número de estados ligados de um poço quadrado de potencial para uma largura fixa, depende de sua profundidade (35). Na Figura 19 ilustramos o mecanismo pelo qual o deslocamento dos polos no plano complexo dá origem a novos estados ligados e antiligados.

Como podemos visualizar na Figura 19(a) até 19(c), ao aumentar a profundidade do poço, temos que o par ressonância e antirressonância aproxima-se do eixo imaginário, até tocarem o eixo e gerarem dois estados antiligados, como apresentado em 19(d), os quais deslocam-se em sentidos opostos a partir do ponto de surgimento, até que um dos polos continua se deslocando no sentido imaginário negativo, enquanto o outro aproxima-se do eixo real, gerando o próximo estado ligado, como vemos em 19(g), ao passar para o eixo imaginário positivo. Em 19(h) é ilustrado de forma qualitativa como ocorre este fluxo dos polos ao aumentarmos a profundidade do poço de potencial.

Figura 19 – Surgimento de estados ligado e antiligado a partir de um par ressonância antirressonância em um poço de potencial com largura fixa $\ell = 2$ e profundidade variável, cuja profundidade está aumentando.



Fonte: O autor.

5 PICOS DE TRANSMISSÃO DE COMPOSIÇÃO DE GRAFOS QUÂNTICOS

Neste capítulo será discutido sobre o trabalho (22), publicado na revista *Physical Review A*, no qual utilizamos grafos quânticos simples e alguns arranjos em série e em paralelo para estudo de suas propriedades de transmissão. Neste trabalho o escopo foi utilizar grafos que possuíssem todos os vértices com o mesmo grau, mas com conectividade distinta, a fim de investigar como a transmissão é alterada devido a mudança de topologia do grafo, ou seja, diferentes formas de conexão entre os vértices do grafo. Utilizamos destes mesmos grafos para construir arranjos simples em série e em paralelo, onde notamos que certos arranjos geram uma banda de transmissão nula, que chamamos região de supressão. Outro ponto investigado foi o surgimento de finos picos de ressonância no interior desta região de supressão proveniente da interferência quântica construtiva, efeitos que são de grande interesse no controle da transmissão quântica.

5.1 Escolha dos Grafos quânticos

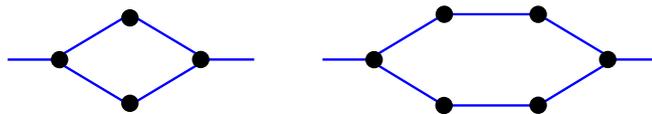
Buscando analisar as propriedades de transmissão em grafos simples, utilizaremos as condições de contorno do tipo Neumann, então os coeficientes de transmissão e reflexão em cada vértice j depende apenas de seu grau g_j ,

$$r_j = \frac{2}{g_j} - 1, \quad t_j = \frac{2}{g_j}, \quad (5.1)$$

tornando as propriedades de transmissão global dos grafos analisados dependente apenas da sua estrutura. Enfatizamos aqui que para calcular as amplitudes de transmissão foi empregada a metodologia de funções de Green, como apresentado no capítulo 3.

Inicialmente buscamos utilizar grafos que possuíssem a estrutura mais simples possível. Entretanto, tais grafos são do tipo caminho e apresentam reflexão nula e transmissão total em todos os seus vértices, ou seja, o coeficiente de transmissão global do grafo será máximo para qualquer valor de energia. Por exemplo: grafo caminho com um vértice $|T_{\bullet}(k)|^2 = 1$; grafo caminho com dois vértices $|T_{\bullet\bullet}(k)|^2 = 1$; e assim por diante para grafos em que seus vértices possuam todos grau 2. Desta forma, foram considerados grafos em que seus vértices possuíssem grau distinto, como representado na Figura 20.

Figura 20 – Grafos diamante e hexágono com seus vértices possuindo graus 2 e 3.



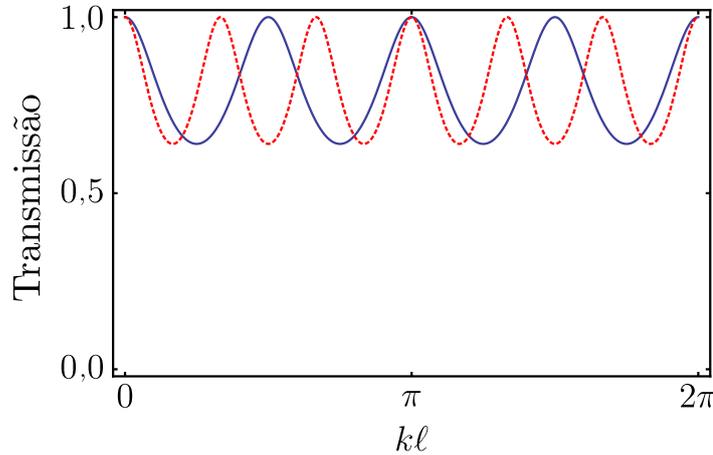
Fonte: O autor.

Para estes grafos as amplitudes de transmissão são dadas por,

$$T_{\diamond}(k) = \frac{8e^{2ikl}}{9 - e^{4ikl}}, \quad T_{\hexagon}(k) = \frac{8e^{3ikl}}{9 - e^{6ikl}}, \quad (5.2)$$

em que ℓ é o comprimento das arestas. Os coeficientes de transmissão associados apresentados na Figura 21.

Figura 21 – Coeficiente de transmissão dos grafos diamante (linha azul sólida) e hexágono (linha vermelha tracejada).

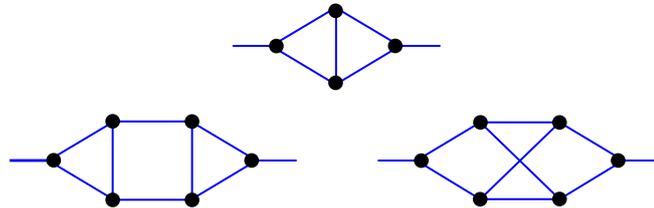


Fonte: O autor.

Desta forma, podemos perceber que os coeficientes de transmissão alteram seu aspecto, entretanto, como estamos utilizando os vértices do tipo Neumann, temos que os dois grafos são equivalentes, supondo que o tamanho das arestas do grafo diamante sejam equivalentes a $3/2$ das arestas do hexágono, tornando as transmissões exatamente iguais.

Estes grafos (\diamond e \hexagon) possuem o mesmo número de vértices, entretanto, eles possuem vértices com diferentes graus. Logo buscando grafos que possuam vértices todos com mesmo grau, avaliamos os grafos apresentados na Figura 22, que possuem suas formas como um diamante com uma aresta no meio e hexágonos, um com as ligações no interior em forma de X e outro na forma de quadrado:

Figura 22 – Grafos diamante e hexágono que possuem vértices todos com grau 3.



Fonte: O autor.

As amplitudes de transmissão para os grafos apresentados são dadas por:

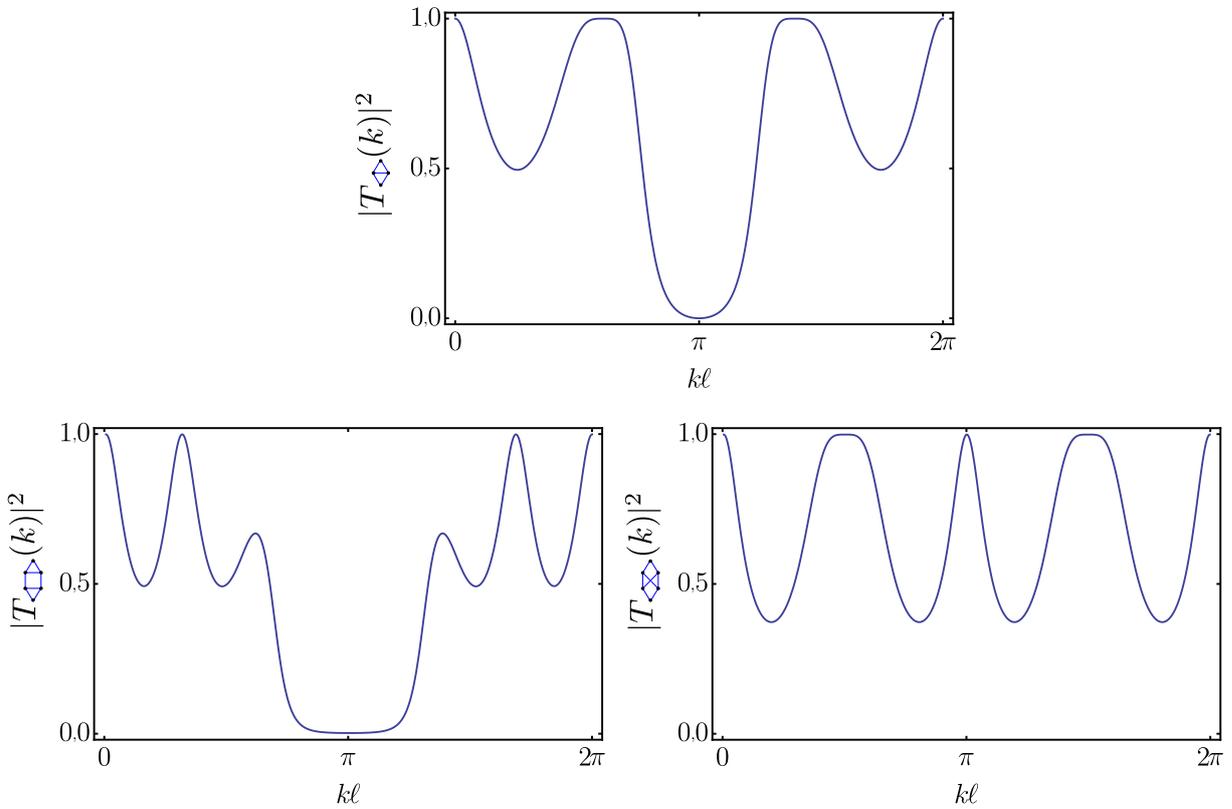
$$T_{\diamond}(k) = \frac{16(e^{2ik\ell} + e^{3ik\ell})}{27 + 9e^{ik\ell} + 6e^{2ik\ell} - 6e^{3ik\ell} - e^{4ik\ell} - 3e^{5ik\ell}}, \quad (5.3)$$

$$T_{\hexagon}(k) = \frac{32(e^{4ik\ell} + e^{5ik\ell})}{(9 + 4e^{2ik\ell} + 3e^{4ik\ell})(9 - 3e^{ik\ell} + e^{2ik\ell} - 3e^{3ik\ell})}, \quad (5.4)$$

$$T_{\diamond}(k) = \frac{64e^{3ik\ell}}{81 + 9e^{2ik\ell} - 17e^{4ik\ell} - 9e^{6ik\ell}}, \quad (5.5)$$

com seus coeficientes de transmissão apresentados na Figura 23.

Figura 23 – Grafos diamante e hexágonos, os quais possuem todos os seus vértices com grau 3.



Fonte: O autor.

Podemos notar que nos grafos diamantes, ao acrescentarmos uma aresta (por consequência alterando os graus dos vértices) e avaliando a diferença entre os coeficientes de transmissão entre dois grafos Γ e Γ' ,

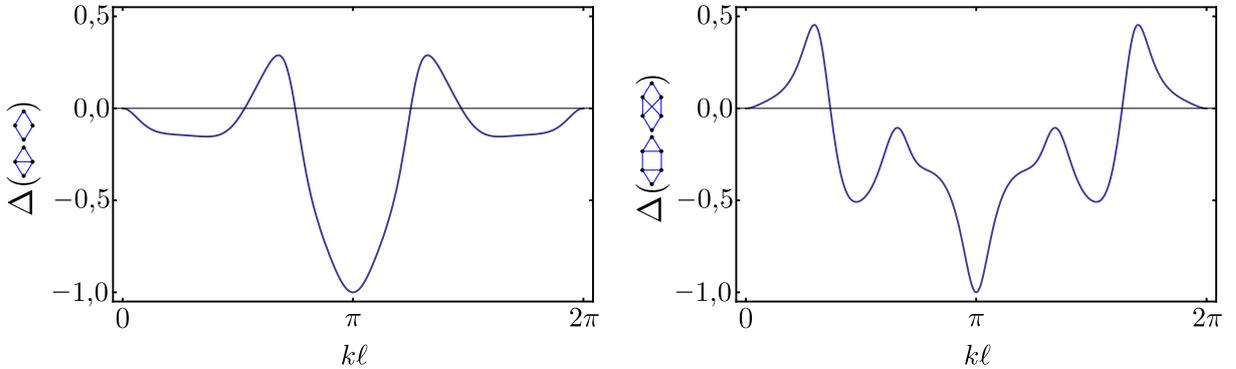
$$\Delta(\Gamma\Gamma') = |T_{\Gamma}(k)|^2 - |T_{\Gamma'}(k)|^2, \quad (5.6)$$

temos que o grafo com menos arestas apresenta maior eficiência na transmissão para alguns valores de k (Figura 24), um resultado contra intuitivo, uma vez que espera-se um aumento na probabilidade de transmissão devido ao aumento no número de arestas conectando o vértice de entrada e o vértice de saída. Esse efeito é semelhante ao que ocorre no Paradoxo de Braess (26, 27, 36, 37), o qual descreve que se duas vias de acesso a uma determinada cidade possuem congestionamento, aumentar o número de vias pode, em certos casos, não melhorar o fluxo de veículos. Este paradoxo é explorado em (38, 39), sobre ineficiência do transporte em redes mesoscópicas

No caso dos grafos hexagonais, observamos que os dois grafos possuem o mesmo número de vértices, arestas e o grau de todos os vértices é 3. Analisando o coeficiente de transmissão, podemos perceber que o grafo  possui uma região de supressão em torno de π , enquanto o grafo  possui um máximo em π . Esta ressonância do grafo  localizada em π foi investigada no plano complexo, confirmando sua posição e determinamos sua largura com o valor de $w_{\diamond} = 0,54408$.

A Figura 24 apresenta a diferença entre as probabilidades de transmissão entre os diamantes e os hexágonos.

Figura 24 – Diferença entre os coeficientes de transmissão entre os grafos diamante (esquerda) e entre os grafos hexagonais (direita).



Fonte: O autor.

Na janela de $0 \leq kl \leq 2\pi$ observada, a eficiência do grafo  é maior que a do  no intervalo de $1,15 < kl < 5,13$. Avaliando estes grafos em termos de caminhadas quânticas (40, 41), podemos utilizar a ideia de *hitting time*: Clássico: representa o número médio de passos necessários para que um caminhante aleatório partindo de um vértice v_i chegar a um vértice v_f (42); Quântico: número de passos necessários para chegar a um dado estado quântico na aresta e_f partindo de um estado inicial na aresta e_i (43, 41). Em termos das funções de Green, esta é compreendida como uma “função geratriz” para todos os possíveis caminhos de espalhamento através do grafo.

Para fazer a relação com as caminhadas quânticas associamos o termo $z = e^{ikl}$ equivalente a um passo em caminhadas quânticas. Desta forma, para obtermos todos os caminhos com m passos, utilizamos o operador passo (40)

$$\hat{P}_m = \frac{1}{m!} \left. \frac{\partial^m}{\partial z^m} \right|_{z=0}. \quad (5.7)$$

Desta forma, a probabilidade total \mathcal{Q} para um caminhante quântico entrar no grafo por meio de uma *lead* e sair do outro lado na outra *lead*, em m passos no processo de espalhamento é

$$\mathcal{Q}(m) = |\hat{P}_m T_\Gamma|^2, \quad (5.8)$$

em que T_Γ é a amplitude de transmissão no grafo Γ . A probabilidade de fazer uma medição na partícula na primeira vez que ela sai do grafo, independente do número de passos necessários, possui a forma

$$\mathcal{Q}_{\text{saída}} = \sum_{m=1}^{\infty} \mathcal{Q}(m), \quad (5.9)$$

logo podemos definir um *hitting time* condicional h (43, 41)

$$h = \frac{1}{\mathcal{Q}_{\text{saída}}} \sum_{m=1}^{\infty} m \mathcal{Q}(m), \quad (5.10)$$

a qual foi utilizada no cálculo dos *hitting time* para os grafos hexagonais em que obtemos $h_{\langle \diamond \rangle} = 4,01196$ e $h_{\langle \diamond \rangle} = 13/4 = 3,25$.

Utilizando a ideia de *hitting time* contribui no âmbito de avaliar a maior eficiência na transmissão do grafo $\langle \diamond \rangle$ na janela observada de $[0, 2\pi]$. Entretanto, podemos visualizar uma forma de manifestação do paradoxo de Braess nos intervalos em que a transmissão do grafo $\langle \diamond \rangle$ é mais eficiente, pois comparando apenas os *hitting time* dos grafos, consideraríamos o grafo $\langle \diamond \rangle$ mais eficiente para todo valor de $k\ell$.

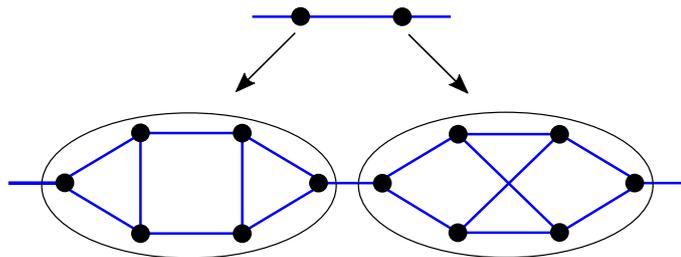
5.2 Composição de circuitos

Nesta seção vamos construir composições de circuitos utilizando os grafos $\langle \diamond \rangle$ e $\langle \diamond \rangle$, a fim de avaliar como a transmissão pode ser controlada devido a estas associações.

5.2.1 Composição de grafos em série

Considerando a composição dos grafos como circuitos, utilizamos inicialmente o arranjo em série dos grafos hexagonais, devido a características de seus vértices. Desta forma, no arranjo em série buscamos manter os vértices com grau 3, logo sua associação foi construída como apresentado na Figura 25, em que associamos o grafo caminho com dois vértices ($P_2, \bullet-\bullet$), supondo que cada um de seus vértices possui uma estrutura interna na forma do hexágono desejado. Os arranjos em série serão denotados por $S(\Gamma \Gamma')$, sendo Γ e Γ' os grafos utilizados na construção.

Figura 25 – Representação da construção do arranjo em série dos grafos $\langle \diamond \rangle$ e $\langle \diamond \rangle$; $S(\langle \diamond \rangle \langle \diamond \rangle)$.



Fonte: O autor.

Devido a esta construção, podemos utilizar a amplitude de transmissão do grafo $\bullet-\bullet$ no cálculo dos arranjos em série, onde supomos que cada vértice possui uma estrutura interna, como apresentado em (19)

$$T_{\bullet-\bullet}(k, t_1, t_2, r_1, r_2) \equiv T_{S(\Gamma \Gamma')}, \quad (5.11)$$

$$T_{S(\Gamma \Gamma')}(k) = \frac{t_1 t_2 e^{ik\ell}}{1 - r_1 r_2 e^{2ik\ell}}, \quad (5.12)$$

em que utilizamos as equações (5.4) e (5.5) para as transmissões, enquanto as reflexões são dadas por

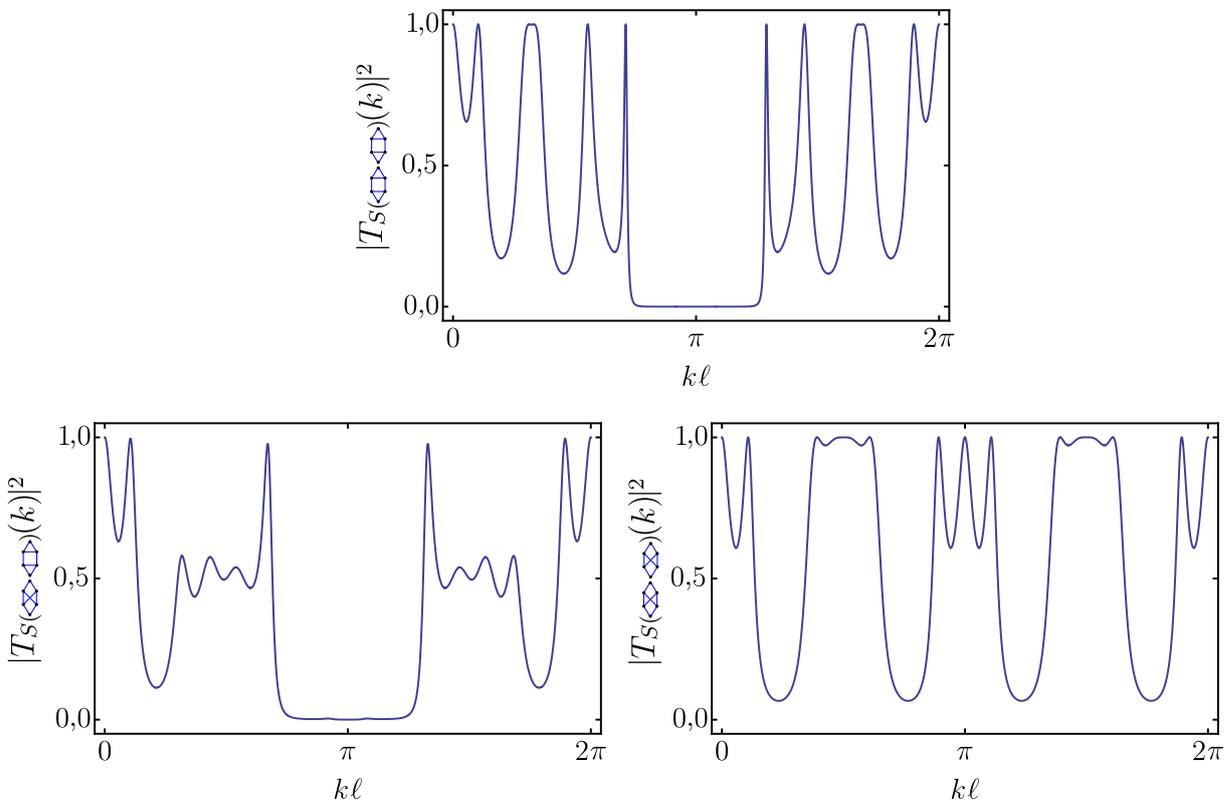
$$R_{\langle \diamond \rangle} (k) = \frac{(e^{ik\ell} - 1) (27(1 + e^{6ik\ell}) + 18(e^{ik\ell} + e^{5ik\ell}) + 57(e^{2ik\ell} + e^{4ik\ell}) + 4e^{3ik\ell})}{(9 + 4e^{2ik\ell} + 3e^{4ik\ell}) (9 - 3e^{ik\ell} + e^{2ik\ell} - 3e^{3ik\ell})}, \quad (5.13)$$

$$R_{\langle \diamond \diamond \rangle} (k) = \frac{27(e^{2ik\ell} - 1)(1 + e^{2ik\ell})^2}{81 + 9e^{ik\ell} + 17e^{4ik\ell} + 9e^{6ik\ell}}, \quad (5.14)$$

calculadas por meio da equação (3.29).

Conhecendo todos os parâmetros necessários podemos construir as associações em série, dos grafos, com suas probabilidades de transmissão apresentados na Figura 26.

Figura 26 – Probabilidades de transmissão da associação em série dos grafos hexagonais; composição com dois grafos.



Fonte: O autor.

A associação em série dos grafos gera alguns efeitos interessantes, por exemplo, na transmissão do grafo $S(\langle \diamond \rangle \langle \diamond \rangle)$ que a região de supressão em torno de $k\ell = \pi$ torna-se mais acentuada, além dos picos em torno da região de supressão tornarem-se máximos em relação ao caso do grafo $\langle \diamond \rangle$ apenas.

Para a associação $S(\langle \diamond \diamond \rangle \langle \diamond \diamond \rangle)$ notamos que o pico central de transmissão total tem sua estrutura modificada para três picos, e evidencia os pontos onde a transmissão não é máxima tornando-a ainda menor, entretanto, não chega a zero. O pico de transmissão localizado em π tem sua largura alterada para $w_{\langle \diamond \diamond \rangle} = 0,25037$.

Na associação mista dos grafos $S(\langle \diamond \rangle \langle \diamond \diamond \rangle) = S(\langle \diamond \diamond \rangle \langle \diamond \rangle)$, podemos visualizar que a região de supressão permanece mais evidente, porém com duas ondulações quase imperceptíveis

em torno de π . Em torno da região de supressão percebe-se uma atenuação nos picos que eram máximos em $\langle \diamond \diamond \rangle$, enquanto nas extremidades dos gráficos (próximo a $k\ell = 0$ e $k\ell = 2\pi$), não houveram grandes mudanças pois ambos apresentam pontos máximos seguidos de um mínimo, o qual tornou-se mais evidente.

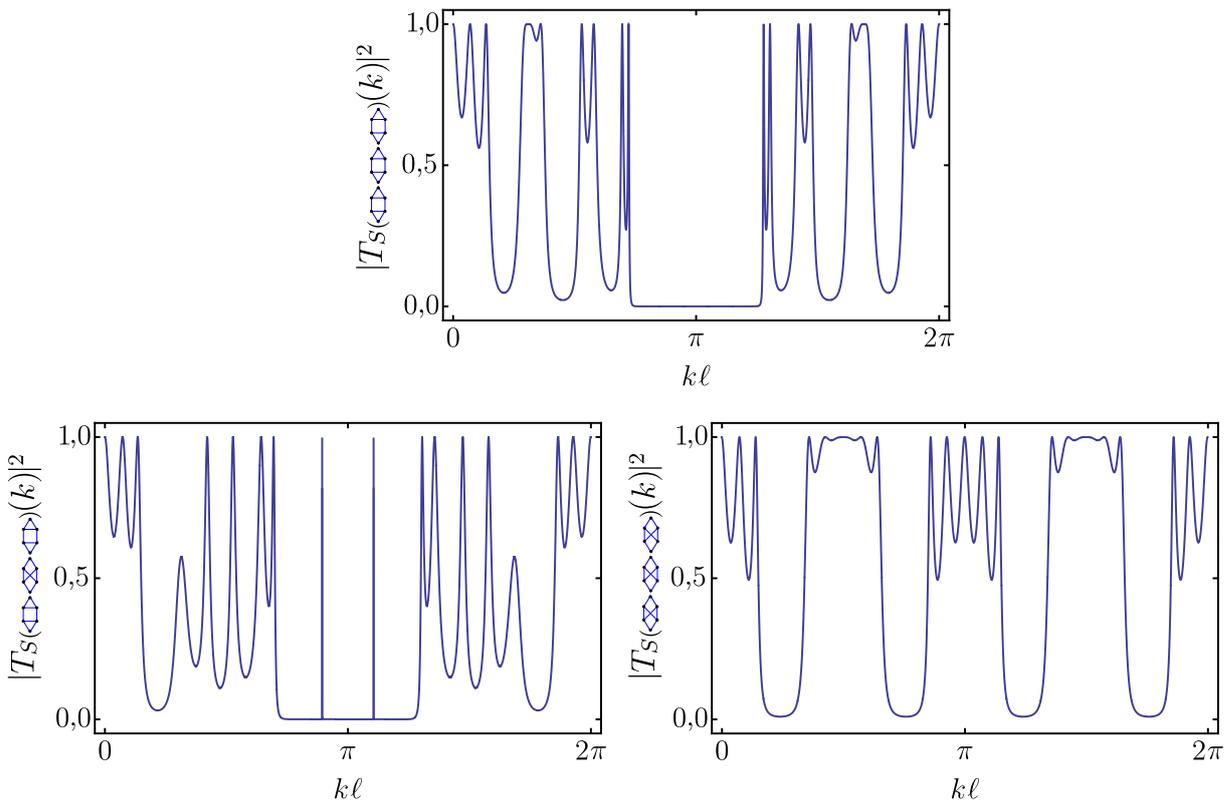
Com base nestes resultados, construiu-se também as associações em série com três destes grafos ($S(\Gamma \Gamma' \Gamma'')$). Para isso utilizamos a amplitude de transmissão para um grafo caminho com três vértices ($-\bullet-\bullet-\bullet-$), com a ideia de que cada vértice possui uma estrutura interna (19), cuja transmissão é dada por

$$T_{-\bullet-\bullet-\bullet-}(k, t_1, t_2, t_3, r_1, r_2, r_3) \equiv T_{S(\Gamma \Gamma' \Gamma'')}(k), \quad (5.15)$$

$$T_{S(\Gamma \Gamma' \Gamma'')}(k) = \frac{t_1 t_2 t_3 e^{2ik\ell}}{1 - r_1 r_2 e^{2ik\ell} - r_2 r_3 e^{2ik\ell} + r_1 r_2^2 r_3 e^{4ik\ell} - r_1 r_3 t_2^2 e^{4ik\ell}}, \quad (5.16)$$

e seus vértices possuem um estrutura interna de acordo com a escolha dos hexágonos. As probabilidades de transmissão para estas associações podem ser visualizadas na Figura 27.

Figura 27 – Probabilidades de transmissão da associação em série dos grafos hexagonais; composição com três grafos.



Fonte: O autor.

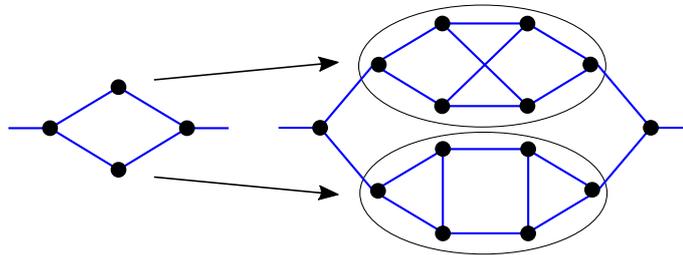
Na associação com três grafos podemos perceber que as estruturas formadas nas transmissões são modificadas, mantendo algumas características. Em $S(\langle \diamond \diamond \diamond \rangle)$, temos a banda de supressão em torno de $k\ell = \pi$, entretanto, os picos máximos de transmissão são modificados gerando dois picos cada. Enquanto na associação $S(\langle \diamond \diamond \rangle)$ temos o efeito

semelhante, que podemos evidenciar principalmente nos máximos centrais, que era único no grafo sozinho, tornou-se três na associação de 2 em série e neste caso torna-se 5. Entretanto, o efeito que se mostra mais interessante é o caso em que temos $S(\langle \diamond \rangle \langle \diamond \rangle \langle \diamond \rangle)$, em que surgem dois picos finos de ressonância no interior da região de supressão, ou seja, apenas partículas com uma energia específica (no interior da região de supressão) podem ser transmitidas através desta associação, o que pode ser associado a uma forma de filtro. Os picos de ressonância que aparecem no interior da região de supressão estão localizados em $k\ell = \pi \pm 0,33250$, com largura da ordem de $w \approx 0,00030$. Estes picos de transmissão são gerados devido a interferência quântica construtiva. As demais associações possíveis com três hexágonos foram consideradas, entretanto, não observamos diferentes efeitos qualitativos dos já apresentados.

5.2.2 Composição de grafos em paralelo

Conhecendo a composição dos circuitos em série com os grafos hexagonais, torna-se natural a investigação de sua composição em paralelo, em que utilizaremos o grafo $\langle \diamond \rangle$, em que seus vértices de grau 2 possuem uma estrutura interna (Figura 28), enquanto seus vértices de entrada e de saída possuem transmissão $2/3$ e reflexão $-1/3$, de acordo com a equação (5.1).

Figura 28 – Representação da associação em paralelo dos grafos hexagonais.



Fonte: O autor.

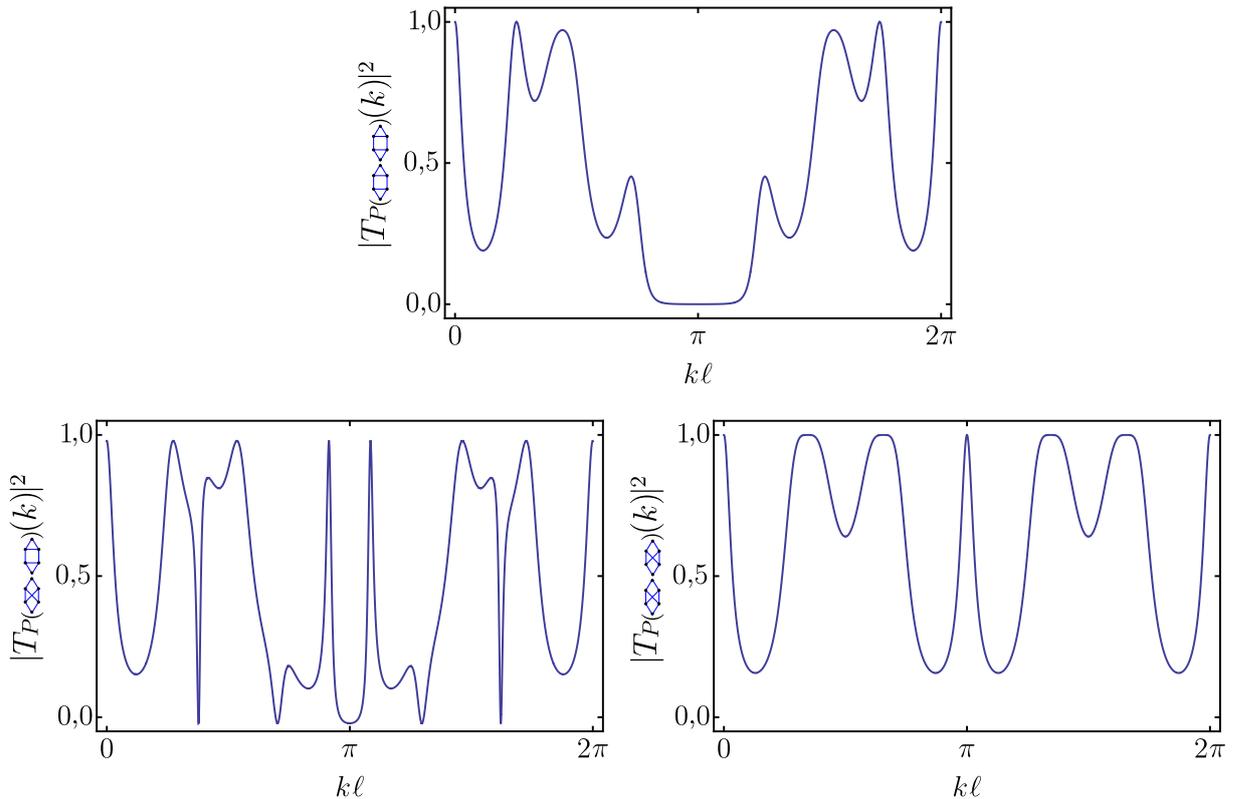
Estes arranjos em paralelos entre os dois grafos Γ e Γ' serão denotados por $P(\Gamma \Gamma')$ e podem ser visualizados na Figura 28.

Analisando as composições em paralelo, podemos perceber que alguns efeitos são semelhantes, como no caso da supressão em torno de π para $P(\langle \diamond \rangle \langle \diamond \rangle)$, entretanto, não há mais os picos máximos de transmissão em torno da região de supressão como no caso da associação em série.

Na associação $P(\langle \diamond \rangle \langle \diamond \rangle)$, notamos que o pico máximo de transmissão em π é mantido, enquanto as estruturas adjacentes são modificadas, efeito diferente a associação em série, cuja principal modificação pode ser percebida no pico de transmissão central.

A associação que sofre maiores modificações é a composição mista em paralelo na forma $P(\langle \diamond \rangle \langle \square \rangle)$, porém apresenta efeitos interessantes como picos máximos de transmissão em torno de π e dois pontos em que a transmissão decai rapidamente a zero, efeito similar ao que ocorre em ressonâncias de Feshbach (24, 23, 44).

Figura 29 – Probabilidades de transmissão da associação em paralelo dos grafos hexagonais.



Fonte: O autor.

5.3 Discussão

O escopo do trabalho (22) foi estudar as propriedades de transmissão em grafos simples. Entretanto, as escolhas iniciais entre diamante (\diamond) e hexágono (\hexagon) não apresentaram resultados significativos. Avaliando os coeficientes de transmissão entre os diamantes (\diamond, \diamond), podemos visualizar efeitos interessantes, em que dependendo do número de onda um é mais eficiente que o outro, como apresentado na Figura 24. Entretanto, como os grafos possuem vértices com graus distintos e o número de arestas também é diferente, utilizamos os grafos hexagonais ($\diamond \leftrightarrow \diamond$, \hexagon), que apresentam vértices todos com mesmo grau e mesmo número de arestas, para que as características diferentes em suas transmissões possam ser atribuídas apenas devido à diferença entre as conexões internas, ou seja, devido a diferença na topologia dos grafos.

A principal característica que podemos destacar é a existência da região de supressão que ocorre devido ao grafo $\diamond \leftrightarrow \diamond$, que torna-se mais evidente na associação em série. Outro efeito interessante é a existência dos picos finos de transmissão no interior da região de supressão, devido a composição mista dos grafos. Estes efeitos podem ser interessantes na construção de dispositivos quânticos a fim de manipular a probabilidade de transmissão.

Supondo que estes grafos quânticos possam ser utilizados como dispositivos elementares, estes efeitos poderiam ser simulados utilizando redes de micro-ondas, como nos trabalhos

(9, 10). Outras linhas que podem ser exploradas na utilização de grafos em sua implementação experimental, destacando os grafos apresentados, podem ser nas chamadas redes complexas opticamente ativas (45, 46), ou em pontos quânticos (*quantum dots*), como apresentado em (12, 13).

Do ponto de vista teórico, outras possibilidades podem ser testadas visando tornar o grafo mais próximo a situações reais, como a inclusão de potenciais (barreiras ou poços) nas arestas, interações pontuais nos vértices do tipo δ ou δ' com intensidades controláveis (47). A implementação de campos magnéticos ao longo das arestas, os quais poderiam gerar quebra na simetria de reversão temporal, ou seja, poderia gerar um caminho preferencial de transmissão no grafo.

6 CONCLUSÃO

Neste trabalho apresentamos um estudo sobre grafos quânticos e algumas de suas aplicações em mecânica quântica, utilizando a abordagem de funções de Green. A utilização de grafos quânticos para o estudo de poços e barreiras de potencial proporciona uma maior abrangência na análise, uma vez que grafos possuem maior versatilidade para descrição de sistemas, devido a possibilidade de definirmos potenciais nas arestas e nos vértices do grafo. Outro ponto a ser destacado é a utilização de grafos que possuem vértices com graus maiores que 2, os quais possibilitam a generalização de potenciais constantes por partes na forma de sistemas unidimensionais multiconectados. É importante destacarmos que a abordagem de potenciais constantes por partes interpretados como grafos vestidos utilizando a abordagem de funções de Green é uma contribuição original obtida neste trabalho.

Discutimos a matriz de espalhamento que possui papel fundamental na análise de sistemas de espalhamento, que possibilita analisarmos o fluxo de polos para barreira e poço de potencial, que descreve como os pontos associados aos estados de ressonância e antirressonância, os quais estão localizados nos quarto e terceiro quadrante respectivamente, e os estados ligados e antiligados, que encontram-se no eixo imaginário positivo e negativo respectivamente. Os polos da matriz de espalhamento foram analisados como polos da função de Green, em que mostramos a equivalência entre as abordagens em grafos, o que torna sua obtenção bastante simples, uma vez que não é necessário resolver a equação diferencial, apenas constrói-se o sistema de equações lineares associado às famílias de caminhos de espalhamento e extraímos a matriz cujo determinante secular fornece os polos.

Os assuntos apresentados nos primeiros capítulos são utilizados na descrição dos efeitos de transmissão dos grafos diamante e hexagonais, em que focamos a atenção nos grafos hexagonais, onde interpretamos estes grafos como dispositivos quânticos para controle da transmissão. A partir disso, construímos associações em série e paralelo a fim de avaliar efeitos de transmissão gerados devido a estes circuitos, como as regiões de supressão total da transmissão e dos picos de transmissão no interior das regiões de supressão.

Além disso, devido a grande flexibilidade em suas construções, sua utilização se torna viável na busca outros sistemas que possam ser modelados por meio de grafos é bastante promissora, como simulações de condução em moléculas e redes complexas. Também em virtude da possibilidade das simulações experimentais com redes de micro-ondas, por exemplo, a ideia da construção de dispositivos quânticos utilizando grafos e suas possíveis aplicações podem ser testadas experimentalmente, favorecendo ainda mais suas análises.

Os picos finos de transmissão obtidos da composição de grafos simples, são bastante interessantes, uma vez que os grafos utilizados não possuem tais estruturas quando analisados separadamente. A escolha dos grafos para análise foi feita buscando a estruturas mais simples possíveis capazes de fornecer feitos característicos na transmissão. Entretanto optamos por utilizar os grafos hexagonais pois estes possuem mesmo número de vértices, arestas e todos os vértices possuem grau três, desta forma temos que os efeitos de transmissão observados podem

ser atribuídos à topologia dos grafos, ou seja, sua conectividade. Os efeitos de supressão e picos finos no interior desta mesma região da transmissão podem ser interessantes na construção de dispositivos quânticos, a fim de manipular a probabilidade de transmissão. Supondo tais grafos como dispositivos, estas propriedades poderiam ser simuladas utilizando redes de micro-ondas.

Do ponto de vista teórico, diversas possibilidades podem ser testadas visando tornar o grafo mais próximo a situações reais, como inclusão de potenciais nos vértices e/ou nas arestas. Também a implementação de campos magnéticos é um ponto interessante a ser estudado, uma vez que a simetria de reversão temporal seria quebrada.

7 PERSPECTIVAS FUTURAS

Tendo em vista a flexibilidade do estudo de grafos e algumas análises apresentadas, certas linhas podem ser tomadas para estudos futuros, tais como:

- Avaliar o fluxo de polos para diferentes formas de potencial e também para grafos, a fim de compreender a formação dos picos de ressonância. Estudo da influência de potenciais com interações pontuais no fluxo de polos;
- Análise e descrição dos picos de ressonância por meio da abordagem sobre a topologia que envolve o grafo, uma vez que as ressonâncias podem ser classificadas como ressonâncias de forma ou topológicas (48);
- Implementação de campo magnético em grafos, com o intuito de gerar “caminhos preferenciais” que possam favorecer a transmissão em uma dada direção e impedir em outra. Tal implementação quebraria a reversão temporal nos grafos, o que poderia trazer resultados interessantes;
- Modelar moléculas de forma simplificada por meio de grafos, em que os vértices seriam átomos e as arestas as ligações químicas, a fim de avaliar possíveis quantidades que possam ser concebidas e comparadas com as medidas experimentais conhecidas, ao menos de maneira qualitativa.

REFERÊNCIAS

- 1 ANDRADE, F. M. Funções de green semiclássicas generalizadas e aplicações a sistemas ligados. 2001.
- 2 ANDRADE, F. M. Métodos de função de green na análise de grafos quânticos e caminhadas quânticas. 2009.
- 3 GNUTZMANN, S.; SMILANSKY, U. Quantum graphs: Applications to quantum chaos and universal spectral statistics. *Adv. Phys.*, v. 55, p. 527, 2006.
- 4 KOTTOS, T.; SMILANSKY, U. Quantum graphs: a simple model for chaotic scattering. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 36, n. 12, p. 3501, 2003.
- 5 KOTTOS, T.; SMILANSKY, U. Chaotic scattering on graphs. *Physical review letters*, APS, v. 85, n. 5, p. 968, 2000.
- 6 KOTTOS, T.; SMILANSKY, U. Periodic orbit theory and spectral statistics for quantum graphs. *Ann. Phys. (NY)*, v. 274, p. 76, 1999.
- 7 HARRISON, J. M.; SMILANSKY, U.; WINN, B. Quantum graphs where back-scattering is prohibited. *J. Phys. A*, IOP Publishing, v. 40, n. 47, p. 14181–14193, nov 2007.
- 8 ANDRADE, F. M. Exact green's function for rectangular potentials and its application to quasi-bound states. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 378, n. 21, p. 1461–1468, 2014.
- 9 HUL, O. et al. Experimental simulation of quantum graphs by microwave networks. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 69, n. 5, p. 056205–, 2004–05.
- 10 ŁAWNICZAK, M.; LIPOVSKÝ, J.; SIRKO, L. Non-weyl microwave graphs. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society (APS), v. 122, n. 14, p. 140503, apr 2019.
- 11 HUL, O. et al. Are scattering properties of graphs uniquely connected to their shapes? *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society (APS), v. 109, n. 4, p. 040402, jul 2012.
- 12 DICK, K. A. et al. Synthesis of branched 'nanotrees' by controlled seeding of multiple branching events. *Nature materials*, Nature Publishing Group, v. 3, n. 6, p. 380, 2004.
- 13 HEO, K. et al. Large-scale assembly of silicon nanowire network-based devices using conventional microfabrication facilities. *Nano Lett.*, American Chemical Society (ACS), v. 8, n. 12, p. 4523–4527, dec 2008.
- 14 PAULING, L. The diamagnetic anisotropy of aromatic molecules. *J. Chem. Phys.*, v. 4, p. 673, 1936.
- 15 RUEDENBERG, K.; SCHERR, C. W. Free-electron network model for conjugated systems. i. theory. *The Journal of Chemical Physics*, AIP, v. 21, n. 9, p. 1565–1581, 1953.
- 16 MONTROLL, E. W. Quantum theory on a network. i. a solvable model whose wavefunctions are elementary functions. *Journal of Mathematical Physics*, AIP, v. 11, n. 2, p. 635–648, 1970.

- 17 BERKOLAIKO, G.; KUCHMENT, P. *Introduction to Quantum Graphs*. [S.l.]: American Mathematical Society, 2012.
- 18 SCHMIDT, A. G. M.; CHENG, B. K.; LUZ, M. G. E. da. Green function approach for general quantum graphs. *J. Phys. A*, v. 36, p. L545, 2003.
- 19 ANDRADE, F. M. et al. Green's function approach for quantum graphs: an overview. *Phys. Rep.*, Elsevier BV, v. 647, p. 1–46, 2016.
- 20 ANDRADE, F. M.; SEVERINI, S. Unitary equivalence between the green's function and schrödinger approaches for quantum graphs. *Physical Review A*, APS, v. 98, n. 6, p. 062107, 2018.
- 21 BELCHEV, B.; NEALE, S.; WALTON, M. Flow of s-matrix poles for elementary quantum potentials. *Canadian Journal of Physics*, NRC Research Press, v. 89, n. 11, p. 1127–1140, 2011.
- 22 DRINKO, A.; ANDRADE, F.; BAZEIA, D. Narrow peaks of full transmission in simple quantum graphs. *Physical Review A*, APS, v. 100, n. 6, p. 062117, 2019.
- 23 WALTNER, D.; SMILANSKY, U. Scattering from a ring graph—a simple model for the study of resonances. *Acta Physica Polonica A*, Institute of Physics, Polish Academy of Science, v. 124, n. 6, p. 1087–1090, 2013.
- 24 FESHBACH, H. Unified theory of nuclear reactions. *Ann. Phys. (NY)*, Elsevier BV, v. 5, n. 4, p. 357–390, dec 1958.
- 25 THOMAS, O. et al. Experimental realization of a rydberg optical feshbach resonance in a quantum many-body system. *Nat. Commun.*, Springer Nature, v. 9, n. 1, p. 2238, jun 2018.
- 26 BRAESS, D. Über ein paradoxon aus der verkehrsplanung. *Unternehmensforschung Operations Research*, Springer Nature, v. 12, n. 1, p. 258–268, dec 1968.
- 27 BRAESS, D.; NAGURNEY, A.; WAKOLBINGER, T. On a paradox of traffic planning. *Transportation Science*, Institute for Operations Research and the Management Sciences (INFORMS), v. 39, n. 4, p. 446–450, nov 2005.
- 28 NUSSENZVEIG, H. The poles of the s-matrix of a rectangular potential well of barrier. *Nuclear Physics*, Elsevier, v. 11, p. 499–521, 1959.
- 29 DIESTEL, R. Graph theory—heidelberg. *Graduate Texts in Mathematics*, v. 173, n. 451, p. 5, 2010.
- 30 BERKOLAIKO, G. An elementary introduction to quantum graphs. *Geom. Comput. Spectr. Theory*, v. 700, p. 41–72, 2017.
- 31 BOLTE, J.; ENDRES, S. The trace formula for quantum graphs with general self adjoint boundary conditions. In: SPRINGER. *Annales Henri Poincaré*. [S.l.], 2009. v. 10, n. 1, p. 189–223.
- 32 BUTKOV, E. Física matemática. *Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos*, 1988.
- 33 ECONOMOU, E. N. *Green's functions in quantum physics*. [S.l.]: Springer, 1983. v. 3.
- 34 FEYNMAN, R.; HIBBS, A. *Quantum Mechanics and Path Integrals (Emended edition by DF Styer)*. [S.l.]: Dover Publications Inc., New York, 2010.

- 35 FLÜGGE, S. *Practical quantum mechanics*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012.
- 36 BARBOSA, A. L. R.; BAZEIA, D.; RAMOS, J. G. G. S. Universal braess paradox in open quantum dots. *Phys. Rev. E*, American Physical Society (APS), v. 90, n. 4, p. 042915, oct 2014.
- 37 PENCHINA, C. M.; PENCHINA, L. J. The braess paradox in mechanical, traffic, and other networks. *Am. J. Phys.*, American Association of Physics Teachers (AAPT), v. 71, n. 5, p. 479–482, may 2003.
- 38 PALA, M. G. et al. Transport inefficiency in branched-out mesoscopic networks: An analog of the braess paradox. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society (APS), v. 108, n. 7, p. 076802, feb 2012.
- 39 SOUSA, A. A. et al. Braess paradox at the mesoscopic scale. *Phys. Rev. B*, American Physical Society (APS), v. 88, n. 24, p. 245417, dec 2013.
- 40 ANDRADE, F. M.; LUZ, M. G. E. da. Green-function approach for scattering quantum walks. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 84, n. 4, p. 042343, 2011.
- 41 FELDMAN, E.; HILLERY, M. Quantum walks on graphs and quantum scattering theory. In: EVANS, D. et al. (Ed.). *Coding Theory and Quantum Computing*. [S.l.: s.n.], 2005. (Contemporary Mathematics, v. 381), p. 71.
- 42 KEMPE, J. Discrete quantum walks hit exponentially faster. *Probab. Theory Relat. Fields*, v. 133, p. 215, 2005.
- 43 FELDMAN, E.; HILLERY, M. Scattering theory and discrete-time quantum walks. *Phys. Lett. A*, v. 324, p. 277, 2004.
- 44 CHIN, C. et al. Feshbach resonances in ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society (APS), v. 82, n. 2, p. 1225–1286, apr 2010.
- 45 GIACOMELLI, G.; LEPRI, S.; TRONO, C. Optical networks as complex lasers. *Phys. Rev. A*, American Physical Society (APS), v. 99, n. 2, p. 023841, feb 2019.
- 46 LEPRI, S.; TRONO, C.; GIACOMELLI, G. Complex active optical networks as a new laser concept. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society (APS), v. 118, n. 12, p. 123901, mar 2017.
- 47 EXNER, P. Lattice kronig-penney models. *Physical review letters*, APS, v. 74, n. 18, p. 3503, 1995.
- 48 GNUTZMANN, S.; SCHANZ, H.; SMILANSKY, U. Topological resonances in scattering on networks (graphs). *Physical review letters*, APS, v. 110, n. 9, p. 094101, 2013.

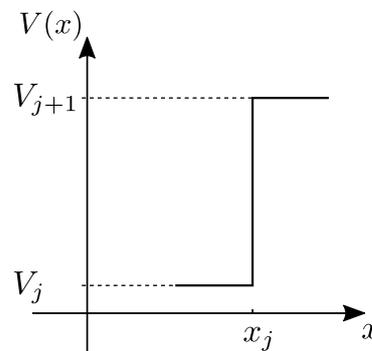
APÊNDICE A – AMPLITUDES DE TRANSMISSÃO E REFLEXÃO PARA POTENCIAIS DO TIPO DEGRAU

Utilizando um potencial do tipo degrau na forma

$$V(x) = \begin{cases} V_j & \text{se } x < x_j, \\ V_{j+1} & \text{se } x_j < x, \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

em que os V_j s são potenciais arbitrários, distintos e constantes, como podemos visualizar na figura 30:

Figura 30 – Representação de um potencial do tipo degrau.



Fonte: O autor.

Podemos determinar as amplitudes de reflexão e transmissão para uma partícula com energia E ao atingir a descontinuidade do potencial, resolvendo a equação de Schrödinger do sistema.

Supondo que a partícula incide na descontinuidade do potencial pela esquerda, a solução é descrita na forma:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_j x} + r_j^{(+)} e^{-ik_j x} & \text{se } x < a, \\ t_j^{(+)} e^{ik_{j+1} x} & \text{se } a < x, \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

em que a notação $r_j^{(+)}$ indica que a partícula incide no potencial j pela direita, com números de onda

$$k_j = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_i)}. \quad (\text{A.3})$$

Utilizando as condições de contorno nos pontos de descontinuidade do potencial, as quais são a continuidade da função $\psi(x = 0^-) = \psi(x = 0^+)$ e da derivada $\psi'(x = 0^-) = \psi'(x = 0^+)$, podemos determinar as amplitudes de reflexão e transmissão, em termos dos números de onda,

$$r_j^{(+)} = \frac{k_j - k_{j+1}}{k_i + k_{j+1}}, \quad (\text{A.4})$$

$$t_j^{(+)} = 2 \frac{\sqrt{k_j k_{j+1}}}{k_j + k_{j+1}}. \quad (\text{A.5})$$

A solução para o caso da partícula incidindo no potencial à esquerda, consiste na equação (A.2) complexo conjugada e alternando as regiões em torno do potencial. As amplitudes de reflexão tornam-se

$$r_j^{(-)} = -r_j^{(+)}, \quad (\text{A.6})$$

$$t_j^{(-)} = t_j^{(+)}, \quad (\text{A.7})$$

em que o $(-)$ indica atingir o potencial pela esquerda.

APÊNDICE B – TRABALHOS PRODUZIDOS DURANTE O MESTRADO

Durante o mestrado foram produzidos dois trabalhos, sendo o primeiro intitulado “*Narrow peaks of full transmission in simple quantum graphs*” já publicado (online) na revista *Physical Review A*, disponível em <<https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRevA.100.062117#>>. Outro está em desenvolvimento, intitulado “*Quantum graphs proposal for quantum devices*”, cuja versão preliminar encontra-se disponível em <<https://arxiv.org/pdf/1906.07782.pdf>>.