

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE PONTA GROSSA  
PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM CIÊNCIAS  
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO – FÍSICA**

**ALISON ANTUNES DA SILVA**

**GRAFOS COMO MODELOS DINÂMICOS E ESTÁTICOS EM MECÂNICA  
QUÂNTICA**

**PONTA GROSSA  
2021**

**ALISON ANTUNES DA SILVA**

**GRAFOS COMO MODELOS DINÂMICOS E ESTÁTICOS EM MECÂNICA  
QUÂNTICA**

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: Dr. Fabiano Manoel de Andrade

**PONTA GROSSA**

**2021**

S586 Silva, Alison Antunes da  
Grafos como modelos dinâmicos e estáticos em mecânica quântica / Alison Antunes da Silva. Ponta Grossa, 2021.  
81 f.

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

Orientador: Prof. Dr. Fabiano Manoel de Andrade.

1. Grafos. 2. Grafos quânticos. 3. Espalhamento. 4. Estados grafo. 5. Emaranhamento. I. Andrade, Fabiano Manoel de. II. Universidade Estadual de Ponta Grossa. Física. III.T.

CDD: 530,1

## TERMO DE APROVAÇÃO

ALISON ANTUNES DA SILVA

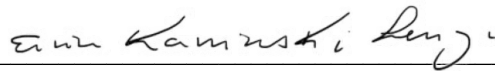
**“Grafos como modelos dinâmicos e estáticos em mecânica quântica.”**

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



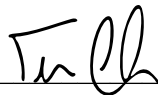
---

Prof. Dr. Fabiano Manoel de Andrade– UEPG/PR – Presidente/Orientador



---

Prof. Dr. Ervin Kaminski Lenzi- UEPG/PR – Titular



---

Prof. Dr. Marcelo Terra Cunha- UNICAMP – Titular

Ponta Grossa, 05 de abril de 2021.

## AGRADECIMENTOS

A Deus pela força e motivação na realização desse trabalho.

Ao Prof. Dr. Fabiano Manoel de Andrade pela orientação ao longo de todos os anos que trabalhamos juntos, sempre compartilhando o conhecimento, discutindo e guiando a pesquisa e pela amizade.

Ao grupo Física Quântica e Informação Quântica (FQIQ) por todas as discussões, ajudas e ideias propostas.

Agradecimentos ao Prof. Dr. Dionísio Bazeia Filho da UFPB e ao Me. e Doutorando Vinicius Salem pelos projetos de pesquisa em conjuntos, com o compartilhamento de ideias e discussões.

Ao Prof. Dr. Antônio Sérgio Magalhães de Castro e ao Prof. Dr. José Danilo Szezech Júnior pelas correções e sugestões durante a qualificação de mestrado.

Agradeço aos demais professores que contribuíram para a minha formação acadêmica, principalmente aos do departamento de Física e de Pós-graduação em ciências/Física pelos ensinamentos durante a graduação e no mestrado.

Em especial à minha família, principalmente meus pais, Emerson e Andrea e minhas irmãs Lais e Larissa, aos avós, e aos meus sogros pelo apoio em todos os momentos e incentivos. À minha noiva Bruna pelo carinho, companheirismo, apoio, incentivos e ajudas na escrita do trabalho.

Aos amigos e colegas por todos os momentos, conversas e apoios.

Agradeço a CAPES pelo fomento da pesquisa.

A todos que de alguma forma contribuíram no desenvolvimento do trabalho.

## RESUMO

O formalismo de grafos permite a sua abordagem em várias áreas do conhecimento nas quais sejam possíveis modelar conceitos a partir de elementos e relações entre eles. Nesse trabalho mostramos como esses grafos podem ser usados como modelos em mecânica quântica através de dois casos, um de dinâmica em um sistema e outro estático envolvendo informação quântica. Com a abordagem de espalhamento em grafos quânticos através da sua função de Green, é possível estudar a probabilidade de transmissão através de uma estrutura definida pelo grafo de uma forma eficiente, pelo uso da matriz adjacência. Isso permitiu trazer uma nova abordagem usando as probabilidades de espalhamentos nessas estruturas para definir uma entropia de espalhamento baseada na entropia de Shannon. No caso estático, temos os estados grafo, os quais podem ser usados como recurso para informação quântica. Esses estados grafos são modelados a partir da matriz incidência, fornecendo uma boa eficiência numérica nos cálculos. Assim, medições de emaranhamento em casos que consideramos ruídos na aplicação das portas emaranhadoras foram reproduzidas.

**Palavras-chaves:** Grafos; grafos quânticos; espalhamento; estados grafo; emaranhamento.

## ABSTRACT

The graph formalism allows its approach to different areas of knowledge in which concepts by elements and the relationship between them are possible to model. In this work, we show how graphs can be used as models in quantum mechanics through of two models, one involving dynamics in a system and other, involving quantum information, which is a static model. With the scattering in quantum graphs using a Green's function formulation, the probability of transmission of a quantum particle through a structure defined by a graph was studied in a efficient way by using its adjacency matrix. It allowed us to bring a new approach, using these scattering probabilities, to define a scattering entropy based in the Shannon entropy. In the static case, with the graph states, which can be used as resource in quantum information, they were modeled by the incidence matrix, allowing a good numerical efficiency. Thus, entanglement measurements in cases with noisy quantum gates that entangle the system were reproduced.

**Keywords:** Graph; quantum graph; scattering; graph states; entanglement.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – (a) Mapa da cidade de Königsberg com suas quatro regiões e sete pontes; (b) Grafo para representar esse problema das sete pontes. . . . .	12
Figura 2 – Exemplo de um grafo discreto simples com arestas e vértices rotulados. . . . .	13
Figura 3 – Grafos Estrelas ( $S_n$ ) para $n = 3, \dots, 6$ . . . . .	17
Figura 4 – Grafos Caminhos ( $P_n$ ) para $n = 2, \dots, 5$ . . . . .	19
Figura 5 – Grafos Ciclos ( $C_n$ ) para $n = 3, \dots, 6$ . . . . .	20
Figura 6 – Grafos Completos ( $K_n$ ) para $n = 3, \dots, 6$ . . . . .	20
Figura 7 – Grafo métrico com seus comprimentos $\ell_{e_s}$ em cada aresta $e_s = \{i, j\}$ . . . . .	22
Figura 8 – Grafo métrico com funções de ondas $\psi_{i,j}$ associadas em cada aresta $e_s$ . . . . .	24
Figura 9 – Potenciais retangulares com descontinuidades em $x_1, x_2$ e $x_3$ , seu respectivo grafo vestido (onde temos cada aresta com determinada espessura representando a intensidade do potencial) e famílias de caminhos $P_{x_i, x_j}$ associados às componentes da função de onda durante o espalhamento. . . . .	28
Figura 10 – Exemplo de trajetórias de caminhos que compõem uma família de caminho $P_{1,2}$ em um grafo $P_3$ com duas "leads" adicionadas. . . . .	29
Figura 11 – Grafo $P_2$ com duas "leads" adicionadas . . . . .	33
Figura 12 – Probabilidade de transmissão no grafo quântico caminho com 2 vértices ( $P_2$ ) em função do número de onda vezes o comprimento da aresta ( $k\ell$ ) e da intensidade $\alpha$ da $\delta$ nos vértices. . . . .	33
Figura 13 – (a) Grafo onde duas arestas são conectadas entre si por duas arestas com comprimentos $\ell$ e $\beta\ell$ e cada uma por uma aresta semi-infinita e (b) sua representação possível em um grafo quântico, onde em uma dessas arestas é colocado um vértice transparente (com transmissão 1 e reflexão 0). . . . .	34
Figura 14 – Probabilidade de transmissão no grafo quântico definido na Figura 13. . . . .	35
Figura 15 – Probabilidade de transmissão no grafo quântico definido na Figura 13, com valores específicos de $\beta$ . . . . .	35
Figura 16 – Probabilidade de transmissão dos grafos $S_n$ . . . . .	36
Figura 17 – Grafos do tipo $P_n$ , com "leads" de entrada e saída adicionadas em um dos vértices da ponta. . . . .	37
Figura 18 – Probabilidade de transmissão no grafo quântico $P_2$ entrando e saindo em um mesmo vértice da ponta, em função do número de onda vezes o comprimento $\beta\ell$ da aresta. . . . .	37
Figura 19 – Probabilidade de transmissão nos grafos quânticos $C_n$ . . . . .	38
Figura 20 – Probabilidade de transmissão dos grafos $K_n$ . . . . .	38
Figura 21 – Grafo $C_4$ com "leads" adicionadas em seus vértices. . . . .	39



Figura 22 – Probabilidades de Transmissões e Reflexão em um grafo $C_4$ com entrada em no vértice 1 e saídas possíveis nos demais. . . . .	40
Figura 23 – Entropia de Shannon para duas variáveis . . . . .	41
Figura 24 – Entropia média de espalhamento nos grafos quânticos $S_n$ , $C_n$ e $K_n$ . . . . .	42
Figura 25 – Entropia média de espalhamento um grafo quântico formado por um vértice com uma entrada e $d - 1$ saídas em função do grau desse vértice. . . . .	43
Figura 26 – Esfera de Bloch . . . . .	48
Figura 27 – Diagrama de uma porta lógica quântica $\hat{U}$ , que é representada por uma caixa com seu respectivo nome $\hat{U}$ , a qual é ligadas por duas linhas, na esquerda sendo o estado antes da operação e na direita após essa transformação unitária. . . . .	54
Figura 28 – Diagrama da porta Hadamard $\hat{H}$ . . . . .	54
Figura 29 – Diagrama das portas de Pauli $\hat{I}$ , $\hat{X}$ , $\hat{Y}$ e $\hat{Z}$ . . . . .	55
Figura 30 – Diagrama de uma porta controlada associada a uma operação $\hat{U}$ no segundo qubit . . . . .	57
Figura 31 – Diagrama das portas controladas $\hat{U}_{CX}$ , $\hat{U}_{CY}$ e $\hat{U}_{CZ}$ . . . . .	58
Figura 32 – Diagrama de um circuito quântico com 3 qubits e portas lógicas 1 atuando sobre 1 qubit e portas 2 e 3 atuando sobre 2 qubits . . . . .	61
Figura 33 – Exemplo de circuito quântico desse modelo. . . . .	62
Figura 34 – (a) Uma forma geral para um circuito com quatro qubits e portas que atuam entre dois qubits; (b) Representação na forma de grafo para esse circuito. . . . .	63
Figura 35 – Subgrafos de um grafo $K_3$ ou $C_3$ , onde nos estados grafo as arestas azuis representam portas que puderam ser aplicadas, enquanto em vermelho pontilhado são as portas que falharam. . . . .	64
Figura 36 – Negatividade do estado $ K_3\rangle$ randomizado em função da probabilidade $p$ das arestas . . . . .	66
Figura 37 – Negatividade dos estados $ S_4\rangle$ , $ K_4\rangle$ , $ C_4\rangle$ e $ P_4\rangle$ randomizados em função da probabilidade $p$ das arestas. Para o estado $ S_4\rangle$ , o vértice 1 é o central e no $ P_4\rangle$ o vértice 1 é um qubit da ponta. . . . .	66

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>10</b>
1.1	ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO	11
<b>2</b>	<b>GRAFOS</b>	<b>12</b>
2.1	MATRIZES RELACIONADAS A GRAFOS	13
2.1.1	Matriz Adjacência	13
2.1.2	Matriz de Graus	14
2.1.3	Matriz Incidência	15
2.1.4	Matriz Laplaciana	15
2.2	ESPECTRO DE GRAFOS	16
2.3	TIPOS DE GRAFOS	17
2.3.1	Grafos Estrelas	17
2.3.2	Grafos Caminhos	19
2.3.3	Grafos Ciclos	19
2.3.4	Grafos Completos	20
2.4	SUBGRAFOS ABRANGENTES	21
2.5	GRAFOS MÉTRICOS	22
<b>3</b>	<b>GRAFOS QUÂNTICOS</b>	<b>23</b>
3.1	CONDIÇÕES DE CONTORNO NOS VÉRTICES	24
3.2	FUNÇÃO DE GREEN PARA GRAFOS QUÂNTICOS	27
3.2.1	Espectro de Grafos Quânticos	31
3.3	TRANSMISSÃO EM GRAFOS QUÂNTICOS	32
3.3.1	Transmissão em Tipos de Grafos	35
3.3.2	Transmissão em Grafos Quânticos com $l$ "leads"	38
3.4	ENTROPIA MÉDIA DE ESPALHAMENTO EM GRAFOS QUÂNTICOS	40
<b>4</b>	<b>ESTADOS GRAFO</b>	<b>45</b>
4.1	INFORMAÇÃO QUÂNTICA	45
4.1.1	Notação	45
4.1.2	Qubits	46
4.1.3	Matriz Densidade	48
4.1.4	Estados Emaranhados e medições de Emaranhamento	50
4.1.4.1	Matrizes Transpostas Parciais e o critério PPT	52
4.1.4.2	Negatividade	53
4.1.5	Portas Lógicas Quânticas	53

4.1.5.1	Porta Hadamard . . . . .	54
4.1.5.2	Portas de Pauli . . . . .	55
4.1.5.3	Portas controladas . . . . .	57
4.1.6	Circuitos Quânticos . . . . .	60
4.1.7	O Computador Quântico de Único Sentido . . . . .	60
4.2	CONSTRUÇÃO DE ESTADOS GRAFO . . . . .	61
4.3	ESTADOS GRAFO RANDOMIZADOS . . . . .	63
<b>5</b>	<b>CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS . . . . .</b>	<b>68</b>
	<b>REFERÊNCIAS . . . . .</b>	<b>70</b>
<b>APÊNDICE A</b>	<b>RELAÇÃO ENTRE OS ESPECTROS DE GRAFOS QUÂNTICOS E GRAFOS DISCRETOS . . . . .</b>	<b>73</b>
<b>APÊNDICE B</b>	<b>DEDUÇÃO DO COEFICIENTE DE TRANSMISSÃO EM GRA- FOS QUÂNTICOS . . . . .</b>	<b>76</b>
<b>APÊNDICE C</b>	<b>ALGUNS ESTADOS GRAFO . . . . .</b>	<b>79</b>
<b>APÊNDICE D</b>	<b>TRABALHOS PRODUZIDOS . . . . .</b>	<b>81</b>

## 1 INTRODUÇÃO

A abstração e construção de modelos que permitem a compreensão e previsão de fenômenos físicos são de grande importância para o desenvolvimento científico e permitem que novas tecnologias sejam possíveis. Isso ocorre desde definir e prever as trajetórias de objetos clássicos como até mesmo para prever efeitos quânticos como o emaranhamento quântico, ou o tunelamento de uma partícula através de um potencial. No caso do tunelamento, é um exemplo de teoria que permitiu criar equipamentos como microscópios eletrônicos e também a prever efeitos como ruídos em pequenos componentes eletrônicos.

Um tipo de modelagem que permite aplicação em diversas áreas é definida pela teoria de grafos, a qual teve seu início com Euler (1) na busca de soluções para alguns problemas, para os quais utilizou do auxílio de diagramas onde os elementos eram representados por vértices e a relação entre eles por arestas. Dentre problemas importantes no desenvolvimento dessa teoria, temos o das sete pontes de Königsberg (2), que buscava saber se era possível passar por todas as pontes sem repeti-las, e o teorema das quatro cores (3), que busca demonstrar que em um mapa, são necessárias apenas quatro cores para pintar elementos vizinhos, como estados ou países.

Com os seus componentes e simplificações possíveis, ressaltando apenas os elementos necessários para estudar determinado problema, a teoria de grafos possui aplicações em diversas áreas do conhecimento, desde mais acadêmicas como no caso da teoria de Hückel (4), através das quais podemos obter orbitais moleculares ao descrever moléculas pelo formalismo de grafos, até em casos da aviação, no desenvolvimento de algoritmos que permitam uma melhor organização do tráfego aéreo (5).

Dentre casos atuais, temos na computação clássica, a qual é organizada a partir de elementos de informação, chamados bits, a necessidade constante de aprimoramento visando uma maior eficiência e elementos, como seus componentes eletrônicos, cada vez mais compactos. Como era apresentado pela chamada lei de Moore (6), com um mesmo valor de produção, o número de componentes que compõem um único circuito tenderiam a dobrar a cada dois anos. Isso implicaria em uma necessidade de diminuir cada vez mais o tamanho desses componentes e, dessa forma, ter-se circuitos com mesmo custo, porém cada vez mais eficientes devido à sua densidade de componentes. Porém essa não é uma lei natural e tendia a ser corrigida para tempos cada vez mais longos, o que se deve a causas como de escalas, que sendo cada vez menores, teremos fenômenos quânticos como o de tunelamento cada vez mais presentes.

Esses efeitos podem ter consequências indesejáveis em componentes como transistores em circuitos elétricos, onde em casos que deveria cancelar o sinal, obtendo um bit 0, esse efeito pode produzir um ruído de forma a deixar o sinal passar, obtendo um bit 1. Devido a isso, estudos em mecânica quântica, como o da dinâmica dentro desses sistemas, são importantes. Visa tanto desenvolver novas tecnologias, como a criação de novos componentes semicondutores baseados em poços de potencial quânticos (7), quanto para prever possíveis problemas ao se

trabalhar com elementos nessa escala de tamanho.

Portanto, com a teoria de grafos e a forma como ela permite abstrair e simplificar sistemas físicos, apresentando elementos e a relação entre eles, permite definir modelos visando a aplicações na mecânica quântica. Dessa forma permite estudar e desenvolver equipamentos que utilizem desses fenômenos puramente quântico para realizar operações, o que é o foco da informação e computação quântica, a qual tem ganho amplo espaço de pesquisa e desenvolvimento de computadores quânticos. Um exemplo é o caso do computador construído pela empresa Google (8), no qual afirmam terem realizado uma operação em um computador quântico que seria praticamente impossível com computadores clássicos, também havendo um investimento grande nessas pesquisas em outras empresas como por exemplo a IBM e Amazon. Assim visando a abordagem de informação utilizando fenômenos quânticos, os quais serão estudados através dos conceitos de grafos apresentados ao longo dessa dissertação, apresentaremos e desenvolveremos estudos e resultados tanto em um caso dinâmico quanto em um caso estático. No caso de sistemas dinâmicos, aborda-se o problema de espalhamento em mecânica quântica, enquanto em modelos estáticos, estados grafo são utilizados e abordados como recursos no desenvolvimento de circuitos em informação quântica.

## 1.1 ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO

Na seção 2 introduzimos o conceito de grafo, enfatizando aspectos históricos e apresentando os elementos que os constituem, assim como as propriedades referentes às suas representações matemáticas e finalmente certas aplicações que possuem em diferentes áreas do conhecimento, finalizando com exemplos de aplicações em diferentes áreas do conhecimento.

Na seção 3 discutimos um primeiro caso de aplicação dos grafos em mecânica quântica em um caso dinâmico. Visando essa abordagem, os conceitos e propriedades apresentadas na seção anterior serão utilizados para demonstrar como essas ferramentas da matemática discreta podem ser usadas para descrever o espalhamento em uma estrutura quântica, assim como os estados ligados nessa estrutura. Finalmente, apresenta-se uma ferramenta proposta, a entropia de espalhamento, análoga à entropia de Shannon (9), relacionando esses conceitos ao de informação quântica.

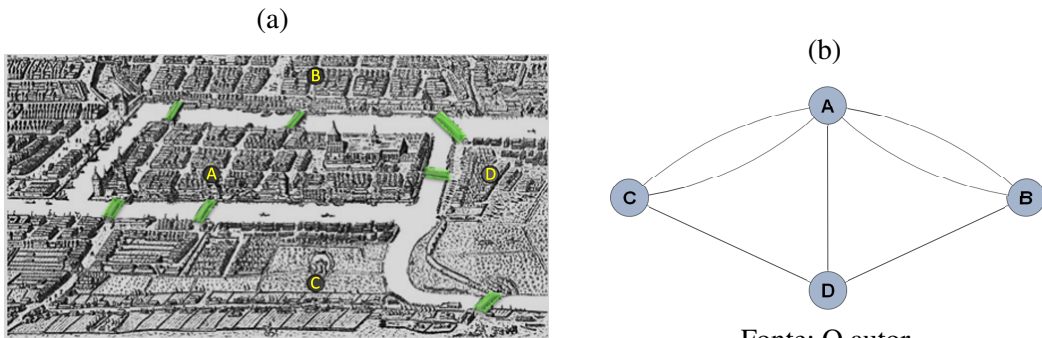
Na seção 4, apresentamos por meio de revisão da literatura os conceitos bases da informação quântica, tais como os bits quânticos (qubits), circuitos lógicos quânticos e as portas que os compõem e apresenta-se conceitos como de emaranhamento e medições para eles. A partir desses conceitos, desenvolve-se uma aplicação de grafos para um caso estático em mecânica quântica, apresentando os estados grafo como um estado base em informação quântica, obtendo a partir deles um conjunto de qubits emaranhados. Define-se medições de emaranhamentos para tais estados, permitindo analisar casos como o de aplicação de portas lógicas quânticas que possuem ruídos, sendo possível analisar quando teremos estados emaranhados.

Finalmente, na seção 5, teremos as conclusões do trabalho realizado, assim como as perspectivas e ideias a serem desenvolvidas serão apresentadas.

## 2 GRAFOS

Como comentamos na introdução, o primeiro uso de grafos apareceu na solução do problema das sete pontes de Königsberg (1, 2, 3). Nessa cidade, que dá o nome ao problema e atualmente conhecida como Kaliningrado, na Rússia (porém território da antiga Prússia na época), passa um rio chamado Prególia que divide a cidade. Além disso, há duas ilhas nesse rio, as quais ficam no centro da cidade, dividindo-a em quatro regiões. Há sete pontes para ligar estas regiões, quatro ligando a ilha da catedral (região *A*), duas ligando a outra ilha (região *D*) e ainda há uma ponte que liga ambas, conforme ilustrado na Figura 1(a).

Figura 1 – (a) Mapa da cidade de Königsberg com suas quatro regiões e sete pontes; (b) Grafo para representar esse problema das sete pontes.



Fonte: Adaptado de (10).

Fonte: O autor.

O problema relacionado a essas pontes consistia em partir de uma região, passar por todas as pontes sem repeti-las e voltar à região inicial. Para resolver esse problema, Leonhard Euler propôs considerar esse problema apenas topologicamente (1), observando apenas o número de conexões existente entre as regiões e quais delas estão conectadas entre si. Dessa forma, uma representação topológica do problema está apresentada na Figura 1(b), onde cada ponto, denominado vértice, representa uma região da cidade e as linhas, chamadas arestas, representam as pontes entre essas regiões.

Dessa forma, é possível analisar esse problema, considerando apenas o número de conexões que cada vértice possui, o qual é denominado de grau do vértice. Analisando essa situação, Euler demonstrou que não era possível atravessar todas as pontes de uma única vez e retornar para a posição inicial, o que posteriormente foi provado de uma forma mais formal por Hierholzer e Wiener em um artigo de 1873 (11). Atualmente, caminhos que partem de um vértice, passando por todas as arestas uma vez e, retornando ao vértice inicial são chamados de caminhos Eulerianos (3).

A teoria de grafos possui aplicações em diversas áreas, tais como na matemática, física, química, informática, nas teorias de informação, na linguística, dentre outras. Um caso interessante de importante aplicação, são as malhas de Kirchhoff (12), no qual grafos com are-

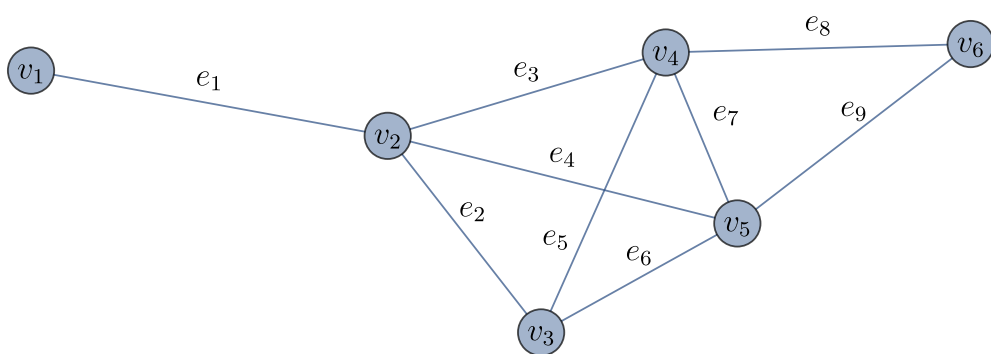
tas direcionadas são utilizados para analisar circuitos elétricos. Outro caso, consiste na teoria de Hückel (4), onde moléculas químicas são descritas por meio de grafos e, a partir das informações que podem ser obtidas com a teoria de grafos, encontramos os seus orbitais moleculares.

Matematicamente, os grafos são denotados por  $G(E, V)$ , sendo definidos como um modelo para abstrair um conjunto de elementos, representados pelo conjunto de vértices  $V = \{1, \dots, v\}$  e a relação entre esses elementos, representadas pelas arestas  $E = \{e_s\}$ , as quais conectam esses vértices. As arestas de um grafo podem ser direcionadas ou não direcionadas, ou começar e terminar em um mesmo vértice. Nesse último caso a aresta é chamada de "loop". Também podemos ter mais de uma aresta conectando dois vértices adjacentes (2). Nesse trabalho utilizaremos grafos simples, os quais são definidos como grafos com conexões únicas. Portanto, eles não devem possuir mais de uma aresta entre dois vértices ou loops. Esses grafos também não devem possuir vértices isolados, sendo chamados de grafo conectado.

## 2.1 MATRIZES RELACIONADAS A GRAFOS

Os grafos geralmente são apresentados como um modelo visual, porém um mesmo grafo pode ser desenhado de várias maneiras diferentes, como ao mover seus vértices no espaço em que está desenhado. Dessa forma, para a análise das características de um grafo e as informações que eles podem fornecer, é importante haver formas matemáticas unívocas de representá-los. Assim, algumas matrizes importantes nos estudos de grafos e as informações sobre a estrutura que elas podem nos fornecer serão apresentadas. Para demonstrar exemplos dessas matrizes, utilizaremos o grafo apresentado na Figura 2.

Figura 2 – Exemplo de um grafo discreto simples com arestas e vértices rotulados.



Fonte: O autor.

### 2.1.1 Matriz Adjacência

Uma matriz muito utilizada na descrição de um grafo é a sua matriz adjacência. Esse nome vem da conexão entre dois vértices ( $v_i$  e  $v_j$ ) por uma mesma aresta ( $e = \{v_i, v_j\}$ ) e, quando isso ocorre, dizemos que os vértices de índices  $i$  e  $j$  são adjacentes, sendo representado

pela notação  $v_i \sim v_j$ . Com esse conceito, a construção dessa matriz busca estender a análise de quais vértices são adjacentes em um grafo com um total de  $n = |V|$  vértices. Assim, definimos a matriz adjacência como uma matriz  $A$ , com  $|V| \times |V|$  elementos, onde os seus elementos  $A_{i,j}$  possuem valores (13)

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

Usando como exemplo o grafo na Figura 2, a sua matriz adjacência é

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Porém, como podemos rotular um grafo de diferentes formas, há mais de uma matriz adjacência que representam um mesmo grafo. Considerando duas matrizes adjacência  $A$  e  $A'$ , dizemos que representam o mesmo grafo desde que a diferença entre elas seja a ordem escolhida desses vértices para obter essa matriz (12). Portanto podemos escrever

$$A' = P^{-1}AP, \quad (2.3)$$

onde  $P$  é uma matriz de permutação e, nesse caso dizemos que esses grafos são isomorfos, o que representamos como  $A \cong A'$  (2).

### 2.1.2 Matriz de Graus

Uma outra análise que podemos fazer sobre os grafos é quanto ao grau de cada um dos vértices. O grau de um vértice  $i$  é definido como o número de conexões que ele possui, sendo denotado por  $d_i$ . Portanto, a matriz de graus é uma matriz diagonal  $D$  de  $|V| \times |V|$  elementos com valores dados pelos graus dos vértices

$$D_{i,j} = \begin{cases} d_i, & \text{se } i = j, \\ 0, & \text{se } i \neq j. \end{cases} \quad (2.4)$$

Usando novamente o grafo da Figura 2 como exemplo, a sua matriz de graus é

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$



Essa matriz também pode ser definida como uma matriz diagonal, cujos valores são obtidos pela soma dos elementos em cada linha ou coluna da matriz adjacência. Isso é possível, pois ao somar todas as conexões de um vértice, obtemos o grau desses vértices.

### 2.1.3 Matriz Incidência

A matriz incidência, representada por  $M$ , apresenta as conexões entre os vértices e arestas, possuindo dimensões  $n \times m$ , onde  $n = |V|$  é referente ao número de vértices do grafo e  $m = |E|$  é o seu número de arestas (2). Como uma aresta  $e_s$  pode ser definida como um conjunto cujos elementos são os vértices que ela conecta, como no caso da Figura 2, tem-se  $e_1 = \{1, 2\}$ ,  $e_2 = \{2, 3\}$ , etc. Logo podemos definir essa matriz pelas condições

$$M_{i,s} = \begin{cases} 1, & \text{se } v_i \in e_s, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.6)$$

No caso da Figura 2, terá a matriz incidência

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Essa matriz é relevante em casos onde é necessário representar esses elementos dos grafos em uma única matriz, como em casos onde a numeração das arestas também é importante.

### 2.1.4 Matriz Laplaciana

A matriz laplaciana, que recebe esse nome por ser a forma discreta do operador laplaciano (14), é definida como

$$L_{i,j} = \begin{cases} d_i, & \text{se } i = j, \\ -1, & \text{se } v_i \sim v_j, \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (2.8)$$

onde  $d_i$  é o grau do vértice  $i$ . Novamente, considerando o grafo discreto apresentado na Figura 2, tem-se

$$L = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 3 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 4 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

A partir dessa definição, podemos verificar que na diagonal principal teremos os elementos referente ao grau do vértice  $v_n$  e os demais elementos são iguais a  $-1$  quando os vértices referentes aos elementos  $i$  e  $j$  são adjacentes. Logo, com as definições da matriz adjacência na equação (2.1) e da matriz de graus (equação (2.4)), podemos definir  $L$  como

$$L = D - A. \quad (2.10)$$

Uma matriz derivada da matriz laplaciana é a matriz laplaciana harmônica, definida como

$$\Delta_G = D^{-1}L. \quad (2.11)$$

Substituindo a equação (2.10),

$$\Delta_G = I - D^{-1}A, \quad (2.12)$$

permitindo definir a partir de uma matriz identidade e uma operação entre a inversa da matriz de graus e sua matriz adjacência.

## 2.2 ESPECTRO DE GRAFOS

O espectro de um grafo é basicamente definido como o espectro de uma determinada matriz que define esse grafo. Um primeiro caso é do seu chamado espectro ordinário (15), o qual é definido pelo conjunto de autovalores  $\lambda_u$ , junto com suas multiplicidades  $m_u$ , da sua matriz adjacência  $A$ . Dessa forma, primeiro é definido o polinômio característico de um grafo  $G$ , cujas raízes são esses autovalores da sua matriz  $A$ , sendo assim definido por

$$P_G(\lambda) = \det(\lambda I - A). \quad (2.13)$$

Portanto, o espectro de um grafo  $G$  é dado por

$$Spec(G) = \{(\lambda_1)^{m_1}, (\lambda_2)^{m_2}, \dots, (\lambda_u)^{m_u}\}, \quad (2.14)$$

o qual também possui uma notação alternativa (2), sendo representado por

$$Spec(G) = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \dots & \lambda_u \\ m_1 & \dots & m_u \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Uma primeira aplicação desse espectro é para definir a energia de um grafo, dada pela soma do módulo dos elementos desses espectro, sendo assim,

$$\mathcal{E}(G) = \sum_{j=1}^u |\lambda_j|. \quad (2.16)$$

Grafos com o mesmo espectro são chamados de coespectrais (ou isoespectrais), e essa informação pode ser utilizada para uma primeira análise se dois grafos são isomorfos. Grafos isomorfos compartilham o mesmo espectro, porém, um mesmo espectro não implica em isomorfismo (13, 15).

Outro espectro possível de analisar em grafos discretos é aquele fornecido pela matriz laplaciana, sendo definido como espectro laplaciano do grafo, o qual possui polinômio característico

$$P_{L(G)}(\lambda) = \det(\lambda I - L). \quad (2.17)$$

Finalmente, temos o espectro laplaciano harmônico, dado pelas raízes de

$$P_{\Delta(G)}(\lambda) = \det(\lambda I - \Delta_G). \quad (2.18)$$

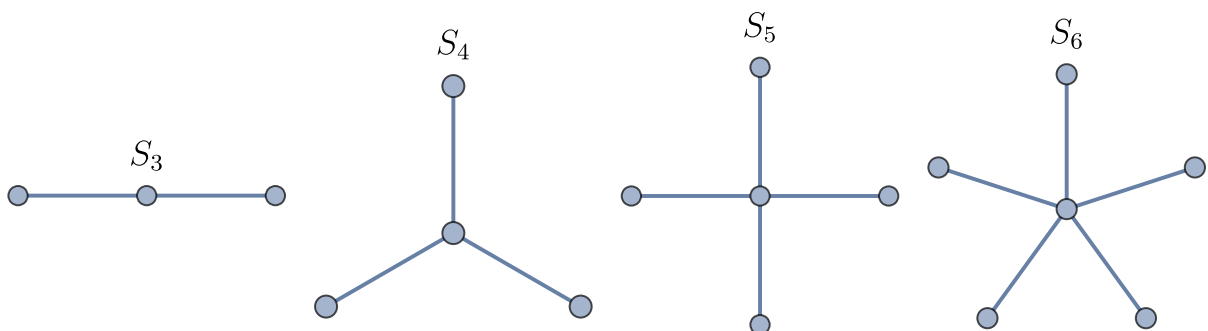
Esse espectro possui valores que serão comparáveis ao espectro de grafos quânticos, assunto a ser discutido na seção 3.

## 2.3 TIPOS DE GRAFOS

No estudo de grafos, é comum apresentar alguns tipos mais comuns de grafos. Esses conjuntos de grafos recebem esse nome por possuírem características em comuns, sendo a principal a sua construção, que mesmo possuindo número diferente de vértices, possui um padrão de montagem. Esses tipos de grafos são definidos por um símbolo e o seu número de vértices, assim facilitando referenciar qual grafo está sendo utilizado. Desta forma, é importante definir grafos através dos seus tipos, visando uma apresentação mais eficiente de definições sobre esses grafos. Portanto, nessa seção, alguns dos grafos mais comuns e utilizados ao longo desse trabalho serão apresentados.

### 2.3.1 Grafos Estrelas

Figura 3 – Grafos Estrelas ( $S_n$ ) para  $n = 3, \dots, 6$ .



Fonte: O autor.

Um grafo estrela é representado pelo símbolo  $S_n$ , onde  $n$  é o seu número de vértices. Esses grafos são definidos por um vértice central conectado a  $n - 1$  vértices. Assim, o vértice central tem grau  $n - 1$  e os outros  $n - 1$  vértices possuem todos grau 1. Esse tipo de grafos

é particularmente interessante, pois localmente cada vértice pode ser visto como se fosse um grafo estrela. Ou seja, grafos estrelas podem ser utilizados como blocos construtores de grafos maiores. Nesse trabalho, o vértice central será definido como  $v_1$  e os demais serão apresentados como os vértices  $v_2, \dots, v_n$ .

Dessa forma, como temos vértices adjacentes apenas a  $v_1$ , sua matriz adjacência  $A_{S_n}$  pode ser definida como

$$A_{i,j}(S_n) = \begin{cases} 1, & \text{se } i \neq j \text{ e } (i = 1 \text{ ou } j = 1), \\ 0, & \text{para demais valores de } i \text{ e } j. \end{cases} \quad (2.19)$$

Reescrevendo em termos de deltas de Kronecker, obtemos uma expressão mais compacta

$$A_{i,j}(S_n) = (1 - \delta_{i,j})(\delta_{i,1} + \delta_{j,1}). \quad (2.20)$$

Sua matriz grau possuirá um elemento com valor  $n - 1$ , referente ao grau do vértice do centro, enquanto os demais elementos possuem valor 1, assim

$$D_{i,j}(S_n) = \begin{cases} (n - 1), & \text{se } i = j = 1, \\ 1, & \text{se } i = j \neq 1, \\ 0, & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (2.21)$$

Podendo ser reescrita como

$$D_{i,j}(S_n) = \delta_{i,j}[\delta_{j,1}(n - 1) + (1 - \delta_{j,1})] = \delta_{i,j}[\delta_{j,1}(n - 1) + 1]. \quad (2.22)$$

A partir destas matrizes, podemos apresentar as matrizes laplaciana e laplaciana harmônica. Para propósitos futuros, apresentaremos essa última matriz, a qual possui seus elementos dado por

$$\Delta_{i,j}(S_n) = \begin{cases} -\frac{1}{(n-1)}, & \text{se } i = 1 \neq j, \\ -1, & \text{se } j = 1 \neq i, \\ 1, & \text{se } i = j, \\ 0, & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (2.23)$$

De forma mais simples,

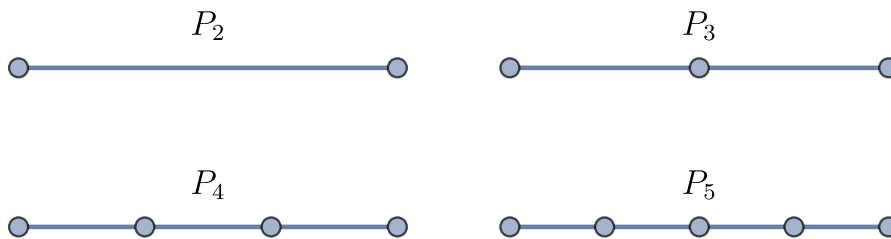
$$\Delta_{i,j}(S_n) = \delta_{i,j} - (1 - \delta_{i,j}) \left[ \frac{\delta_{i,1}}{(n-1)} + \delta_{j,1} \right]. \quad (2.24)$$

A partir desses resultados, podemos obter formas gerais dos espectros para esse tipo de grafos. A partir da matriz adjacência, temos  $Spec(S_n) = \{-\sqrt{n-1}, 0^{(n-2)}, \sqrt{n-1}\}$ , o seu espectro ordinário. E o espectro do seu laplaciano harmônico será  $Spec_{\Delta}(S_n) = \{0, 1^{(n-2)}, 2\}$  (15).

### 2.3.2 Grafos Caminhos

Os grafos chamados de caminhos, são denotados por  $P_n$ . Como definição da sua construção, temos dois vértices nas pontas, ambos de grau 1 e os demais vértices são colocados em sequência, cada um com grau igual a 2, conforme apresentado na Figura 4. Considerando uma numeração dos seus vértices, como sendo  $v_1$  em uma ponta, sendo vizinho ao vértice  $v_2$  e assim por diante até o vértice  $n$ , definiremos algumas de suas matrizes.

Figura 4 – Grafos Caminhos ( $P_n$ ) para  $n = 2, \dots, 5$ .



Fonte: O autor.

No caso de sua matriz adjacência  $A_{P_n}$ , primeiro verificamos que os vértices  $v_1$  e  $v_n$  são conectados, respectivamente aos vértices  $v_2$  e  $v_{n-1}$ , enquanto os demais vértices  $v_j$  são adjacentes aos vértices  $v_{j-1}$  e  $v_{j+1}$ . Dessa forma, é possível escrever os elementos dessa matriz para  $n \geq 2$  como

$$A_{i,j}(P_n) = \delta_{i,1}\delta_{j,2} + \delta_{i,n}\delta_{j,n-1} + (1 - \delta_{i,1} - \delta_{i,n})(\delta_{j,i-1} + \delta_{j,i+1}). \quad (2.25)$$

Teremos sua matriz de grau

$$D_{i,j}(P_n) = \delta_{i,j}(2 - \delta_{j,1} - \delta_{j,n}). \quad (2.26)$$

E, finalmente, obtemos a matriz laplaciana harmônica na forma

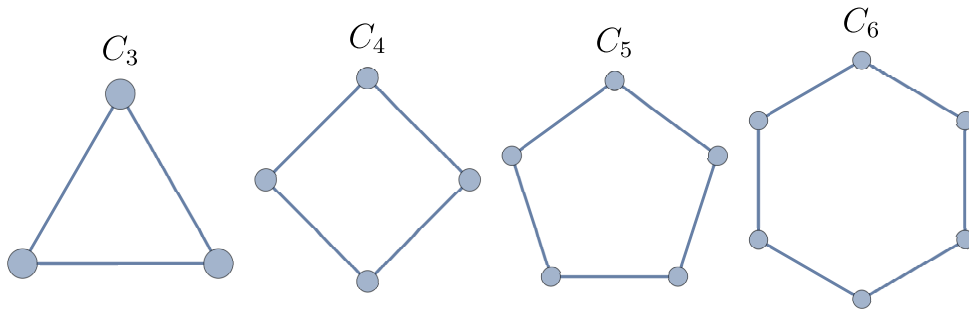
$$\Delta_{i,j}(P_n) = \delta_{i,j} - \left[ \delta_{i,1}\delta_{j,2} + \delta_{i,n}\delta_{j,n-1} + \frac{1}{2}(1 - \delta_{i,1} - \delta_{i,n})(\delta_{j,i-1} + \delta_{j,i+1}) \right]. \quad (2.27)$$

Dessa forma, podemos obter os espectros desse grafo, onde o espectro ordinário será  $Spec(P_n) = 2 \cos\left(j \frac{\pi}{n+1}\right)$ , onde  $j = 1, \dots, n$  (15).

### 2.3.3 Grafos Ciclos

Os grafos ciclos ( $C_n$ ) podem ser definidos como uma extensão do grafo caminho. Utilizando a rotulagem definida para os grafos  $P_n$ , com o último vértice ( $v_n$ ) ligado ao vértice  $v_1$ , onde a sua representação visual está apresentada na Figura 5. Portanto, com algumas adaptações da matriz  $A_{P_n}$  sua matriz adjacência pode ser escrita com as seguintes condições

$$A_{i,j}(C_n) = \delta_{i,1}(\delta_{j,2} + \delta_{j,n}) + \delta_{i,n}(\delta_{j,1} + \delta_{j,n-1}) + (1 - \delta_{i,1} - \delta_{i,n})(\delta_{j,i-1} + \delta_{j,i+1}). \quad (2.28)$$

Figura 5 – Grafos Ciclos ( $C_n$ ) para  $n = 3, \dots, 6$ .

Fonte: O autor.

Como todos os vértices possuirão grau 2, teremos sua matriz grau como uma matriz diagonal com elementos igual a 2 e, assim podemos defini-la em termos da matriz identidade com dimensão  $n \times n$  ( $I_n$ ) conforme

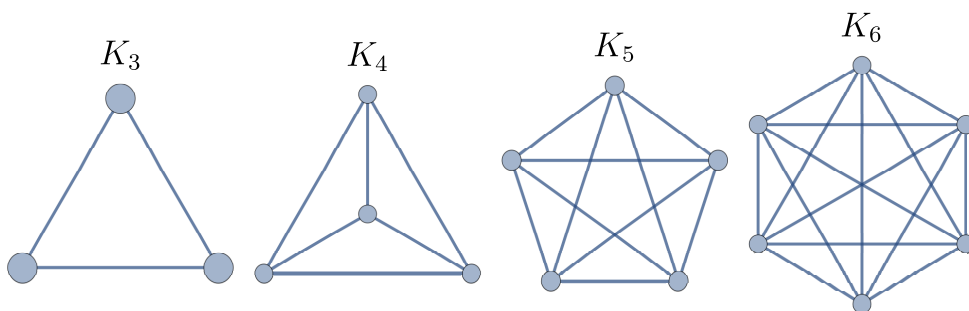
$$D_{i,j}(C_n) = 2I_n. \quad (2.29)$$

Com essas definições, obtemos a matriz laplaciana normalizada através dos seus elementos definidos por

$$\Delta_{i,j}(C_n) = \delta_{i,j} - \frac{1}{2}A_{i,j}. \quad (2.30)$$

O espectro da sua matriz adjacência também pode ser obtido de uma forma geral, sendo dada na forma  $Spec(C_n) = 2 \cos(j \frac{2\pi}{n})$ , com  $j = 0, \dots, n - 1$  (15).

### 2.3.4 Grafos Completos

Figura 6 – Grafos Completos ( $K_n$ ) para  $n = 3, \dots, 6$ .

Fonte: O autor.

Os grafos completos, ou  $K_n$ , apresentados na Figura 6, são definidos como grafos contendo  $n$  vértices totalmente conectados, possuindo assim  $n(n - 1)/2$  arestas e todos os vértices com grau  $n - 1$ . Dessa forma, sua matriz adjacência  $A_{K_n}$  é definida como possuindo todos os elementos, exceto da diagonal principal, iguais a 1. Nesse caso

$$A = J - I, \quad (2.31)$$

onde  $J$  é a matriz com todos os elementos igual a 1 e  $I$  é a matriz identidade. Teremos sua matriz grau como uma matriz diagonal apenas com elementos iguais a  $n - 1$ . Portanto,

$$D_{i,j}(K_n) = \delta_{i,j}(n - 1), \quad (2.32)$$

e, finalmente, sua matriz laplaciana harmônica possuirá elementos na forma

$$\Delta_{i,j}(K_n) = \delta_{i,j} - \frac{1}{n - 1}(1 - \delta_{i,j}). \quad (2.33)$$

Por fim, o seu espectro ordinário é  $Spec(K_n) = \{n - 1, (-1)^{(n-1)}\}$  (15).

## 2.4 SUBGRAFOS ABRANGENTES

Os subgrafos  $F(V_F, E_F)$ , são definidos como uma subestrutura de um grafo original  $G(V, E)$ , possuindo um conjunto de vértices  $V_F$  e arestas  $E_F$  com elementos pertencentes aos respectivos conjuntos de vértices  $V$  e arestas  $E$  do grafo originador. Dentre os tipos possíveis de subgrafos, temos os chamados subgrafos abrangentes (12), nos quais o conjunto de vértices do subgrafo é igual ao do grafo do qual ele é gerado. Portanto, dizemos que  $F(V_F, E_F)$  é um subgrafo abrangente de  $G(V, E)$ , se  $V = V_F$  e  $E_F$  pode ser definido como um subconjunto de  $E$ . Dentre os possíveis subgrafos abrangentes de um grafo conectado, teremos casos desses subgrafos que não serão necessariamente grafos conectados, pois esse subconjuntos de arestas pode não conter as ligações de um vértice ao grafo, ocorrendo casos de grafos com vértices isolados.

No caso de subgrafos abrangentes de grafos como os completos ( $K_n$ ), como essas estruturas possuem o maior número possível de arestas para grafos simples com  $n$  vértices, o conjunto de subgrafos possíveis que possuam o mesmo conjunto de  $n$  vértices, definem todos os grafos possíveis com esse número de vértices. Dessa forma, como as arestas conectam dois vértices do grafo, um grafo de  $n$  vértices possui um número máximo de arestas dado pelo número de combinações desses  $n$  elementos tomados dois a dois, ou seja,

$$\binom{n}{2} = \frac{n!}{2!(n - 2)!}. \quad (2.34)$$

Como  $n!$  pode ser expandido em  $n! = n(n - 1)(n - 2)!$ , e sendo  $|E|_{max}(n)$  o número máximo de arestas para um grafo de  $n$  vértices, a equação pode ser simplificada para

$$|E|_{max}(n) = \frac{n(n - 1)}{2}. \quad (2.35)$$

Tomando a soma de combinações desde 0 arestas, até esse número máximo possível, obtemos o número total de subgrafos possíveis para um dado grafo  $K_n$  de vértices nomeados.

$$n_{S_{K_n}} = \sum_{j=0}^{|E|_{max}(n)} \binom{|E|_{max}(n)}{j}, \quad (2.36)$$

a qual pode ser simplificado a partir da relação do binômio de Newton,

$$(a + b)^\mu = \sum_{j=0}^{\mu} \binom{\mu}{j} a^{\mu-j} b^j, \quad (2.37)$$

considerando  $a = b = 1$ , implicando em

$$\sum_{j=0}^{\mu} \binom{\mu}{j} = 2^\mu. \quad (2.38)$$

Substituindo o valor obtido para  $|E|_{max}(n)$ , finalmente chegamos ao valor de subgrafos de um grafo completo de vértices numerados, dado por

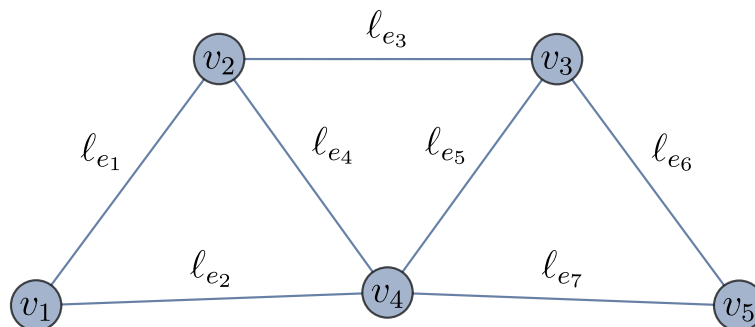
$$n_{S_{K_n}} = 2^{\frac{n(n-1)}{2}}. \quad (2.39)$$

Esse conceito de subgrafos abrangentes será essencial para definir a randomização em estados grafo na seção 4.3, no qual um grafo é definido para representar o estado esperado e os seus subgrafos representam estados possíveis ao considerar um ruído na produção de portas emaranhadoras.

## 2.5 GRAFOS MÉTRICOS

Podemos definir uma métrica nas arestas de um grafo, constituindo assim um grafo métrico. Para isso, em cada aresta  $e_s \in E$ , é definido um comprimento positivo  $L_{e_s}$ , o que permite associar uma coordenada  $x_{e_s}$  pertencente a um intervalo entre 0 e  $L_{e_s}$ , sendo esses valores limites a posição dos vértices ligados por essa aresta (13). Temos como exemplo o grafo apresentado na Figura 7.

Figura 7 – Grafo métrico com seus comprimentos  $\ell_{e_s}$  em cada aresta  $e_s = \{i, j\}$ .



Fonte: O autor.

Dentre modelos que utilizam desses grafos métricos, temos os grafos quânticos, que necessitam da métrica para definir um operador diferencial ao longo dessas arestas e assim estudar espalhamento. Esse modelo de espalhamento em grafos quânticos será o tema abordado na próxima seção.



### 3 GRAFOS QUÂNTICOS

Buscando analisar o espalhamento de uma partícula quântica através de uma estrutura, temos a dinâmica de espalhamento em sistemas quânticos. Esse estudo pode ser realizado usando o formalismo de grafos, no qual é um ótimo modelo para definir o espalhamento de uma onda plana. Para esse propósito, definimos um grafo quântico pela notação  $\Gamma_G(E, V)$ , onde, para ser possível aplicar uma equação diferencial, necessita de uma métrica e condições de contorno definidas nos vértices. Portanto, temos como condições necessárias para definir um grafo quântico  $\Gamma_G$ :

- i. Um grafo métrico;
- ii. A definição do operador Hamiltoniano  $\mathcal{H}$  em cada uma de suas arestas;
- iii. Condições de contorno em seus vértices.

Definindo um grafo métrico, cujas arestas possuem um comprimento positivo  $\ell_{e_s}$ , assim permitindo uma coordenada  $x_{e_s} \in [0, \ell_s]$ , podemos definir um operador diferencial. Considerando um operador hamiltoniano proveniente da equação unidimensional de Schrödinger (13, 16) em cada aresta  $e_s$ ,

$$\mathcal{H}_{e_s} = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx_{e_s}} - qA(x_{e_s}) \right)^2 + qV(x_{e_s}), \quad (3.1)$$

onde  $A_m$  vem do potencial vetor magnético e  $V_{e_s}(x_{e_s})$  representa um potencial na aresta. Considerando uma partícula livre, ou seja, livre desses potenciais, obtemos

$$\mathcal{H}_{e_s} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx_{e_s}^2}. \quad (3.2)$$

Com esse operador definido em  $e_s$ , teremos funções  $\psi_{e_s}(x_{e_s})$  em cada uma dessas aresta, conforme apresentado na Figura 8. Esse operador sem potenciais define a equação de Schrödinger para a partícula livre. Portanto teremos essas funções em cada aresta  $e_s$  definidas por

$$-\frac{d^2\psi_{e_s}(x_{e_s})}{dx_{e_s}^2} = k^2\psi_{e_s}(x_{e_s}), \quad (3.3)$$

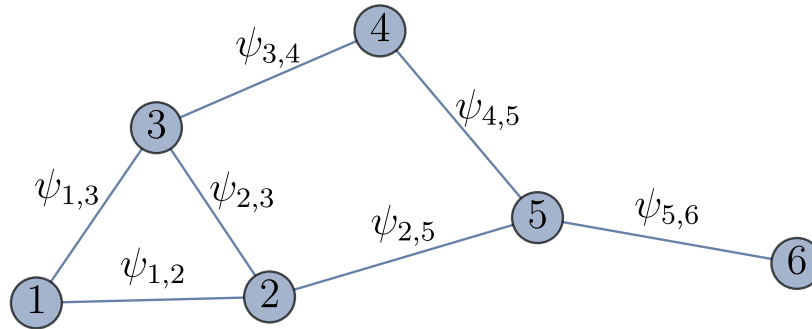
onde  $\psi_{e_s}(x_{e_s})$  é uma função de onda com número de onda  $k$ , o qual para uma partícula é  $k = \sqrt{2m\mathcal{E}/\hbar^2}$ , com  $m$  a massa e  $\mathcal{E}$  a energia.

Portanto, toda aresta do grafo, definida como  $e_s = \{i, j\}$ , com coordenadas definidas no intervalo comprimento  $x_{e_s} = [0, \ell_{e_s}]$  teremos uma função de onda associada  $\psi_{e_s} = \psi_{i,j}$ , a qual terá uma forma geral como

$$\psi_{i,j}(x) = a_{i,j}e^{ikx} + b_{i,j}z_{i,j}e^{-ikx}, \quad (3.4)$$

onde  $z_{i,j} = e^{ik\ell_{e_s}}$ . Assim é possível definir um conjunto de funções de onda em arestas conectadas a um mesmo vértice  $v_j$  como  $\Psi_j$ , o qual usaremos nas definições das condições de contorno.

Figura 8 – Grafo métrico com funções de ondas  $\psi_{i,j}$  associadas em cada aresta  $e_s$ .



Fonte: O autor.

### 3.1 CONDIÇÕES DE CONTORNO NOS VÉRTICES

Conforme apresentado até o momento, em um grafo quântico são definidas funções de onda em cada aresta. Dado um vértice  $v_j$  do grafo, teremos um conjunto dessas funções de onda  $\Psi(v_j)$  com elementos  $\psi_{e_s}(v_j)$ , sendo  $e_s \in NE(v_j)$ , onde  $NE(v_j)$  é o conjunto de arestas adjacentes ao vértice  $v_j$ . No caso de um vértice com grau  $d = d_{v_j}$ , e nomeando todos os vértices com um conjunto de números de 1 a  $d$ , teremos um conjunto de arestas vizinhas  $NE(v_j) = \{e_{\{1,j\}}, \dots, e_{\{d,j\}}\}$ , e assim

$$\Psi(v_j) = \begin{pmatrix} \psi_{\{1,j\}}(v_j) \\ \psi_{\{2,j\}}(v_j) \\ \dots \\ \psi_{\{d,j\}}(v_j) \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

Para se obter a forma final dessas funções, impõem-se restrições de modo que elas devem satisfazer condições de contorno definidas em cada vértice do grafo. A forma mais geral dessas condições envolve esse conjunto de funções e suas derivadas nos vértices que limitam essa aresta analisada. Assim, a forma geral para a condição de contorno no vértice, que é consistente com conservação de fluxo de probabilidade, é dada por

$$A_{v_j} \Psi(v_j) + B_{v_j} \Psi'(v_j) = 0, \quad (3.6)$$

onde os coeficientes  $A_{v_j}$  e  $B_{v_j}$  são definidos por matrizes  $d_{v_j} \times d_{v_j}$ , obtidas de acordo com a condição de contorno proposta nesse vértice  $v$ . Dentre as condições que essas matrizes devem respeitar, temos que uma matriz  $(A_{v_j}, B_{v_j})$ , de dimensão  $d_{v_j} \times 2d_{v_j}$ , deve possuir posto máximo  $d_{v_j}$  e  $AB^*$  é autoadjunta (17).

Como um primeiro exemplo de condição de contorno, há a denominada condição de Neumann e definida por duas condições (13)

$$\text{C.C. Neumann : } \begin{cases} \psi(x) \text{ contínua em } v, \\ \sum_{e \in NE(v)} \frac{d\psi}{dx_{e_s}}(v) = 0. \end{cases} \quad (3.7)$$

Este resultado é obtido da equação (3.6) assumindo  $A_v = 0$  e  $B_v$  uma matriz inversível. Já na condição do tipo Dirichlet, temos um resultado no qual a função no vértice será nula, e assim

$$\text{C.C. Dirichlet : } \begin{cases} \psi(x) \text{ contínua em } v, \\ \psi(v) = 0. \end{cases} \quad (3.8)$$

Essa condição, por impor  $\psi(v) = 0$ , implica em propriedades interessantes, pois como a função de onda no grafo é igual a zero no vértice, e independente da aresta em que se encontra, não haverá transmissão dessa função de uma aresta para outra. Isso pode levar a extrapolações como a redesenhar um novo grafo, no qual originalmente todas essas arestas conectadas ao vértice  $v$  que possui uma condição do tipo Dirichlet, podem ser apresentadas como desconectadas de  $v$  e conectadas a vértices de grau 1 (18). Em casos como quando queremos definir grafos totalmente conectados, sem um conjunto de vértices isolados dos demais, tal condição não é ideal. Porém em vértices que possuem grau 1 é interessante de aplicá-la para em muitos casos ter a comparação entre diferentes condições de contorno nesses vértices.

Um tipo de condição de contorno que generaliza as duas condições de contorno apresentadas acima é a condição do tipo  $\delta$ . Essa condição de contorno em um vértice de grau 2 é análoga à condições da equação de Schrödinger em uma dimensão com um potencial dado pela delta de Dirac  $\delta(x)$  explorada em livros de mecânica quântica (19). Assim, a condição de contorno do tipo delta é dado por

$$\text{C.C. tipo } \delta : \begin{cases} f(x) \text{ contínua em } v, \\ \sum_{e \in NE(v)} \frac{d\psi}{dx_{es}}(v) = \alpha_v \psi(v), \end{cases} \quad (3.9)$$

na qual o parâmetro  $\alpha_v$  define a opacidade da delta de Dirac. Desta forma, podemos escrever

$$\begin{cases} \alpha_j = 0, & \text{Neumann-Kirchhoff,} \\ \alpha_j \neq 0, & \text{delta de Dirac com intensidade } \alpha_j, \\ \alpha_j \rightarrow \infty, & \text{Dirichlet.} \end{cases} \quad (3.10)$$

Essas condições de contorno permitem interpretar os vértices de um grafo como centros espalhadores da função de onda, onde teremos uma parte transmitida para as demais arestas adjacentes a  $v_j$  e uma reflexão para essa mesma aresta inicial. Assim, podemos associar uma matriz de espalhamento  $\sigma_j$  (20) em um vértice  $j = v_j$ . Em termos das matrizes  $A_j$  e  $B_j$  ela é dada por

$$\sigma_j(k) = -(A_j + ikB_j)^{-1} (A_j - ikB_j). \quad (3.11)$$

Seus elementos, que serão apresentados como  $\sigma_{v_j^{e_{s'}, e_{s''}}} = \sigma_j^{s', s''}$ , definem a amplitude de reflexão, quando temos os números associados às arestas iguais ( $s' = s''$ ), e definem também as amplitudes de transmissão, quando  $s' \neq s''$ .

As matrizes  $A_j$  e  $B_j$  para um vértice  $v_j$  com grau  $d_j \geq 2$  com condição de contorno do tipo delta, são dadas por matrizes  $d_j \times d_j$ , cujos elementos são dados por (13)

$$(A_j)_{m,n} = (1 - \delta_{m,d_j})(\delta_{n,m} - \delta_{n,m+1}) - \alpha_j \delta_{m,d_j} \delta_{n,1}, \quad (3.12)$$

$$(B_j)_{m,n} = \delta_{m,d_j}. \quad (3.13)$$

Portanto, essas matrizes implicam em  $A_j B_j^* = -\alpha_j \delta_{m,d_j} \delta_{n,d_j}$ , a qual, para ser autoadjunta, deve ter  $\alpha_j$  real. Substituindo essas matrizes na equação (3.11), obtemos as amplitudes de reflexão e transmissão

$$r_j = \frac{\alpha_j - (d_j - 2)ik}{d_j ik - \alpha_j}, \quad (3.14)$$

$$t_j = \frac{2ik}{d_j ik - \alpha_j}. \quad (3.15)$$

Assim vemos que essas amplitudes dependem do grau do vértice em questão, da intensidade da delta e de  $k$ . Esses dois resultados podem ser reescritos em termos de uma amplitude de espalhamento no vértice (19, 20, 21)

$$\sigma_j^{m,n}(k) = \left( \frac{2ik}{d_j ik - \alpha_j} - \delta_{m,n} \right), \quad (3.16)$$

obtendo essas amplitudes  $t_j$  para  $e_m \neq e_n$  e  $r_j$  quando  $n = m$ , válida para  $d_j \geq 2$ .

Em uma condição do tipo Neumann, temos  $\alpha_j = 0$  e assim teremos condições de contorno independentes de  $k$  nos vértices

$$\sigma_j^{m,n}(k) = \frac{2}{d_j} - \delta_{m,n}. \quad (3.17)$$

Para vértices de grau  $d_j = 1$ , pela forma geral da equação de contorno e para um  $\psi_e$  na forma dada pela equação (3.4), teremos apenas a reflexão para essa única aresta. Resolvendo essa equação da condição de contorno, a amplitude de reflexão nesse vértice dada por (22)

$$r_j = \frac{ik + \alpha_j}{ik - \alpha_j}, \quad (3.18)$$

onde  $\alpha_j$  define a intensidade dessa condição. Para  $\alpha_j = 0$ , temos a condição do tipo Neumann, cuja amplitude de reflexão será  $r_j = 1$ , enquanto para a condição de Dirichlet dada no limite  $(\alpha_j/k) \rightarrow \infty$ , será  $r_j = -1$ .

Ao obter as soluções das funções de ondas nas arestas com as condições de contorno definidas nos vértices, obtemos por consequência os valores para cada amplitude  $a_{i,j}$  e  $b_{i,j}$  presentes na equação (3.4). O conjunto dessas amplitudes define uma matriz coluna  $\mathbf{a}_\Gamma$  com um número  $2|E|$  de elementos. Dessa forma, essa matriz é definida por

$$U_\Gamma^S(k) \mathbf{a}_\Gamma = \mathbf{a}_\Gamma, \quad (3.19)$$

onde a matriz  $U_\Gamma^S(k)$  é definida como o produto

$$U_\Gamma^S(k) = S_\Gamma(k) D_\Gamma(k). \quad (3.20)$$

$S_\Gamma$  é a matriz de espalhamento no grafo definida pelos coeficientes pelas amplitudes de transmissão e reflexão, assim definindo o espalhamento nos vértices. Já  $D_\Gamma(k)$  é a matriz que define

a métrica em cada aresta  $e_s$  no grafo, possuindo os elementos  $z_{i,j} = e^{ikl_{e_s}}$ , indicando como a função se comporta nessas arestas. Finalmente, dentre as propriedades que essa matriz fornece, temos o seu determinante secular

$$\zeta_{\Gamma}^S(k) := \det [I - U_{\Gamma}^S] = 0, \quad (3.21)$$

cujas raízes fornecem o espectro do grafo quântico, que será discutido na seção 3.2.1. Dessa forma, temos essa matriz  $U_{\Gamma}^S$  que apresenta todo o processo de espalhamento no grafo quântico  $\Gamma_G$ , sendo definida a partir das condições de contorno e da métrica do grafo. A abordagem fornecida nessa seção para resolver o espalhamento em grafos quânticos não é a única. Na próxima seção apresentamos o método usado nesse trabalho, o qual é baseado na obtenção da função de Green para o espalhamento em grafos.

### 3.2 FUNÇÃO DE GREEN PARA GRAFOS QUÂNTICOS

Existem algumas formas para se obter a função de Green, um caso é dessa função associada ao Hamiltoniano  $H(x_f)$ , que é formalmente definida pela solução da equação diferencial não homogênea (23)

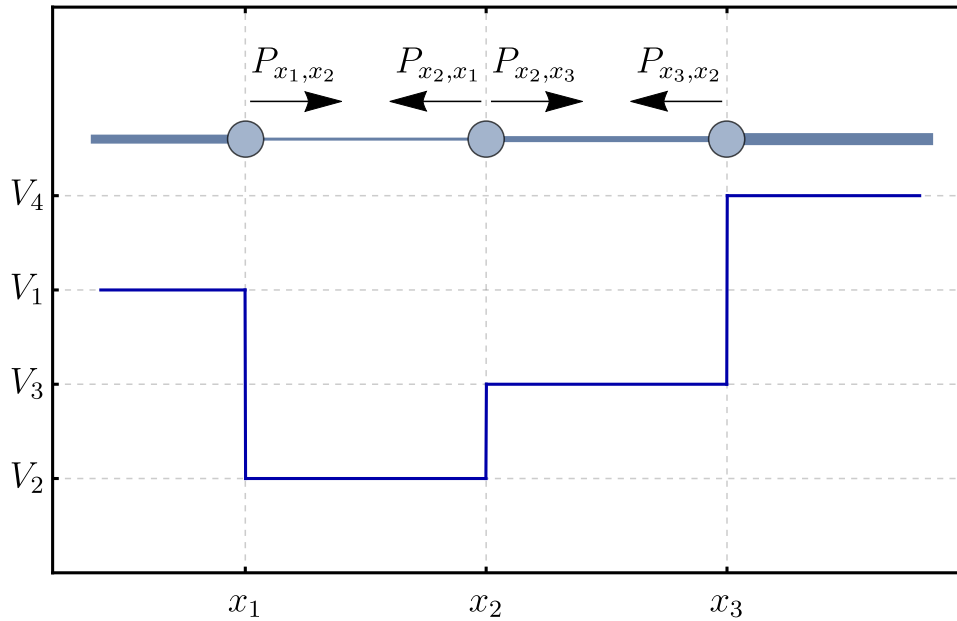
$$[\mathcal{E} - \mathcal{H}(x_f)]\mathcal{G}(x_f, x_i; \mathcal{E}) = \delta(x_f - x_i), \quad (3.22)$$

onde  $\mathcal{H}$  é o operador hamiltoniano, definido segundo a equação (3.1),  $\mathcal{E}$  é a energia da partícula e  $\delta$  é a função delta de Dirac. No entanto, para alguns sistemas como poços quânticos quadrados ou de potenciais de suporte compacto (24, 25), a função de Green exata pode ser obtida através de um método semiclássico generalizado. Nesse método, os efeitos quânticos locais são verificados levando em conta as amplitudes quânticas de transmissão e reflexão. Essa abordagem é válida para grafos quânticos e fornece soluções exatas para eles, onde o espalhamento será através de estruturas com topologia definidas pelos grafos, com condição de contorno nas posições dos vértices e com métrica definidas em suas arestas.

Esse método através da abordagem semiclássica é definido considerando famílias de caminhos  $P_{x_i, x_f}$ , formadas pelo conjunto de caminhos possíveis que partem de um ponto  $x_i$  e chegam a um ponto  $x_f$ , onde há uma condição de contorno, sendo espalhadas e formando outras famílias de caminhos. Nesse caso, teremos a situação apresentada na Figura 9 na qual associamos famílias de caminhos referentes as componentes da função de onda se deslocando em um certo sentido em regiões de potencial constante. Como no caso do intervalo entre os pontos  $x_1$  e  $x_2$ , onde a família de caminhos de espalhamento  $P_{x_1, x_2}$  vão de  $x_1$  para  $x_2$ , ao longo de um certo comprimento  $|x_2 - x_1|$ , encontrando uma diferença de potencial em  $x_2$ . Isso implica em uma parte sendo refletida, formando a família  $P_{x_2, x_1}$  e certa parte sendo transmitida para a região entre os pontos  $x_2$  e  $x_3$ , formando a família  $P_{x_2, x_3}$ . Essas contribuições de coeficientes de reflexão e transmissão em cada família de caminhos definem uma amplitude geral  $W_{c.e.}$ . Assim, teremos a função de Green definida como (22)

$$\mathcal{G}(x_f, x_i; \mathcal{E}) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \sum_{c.e.} W_{c.e.} e^{\frac{i}{\hbar} S_{c.e.}(x_f, x_i; \mathcal{E})}, \quad (3.23)$$

Figura 9 – Potenciais retangulares com descontinuidades em  $x_1$ ,  $x_2$  e  $x_3$ , seu respectivo grafo vestido (onde temos cada aresta com determinada espessura representando a intensidade do potencial) e famílias de caminhos  $P_{x_i,x_j}$  associados às componentes da função de onda durante o espalhamento.



Fonte: O autor.

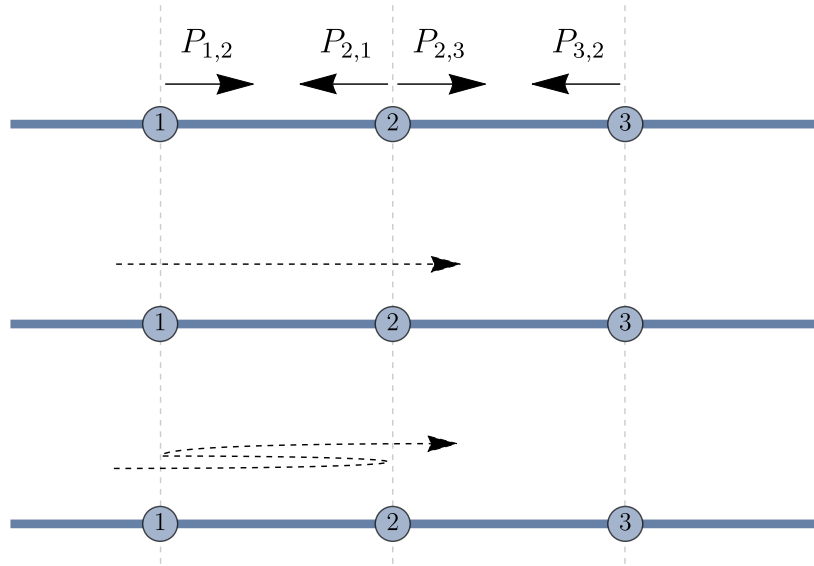
onde *c.e.* significa os caminhos de espalhamento possíveis no sistema e  $S_{c.e.}$  é uma ação clássica, definida por  $S_{c.e.}(x_a, x_b; \mathcal{E}) = \hbar \int_{x_a}^{x_b} k_j dx$ , sendo  $k_j$  o número de onda. Dessa forma, vemos que esse método de trabalhar com o espalhamento a partir de composição de trajetórias possui uma abordagem similar ao método das integrais de caminhos proposto por Feynman (26), onde a ação clássica é generalizada para a composição de todas as trajetórias possíveis entre esses dois pontos.

Para o caso de um potencial nulo ao longo da aresta, tem-se  $S_{c.e.}(x_a, x_b; \mathcal{E}) = \hbar k L_{c.e.}$ , com  $k = \sqrt{2m\mathcal{E}/\hbar^2}$  e sendo o último termo o tamanho dessa trajetória. Comparando com os casos apresentados nas Figuras 9 e 10, para o caminho de espalhamento  $P_{1,2}$ , teremos  $L_{x_1,x_2} = |x_2 - x_1|$ . Assim, a função de Green terá a forma

$$\mathcal{G}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \sum_{c.e.} W_{c.e.} e^{ikL_{c.e.}}. \quad (3.24)$$

Conforme explicado anteriormente, esses estudos de espalhamentos podem ser modelados utilizando o formalismo de grafos. Para casos como esse abordado na Figura 9, teremos os vértices representando os pontos onde há essa mudança de potencial, assim associamos  $v_1$  em  $x_1, \dots, v_n$  em  $x_n$ . As arestas possuirão uma métrica e potenciais associados (caso ao qual chamamos de grafos vestidos), com comprimento total dado pelo tamanho da região com potencial constante. Dessa forma temos um exemplo de região com potenciais e o grafo referente a ele. Nessa dissertação, estudaremos o caso onde o potencial nas arestas é nulo, para assim comparar com os apresentados no início da seção onde obtínhamos a solução pelo conjunto de equações

Figura 10 – Exemplo de trajetórias de caminhos que compõem uma família de caminho  $P_{1,2}$  em um grafo  $P_3$  com duas "leads" adicionadas.



Fonte: O autor.

de Schrödinger, com as condições de contorno definidas na equação (3.17).

A função de Green exata para grafos quânticos pode ser dada em termos da matriz adjacência do grafo, somando todas as famílias de caminhos que partem do vértice de entrada, sendo assim

$$\mathcal{G}_{\Gamma_G}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \left[ \delta_{f,i} e^{ik(|x_f - x_i|)} + \sigma_{\Gamma}^{(f,i)}(k) e^{ik(|x_f| + |x_i|)} \right], \quad (3.25)$$

onde

$$\sigma_{\Gamma}^{(f,i)}(k) = \delta_{f,i} r_i + t_i \sum_{j=1}^{|V|} A_{ij} P_{ij}. \quad (3.26)$$

Para obter a função de Green para o caso de espalhamento em um grafo quântico  $\Gamma_G(V, E)$ , adicionamos duas arestas semi-infinitas, chamadas de "leads". Uma delas é ligada ao vértice de entrada, o qual chamaremos de  $v_i$  e outra ao vértice de saída  $v_f$ , dessa forma, ao compararmos com o grafo sem "leads", o grau desses dois vértices aumenta uma unidade ( $d_{v_i} \rightarrow d_{v_i} + 1$  e  $d_{v_f} \rightarrow d_{v_f} + 1$ ), também é possível o caso em que é definido  $v_i = v_f$ , nesse caso, o grau desse vértice será  $d_{v_i} \rightarrow d_{v_i} + 2$ . Com essas arestas semi-infinitas, temos que cada família de caminhos em uma aresta  $e_s = \{i, j\}$  do grafo será definida percorrendo sempre uma distância  $\ell_{e_s}$  e espalhada no vértice  $v_j$ . O espalhamento nesse último vértice define todas as famílias de caminhos que partem dele, sendo assim as famílias de caminhos que vão de  $v_j$  aos vértices adjacentes a ele e ainda, caso esse seja o vértice que foi ligado à "lead" de saída, uma parte é transmitida para fora do grafo. Portanto cada família de caminho  $P_{i,j}$  é definida como

$$P_{i,j} = z_{i,j} \left[ \delta_{f,j} \sigma_j^{\{i,j\}, l_f} + \sum_{l=1}^{|V|} A_{j,l} P_{j,l} \sigma_j^{\{i,j\}, \{j,l\}} \right], \quad (3.27)$$

onde  $l_j$  é uma "lead" de saída,  $A$  é a matriz adjacência do grafo. Ainda podemos expandir essa relação entre as famílias de caminhos considerando os coeficientes de transmissão e reflexão que compõem  $\sigma_j$

$$P_{i,j} = z_{i,j} \left[ \delta_{i,j} t_j + r_j P_{j,i} + t_j \sum_{l \in (V \setminus \{v_i\})} A_{j,l} P_{j,l} \right], \quad (3.28)$$

onde  $l \in (V \setminus \{v_i\})$  define que o somatório é feito sobre todos vértices  $v_l \in V$ , porém com a exceção do vértice  $v_i$ , onde teremos a amplitude de reflexão.

A equação (3.25) apresenta uma forma muito interessante de obter a função de Green, pois em casos como a de um grafo com apenas condições de contorno do tipo Neumann ( $t_j = 2/d_j$  e  $r_j = (2/d_j) - 1$  para grau  $d_j \geq 2$ , ou  $t_j = 0$  e  $r_j = 1$  para grau  $d_j = 1$ ) e comprimentos de arestas com valor  $\ell$  constante, obtemos uma solução na forma

$$\sigma_{\Gamma}^{(f,i)}(k) = \delta_{fi} \frac{2 - d_i}{d_i} + \frac{2}{d_i} \sum_{j=1}^{|V|} A_{ij} P_{ij}, \quad (3.29)$$

onde cada elemento do conjunto de equações que definem as famílias de caminho  $P_{i,j}$ , terão a forma

$$P_{ij} = e^{ik\ell} \left[ \delta_{ij} \frac{2}{d_j} + \frac{2 - d_j}{d_j} P_{ji} + \frac{2}{d_j} \sum_{l \in (V \setminus \{v_i\})} A_{jl} P_{jl} \right]. \quad (3.30)$$

Como o grau  $d_j$  de cada vértice pode ser obtido pela soma dos elementos da respectiva linha para esse vértice na matriz adjacência  $A$ , teremos que a solução para a função de Green de um caso com essas restrições dependerá apenas da matriz adjacência que define o grafo.

Para mostrarmos a equivalência entre o método da função de Green e da solução da equação de Schrödinger apresentada na seção 3.1, removemos as leads dos grafos. Nesse caso, o sistema de equações para essas famílias pode ser escrito como

$$U_{\Gamma}^G(k) \mathbf{p}_{\Gamma} = \mathbf{p}_{\Gamma}, \quad (3.31)$$

onde  $\mathbf{p}_{\Gamma}$  é uma matriz coluna com as famílias. Essa matriz ainda pode ser reescrita como o produto das duas matrizes que definem também a matriz no caso do sistema de equações de Schrödinger no grafo  $U_{\Gamma}^G(k)$ , sendo elas  $D_{\Gamma}(K)$  e  $S_{\Gamma}(K)$  (27). Porém se compararmos ambas matrizes  $U_{\Gamma}$ , a diferença entre essas matrizes é determinada pela ordem em que essas outras duas matrizes que os definem são multiplicadas. Assim como no caso de utilizarmos o método resolvendo as funções de onda em cada aresta, pelo método da função de Green, agora utilizando as famílias de caminhos, teremos o determinante secular para essa nova matriz, sendo definido como

$$\zeta_{\Gamma}^G(k) := \det [I - U_{\Gamma}^G] = 0, \quad (3.32)$$

o qual permite obter o espectro desses grafos quânticos utilizando esse método da função de Green.



### 3.2.1 Espectro de Grafos Quânticos

O estudo do espectro em mecânica quântica surge da necessidade de obter as autofunções de sistemas. Isso é possível em grafos quânticos ao obter os valores de energia dos seus autoestados, assim, teremos o estudo dos espectros de grafos quânticos que permitirá analisar os estados ligados do sistema.

Para obter o espectro em um grafo quântico, podemos partir da sua função de Green. Para esse caso, definimos um conjunto de autoestados  $\psi_\eta(x)$  referentes a um espectro discreto do grafo quântico, tal que

$$\mathcal{H}\psi_\eta = \mathcal{E}_\eta\psi_\eta, (\eta = 0, 1, \dots) \quad (3.33)$$

e um espectro contínuo dado por

$$\mathcal{H}\psi_\nu = \frac{\hbar^2\nu^2}{2m}\psi_\nu, (\nu > 0). \quad (3.34)$$

Uma vez conhecido o espectro discreto e contínuo de um sistema, podemos obter a função de Green desse sistema a partir da expansão espectral, a qual é dada por (22)

$$G(x_f, x_i; \mathcal{E}) = \sum_\eta \frac{\psi_\eta(x_f)\psi_\eta^*(x_i)}{\mathcal{E} - \mathcal{E}_\eta} + \int_0^\infty \frac{\psi_\nu(x_f)\psi_\nu^*(x_i)}{\mathcal{E} - \hbar^2\nu^2/2m} d\nu. \quad (3.35)$$

Analisando a equação acima, notamos que temos na primeira parte dessa equação que as autoenergias podem ser obtidas a partir dos polos dessa função e, conseqüentemente, os resíduos da função trazem a função de onda correspondente a essa energia.

Como exemplo, para o grafo quântico estrela ( $\Gamma_{S_n}$ ) com  $n$  vértices, todas as arestas de mesmo comprimento  $\ell$  e condições de Neumann em seus vértices. Aplicando o método apresentado na seção anterior, teremos uma função de Green na forma

$$G_{\Gamma_{S_n}}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \frac{2e^{ik\ell}(1 + e^{2ik\ell})^{n-2}/n}{[n - (n-4)e^{2ik\ell}](1 + e^{2ik\ell})^{n-3}/n} e^{ik(|x_f| + |x_i|)}. \quad (3.36)$$

Assim, os polos dessa classe de grafos quânticos, definidos pelos pontos de divergência, serão dados pelas raízes do seu denominador, ou seja

$$\frac{1}{n}[n - (n-4)e^{2ik\ell}](1 + e^{2ik\ell})^{n-3} = 0. \quad (3.37)$$

Essa igualdade tem como solução para  $k$  real, valores múltiplos de  $\frac{\pi}{2\ell}$ , o espectro dos grafos quânticos estrelas são dados pelo conjunto de valores de  $k_\nu$

$$Spec(\Gamma_{S_n}) := \{k_\nu\} = \left\{ \frac{\eta\pi}{2\ell} \right\}, (\eta = 0, 1, 2, \dots). \quad (3.38)$$

A relação entre os espectros de grafos discretos e de grafos quânticos com arestas de mesmo comprimento  $\ell$  e condições de contorno do tipo Neumann em seus vértices, é discutido no apêndice A. Nele obtemos a relação

$$k_\eta = \frac{1}{\ell} \arccos(1 - \lambda_\eta), \quad (3.39)$$

onde  $Spec_{\Delta_G} = \{\lambda_\eta\}$  é o espectro de autovalores da matriz laplaciana harmônica  $\Delta_G$  de um grafo  $G$  discreto. Isso mostra que esses espectros estão correlacionados e também que, com as restrições impostas pelas condições de contorno, eles são relacionados com a topologia do sistema, pois pode ser obtido a partir de uma matriz do seu respectivo grafo discreto.

A fim de mostrar como o espectro obtido pelo método da função de Green coincide com o método padrão, temos o espectro de  $\Delta_{S_n}$  que é

$$Spec_{\Delta}(S_n) = \{0, 1^{(n-2)}, 2\}. \quad (3.40)$$

Através da relação entre os espectros, teremos autovalores  $k_\eta$ ,

$$k_\eta = \frac{1}{\ell} \arccos(1 - \lambda_\eta). \quad (3.41)$$

Portanto teremos seus valores dados por

$$Spec_{\Gamma}(S_n) = \left\{ \frac{2\pi\eta}{\ell}, \frac{\pi + 4\pi\eta}{2\ell}, \frac{\pi + 2\pi\eta}{\ell} \right\}, \quad (\eta = 0, 1, 2, \dots), \quad (3.42)$$

ou, de forma mais geral,

$$Spec_{\Gamma}(S_n) = \left\{ \frac{\eta\pi}{2\ell} \right\}, \quad (\eta = 0, 1, 2, \dots), \quad (3.43)$$

resultando no mesmo espectro obtido em relação ao método pelos polos da função de Green.

### 3.3 TRANSMISSÃO EM GRAFOS QUÂNTICOS

O espalhamento de uma função de onda unidimensional através de uma certa estrutura pode ser apresentado através dos grafos quânticos. Para obter esse espalhamento, partimos da função de Green, onde definimos um ponto  $x_i$  em uma "lead" de entrada e um ponto  $x_f$  na "lead" de saída. Conforme apresentado anteriormente, para grafos quânticos com no máximo uma "lead" em cada vértice e com a "lead" de entrada adicionada a um vértice definido como  $v_i$  e a "lead" final ou de saída definida como  $v_f$ , temos a amplitude de espalhamento definida na função de Green como

$$\sigma_{\Gamma}^{(f,i)}(k) = \delta_{fi} r_i + t_i \sum_{j=1}^{|V|} A_{ij} P_{ij}. \quad (3.44)$$

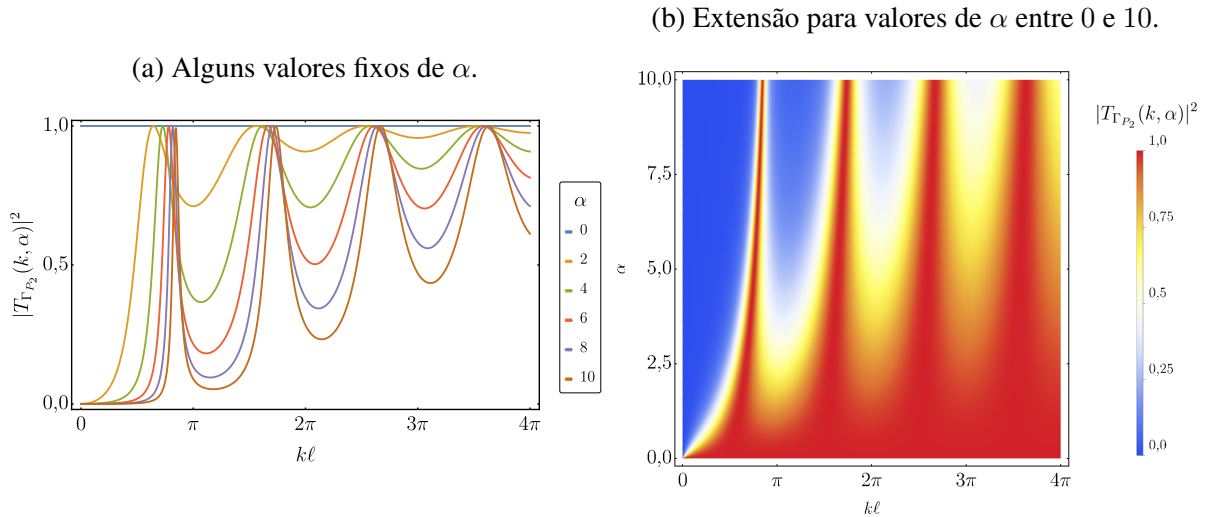
No qual para  $i = f$ , temos a amplitude de reflexão  $R_{\Gamma}(k)$  e para  $i \neq f$ , define a amplitude de transmissão  $T_{\Gamma}(k)$ . Essas amplitudes, como temos apenas uma entrada e uma saída do grafo, devem respeitar a condição

$$|R_{\Gamma}(k)|^2 + |T_{\Gamma}(k)|^2 = 1. \quad (3.45)$$

Com essas amplitudes de transmissão e reflexão do grafo definidas, podemos estudar o comportamento do espalhamento de acordo com as condições impostas. Considerando condições do tipo  $\delta$ , sendo um grafo com comprimento de arestas  $\ell$  constante, podemos obter a amplitude de transmissão em função do número de onda vezes esse comprimento das arestas e

Figura 11 – Grafo  $P_2$  com duas "leads" adicionadas

Fonte: O autor.

Figura 12 – Probabilidade de transmissão no grafo quântico caminho com 2 vértices ( $P_2$ ) em função do número de onda vezes o comprimento da aresta ( $k\ell$ ) e da intensidade  $\alpha$  da  $\delta$  nos vértices.

Fonte: O autor.

da intensidade da  $\delta$ , definida pela variável  $\alpha$ , a qual será a mesma em todos os vértices. Considerando o caso mais simples de um grafo, o grafo caminho com 2 vértices ( $P_2$ ), definido com uma "lead" em cada um desses vértices, conforme apresentado na Figura 11. A amplitude de transmissão desse grafo quântico como apresentado no apêndice B, é dada por

$$T_{\Gamma_{P_2}}(k, \alpha) = \frac{4k^2 e^{ik\ell}}{4k^2 + 4i\alpha k - \alpha^2(1 - e^{2ik\ell})}. \quad (3.46)$$

Tomando o módulo quadrado dessa função, obtemos a probabilidade de transmissão nesses grafos  $P_2$  em função de  $k$  e  $\alpha$ , conforme apresentado na Figura 12. Algumas observações que podem ser feitas quando é considerada uma certa intensidade  $\alpha$  nessas condições  $\delta$  é o fato de não ser uma função periódica para  $\alpha \neq 0$ . Porém, tomando seus limites, na razão  $\alpha/k$  tendendo a zero, teremos os coeficientes de transmissão com comportamento cada vez mais similar às condições do tipo Neumann, o que pode ser visto em extensões de valores de  $k$  crescentes. Um exemplo para esse grafo, cujos limites para valores de  $k$  e  $\alpha$  são apresentados no mesmo apêndice B.

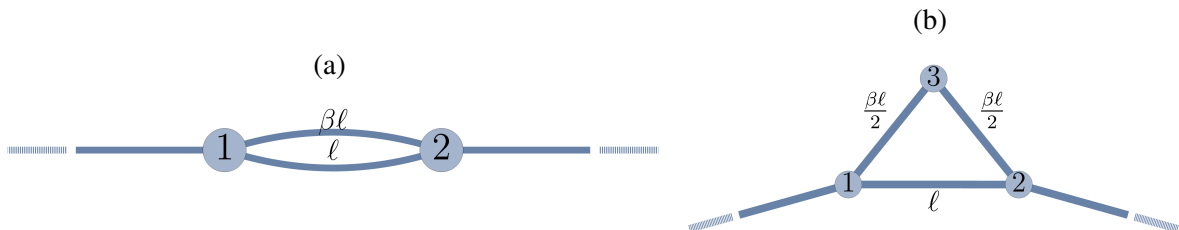
Outra variação possível é analisar como comprimentos diferentes influenciam nesse padrão de transmissão no grafo. Para esse caso, utilizamos o caso de dois vértices, ligados por duas arestas, conforme apresentado na Figura 13(a), sendo uma com comprimento  $\ell$  e outra com

comprimento  $\beta\ell$ . Como o método utilizado requer que o grafo seja simples, não possuindo mais de uma aresta entre os vértices, podemos considerar um vértice adicional no meio de uma dessas arestas, o qual deve possuir uma condição de contorno do tipo Neumann. Assim esse novo grafo será do tipo  $C_3$ , conforme ilustrado na Figura 13(b), onde os comprimentos de suas arestas são  $\beta\ell/2$  nas arestas conectadas por esse novo vértice e  $\ell$  na aresta que conecta os vértices de entrada e de saída. Isso só é possível nesses grafos quânticos devido a esse novo vértice possuir grau 2 e a condição do tipo Neumann, fazendo com que a amplitude de transmissão através desse vértice seja 1 e a de reflexão seja 0, sendo um vértice que apenas transmite e não reflete, não interferindo na solução final. Nesse caso, a amplitude de transmissão é dada por (ver apêndice B)

$$T(k, \beta) = \frac{4(e^{ik\ell} + e^{i\beta k\ell} - e^{i\beta k\ell + 2ik\ell} - e^{2i\beta k\ell + ik\ell})}{9 - e^{2ik\ell} - e^{2i\beta k\ell} - 8e^{i\beta k\ell + ik\ell} + e^{2i\beta k\ell + 2ik\ell}}. \quad (3.47)$$

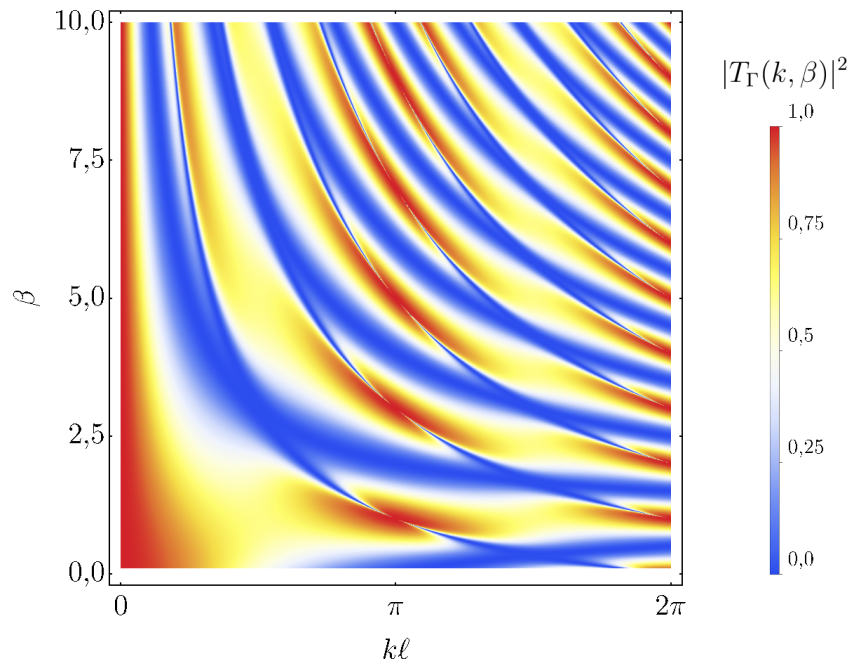
Fazendo o gráfico do módulo quadrado dessa amplitude de transmissão, obtemos a Figura 14. Da qual, ao considerar valores de  $\beta$  não inteiros como na Figura 15, observamos certas linhas finas de transmissão nula, as quais apresentam regiões onde há ressonâncias nesses grafos quânticos.

Figura 13 – (a) Grafo onde duas arestas são conectadas entre si por duas arestas com comprimentos  $\ell$  e  $\beta\ell$  e cada uma por uma aresta semi-infinita e (b) sua representação possível em um grafo quântico, onde em uma dessas arestas é colocado um vértice transparente (com transmissão 1 e reflexão 0).



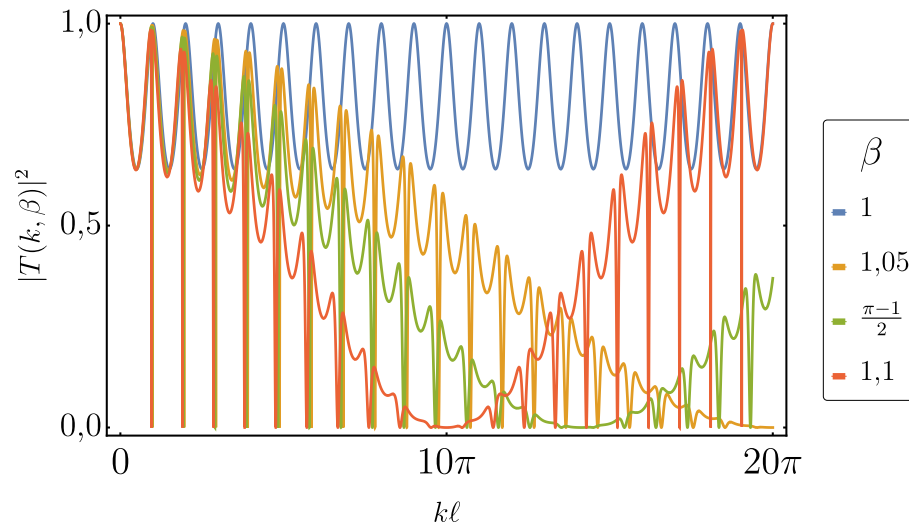
Fonte: O autor.

Figura 14 – Probabilidade de transmissão no grafo quântico definido na Figura 13.



Fonte: O autor.

Figura 15 – Probabilidade de transmissão no grafo quântico definido na Figura 13, com valores específicos de  $\beta$ .



Fonte: O autor.

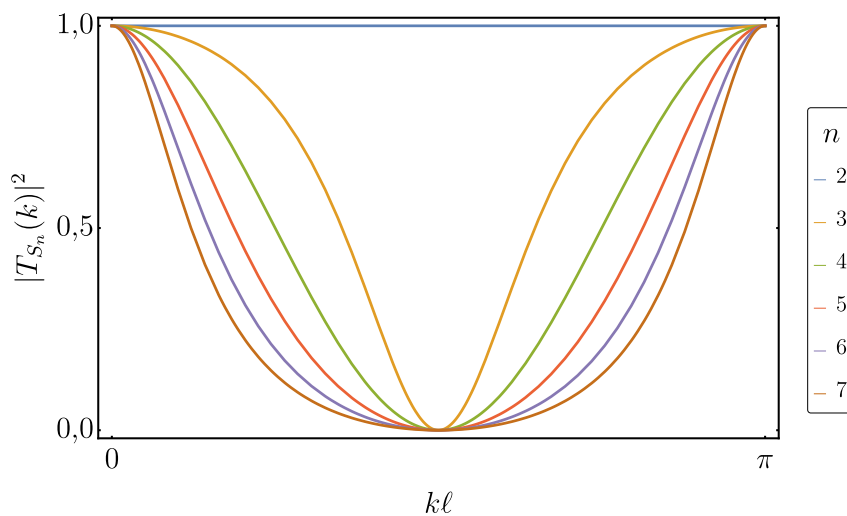
### 3.3.1 Transmissão em Tipos de Grafos

Uma abordagem para comparar o comportamento da transmissão em grafos quânticos é através dos tipos de grafos. Nesse caso definimos vértices de entrada e saídas padrões e o número de vértices são aumentados, assim como o número de arestas, respeitando a topologia

desses tipos de grafos definidos como na seção 2.3. Ao longo dessa seção, serão abordadas as transmissões para os grafos estrelas ( $S_n$ ), grafos caminhos ( $P_n$ ), ciclos ( $C_n$ ) e completos ( $K_n$ ), para cada qual foram escolhidos vértices de entrada sempre em um ponto definido e vértice de saída variando de acordo com o caso a ser analisado. Em todas as análises da probabilidade de transmissão serão definidas condições de contorno do tipo Neumann em todos os seus vértices, pois é a condição que permite analisar a topologia dos grafos. Também é relevante estudar esse caso, pois se considerássemos condições de contorno do tipo  $\delta$ , com valores de  $\alpha > 0$ , porém diferentes de uma condição do tipo Dirichlet, o comportamento da probabilidade de transmissão no grafo tende ao caso do tipo Neumann conforme o valor de  $k$  aumenta.

Começamos pelos grafos estrelas, onde definimos o ponto de entrada no vértice central, enquanto o vértice de saída será em um dos vértices conectados ao vértice central. Dessa forma, obtemos que o grau do vértice central desse grafo quântico é igual a  $n$  de vértices que ele possui, o que permite analisar o comportamento da transmissão quando temos um dado grau  $n$  e todos os outros vértices possuem grau 1, com exceção do vértice de saída que tem grau 2. Portanto, temos a probabilidade de transmissão em função do número de onda vezes o comprimento da aresta conforme apresentado no gráfico na Figura 16, onde o seu período é de  $\pi/k\ell$ .

Figura 16 – Probabilidade de transmissão dos grafos  $S_n$



Fonte: O autor.

Um segundo tipo comum de grafos, são os grafos caminhos ( $P_n$ ). Nesse caso, se considerarmos entrando em uma aresta da ponta e saindo na outra ponta, teremos uma probabilidade de transmissão sempre igual a 1, conforme apresentado na equação (3.46) ao adotarmos o valor  $\alpha = 0$  já que estamos em uma condição do tipo Neumann, isso pode ser compreendido com essa condição contorno adotada, pois como todos os vértices do grafo terão grau 2, logo a amplitude de transmissão em cada vértice será 1, enquanto a amplitude de reflexão é 0. Uma abordagem diferente e ainda interessante seria entrando e saindo em um mesmo vértice da ponta, assim possuindo grau igual a 3 nesse vértice, grau 2 nos demais vértices e 1 no outro vértice da ponta,

Figura 17 – Grafos do tipo  $P_n$ , com "leads" de entrada e saída adicionadas em um dos vértices da ponta.

- (a) Grafo representando o caso com  $n$  vértices. (b) Grafo  $P_2$  com uma aresta de comprimento  $\beta\ell$ .



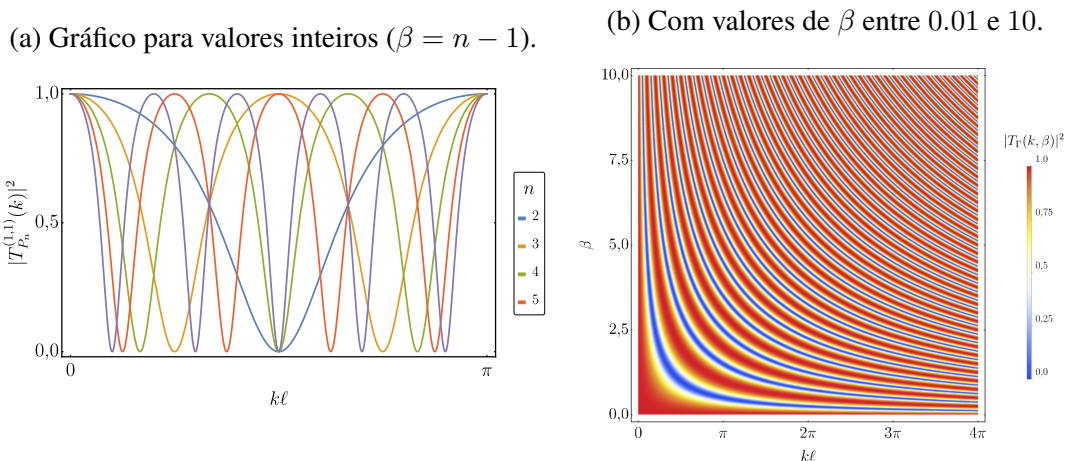
Fonte: O autor.

conforme ilustrado na Figura 17(a). A probabilidade de transmissão em grafos quânticos nessa forma são apresentados na Figura 18(a). Nesse caso, a adição de mais vértices, é equivalente a analisarmos um grafo  $P_2$ , porém com um comprimento de aresta  $\ell' = n\ell$ . De forma geral, podemos estender esse comprimento para valores reais  $\beta$  de comprimento, conforme o caso apresentado na Figura 17(b), assim obtendo um valor de amplitude de transmissão

$$T_{P_2}^{(1,1)}(k, \beta) = \frac{2(1 + e^{2ik\beta\ell})}{3 + e^{2ik\beta\ell}}, \quad (3.48)$$

cuja probabilidade de transmissão é apresentada na Figura 18(b) em função de  $k\ell$  e de  $\beta$ .

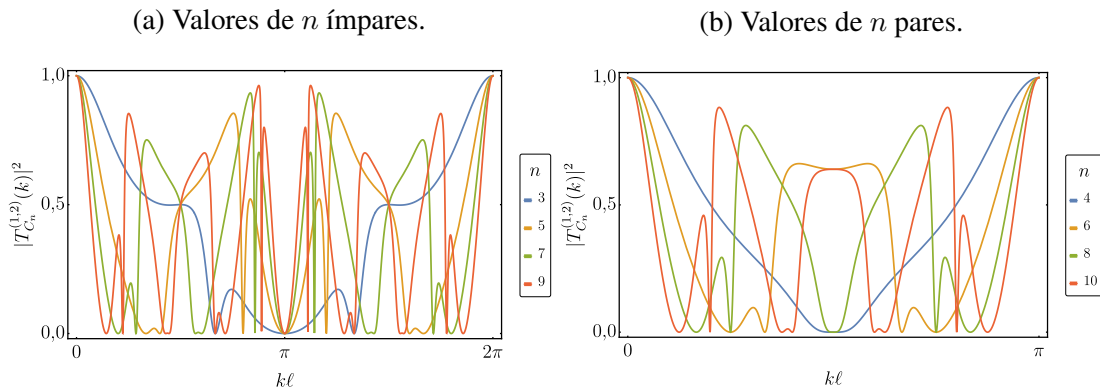
Figura 18 – Probabilidade de transmissão no grafo quântico  $P_2$  entrando e saindo em um mesmo vértice da ponta, em função do número de onda vezes o comprimento  $\beta\ell$  da aresta.



Fonte: O autor.

Em grafos quânticos do tipo ciclo, podemos considerar o caso de entrar em um vértice e sair logo em um vértice adjacente. Esse caso é equivalente ao apresentado no caso de dois vértices conectados por duas arestas. Assim, para um grafo do tipo  $C_n$ , teremos uma solução igual a da equação (3.47), porém, com valores de  $\beta$  inteiros e igual a  $n - 1$ . Dessa forma teremos transmissões como as apresentadas na Figura 19.

Figura 19 – Probabilidade de transmissão nos grafos quânticos  $C_n$ .

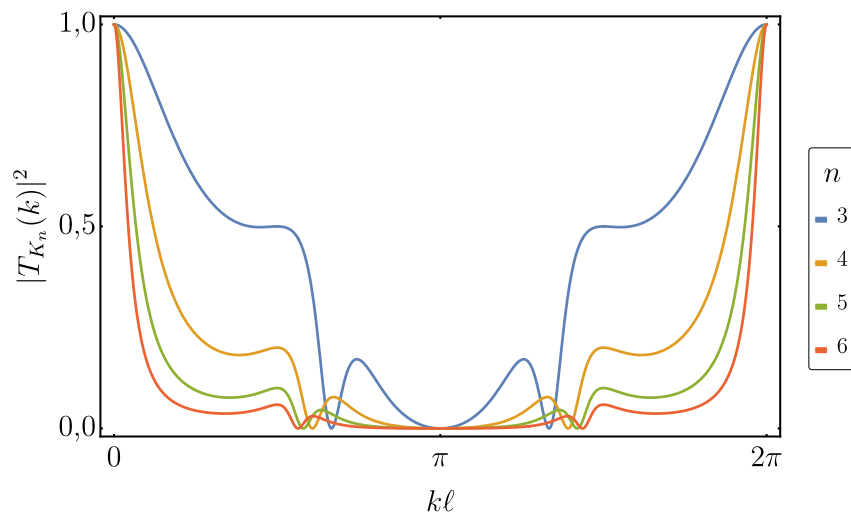


Um último caso recorrente de grafos são os grafos completos. Como eles possuem o maior número possível de arestas para um dado número  $n$  de vértices, o grau de cada vértice cresce rapidamente, alterando drasticamente os coeficientes de transmissão e reflexão neles. Ao escolher um vértice de entrada, nesse tipo de grafo quântico, qualquer escolha de vértice de saída adjacente a essa de entrada será equivalente, devido às suas conectividades também serem equivalentes. Logo, escolhendo vértices de entrada e saídas arbitrários nesses grafos, tal que  $v_f \neq v_i$ , teremos as probabilidades de transmissão nesses grafos conforme apresentada na Figura 20.

### 3.3.2 Transmissão em Grafos Quânticos com $l$ "leads"

É possível estender a um caso de  $l$  "leads" adicionadas ao grafo. Para isso, consideramos uma "lead" de entrada e as outras  $l - 1$  "leads" como saídas. Dessa forma, teremos a

Figura 20 – Probabilidade de transmissão dos grafos  $K_n$ .





conservação de probabilidade na forma

$$\sum_{f \sim l} \left| \sigma_{\Gamma}^{(f,i)}(k) \right|^2 = 1. \quad (3.49)$$

onde  $f \sim l$  apresenta que o vértice  $v_f$  é adjacente de uma "lead"  $l$  no sentido do vértice ser a origem dessa aresta semi-infinita. Para esse caso, a função de Green toma a forma

$$\mathcal{G}_{\Gamma^l}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \left[ \delta_{fi} e^{ik(|x_f - x_i|)} + \sigma_{\Gamma^l}^{(f,i)}(k) e^{ik(|x_f| + |x_i|)} \right], \quad (3.50)$$

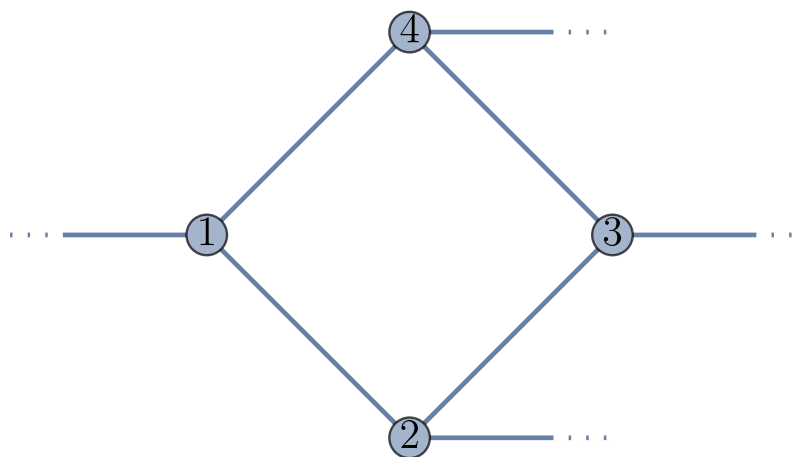
e essas amplitudes de espalhamento são obtidas por

$$\sigma_{\Gamma}^{(f,i)}(k) = \delta_{fi} r_i + t_i \sum_{j=1}^{|V|} A_{ij} P_{ij}^{(f)}, \quad (3.51)$$

onde  $P_{ij}^{(f)}$  é solução da família de caminhos que vão do vértice  $i$  para o vértice  $j$ , considerando um vértice  $v_f$  conectado a uma "lead" de saída.

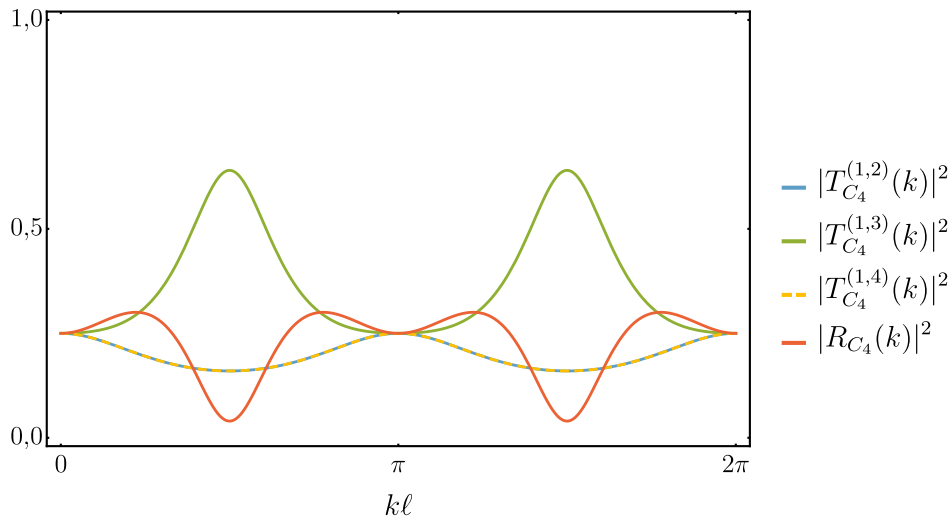
Como exemplo, temos para o grafo ciclo com quatro vértices ( $C_4$ ), onde, conforme a Figura 21, consideramos a "lead" de entrada adicionada ao vértice 1 e as demais "lead" aos vértices de saída. Com essa construção, chegamos ao gráfico de transmissão e reflexão em função de  $k$  e  $\ell$  apresentado na Figura 22. Nesse gráfico, vemos que há duas probabilidades de transmissão equivalentes, por saírem no primeiro vizinho. Outra característica que pode ser verificada é que a soma dessas transmissões mais a reflexão nesse grafo quântico com várias saídas resulta no valor 1, conforme esperado pelo que apresentamos na equação (3.49).

Figura 21 – Grafo  $C_4$  com "leads" adicionadas em seus vértices.



Fonte: O autor.

Figura 22 – Probabilidades de Transmissões e Reflexão em um grafo  $C_4$  com entrada em no vértice 1 e saídas possíveis nos demais.



Fonte: O autor.

### 3.4 ENTROPIA MÉDIA DE ESPALHAMENTO EM GRAFOS QUÂNTICOS

Uma ferramenta importante em estudos sobre informação é a entropia de informação, a qual permite medir a incerteza em uma distribuição de eventos possíveis (28). Caso exista uma total certeza de que um evento ocorrerá, então a entropia desse caso deve ser nula, sendo máxima apenas quando todos os possíveis eventos dessa distribuição possuam probabilidade iguais de ocorrer, ou seja, incerteza máxima. Deste modo, pensando em um caso em que temos  $n$  variáveis de probabilidade, cuja soma delas seja igual a 1, temos a entropia de Shannon (9) definida como

$$H_n = \sum_{i=1}^n p_i \log_2 \frac{1}{p_i} = - \sum_{i=1}^n p_i \log_2 p_i. \quad (3.52)$$

Dessa forma, podemos estudar a entropia informacional de um sistema. Como exemplo, temos o caso de um sistema de dois estados, sendo um com probabilidade  $p$  e outro com probabilidade  $(1 - p)$ ,

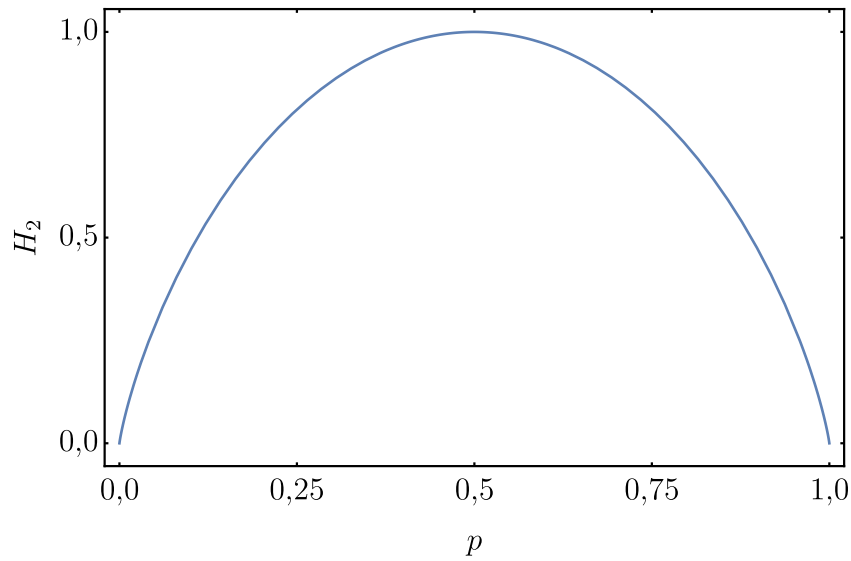
$$H(p) = -p \log_2(p) - (1 - p) \log_2(1 - p), \quad (3.53)$$

cujos gráfico dessa entropia em função de  $p$  é apresentada na Figura 23. Um exemplo prático desse primeiro caso é uma moeda com dois estados possíveis (cara e coroa), onde para uma moeda sem vícios temos a mesma probabilidade  $p = 0.5$  para ambos os casos e assim a entropia é máxima. Porém para qualquer valor diferente dessa probabilidade a entropia diminui, sendo os limites para  $p = 0$  e  $p = 1$ , onde a entropia é 0.

Nesse trabalho, propomos uma entropia de espalhamento que utiliza das probabilidades de espalhamento em grafos quânticos (29), associando-as à probabilidades

$$p_j(k) = \left| \sigma_{\Gamma^i}^{(j,i)}(k) \right|^2. \quad (3.54)$$

Figura 23 – Entropia de Shannon para duas variáveis



Fonte: O autor.

Isso é possível pois os coeficientes de espalhamento são tais que respeitam uma relação de que suas somas são sempre iguais a 1,

$$\sum_{j=1}^l p_{\sigma_{\Gamma^l}}^{(j)}(k) = 1, \quad (3.55)$$

ou seja, elas representam uma distribuição de probabilidades. Utilizando uma analogia com a entropia de Shannon, definimos a entropia similar, em função dessas probabilidades de espalhamento

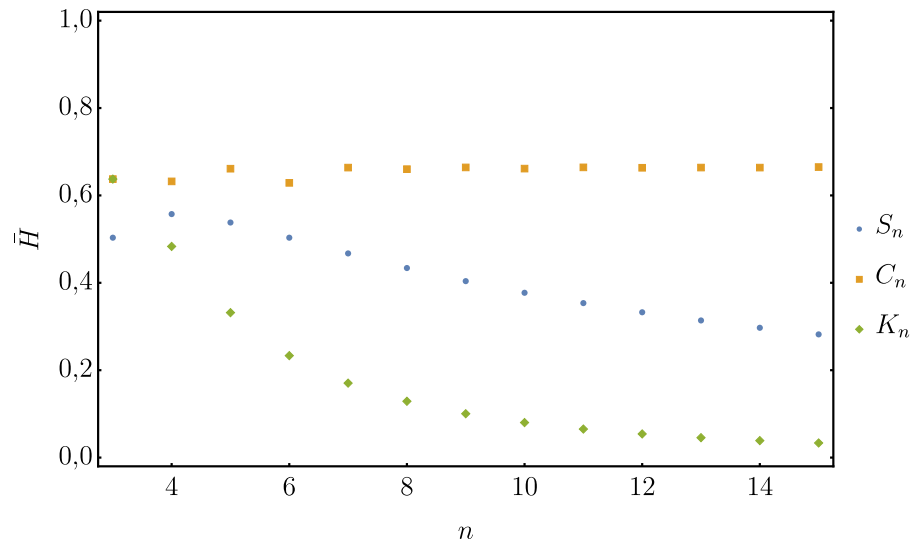
$$H_{\sigma_{\Gamma^l}}(k) = - \sum_{j=1}^l p_j(k) \log_2 p_j(k). \quad (3.56)$$

Como observamos nos resultados de espalhamento dos tipos de grafos, onde utilizamos condições do tipo Neumann em todos os vértices do grafo, as probabilidades de transmissão e reflexão são periódicas. Considerando um pacote de onda quadrado com valores de  $k$  em um intervalo de 0 a  $K$ , onde  $K$  é o período da probabilidade de transmissão, definimos a entropia média de espalhamento como

$$\bar{H}(\sigma_{\Gamma^l}) = \frac{1}{K} \int_0^K H_{\sigma_{\Gamma^l}}(k) dk. \quad (3.57)$$

Quando as arestas do grafo são comensuráveis, ou seja, se a razão entre os comprimentos for um número racional, o período  $K$  é múltiplo de  $\pi$ . Com essa entropia média de espalhamento, verificamos seu comportamento para diferentes tipos de grafos, em casos que há duas "leads", sendo uma conectada ao vértice de entrada e outra ao vértice de saída. Para isso, utilizamos configurações conforme as definidas na seção 3.3.1, onde para os grafos estrela ( $S_n$ ), é adicionada uma "lead" ao vértice central e outra a um dos vértices adjacentes a esse, no caso dos grafos

Figura 24 – Entropia média de espalhamento nos grafos quânticos  $S_n$ ,  $C_n$  e  $K_n$ .



Fonte: O autor.

ciclos ( $C_n$ ) uma "lead" é conectada a um de seus vértices, enquanto outra lead é conectada a um de seus vértices vizinhos, já para os grafos completos, devido à sua topologia, podemos escolher dois vértices diferentes para adicionar as "leads" de entrada e de saída, pois todos os vértices são sempre conectados aos demais. Assim, obtemos os valores apresentados na Figura 24.

Para compreender esses comportamentos da entropia média de espalhamento, verificamos como ela se comporta de acordo com o grau do vértice em um grafo. Se considerarmos o caso de apenas um vértice de saída, podemos ver esse comportamento de acordo com o aumento de vértices nos grafos  $S_n$ , pois neles teremos como entrada o vértice central e a saída em um dos vértices adjacentes. Desse modo o grau do vértice central será igual ao número de vértices do grafo, permitindo analisar diretamente que, nesses casos com apenas uma saída, variando o grau  $n$  em um vértice, teremos um comportamento semelhante ao caso para a entropia dos grafos  $S_n$  no gráfico apresentado na Figura 24, pois a condição de contorno definida nesses vértices depende do grau desses, assim implicando em uma amplitude de reflexão com módulo cada vez maior que a amplitude de transmissão para vértices com grau maior que 4. Isso explica o comportamento para os grafos  $K_n$ , pois todos os seus vértices terão um aumento no grau de acordo com o aumento de vértices, implicando no aumento da reflexão e assim na queda mais acentuada dos valores da entropia em função desse número de vértices.

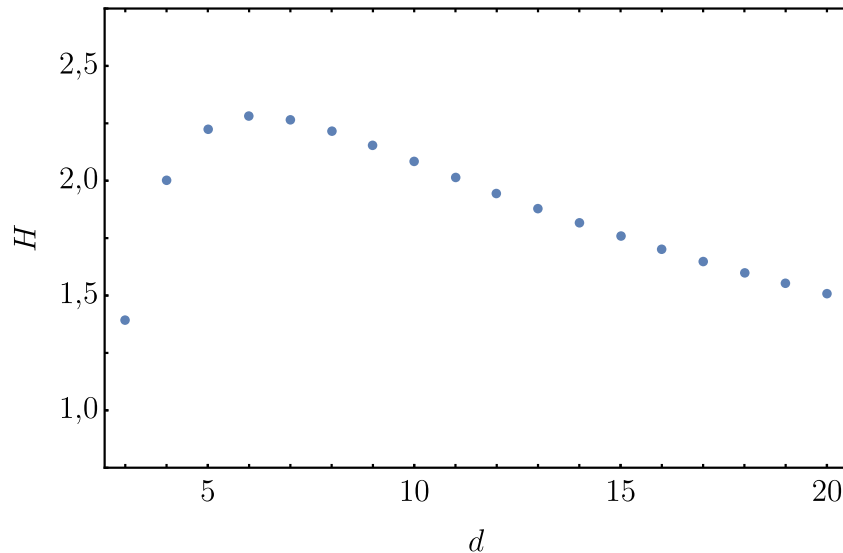
Podemos analisar o comportamento da entropia média de espalhamento de acordo com o grau do vértice considerando apenas um vértice, no qual teremos uma "lead" de entrada e outras  $d - 1$  de saídas adicionadas, resultando em um vértice de grau  $d$ . Em um primeiro caso, com apenas uma aresta semi-infinita adicionada a esse vértice, teremos esse vértice com grau 1 e apenas teremos a probabilidade de reflexão, a qual possui valor 1, pois se trata de um "dead end", assim possuindo uma entropia média de espalhamento de valor 0. Considerando apenas

uma entrada e uma saída, teremos esse vértice com grau 2, o qual, como utilizamos condições do tipo Neumann nos vértices, terá probabilidade de transmissão 1 e de reflexão 0, assim também possuindo um valor 0 de entropia média de espalhamento. Nos demais casos, conforme apresentado na equação (3.17), essa condição utilizada implicará em uma probabilidade de reflexão constante em relação à  $k$  e de valor  $(2-d)^2/d^2$  e outras  $(d-1)$  probabilidades também constantes de transmissão com o mesmo valor  $(2/d)^2$ . Portanto, a forma dessa entropia de acordo com o grau do vértice será

$$\bar{H}(\sigma_{S_1^d}) = -\frac{(2-d)^2}{d^2} \log_2 \frac{(2-d)^2}{d^2} - (d-1) \frac{4}{d^2} \log_2 \frac{4}{d^2}, \quad (3.58)$$

onde  $S_1^d$  é como chamamos esse grafo de apenas um vértice e  $d$  "leads". Pela qual podemos verificar na Figura 25 o seu comportamento de acordo com o grau desse vértice. Nesse caso verificamos um maior valor de entropia para  $d = 6$ , porém, se compararmos com o valor para o caso de  $l$  eventos com a mesma probabilidade, que pela equação (3.56) seriam  $p_j(k) = 1/l$ , temos que a entropia que mais se aproxima desse valor é para  $d = 4$ . Isso significa que vértices com grau 4 tendem a trazer uma entropia média de espalhamento mais próxima da situação de equiprobabilidades, o que é esperado ao utilizarmos essas condições de contorno, pois assim teremos as amplitudes de transmissão e de reflexão iguais a  $1/2$ , implicando em uma mesma probabilidade de  $1/4$  de espalhamento para cada uma das "leads" adicionadas.

Figura 25 – Entropia média de espalhamento um grafo quântico formado por um vértice com uma entrada e  $d - 1$  saídas em função do grau desse vértice.



Fonte: O autor.

Para um vértice com grau igual a 3 (e para 2, como discutido anteriormente), teremos coeficientes de transmissões maiores que de reflexão, implicando em um viés maior para cada uma das transmissões possíveis. O contrário ocorre quando o grau dos vértices são maiores que 4, onde a reflexão aumenta com o grau do vértice. Com isso, verificamos valores das entropias

média de espalhamento mais próximos aos casos de equiprobabilidades, sendo a junção de quatro arestas em um vértice com condição de Neumann, o caso com o valor mais próximo.

Portanto, conforme os dados apresentados referente a essa entropia, verifica-se que ela permite utilizar o espalhamento em grafos quânticos, na qual temos certas probabilidades de transmissão e reflexão de acordo com as condições do modelo, como um recurso de variável aleatória ao utilizarmos um certo pacote de onda. Com isso, temos uma conexão com uma teoria de informação, definindo uma entropia de informação em grafos quânticos baseados na entropia de Shannon. Porém, como as probabilidades de espalhamentos em grafos quânticos são obtidas por informações sobre a topologia desses grafos e suas condições de contorno, essa medição se correlaciona a essas informações. Temos o interesse de entender melhor essas correlações.

Dessa forma, foi apresentada um modelo de dinâmica quântica em grafos. Dentre as possíveis utilizações desse modelo, há o caso de modelos em informação quântica. Isso é apresentado no modelo proposto por Childs (30), que utiliza de espalhamento em grafos para definir elementos como portas lógicas quânticas e algoritmos. Visando essa transição para aplicações em informação quântica, um modelo, agora estático de mecânica quântica, modelada em grafos será o foco do nosso estudo a partir da próxima seção.

## 4 ESTADOS GRAFO

Os estados grafo demonstram uma forma de obter um estado quântico de  $n$  qubits emaranhados, importante como um estado inicial para o desenvolvimento de algoritmos, para que ao arranjar portas lógicas quânticas entre esses qubits, possa trazer um estado final desejado. Dessa forma, será discutido ao longo dessa seção conceitos envolvendo a área de informação quântica e a construção desses estados com base no formalismo de grafos.

### 4.1 INFORMAÇÃO QUÂNTICA

Nessa seção desenvolveremos os principais conceitos que dão base à descrição dos sistemas quânticos utilizados na teoria de informação quântica, apresentando brevemente conceitos iniciais como a notação utilizada para aqueles que não sejam familiarizados com ela. Após isso, serão definidos os elementos básicos como os qubits, matriz densidade, medições de emaranhamento e finalmente elementos para a construção de circuitos lógicos quânticos.

#### 4.1.1 Notação

Em estudos em mecânica quântica, temos a notação de Dirac que permite uma abordagem mais adequada de problemas. Nela podemos apresentar casos como o de uma partícula definida por uma certa função de onda quadrado integrável  $\psi$  pertencente a um espaço de Hilbert de estados da partícula, associando a um estado apresentado na forma  $|\psi\rangle$ , um vetor de estado pertencente a esse espaço de Hilbert. Com essa notação a partir dos "kets" ( $|\rangle$ ), permite representar o estado de um sistema a partir de bases  $|\psi_n\rangle$  do espaço de Hilbert, na forma

$$|\psi\rangle = \sum_n \alpha_n |\psi_n\rangle. \quad (4.1)$$

No qual temos suas amplitudes de probabilidades  $\alpha_n$  das respectivas bases  $|\psi_n\rangle$ . E, tomando o hermitiano conjugado desse vetor de estado, teremos o chamado "bra" ( $\langle|$ ), os quais podem ser escritos de maneira similar, porém com o complexo conjugado dessas amplitudes de transmissão,

$$\langle\psi| = \sum_n \alpha_n^* \langle\psi_n|. \quad (4.2)$$

Dentre os conceitos importantes, temos a ortonormalidade entre dois estados, no qual, caso dado dois estados  $|\psi_1\rangle$  e  $|\psi_2\rangle$ , sejam ortogonais, o seu produto interno deve ser igual a zero, o que é escrito na forma  $\langle\psi_n|\psi_{n'}\rangle = 0$ , e esse produto interno de um mesmo estado deve ser igual a 1 para que ele seja normalizado, o que é escrito na forma  $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ . Esses conceitos implicam que um estado normalizado  $|\psi\rangle$ , com bases  $|\psi_n\rangle$  ortonormais entre si, terá coeficientes tais que obedecem à condição de normalização

$$\sum_n |\alpha_n|^2 = 1. \quad (4.3)$$

No caso de um sistema de  $n$  partículas temos uma composição dos espaços de Hilbert de cada um desses subsistemas a partir de um produto tensorial, denotado por " $\otimes$ " desses espaços. Isso é apresentado nos vetores de estado de um sistema geral  $|\Psi\rangle$  composto pelos estados de cada uma das  $n$  partículas na forma

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle_1 \otimes |\psi\rangle_2 \otimes \dots \otimes |\psi\rangle_n = \bigotimes_{j=1}^n |\psi\rangle_j. \quad (4.4)$$

Como forma de simplificar a notação, podemos ainda escrever esse estado na forma

$$|\Psi\rangle = |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n\rangle, \quad (4.5)$$

mas sempre levando em conta o espaço a que pertencem.

#### 4.1.2 Qubits

Os bits representam a unidade básica de informação clássica, assumindo apenas dois valores possíveis (0 ou 1), e assim, qualquer sistema físico com dois estados distintos pode definir um bit. Em analogia a esses, foi dado o nome de bits quânticos, ou qubits (31), para sistemas quânticos que possuem 2 estados ortogonais. Sendo assim, um qubit é definido como um estado de um sistema, onde dois vetores de estados ortogonais encontram-se em superposição.

$$|\psi\rangle = \alpha_0 |0\rangle + \alpha_1 |1\rangle. \quad (4.6)$$

Assim como sistemas físicos clássicos de dois estados distintos definem bits, sistemas quânticos de dois estados podem representar um qubit (28). Alguns exemplos de sistemas quânticos que podem ser usados como qubits, são partículas com spin  $\frac{1}{2}$  e estados ortogonais de polarização de um fóton. No estudo dos qubits, é importante a introdução das matrizes de Pauli, dadas na forma

$$I \doteq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

$$\sigma_x \doteq \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.8)$$

$$\sigma_y \doteq \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

$$\sigma_z \doteq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

Como um dos exemplos da importância dessas matrizes na informação quântica, temos a base computacional quântica dada pelos vetores de estado  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ , os quais são definidos como os autovetores de  $\sigma_z$  para os respectivos autovalores -1 e 1. Assim, a forma matricial dessa base computacional é dada por

$$|0\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.11)$$



$$|1\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

Essas matrizes apresentadas nas equações (4.7) a (4.10) definem os chamados de operadores de Pauli, e podem ser reescritos nessa base computacional da seguinte forma

$$\hat{\sigma}_0 = \hat{I} = |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|, \quad (4.13)$$

$$\hat{\sigma}_x = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|, \quad (4.14)$$

$$\hat{\sigma}_y = i(|1\rangle\langle 0| - |0\rangle\langle 1|), \quad (4.15)$$

$$\hat{\sigma}_z = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|. \quad (4.16)$$

Finalmente, a relação de comutação entre esses operadores é obtida na forma

$$[\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k] = 2i\varepsilon_{jkl}\hat{\sigma}_l, \quad (4.17)$$

onde  $\varepsilon_{jkl}$  é o símbolo de Levi-Civita (32).

Todos os operadores associados as matrizes de Pauli possuem dois autovalores, sendo  $+1$  e  $-1$ . Dentre os seus autovetores, destacam-se os do operador  $\hat{\sigma}_z$ , os quais definem os vetores utilizados na base computacional quântica  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ , e os autovetores do operador  $\hat{\sigma}_x$ , denotados por  $|+\rangle$  e  $|-\rangle$  possuem a forma

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm |1\rangle), \quad (4.18)$$

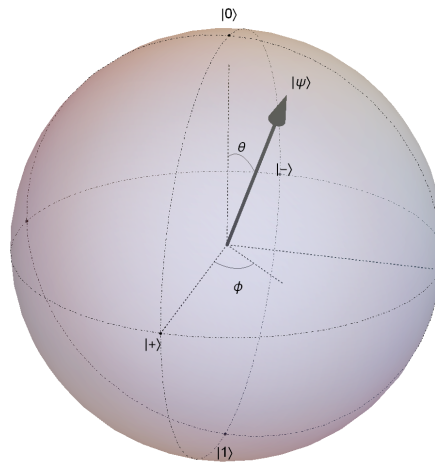
os quais podem ser utilizados também nas notações de informação quântica por apresentarem um estado de superposição.

De forma geral, podemos apresentar um único qubit a partir de uma esfera de raio unitário, chamada de esfera de Bloch (33). Nela temos que cada ponto na superfície da esfera representa um estado  $|\psi\rangle$  único. Esse modelo permite representar graficamente a ação de operadores sobre qubits únicos na forma de rotações em seus ângulos  $\theta$  e  $\phi$ , definidos na Figura 26. Portanto um estado  $|\psi\rangle$  de um qubit na esfera de Bloch pode ser escrito a partir dos kets  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  e os ângulos  $\theta$  e  $\phi$  nessa esfera, permitindo escrever

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle. \quad (4.19)$$

Uma extensão de um sistema de qubits é obtida ao trabalhar com um número  $n$  natural de qubits. Como já mencionado acima, o espaço de Hilbert do sistema composto é obtido pelo produto direto entre esses estados. Portanto, como cada qubit é pela composição de dois estados, em um caso de  $n$  qubits, o vetor de estado do sistema deve ter dimensão  $2^n$ . Por exemplo, no

Figura 26 – Esfera de Bloch



Fonte: O autor.

caso de dois qubits, teremos quatro vetores de estados possíveis, sendo  $|00\rangle$ ,  $|01\rangle$ ,  $|10\rangle$ ,  $|11\rangle$ . Um estado geral de superposição desses estados é dado por

$$|\psi\rangle = \alpha_{00} |00\rangle + \alpha_{01} |01\rangle + \alpha_{10} |10\rangle + \alpha_{11} |11\rangle, \quad (4.20)$$

onde, devido à condição de normalização, os coeficientes devem ser tais que

$$\sum_{i,j=0}^1 |\alpha_{i,j}|^2 = 1. \quad (4.21)$$

### 4.1.3 Matriz Densidade

A matriz densidade permite obter informações estatísticas em um ensemble definido (34). Esses ensembles apresentados por meio dessa matriz podem ser tanto puros, como mistos.

No caso dos estados puros podem ser definido a partir de um vetor de estado  $|\psi\rangle$ . A matriz densidade  $\rho$  para esse caso é dado pelo produto entre esse vetor e seu adjunto, assim,

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (4.22)$$

Uma extensão é dada para caso de um sistema quântico definido pela composição de matrizes densidade de estados  $|\psi_n\rangle$ . Para esse caso, a matriz densidade será apresentada na forma

$$\hat{\rho} = \sum_n p_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|, \quad (4.23)$$

onde  $p_n$  apresenta a probabilidade desse estado, ou seja  $0 \leq p_n \leq 1$  e teremos  $\sum_n p_n = 1$  já que é a soma das probabilidades dos estados que compõem o sistema. Sistemas que só podem ser apresentados por uma matriz densidade dada por composições desse tipo são chamados estados mistos, não sendo possível obter um vetor de estado que traga uma matriz densidade como apenas  $|\psi\rangle\langle\psi|$ .

Uma primeira propriedade dessas matrizes é o seu traço unitário, obtida a partir das definições dos seus coeficientes  $p_n$ , assim pode ser demonstrado na forma

$$\text{Tr}(\hat{\rho}) = \sum_n p_n \sum_j \langle j|\psi_n\rangle \langle\psi_n|j\rangle = \sum_n p_n \sum_j \langle\psi_n|j\rangle \langle j|\psi_n\rangle = \sum_n p_n \langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1, \quad (4.24)$$

pois  $\sum_j |j\rangle\langle j| = 1$ . Uma segunda característica é ser uma matriz Hermitiana, ou seja,

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger, \quad (4.25)$$

pela forma geral apresentada, teremos

$$\hat{\rho}^\dagger = \sum_n p_n^* (|\psi_n\rangle\langle\psi_n|)^T = \sum_n p_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \hat{\rho}. \quad (4.26)$$

A ferramenta fornecida pelas matrizes densidade pode ser entendida a partir da aplicação da medição de um observável sobre um sistema quântico. Aplicando um operador  $\hat{A}$  que define essa medição e  $|\psi\rangle$  sendo o vetor de estado, obtemos

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_n p_n \langle\psi_n|\hat{A}|\psi_n\rangle. \quad (4.27)$$

Multiplicando por  $\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = 1$ , chegamos a

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_n p_n \sum_\alpha \langle\psi_n|\hat{A}|\alpha\rangle \langle\alpha|\psi_n\rangle = \sum_\alpha \sum_n p_n \langle\alpha|\psi_n\rangle \langle\psi_n|\hat{A}|\alpha\rangle. \quad (4.28)$$

Como o traço de um operador  $\hat{H}$  pode ser escrito na forma  $\text{Tr}(\hat{H}) = \sum_j \langle j|\hat{H}|j\rangle$ , teremos que

$$\langle\hat{A}\rangle = \text{Tr} \left( \sum_n p_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| \hat{A} \right). \quad (4.29)$$

Considerando a forma de  $\hat{\rho}$  apresentada na equação (4.23), temos

$$\langle\hat{A}\rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) = \text{Tr}(\hat{A}\hat{\rho}). \quad (4.30)$$

Fornecendo uma forma direta do valor esperado ao atuar um operador que representa um dado observável sobre um sistema físico.

Com a definição do operador densidade de um sistema quântico e a relação dela com o valor esperado de uma observável, podemos utilizá-la para prever comportamentos no sistema. Essas medições permitem analisar correlações quântica no sistema, como o emaranhamento quântico. Para realizar a medição dessas correlações, partimos das matrizes densidade, como apresentaremos na seção a seguir.

#### 4.1.4 Estados Emaranhados e medições de Emaranhamento

Em um sistema quântico  $|\psi\rangle$  composto por dois subsistemas, estando um deles com um observador Alice ( $A$ ), definido pelos  $|\lambda\rangle_A \in H_A$  e o outro com Bob ( $B$ ), onde teremos  $|\phi\rangle_B \in H_B$ . Esse sistema é definido através de uma composição dos subsistemas na forma

$$|\psi\rangle = \sum_n \alpha_n |\lambda_n\rangle_A \otimes |\phi_n\rangle_B. \quad (4.31)$$

Uma correlação quântica chamada de emaranhamento pode ser analisada por um primeiro critério, o de separabilidade. Nesse critério, temos que caso esse estado  $|\psi\rangle$  possa ser escrito na forma

$$|\psi\rangle = |\lambda\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B, \quad (4.32)$$

é um estado separável, pois consiste apenas na composição desse sistema de estados não necessariamente correlacionados. Porém, caso não seja possível escrever esse estado nessa última forma apresentada, ele é um estado emaranhado.

Como exemplo desses casos, temos para um estado descrito a partir da base de qubits na forma

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2} |00\rangle + \frac{1}{2} |01\rangle + \frac{1}{2} |10\rangle + \frac{1}{2} |11\rangle. \quad (4.33)$$

Isolando o qubit do primeiro subsistema, teremos

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2} |0\rangle \otimes (|0\rangle + |1\rangle) + \frac{1}{2} |1\rangle \otimes (|0\rangle + |1\rangle), \quad (4.34)$$

o que ainda pode ser simplificado para a forma

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2} (|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|0\rangle + |1\rangle). \quad (4.35)$$

Usando a forma do estado de superposição  $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ , teremos

$$|\psi\rangle = |+\rangle \otimes |+\rangle = |++\rangle, \quad (4.36)$$

sendo assim um estado separável no produto de dois kets definidos e assim não é emaranhado. Porém em um caso de um estado com uma mudança de fase no último ket, sendo apresentado na forma

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2} |00\rangle + \frac{1}{2} |01\rangle + \frac{1}{2} |10\rangle - \frac{1}{2} |11\rangle. \quad (4.37)$$

Nesse caso, a maior redução possível será para um estado na forma

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2} |0\rangle \otimes (|0\rangle + |1\rangle) + \frac{1}{2} |1\rangle \otimes (|0\rangle - |1\rangle), \quad (4.38)$$

e, portanto com os estados de superposição  $|+\rangle$  e  $|-\rangle$ ,

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle \otimes |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle \otimes |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |0+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1-\rangle, \quad (4.39)$$

no qual a determinação do primeiro qubit implicará numa correlação direta com o estado de sobreposição do segundo qubit. Sendo assim um estado emaranhado, onde não é possível reescrever como um produto entre dois estados, cada um de um dado subsistema, apenas como uma composição de estados possíveis desse sistema.

De forma mais geral, podemos partir da sua matriz densidade e determinar o emaranhamento de um sistema. Como exemplos, a partir de casos apresentados, temos um caso se estados separáveis, do qual a sua matriz densidade poderá ser escrita diretamente a partir desses subsistema, ou seja,

$$\rho_{ex_1} = |\psi\rangle\langle\psi| = |++\rangle\langle++|, \quad (4.40)$$

possuindo a representação matricial

$$\rho_{ex_1} \doteq \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}. \quad (4.41)$$

Porém em casos como do segundo exemplo, onde teremos estados emaranhados, a sua matriz densidade será definida como uma composição de estados puros

$$\rho_{ex_2} = |\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2} |0+\rangle\langle 0+| + \frac{1}{2} |0+\rangle\langle 1-| + \frac{1}{2} |1-\rangle\langle 0+| + \frac{1}{2} |1-\rangle\langle 1-|, \quad (4.42)$$

podendo ser representado pela matriz

$$\rho_{ex_2} \doteq \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{-1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{-1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{-1}{4} \\ \frac{-1}{4} & \frac{-1}{4} & \frac{-1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}. \quad (4.43)$$

Por ser uma correlação puramente quântica, uma medição desse emaranhamento a partir da sua matriz densidade ( $E(\rho)$ ) deve respeitar certas condições (35)

- i.  $E(\rho) = 0$  se  $\rho$  é separável;
- ii. Operações unitárias locais não devem modificar essa medição, por serem apenas operações de mudança de base, portanto  $E(\rho) = E(U_A \otimes U_B \rho U_A^\dagger \otimes U_B^\dagger)$ ;
- iii. medições de operações locais e comunicação clássica (LOCC) definidas por um operador  $\Theta$  devem manter o emaranhamento ou diminuí-lo, mas nunca aumentar, pois por se tratar de uma correlação não clássica não deve crescer sob operações clássicas, assim  $E(\rho) \geq E(\Theta\rho)$ .

#### 4.1.4.1 Matrizes Transpostas Parciais e o critério PPT

A operação de transposta parcial de uma matriz densidade (28) é definida pensando primeiramente em uma matriz densidade  $\rho_{AB}$  de um estado separável em duas matrizes  $\rho_A$  de índices  $i$  e  $j$  e outra  $\rho_B$  de índices  $k$  e  $l$ . Logo

$$\rho_{AB} = \sum_{i,j,k,l} a_{i,j,k,l} \rho_{A_{i,j}} \otimes \rho_{B_{k,l}}, \quad (4.44)$$

a qual ainda pode ser escrita definindo essas matrizes densidades em termos dos seus índices,

$$\rho_{AB} = \sum_{i,j,k,l} a_{i,j,k,l} |i\rangle\langle j| \otimes |k\rangle\langle l|. \quad (4.45)$$

O termo transposta parcial se deve ao fato de ser aplicada uma transposição sobre uma dessas matrizes que compõem  $\rho_{AB}$ , dessa forma, uma transposta parcial em relação ao subsistema  $A$  por exemplo, é apresentada como

$$\rho_{AB}^{T_A} = \sum_{i,j,k,l} a_{i,j,k,l} (|i\rangle\langle j|)^T \otimes |k\rangle\langle l|. \quad (4.46)$$

Como a transposta  $(|i\rangle\langle j|)^T$  implicará em uma inversão desses índices  $i$  e  $j$ ,

$$\rho_{AB}^{T_A} = \sum_{i,j,k,l} a_{i,j,k,l} |j\rangle\langle i| \otimes |k\rangle\langle l|, \quad (4.47)$$

o que pode ser generalizado realizando a troca entre os índices  $i$  e  $j$ , mostrando que essa operação implica em uma permutação nesses índices do coeficiente  $a$ . Portanto, uma matriz transposta parcial em relação a  $A$  é definida como

$$\rho_{AB}^{T_A} = \sum_{i,j,k,l} a_{j,i,k,l} |i\rangle\langle j| \otimes |k\rangle\langle l|. \quad (4.48)$$

Uma matriz é definida como PPT (transposta parcial positiva), caso todos os seus autovalores sejam maiores ou iguais a 0

$$\rho^{T_A} \geq 0, \quad (4.49)$$

assim, define um primeiro critério para dizer que um dado  $\rho = \rho_{PPT}$  é um possível estado separável, porem não suficiente, sendo necessárias outras medidas de emaranhamento. Por outro lado, uma matriz é definida como NPT (transposta parcial negativa), caso possua autovalores negativos

$$\rho^{T_A} < 0, \quad (4.50)$$

assim, dizemos que para o estado quântico definido pela matriz densidade  $\rho = \rho_{ent}$ , a não separabilidade é garantida (36, 37).

#### 4.1.4.2 Negatividade

A negatividade, com notação  $\mathcal{N}$ , é obtida a partir da matriz densidade do sistema, dada por (38)

$$\mathcal{N}(\rho) = \frac{\|\rho^{TA}\| - 1}{2} = \frac{\text{Tr} |\rho^{TA}| - 1}{2}, \quad (4.51)$$

onde  $\rho^{TA}$  demonstra que está sendo aplicada uma transposta parcial sobre a matriz densidade  $\rho$ . Uma outra definição é obtida pela soma do módulo dos autovalores  $\lambda_i$  negativos da matriz  $\rho^{TA}$  (39), assim teremos

$$\mathcal{N}(\rho) = \sum_{\lambda_i < 0} |\lambda_i|. \quad (4.52)$$

No caso de qudits, uma extensão do conceito de qubit, onde cada componente do sistema possui  $d$  estados possíveis, os valores da negatividade desse sistema se encontram no intervalo (40)

$$0 \leq \mathcal{N}(\rho) \leq \frac{1}{2}(d - 1). \quad (4.53)$$

Portanto, no caso de qubits,  $d = 2$  os valores do emaranhamento devem estar entre 0 e  $\frac{1}{2}$ .

Como exemplo, podemos usar as matrizes apresentadas nas equações (4.41) e (4.43). No primeiro caso, qualquer transposta parcial que tomarmos teremos a mesma matriz e então, seu conjunto de autovalores que é  $\{0^3, 1\}$  não se altera e são todos positivos, desse modo, esse critério de negatividade demonstra que esse primeiro estado não é emaranhado. Porém, no segundo sistema, inicialmente seus autovalores são  $\{0^3, 1\}$  e podemos tomar sua matriz transposta parcial em relação a um dado subestado, podendo ser o de Alice ou de Bob, nesse caso, ambas implicam em uma mesma forma matricial

$$\rho^{TA} = \rho^{TB} \doteq \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{-1}{4} & \frac{-1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{-1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{-1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{-1}{4} & \frac{-1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}, \quad (4.54)$$

possuindo autovalores  $\{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\}$ , portanto é um estado não separável por possuir um autovalor negativo e como estamos tratando de qubits, a medição de negatividade será máxima ( $\mathcal{N}(\rho) = \frac{1}{2}$ ).

Portanto, temos com a negatividade uma medição computável de emaranhamento para estados mistos (39), sendo assim bastante eficiente quando trabalhamos com esses estados. Desse modo, ela será bem relevante para avaliar o emaranhamento no caso de estados grafo randomizados, que será apresentado no final dessa seção.

#### 4.1.5 Portas Lógicas Quânticas

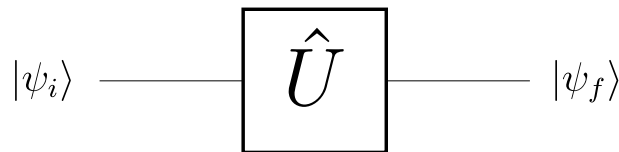
As portas lógicas quânticas aparecem como uma forma análoga às operações realizadas entre os bits de um sistema clássico. Dessa forma, imaginamos um dispositivo quântico que realiza transformações unitárias em um qubit ou um conjunto deles, sendo assim definido por

um operador unitário  $\hat{U}$  (41). Definindo como um operador, a atuação dessa porta define um estado final  $|\psi_f\rangle$  ao atuar sobre de um estado inicial  $|\psi_i\rangle$  na forma

$$\hat{U} |\psi_i\rangle = |\psi_f\rangle. \quad (4.55)$$

Uma forma de representar graficamente essas portas lógicas é apresentado na Figura 27.

Figura 27 – Diagrama de uma porta lógica quântica  $\hat{U}$ , que é representada por uma caixa com seu respectivo nome  $\hat{U}$ , a qual é ligadas por duas linhas, na esquerda sendo o estado antes da operação e na direita após essa transformação unitária.



Fonte: O autor.

#### 4.1.5.1 Porta Hadamard

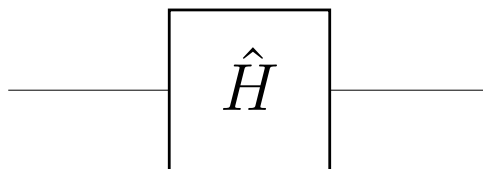
As portas Hadamard são definidos por um operador  $\hat{H}$ , possuindo representação conforme a Figura 28, definido na forma matricial, a partir dos vetores associados aos qubits como

$$\hat{H} \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.56)$$

ou, na base binária, como

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|). \quad (4.57)$$

Figura 28 – Diagrama da porta Hadamard  $\hat{H}$ .



Fonte: O autor.

Uma das propriedades dessa porta é verificada ao aplicá-la sobre as bases de qubits, a qual retorna um estado de superposição apresentados na equação (4.18). O inverso ocorre ao aplicar a porta sobre esses estados, retornando para uma das bases computacionais. Dessa forma, aplicando essa porta sobre os estados apresentados nas equações 4.11, 4.12 e 4.18,

$$\hat{H} |0\rangle = |+\rangle, \quad (4.58)$$



$$\hat{H} |1\rangle = |-\rangle, \quad (4.59)$$

$$\hat{H} |+\rangle = |0\rangle, \quad (4.60)$$

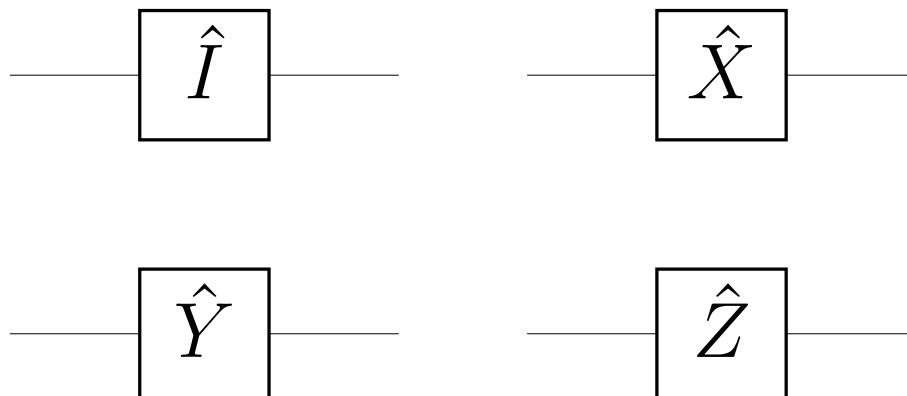
$$\hat{H} |-\rangle = |1\rangle. \quad (4.61)$$

Devido a essas operações, é possível preparar um estado, como no caso de qubits inicialmente em um estado  $|0\rangle$  ou  $|1\rangle$ , deixando-os em um estado de superposição ao aplicar essa porta Hadamard. Essas propriedades serão importantes no estudo de estados grafo, pois, como será apresentado posteriormente, para preparar os estados grafo, necessitamos de um estado inicial de  $n$  qubits, com cada um estando em um estado  $|+\rangle$ . Aplicando em paralelo, uma porta Hadamard em cada um dos qubits que inicialmente se encontram em um estado  $|0\rangle$ , obteremos um estado de superposição desses  $2^n$  estados cada um com um coeficiente  $\frac{1}{\sqrt{2^n}}$  (41), conforme desejado.

#### 4.1.5.2 Portas de Pauli

As portas de Pauli são definidas a partir das matrizes de mesmo nome apresentadas nas equações (4.7) - (4.10). Aqui passamos a usar a notação  $\hat{I}$ ,  $\hat{X}$ ,  $\hat{Y}$  e  $\hat{Z}$  para os respectivos operadores  $\hat{I}$ ,  $\hat{\sigma}_x$ ,  $\hat{\sigma}_y$  e  $\hat{\sigma}_z$ . No caso da porta  $X$ , ao atuar sobre um qubit, desempenha um papel

Figura 29 – Diagrama das portas de Pauli  $\hat{I}$ ,  $\hat{X}$ ,  $\hat{Y}$  e  $\hat{Z}$



Fonte: O autor.

análoga à uma porta NOT clássica, invertendo o estado de entrada. Desse modo, atuando essa porta sobre as bases computacionais quânticas  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ , obtemos as relações

$$\hat{X} |0\rangle = |1\rangle, \quad (4.62)$$

$$\hat{X} |1\rangle = |0\rangle. \quad (4.63)$$

Podemos fazer uma analogia dessas transformações, como uma rotação de  $\pi$  radianos ao redor do eixo  $x$  na esfera de Bloch que define um qubit. Porém, uma definição de porta universal NOT quântica não é adequada para esse operador, pois a operação que ela realiza é no sentido de inverter os kets  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ . Em casos como de combinações lineares dessas bases, como em um qubit definido por  $|\psi\rangle$ , na equação (4.6), verificamos que o estado será

$$\hat{X}|\psi\rangle = \hat{X}(\alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle). \quad (4.64)$$

Substituindo as relações obtidas ao atuar esse operador  $\hat{X}$  sobre as bases computacionais,

$$\hat{X}|0\rangle = \alpha_0|1\rangle + \alpha_1|0\rangle. \quad (4.65)$$

Assim, aplicando essa porta em casos de superposição como dos vetores  $|+\rangle$  e  $|-\rangle$ , retornará estados  $|+\rangle$  e  $|-\rangle$ , apenas aplicando uma fase e não invertendo os estados de um em outro. Desse modo, devemos restringir essa analogia de porta NOT apenas em relação à base computacional ou ao se referir que ela inverte, no caso de uma combinação linear dessa base, as amplitudes de probabilidades entre elas.

A porta  $Y$  atua como uma rotação de  $\pi$  radianos nesse eixo  $y$  na esfera de Bloch. Logo apenas a transformação de um estado  $|\psi\rangle$  por essa porta será apresentado, sem buscar muitas relações com portas lógicas clássicas. Portanto, aplicando-a sobre  $|\psi\rangle$  definido na equação (4.6), obtemos

$$\hat{Y}|\psi\rangle = -i\alpha_0|0\rangle + i\alpha_1|1\rangle. \quad (4.66)$$

A última porta lógica do tipo Pauli é a porta  $Z$ , definida por  $\hat{\sigma}_z$  a qual, ao aplicar sobre os estados que definem a base computacional, obtemos

$$\hat{Z}|0\rangle = |0\rangle, \quad (4.67)$$

$$\hat{Z}|1\rangle = -|1\rangle. \quad (4.68)$$

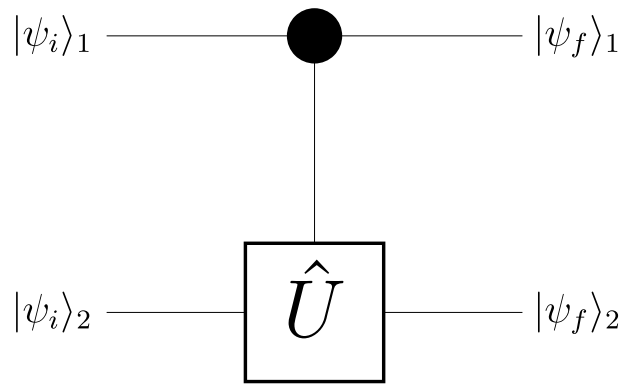
Devido a essa fase obtida nessa última equação, podemos dizer que essa é uma porta inversora de fase.

Como a rotação na esfera de Bloch que essa operação implica em um qubit é de uma rotação no eixo  $z$ , é interessante analisar autoestados de outros eixos definidos nela, como os estados  $|+\rangle$  e  $|-\rangle$ . Nesses casos teremos uma transformação de um no outro através dessa operação, sendo assim,

$$\hat{Z}|+\rangle = |-\rangle, \quad (4.69)$$

$$\hat{Z}|-\rangle = |+\rangle. \quad (4.70)$$

Figura 30 – Diagrama de uma porta controlada associada a uma operação  $\hat{U}$  no segundo qubit



Fonte: O autor.

#### 4.1.5.3 Portas controladas

Na construção de um sistema é importante haver conexões entre os elementos deste, no caso da construção de circuitos e algoritmos quânticos, essas conexões são obtidas através de portas que conectam mais de um qubit ao mesmo tempo. Dessa forma, com portas de múltiplos qubits, são definidas interações entre esses qubits e o estabelecimento de correlações entre eles. Dentre as portas que atendem a essas necessidades, encontramos as chamadas portas controladas.

As portas controladas são primeiramente definidas para o caso de relação entre dois qubits. Nesse caso cada um desses qubits possui uma função, sendo um deles o qubit de controle e o outro o qubit controlado. Caso o qubit de controle se encontre em um estado  $|0\rangle$ , não será realizada operações sobre o segundo elemento, enquanto que, no caso do primeiro se encontrar no estado  $|1\rangle$ , a porta atuará sobre o estado do outro qubit. Dessa forma, podemos apresentar um caso geral de uma porta controlada que executa uma operação definida por um operador de dimensão 2 chamado  $\hat{U}$ , assim, a porta controlada  $\hat{U}_C$  possuirá a forma

$$\hat{U}_C = |0\rangle\langle 0| \otimes \hat{I} + |1\rangle\langle 1| \otimes \hat{U}. \quad (4.71)$$

Utilizando de um estado quântico geral de dois qubits, como o apresentado na equação (4.20), a atuação dessas portas nesses estados resulta em

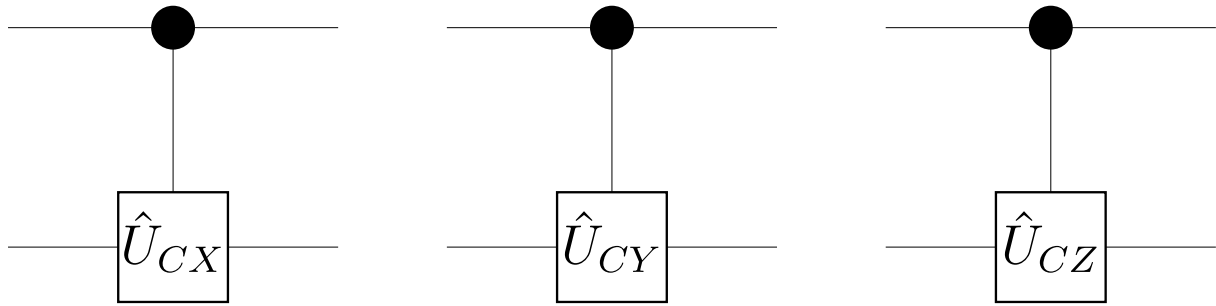
$$\hat{U}_C |\psi\rangle = (|0\rangle\langle 0| \otimes \hat{I} + |1\rangle\langle 1| \otimes \hat{U})(\alpha_{00} |00\rangle + \alpha_{01} |01\rangle + \alpha_{10} |10\rangle + \alpha_{11} |11\rangle), \quad (4.72)$$

como um vetor do tipo  $|mn\rangle$  é definido como  $|m\rangle \otimes |n\rangle$ , podemos reescrever na forma

$$\hat{U}_C |\psi\rangle = (|0\rangle\langle 0| \otimes \hat{I} + |1\rangle\langle 1| \otimes \hat{U})[|0\rangle \otimes (\alpha_{00} |0\rangle + \alpha_{01} |1\rangle) + |1\rangle (\alpha_{10} |0\rangle + \alpha_{11} |1\rangle)]. \quad (4.73)$$

Como  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  são ortonormais, podemos simplificar essa equação com a relação  $\langle m|n\rangle = \delta_{m,n}$ , onde  $\delta_{m,n}$  é a delta de Kronecker, portanto,

$$\hat{U}_C |\psi\rangle = \alpha_{00} |00\rangle + \alpha_{01} |01\rangle + |1\rangle \otimes \hat{U}(\alpha_{10} |0\rangle + \alpha_{11} |1\rangle). \quad (4.74)$$

Figura 31 – Diagrama das portas controladas  $\hat{U}_{CX}$ ,  $\hat{U}_{CY}$  e  $\hat{U}_{CZ}$ 

Fonte: O autor.

Alguns dos operadores utilizados para definir portas controladas são os operadores relacionados às matrizes de Pauli, apresentadas nas equações (4.14) - (4.16). Assim, os respectivos operadores possuirão a sua forma dada a partir da equação (4.71), sendo

$$\hat{U}_{Cj} = |0\rangle\langle 0| \otimes \hat{I} + |1\rangle\langle 1| \otimes \hat{\sigma}_j, \quad (4.75)$$

onde  $j$  é igual a  $x$ ,  $y$  ou  $z$ .

Com as definições da forma matricial de  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ , apresentadas nas equações 4.11 e 4.12, podemos mostrar as formas matriciais desses operadores sendo

$$\hat{U}_{Cj} \doteq \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \delta_{j,0} + \delta_{j,z} & \delta_{j,x} - i\delta_{j,y} \\ 0 & 0 & \delta_{j,x} + i\delta_{j,y} & \delta_{j,0} - \delta_{j,z} \end{pmatrix}, \quad (4.76)$$

onde  $\delta_{i,j}$  é a delta de Kronecker e o caso  $j = 0$  representa a matriz  $\sigma_0$ , a qual é igual a matriz identidade de dimensão 2.

Essas portas controladas, por atuar em dois qubits simultâneos, permitem gerar estados emaranhados, como no caso da porta  $X$ -controlada, definida na equação (4.75), onde  $\hat{\sigma}_j = \hat{\sigma}_x$ . Ao atuar em um estado geral de dois qubits como (4.20), obtemos uma relação igual à (4.74), com  $\hat{U} = \hat{X}$

$$\hat{U}_{CX} |\psi\rangle = \alpha_{00} |00\rangle + \alpha_{01} |01\rangle + |1\rangle \otimes \hat{\sigma}_x (\alpha_{10} |0\rangle + \alpha_{11} |1\rangle). \quad (4.77)$$

Podemos ainda simplificar essa equação com as relações ao aplicar o operador  $\hat{X}$  nos kets  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ , conforme apresentado nas equações (4.62) e (4.63). Assim, obtemos

$$\hat{U}_{CX} |\psi\rangle = \alpha_{00} |00\rangle + \alpha_{01} |01\rangle + \alpha_{11} |10\rangle + \alpha_{10} |11\rangle. \quad (4.78)$$

Em um caso inicialmente descrito como um estado separável  $|\psi\rangle = |+\rangle \otimes |0\rangle$ , ou seja, com

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |00\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |10\rangle, \quad (4.79)$$

Ao aplicarmos essa porta  $X$ -controlada sobre esse  $|\psi\rangle$ , obtemos

$$\hat{U}_{CX} |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |00\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |11\rangle, \quad (4.80)$$

o qual é um estado emaranhado conhecido como estado de Bell  $|\Phi^+\rangle$ , demonstrando assim como podemos obter um estado emaranhado conhecido a partir do uso dessa porta.

Outra porta que desempenha um papel similar, é a porta definida como  $\hat{U}_{CZ}$  na equação (4.81). Por ser um operador cuja representação na forma matricial é diagonal, as amplitudes de probabilidade dos estados que compõem esses qubits ainda são as mesmas, mas ainda assim permite a obtenção de estados emaranhados.

A partir da equação (4.75), onde teremos  $\hat{\sigma}_j = \hat{\sigma}_z$ , a forma do operador nas bases computacionais quânticas é definido como

$$\hat{U}_{CZ} = |0\rangle\langle 0| \otimes \hat{I} + |1\rangle\langle 1| \otimes \hat{\sigma}_z. \quad (4.81)$$

Porém, podemos escrever o operador identidade de dimensão 2 em termos das bases computacionais como

$$\hat{I}_2 = |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|, \quad (4.82)$$

e no caso da operador associado à matriz de Pauli  $\sigma_z$ , teremos

$$\hat{\sigma}_z = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|. \quad (4.83)$$

Substituindo essas duas relações na equação para  $\hat{U}_{CZ}$ , obtemos

$$\hat{U}_{CZ} = |0\rangle\langle 0| \otimes (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) + |1\rangle\langle 1| \otimes (|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|), \quad (4.84)$$

expandindo,

$$\hat{U}_{CZ} = |0\rangle\langle 0| \otimes |0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 0| \otimes |1\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 1| \otimes |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 1|. \quad (4.85)$$

Agora adicionando uma soma que equivale a um operador zero  $\hat{0}$ , como

$$\hat{0} = |1\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 1| - |1\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 1|, \quad (4.86)$$

ao somar com a relação para esse operador da porta  $Z$ -controlada,

$$\hat{U}_{CZ} = |0\rangle\langle 0| \otimes |0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 0| \otimes |1\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 1| \otimes |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 1| - 2 |1\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 1|. \quad (4.87)$$

Simplificando, temos

$$\hat{U}_{CZ} = |0\rangle\langle 0| \otimes (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) + |1\rangle\langle 1| \otimes (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) - 2 |1\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 1|, \quad (4.88)$$

implicando em

$$\hat{U}_{CZ} = (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) \otimes (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) - 2 |1\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 1|. \quad (4.89)$$

A partir da forma apresentada na equação (4.82), simplifica-se para

$$\hat{U}_{CZ} = \hat{I}_2 \otimes \hat{I}_2 - 2|1\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 1|, \quad (4.90)$$

Essa é uma forma mais simples e melhor de trabalhar, pois enquanto o primeiro termo da soma temos apenas identidades, que preservam a forma original do estado sobre o qual esse operador está atuando, no segundo termo, temos apenas um projetor  $|1\rangle\langle 1|$ , e dessa forma, pela condição de ortonormalidade, apenas kets do tipo  $|1\rangle$  serão preservados por ele.

Uma forma para estender ao caso de um sistema de  $n$  qubits, com  $j$  e  $k$  sendo os qubits sobre o qual essa porta atua, e com os operadores identidade sempre com dimensão 2, teremos

$$\hat{U}_{CZ}^{\{j,k\}} = \left( \hat{I}_j \otimes \hat{I}_k - 2|1\rangle\langle 1|_j \otimes |1\rangle\langle 1|_k \right) \bigotimes_{l \in \{1, \dots, n\} \setminus \{j,k\}} \hat{I}_l. \quad (4.91)$$

Uma última generalização dessa porta é para o caso em que ela faça a conexão entre um número maior de qubits. Assim, uma porta Z-controlada que atua sobre um número  $N$  de qubits ao mesmo tempo, os quais são denotados por um conjunto de números  $\{1, 2, \dots, N\}$ , em um sistema de  $n$  qubits é definida na forma

$$\hat{U}_{CZ}^{(N)} = \bigotimes_{j=1}^n \hat{I}_j - 2 \bigotimes_{j=1}^N |1\rangle\langle 1|_j \bigotimes_{k=N+1}^n \hat{I}_k. \quad (4.92)$$

#### 4.1.6 Circuitos Quânticos

Para representar todo o processo de construção de um estado quântico a partir da aplicação de portas lógicas quânticas, necessitamos de uma forma de diagrama, para que todo o contexto e lógica de obtenção desse estado final sejam bem compreendidos de uma forma direta. Nessa necessidade de melhor representar esses algoritmos, surgem os diagramas de circuitos quânticos. A importância deles é compreendida em casos onde teremos vários qubits e um grande número de portas lógicas quânticas.

A construção desses diagramas é muito análogo ao pensarmos em circuitos clássicos. Um primeiro elemento são as linhas horizontais, as quais em circuitos clássicos representariam os bits, aqui fazem uma extensão direta para os qubits que compõem o sistema. Já as portas lógicas quânticas são definidas por símbolos mais simples do que as clássicas, sendo apresentadas por um quadrado com o símbolo da operação realizada. No caso de portas que atuam sobre mais de um qubit, temos linhas verticais com nós que ligam essas portas aos qubits sobre os quais essas atuam, conforme apresentado na Figura 32. Com esses elementos definidos, a construção e leitura desses circuitos é realizada no sentido da esquerda para a direita, seguindo as operações que aparece nessa ordem.

#### 4.1.7 O Computador Quântico de Único Sentido

Como um exemplo proposto para construir circuitos em informação quântica, temos o modelo apresentado por Raussendorf e Briegel (42) para a computação quântica baseada

em medições, o qual foi chamado de “One-Way Quantum Computer”, ou em uma tradução, o “Computador Quântico de Único Sentido”. Esse modelo tem como base um estado inicial que é altamente emaranhado. A partir desse estado, deve-se desenvolver o algoritmo, processá-lo e ler a informação a partir de medições realizadas em cada elemento desse sistema.

O estado inicial será um estado cluster, uma rede bidimensional de qubits, nos quais só há conexão entre os vizinhos mais próximos. Com essas restrições, esses estados cluster são um caso de estados grafos que serão apresentado na seção 4.2. Assim que esse estado inicial está definido, o circuito é construído através de medições em seus qubits. Enquanto medições nas bases de  $\sigma_z$  ( $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ ) agem para separar o qubit de seus vizinhos, medições no plano  $x - y$  ( $|0\rangle \pm e^{i\phi} |1\rangle$ ) atuam para formar o fluxo de informação e as portas lógicas entre os qubits, conforme apresentado na Figura 33.

Para concluir a construção, nessas linhas de informação formadas, deve restar um último qubit, permitindo a leitura neles. Como nesse modelo não é possível reverter essa operação, o que permitiria voltar ao estado inicial, temos a origem do seu nome, sendo um modelo que só possui um sentido.

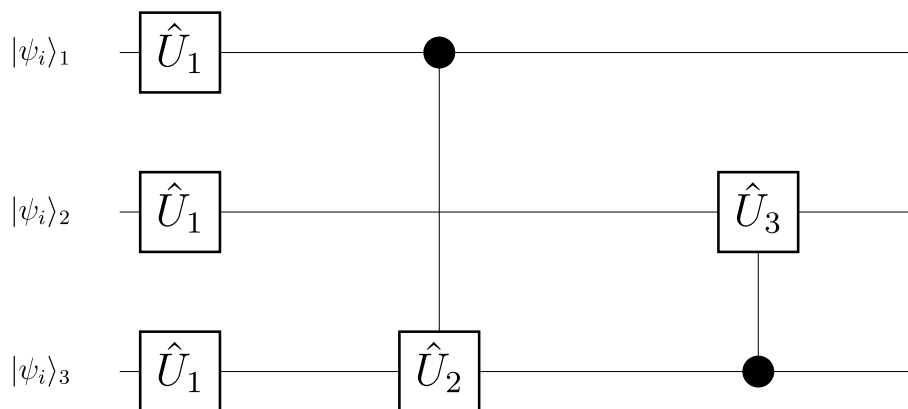
Esse modelo de computação quântica baseada em medições foi utilizado experimentalmente (43) através de um estado cluster formado por quatro fótons. Isso permitiu aplicação dele para realizar um algoritmo de busca, o algoritmo de Grover (28).

Portanto, com essa motivação, visaremos a partir de agora o estudo de estados que sejam recursos para modelos como esse. Como esse modelo apresentado parte de um estado cluster, o caso mais geral deles, os estados grafos serão apresentados a seguir.

## 4.2 CONSTRUÇÃO DE ESTADOS GRAFO

A apresentação de um circuito quântico pode ser representado a partir de um grafo de vértices rotulados  $G(V, E)$ . Os qubits, representados pelos fios do circuito agora são repre-

Figura 32 – Diagrama de um circuito quântico com 3 qubits e portas lógicas 1 atuando sobre 1 qubit e portas 2 e 3 atuando sobre 2 qubits



Fonte: O autor.

sentados por vértices, enquanto as conexões entre esses qubits, realizadas por portas lógicas quânticas são representadas pelas arestas, conforme ilustrado na Figura 34. Desse modo, o estado quântico obtido é um estado puro, definido como  $|G\rangle$ , chamado de estado grafo.

A definição dos estados grafo serem dados a partir de grafos com vértices rotulados deve-se a necessidade de indicar a quais qubits estamos nos referindo, e assim indicar corretamente sobre quais deles um operador atua. Assim, para iniciar a construção de um estado grafo, necessitamos de um estado inicial, definido nesse caso como todos os  $n = |V|$  qubits, onde  $|V|$  é o número de vértices do sistema, em um estado de superposição apresentado pelo ket  $|+\rangle$  definido pela equação (4.18). Portanto o estado inicial é

$$|\psi\rangle = \bigotimes_{j \in V} |+\rangle_j. \quad (4.93)$$

Com a finalidade de simplificar a notação, esse estado inicial será apresentado como

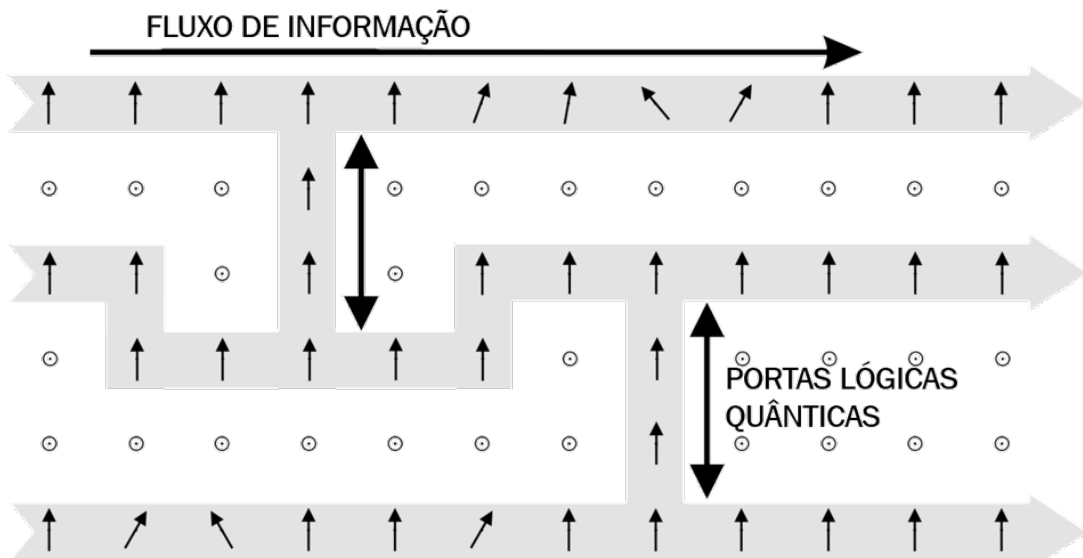
$$|\psi\rangle = |+\rangle^{\otimes n}. \quad (4.94)$$

Expandindo esse produto, obteremos a soma de todos os  $2^n$  estados do sistema com mesma amplitude de probabilidade (41),

$$|+\rangle^{\otimes n} = \frac{1}{\sqrt{2^n}} (|00\dots 00\rangle + |00\dots 01\rangle + |00\dots 10\rangle + \dots + |11\dots 11\rangle). \quad (4.95)$$

Com esse conjunto de qubits, ainda é necessário apresentar algumas propriedades que os operadores devem obedecer (44) para que o estado seja construído. Uma primeira propriedade vem desses grafos possuírem apenas os vértices enumerados e com sequência bem definida, enquanto os operadores não possuem uma ordem prioritária para serem aplicados sobre o

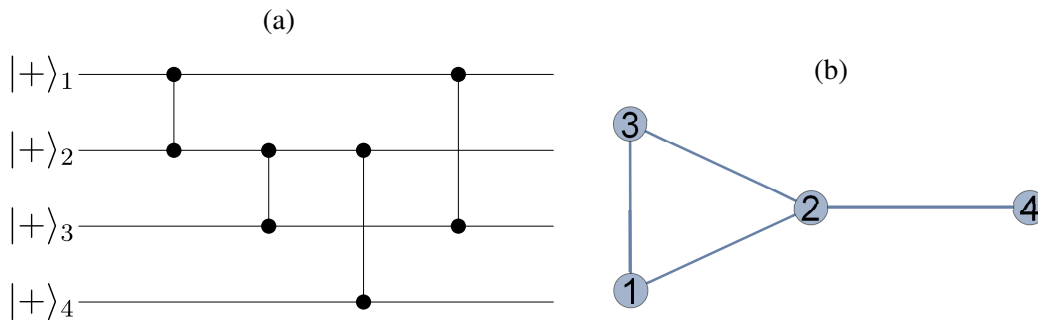
Figura 33 – Exemplo de circuito quântico desse modelo.



Fonte: Adaptado de Raussendorf e Briegel (42).



Figura 34 – (a) Uma forma geral para um circuito com quatro qubits e portas que atuam entre dois qubits; (b) Representação na forma de grafo para esse circuito.



Fonte: O autor.

estado, sendo necessário que esses operadores comutem. Dessa forma, para todo vértice  $v_i$ ,  $v_j$  e  $v_k$  pertencente ao grafo, onde temos os operadores  $U_{i,j}$  atuando entre  $v_i$  e  $v_j$  e  $U_{j,k}$  atuando entre  $v_j$  e  $v_k$ , o comutador entre eles deve ser nulo.

Para obter o estado emaranhado, necessitamos apenas definir um operador que atue entre esses qubits, nesse caso é a porta Z-controlada (45), e portanto, o estado grafo associado ao grafo  $G(E, V)$ , é definido como

$$|G\rangle = \prod_{e \in E} \hat{U}_{CZ}^e |+\rangle^{\otimes |V|}. \quad (4.96)$$

Como a matriz incidência ( $M$ ) possui a informação de quais vértices uma aresta conecta, podemos reescrever a porta Z-controlada, associada a uma aresta  $e_m$  em um grafo de  $n$  qubits, na forma

$$\hat{U}_{CZ}^m = \bigotimes_{l=1}^n \hat{I}_l - 2 \bigotimes_{l=1}^n \left( \hat{I}_l - M_{l,m} |0\rangle\langle 0|_l \right). \quad (4.97)$$

Essa relação estende-se para o caso da construção de estados hipergrafo (46), os quais são generalização de grafos onde as suas chamadas hiperarestas podem conectar mais de 2 vértices, ou até mesmo um único vértice.

Essa forma a partir da matriz incidência permite obter estados grafo e hipergrafo através de um algoritmo. Dessa forma, pacotes de funções a partir do software Mathematica foram construídos usando essa construção. Isso permitiu que estudos como da randomização de estados grafo e do seu emaranhamento, a serem apresentados a seguir, pudessem ser replicados e estendidos para casos mais gerais.

### 4.3 ESTADOS GRAFO RANDOMIZADOS

Uma análise interessante em sistemas quânticos é a de verificar como ruídos alteram o comportamento do sistema e suas propriedades. A partir dos estados grafo, podemos considerar um caso em que as suas portas lógicas quânticas não são ideais, possuindo uma certa probabilidade  $p$  de aplicação entre dois qubits. Para esse modelo, partimos de um estado grafo final  $|G\rangle$ ,

o qual é um estado puro, com operador densidade definido

$$\hat{\rho}_G = |G\rangle\langle G|, \quad (4.98)$$

e tomamos também os estados de seus subgrafos  $|F\rangle$ , conforme definidos na seção 2.4. Cada um desses subgrafos possui o mesmo número de qubits de  $G$ , porém um número  $0 \leq |E_F| \leq |E|$  de arestas.

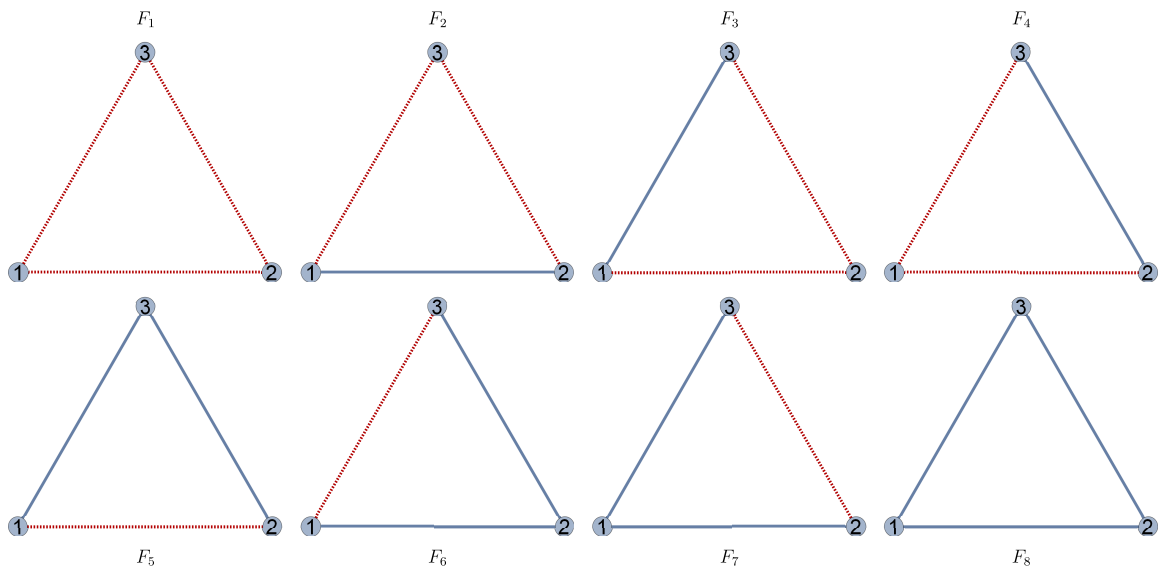
Um operador que apresenta a randomização de um estado grafo  $|G\rangle$  foi definido por Jun-Yi Wu e colaboradores (38) na seguinte forma

$$\rho_G^p = \sum_{F \in Sg(G)} p^{|E_F|} (1-p)^{|E \setminus E_F|} |F\rangle\langle F|, \quad (4.99)$$

onde  $Sg(G)$  é o conjunto de todos os subgrafos de  $G$ . Essa randomização permite a utilização de medições do emaranhamento como a negatividade do estado em função dessa probabilidade de aplicação das portas Z-controladas entre os qubits.

Como exemplo, podemos tomar o caso de um estado grafo definido a partir de um grafo do tipo completo com três vértices ( $K_3$ ). Nesse caso, teremos um conjunto de  $2^{3(3-1)/2} = 8$  subgrafos, conforme apresentamos na seção 2.4 o número de subgrafos de um grafo completo. Esse conjunto de subgrafos são apresentados na Figura 35, onde  $F_8 = K_3$ , e os estados grafo de

Figura 35 – Subgrafos de um grafo  $K_3$  ou  $C_3$ , onde nos estados grafo as arestas azuis representam portas que puderam ser aplicadas, enquanto em vermelho pontilhado são as portas que falharam.



Fonte: O autor.

cada um desses subgrafos são apresentados no apêndice C. Portanto, teremos a randomização do estado grafo  $K_3$  construído pela mistura dos operadores densidades de cada um deles, com a probabilidade  $p$  de ser realizada a porta, e probabilidade  $(1-p)$  de não ser realizadas essas

operações. Assim fica definida na forma

$$\begin{aligned} \rho_{K_3}^p = & (1-p)^3 |F_1\rangle\langle F_1| + p(1-p)^2(|F_2\rangle\langle F_2| + |F_3\rangle\langle F_3| + |F_4\rangle\langle F_4|) \\ & + p^2(1-p)(|F_5\rangle\langle F_5| + |F_6\rangle\langle F_6| + |F_7\rangle\langle F_7|) + p^3 |F_8\rangle\langle F_8|. \end{aligned} \quad (4.100)$$

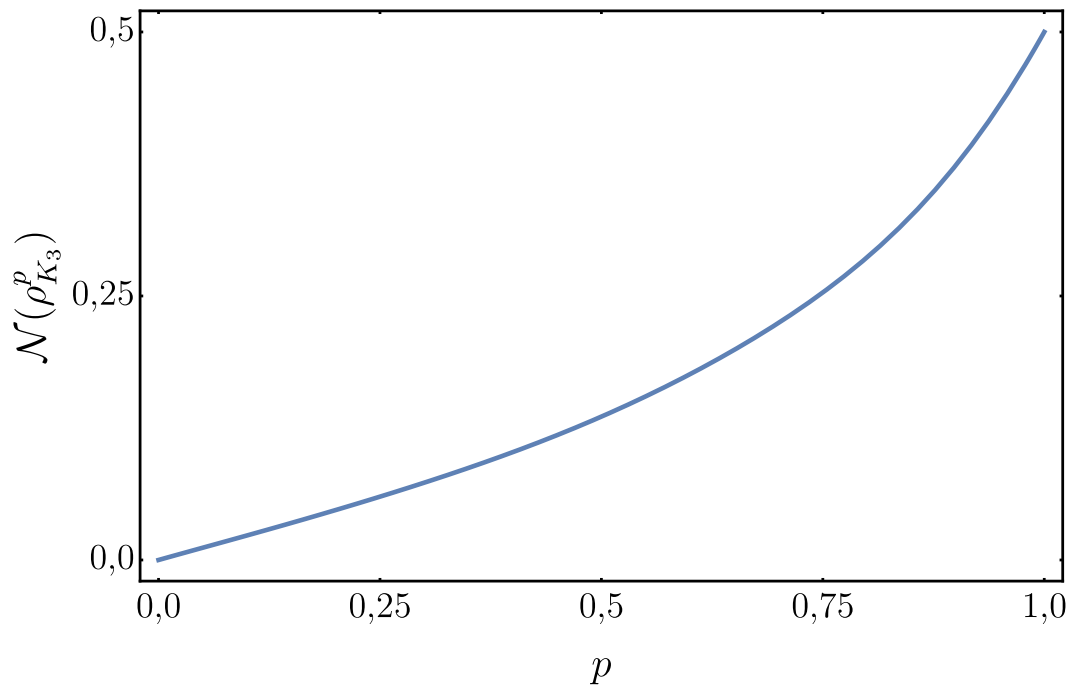
A qual terá sua matriz densidade dada na base computacional definida na forma

$$\rho_{K_3}^p = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \gamma_p & 1 & \gamma_p & \gamma_p & \gamma_p^3 \\ 1 & 1 & 1 & \gamma_p & 1 & \gamma_p & \gamma_p & \gamma_p^3 \\ 1 & 1 & 1 & \gamma_p & 1 & \gamma_p & \gamma_p & \gamma_p^3 \\ \gamma_p & \gamma_p & \gamma_p & 1 & \gamma_p & \gamma_p^2 & \gamma_p^2 & \gamma_p^2 \\ 1 & 1 & 1 & \gamma_p & 1 & \gamma_p & \gamma_p & \gamma_p^3 \\ \gamma_p & \gamma_p & \gamma_p & \gamma_p^2 & \gamma_p & 1 & \gamma_p^2 & \gamma_p^2 \\ \gamma_p & \gamma_p & \gamma_p & \gamma_p^2 & \gamma_p & \gamma_p^2 & 1 & \gamma_p^2 \\ \gamma_p^3 & \gamma_p^3 & \gamma_p^3 & \gamma_p^2 & \gamma_p^3 & \gamma_p^2 & \gamma_p^2 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.101)$$

onde  $\gamma_p = (1 - 2p)$ . Essa matriz densidade permite tomar sua transposta parcial em relação à base de um de seus qubits, tomando os seus autovalores, podemos verificar sua medição do emaranhamento através da negatividade. Essa negatividade em função da probabilidade de aplicar uma porta Z-controlada entre dois qubits terá um comportamento conforme apresentado na Figura 36.

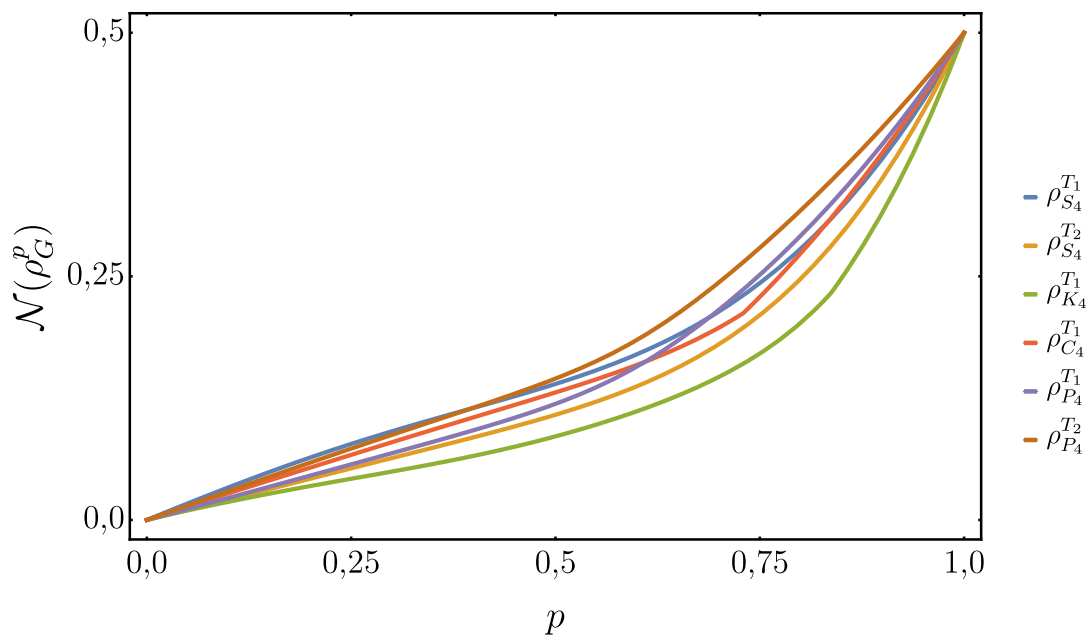
Outros casos utilizando tipos diferentes de grafos são apresentados na Figura 37 onde foram verificadas as negatividades de cada operador de randomização dos estados grafo  $|S_4\rangle$ ,  $|K_4\rangle$ ,  $|C_4\rangle$  e  $|P_4\rangle$ . No caso dos grafos  $K_4$  e  $C_4$ , todos os vértices são considerados equivalentes, por não possuírem nenhuma propriedade diferente dos demais. Porém no grafo  $S_4$ , temos para o grafo estrela uma diferença entre o vértice central em relação aos demais das pontas, logo a transposta parcial foi tomada em dois casos, um para o vértice central e outra para um dos vértices de grau 1. O mesmo foi realizado no grafo  $P_4$ , onde há uma diferença entre os dois vértices da ponta e os vértices internos.

Figura 36 – Negatividade do estado  $|K_3\rangle$  randomizado em função da probabilidade  $p$  das arestas



Fonte: O autor.

Figura 37 – Negatividade dos estados  $|S_4\rangle$ ,  $|K_4\rangle$ ,  $|C_4\rangle$  e  $|P_4\rangle$  randomizados em função da probabilidade  $p$  das arestas. Para o estado  $|S_4\rangle$ , o vértice 1 é o central e no  $|P_4\rangle$  o vértice 1 é um qubit da ponta.



Fonte: O autor.

Em todos essas negatividades de estados grafo apresentados nas Figuras 36 e 37, há um

comportamento monotônico. Isso mostra que nesses casos de estados a partir de grafos simples, temos um crescimento desde o caso com probabilidade igual a 0, onde não há emaranhamento, até o valor máximo para qubits ( $1/2$ ), possível apenas quando  $p = 1$ . Através desses gráficos foi possível verificar que as rotinas definidas estavam de acordo com os resultados da bibliografia (38), permitindo estender o estudo para outros grafos.

Uma extensão proposta para esse assunto é utilizando hipergrafos, nos quais temos hiperarestas, um caso geral de arestas que envolvem um número diferente de 2 vértices (47). Nesse modelo, chamado de estado hipergrafo (46), é possível modelar circuitos com portas lógicas que conectam mais de dois qubits, como em casos com operações locais (em um único qubit). Uma primeira randomização em estados hipergrafo, é para um sistema com arestas que conectam 2 vértices e hiperarestas que conectam 3 vértices, cada uma com uma respectiva probabilidade  $p_2$  e  $p_3$  de serem aplicadas, dessa forma,

$$\rho_G^{\{p_2, p_3\}} = \sum_{F=Sg(G)} p_2^{|E_{2,F}|} (1-p_2)^{|E_{2,H} \setminus E_{2,F}|} p_3^{|E_{3,F}|} (1-p_3)^{|E_{3,H} \setminus E_{3,F}|} |F\rangle\langle F|, \quad (4.102)$$

onde  $E_{n,H}$  e  $E_{n,F}$  definem o conjunto de hiperarestas de grau  $n$  que o hipergrafo e o sub-hipergrafo possuem respectivamente. De forma geral, podemos definir o operador de randomização para hipergrafos  $H$ , com hiperarestas que envolvem  $n$  vértices, sendo  $n \in \mathbb{Z}$ .

$$\rho_H^P = \sum_{F=Shg(H)} \left( \prod_{p_n \in P} p_n^{|E_{n,F}|} (1-p_n)^{|E_{n,H} \setminus E_{n,F}|} \right) |F\rangle\langle F|. \quad (4.103)$$

Com essas definições, foi desenvolvido um trabalho (48), no qual simulamos esses ruídos de aplicar portas de determinado grau  $n$  e como será a medição do emaranhamento nesses sistemas de acordo com essas probabilidades.

## 5 CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS

Uma primeira conclusão é quanto à versatilidade de modelagem no formalismo de grafos. Como discutido na introdução desse trabalho, a estrutura de grafos por apresentar elementos e a conexão entre eles permite uma ampla aplicação em diferentes áreas do conhecimento. No caso dessa dissertação o formalismo de grafos foi aplicado em duas classes de modelos em mecânica quântica, para problemas dinâmicos e estáticos.

No caso de problemas dinâmicos foi apresentado o espalhamento em grafos quânticos. Neste caso, seus vértices tomam o papel de centros espalhadores e as arestas como canais que conectam esses vértices permitindo o espalhamento. Com a construção da função de Green nesse modelo, foi possível de uma forma eficiente obter os valores de energia no qual temos estados ligados e as probabilidades de transmissão e reflexão nessas estruturas, pois, padronizando informações das amplitudes de transmissão e reflexão nos vértices e comprimento das arestas na construção do modelo, essa função será totalmente definida a partir da matriz adjacência do grafo, permitindo uma boa eficiência computacional para obter esses resultados. Finalmente foi possível estabelecer uma abordagem utilizando as amplitudes de espalhamento de um determinado pacote de onda para definir uma entropia de espalhamento baseada na entropia de Shannon, a qual permite verificar se em um determinado espalhamento no grafo há uma prevalência entre a probabilidade de reflexão ou de transmissão.

O modelo de estados grafo traz tanto um caso estático em mecânica quântica como uma abordagem desses grafos para a área de informação quântica. Esse modelo permitiu definir um estado base para estudos em informação quântica, no qual definimos os vértices como as unidades de informação quântica (qubits), enquanto as arestas representam portas lógicas que emaranham esses elementos. Com as definições impostas sobre eles, nos quais temos todos os qubits em um estado inicial  $|+\rangle$  e portas Z-controladas aplicam operações para emaranhar esses qubits, foi possível generalizar essas operações a partir de um operador geral que atua sobre todo o estado inicial, o qual é definido pela matriz incidência do grafo. O estudo nessa área permitiu compreender conceitos de emaranhamento em sistemas de vários elementos, assim como as medições para verificar essa propriedade do estado. Esses conceitos permitiram modelar e analisar casos de ruídos na aplicação de portas lógicas quânticas na formação de estados como esse, o que recebeu uma boa contribuição do formalismo de grafos, pois neles temos os subgrafos do sistema, o que habilita a constatação de que analisamos todos os subsistemas do problema.

Finalmente, esses estudos permitiram um bom desenvolvimento da linha de pesquisa, produzido trabalhos nessas duas áreas abordadas, os quais são citados no apêndice D. Houve também significativas contribuições no desenvolvimento científico do pesquisador, permitindo compreender melhor conceitos envolvidos nessa área, estabelecer metas e focos de estudo, desenvolver melhor a parte de computação numérica, construindo pacote de funções no software

Mathematica e na linguagem de programação Python e ainda planejar trabalhos futuros com a extensão de conceitos aqui abordados. Exemplos de trabalhos futuros a serem abordados são a obtenção da função de Green para grafos quânticos com diferentes potenciais nas arestas, estudos de ressonâncias a partir do espalhamento de grafos quânticos e a extensão de elementos no modelo de estados grafo e estados hipergrafo para estudar mais características do seu emaranhamento e outras perturbações possíveis neles.

## REFERÊNCIAS

- 1 EULER, L. Solutio problematis ad geometriam situs pertinentis. **Commentarii academiae scientiarum Petropolitanae**, p. 128–140, 1741.
- 2 WEST, D. B. **Introduction to graph theory**. [S.l.]: Pearson Education, Inc., 2001.
- 3 BIGGS, N.; LLOYD, E. K.; WILSON, R. J. **Graph Theory, 1736-1936**. [S.l.]: Oxford University Press, 1986.
- 4 LEVINE, I. N. **Quantum chemistry**. 5. ed. New Jersey: Pearson Prentice Hall, 1999.
- 5 FARRAHI, A. H. et al. Applying graph theory to problems in air traffic management. In: **17th AIAA Aviation Technology, Integration, and Operations Conference**. Denver, Colorado: American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc., 2017. p. 3775.
- 6 MOORE, G. E. et al. **Cramming more components onto integrated circuits**. Nova Iorque: McGraw-Hill:, 1965.
- 7 DEWEY, G. et al. Logic performance evaluation and transport physics of schottky-gate iii–v compound semiconductor quantum well field effect transistors for power supply voltages (v cc) ranging from 0.5 v to 1.0 v. In: **2009 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)**. Hillsboro, Oregon: IEEE, 2009. p. 1–4.
- 8 ARUTE, F. et al. Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 574, n. 7779, p. 505–510, 2019.
- 9 SHANNON, C. E. A mathematical theory of communication. **The Bell system technical journal**, Nokia Bell Labs, v. 27, n. 3, p. 379–423, 1948.
- 10 COMPEAU, P. E.; PEVZNER, P. A.; TESLER, G. How to apply de bruijn graphs to genome assembly. **Nature biotechnology**, Nature Publishing Group, v. 29, n. 11, p. 987–991, 2011.
- 11 HIERHOLZER, C.; WIENER, C. Über die möglichkeit, einen linienzug ohne wiederholung und ohne unterbrechung zu umfahren. **Mathematische Annalen**, Springer-Verlag, v. 6, n. 1, p. 30–32, 1873.
- 12 FOULDS, L. R. **Graph theory applications**. Nova Iorque: Springer-Verlag, 1992.
- 13 BERKOLAIKO, G.; KUCHMENT, P. **Introduction to quantum graphs**. [S.l.]: American Mathematical Soc., 2013.
- 14 NEWMAN, M. **Networks: An Introduction**. [S.l.]: Oxford University Press, 2010.
- 15 BROUWER, A. E.; HAEMERS, W. H. **Spectra of graphs**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012.
- 16 ANDRADE, F. M. **Métodos de função de green na análise de grafos quânticos e caminhadas quânticas**. Tese (Doutorado), Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2009.
- 17 KOSTRYKIN, V.; SCHRADER, R. Kirchhoff’s rule for quantum wires. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, IOP Publishing, v. 32, n. 4, p. 595, 1999.



- 18 BERKOLAIKO, G. An elementary introduction to quantum graphs. **Geometric and computational spectral theory**, Providence, Rhode Island, v. 700, p. 41–72, 2017.
- 19 EXNER, P. Lattice kronig-penney models. **Physical review letters**, APS, v. 74, n. 18, p. 3503, 1995.
- 20 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.
- 21 KOTTOS, T.; SMILANSKY, U. Periodic orbit theory and spectral statistics for quantum graphs. **Annals of Physics**, Elsevier, v. 274, n. 1, p. 76–124, 1999.
- 22 ANDRADE, F. M. et al. Green's function approach for quantum graphs: an overview. **Physics Reports**, Elsevier, v. 647, p. 1–46, 2016.
- 23 ECONOMOU, E. N. **Green's functions in quantum physics**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2006.
- 24 LUZ, M. D.; HELLER, E.; CHENG, B. K. Exact form of green functions for segmented potentials. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, IOP Publishing, v. 31, n. 13, p. 2975, 1998.
- 25 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.
- 26 FEYNMAN, R. Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics. **Reviews of Modern Physics**, American Physical Society, v. 20, n. 2, p. 367–387, 1948.
- 27 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.
- 28 BARNETT, S. **Quantum information**. [S.l.]: Oxford University Press, 2009.
- 29 SILVA, A. A.; ANDRADE, F. M.; BAZEIA, D. Average scattering entropy of quantum graphs. **Physical Review A**, APS, v. 103, n. 6, p. 062208, 2021.
- 30 CHILDS, A. M. Universal computation by quantum walk. **Physical review letters**, APS, v. 102, n. 18, p. 180501, 2009.
- 31 SCHUMACHER, B. Quantum coding. **Physical Review A**, APS, v. 51, n. 4, p. 2738, 1995.
- 32 ARFKEN, G.; WEBER, H. H. **Física matemática: métodos matemáticos para engenharia e física**. [S.l.]: Elsevier, 2007.
- 33 NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. **Quantum computation and quantum information**. Cambridge: American Association of Physics Teachers, 2010.
- 34 SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. **Mecânica quântica moderna**. [S.l.]: bookman, 2013.
- 35 VEDRAL, V. et al. Quantifying entanglement. **Physical Review Letters**, APS, v. 78, n. 12, p. 2275, 1997.

- 36 PERES, A. Separability criterion for density matrices. **Physical Review Letters**, APS, v. 77, n. 8, p. 1413, 1996.
- 37 HORODECKI, R.; HORODECKI, M.; HORODECKI, P. Teleportation, bell's inequalities and inseparability. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 222, n. 1-2, p. 21–25, 1996.
- 38 WU, J.-Y. et al. Randomized graph states and their entanglement properties. **Physical Review A**, APS, v. 89, n. 5, p. 052335, 2014.
- 39 VIDAL, G.; WERNER, R. F. Computable measure of entanglement. **Physical Review A**, APS, v. 65, n. 3, p. 032314, 2002.
- 40 JUNGNITSCH, B.; MORODER, T.; GÜHNE, O. Entanglement witnesses for graph states: General theory and examples. **Physical Review A**, APS, v. 84, n. 3, p. 032310, 2011.
- 41 WILLIAMS, C. P. **Explorations in quantum computing**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2010.
- 42 RAUSSENDORF, R.; BRIEGEL, H. J. A one-way quantum computer. **Physical Review Letters**, APS, v. 86, n. 22, p. 5188, 2001.
- 43 WALTHER, P. et al. Experimental one-way quantum computing. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 434, n. 7030, p. 169–176, 2005.
- 44 HEIN, M. et al. Entanglement in graph states and its applications. **arXiv preprint quant-ph/0602096**, 2006.
- 45 MARKHAM, D.; SANDERS, B. C. Graph states for quantum secret sharing. **Physical Review A**, APS, v. 78, n. 4, p. 042309, 2008.
- 46 ROSSI, M. et al. Quantum hypergraph states. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 15, n. 11, p. 113022, 2013.
- 47 BRETTO, A. Hypergraph theory. **An introduction. Mathematical Engineering. Cham: Springer**, Springer, 2013.
- 48 SALEM, V.; SILVA, A. A.; ANDRADE, F. M. Simulating noise in entangling gates through randomized hypergraph states. **Ainda não publicado**, 2021.

## APÊNDICE A – RELAÇÃO ENTRE OS ESPECTROS DE GRAFOS QUÂNTICOS E GRAFOS DISCRETOS

A relação entre o espectro dos grafos quânticos e dos grafos discretos é obtida partindo do espectro da matriz laplaciana harmônica de um grafo ( $\Delta_G$ ) (13). Isso pode ser demonstrado primeiro apresentando a forma que essa matriz possui ao atuar sobre um conjunto de funções  $\Psi = \psi_\eta(v)$  definidas nos vértices  $v$ . Desse modo, possuirá a forma apresentada na equação (2.12), atuando sobre a função no vértice na forma tipo

$$\Delta_G \Psi = (I - D^{-1}A) \Psi. \quad (\text{A.1})$$

A matriz  $D$  é a matriz diagonal que trás a informação sobre o grau do vértice e como tomamos a sua inversa, dará uma contribuição de  $1/d_v$ , enquanto a matriz adjacência  $A$  dá a informação dos vértices adjacentes a cada vértice  $v$ , dessa forma, a atuação dessa matriz sobre cada elemento  $\psi_\eta(v)$  será

$$\Delta_G(v)\psi_\eta(v) = \psi_\eta(v) - \frac{1}{d_v} \sum_{j \in N_v} \psi_\eta(j). \quad (\text{A.2})$$

Considerando a função de onda em cada aresta que inicia em  $v$  e termina em um vértice  $j$ , temos a função de onda nessas arestas  $e = v, j$  com mesmo comprimento  $\ell$  na forma

$$\psi_{v,j}(x) = a_{v,j}e^{ikx} + b_{v,j}e^{-ik(x-\ell)}, \quad (\text{A.3})$$

no qual temos os valores nas bordas do vértice, considerando as coordenadas na aresta definida como  $v, x = 0$  e em  $j, x = \ell$ ,

$$\psi_{v,j}(v) = a_{v,j} + b_{v,j}e^{ik\ell}, \quad (\text{A.4})$$

$$\psi_{v,j}(j) = a_{v,j}e^{ik\ell} + b_{v,j}. \quad (\text{A.5})$$

Com essas relações, podemos reescrever a função de onda nessa aresta em termos do valor dessas condições de contorno, para isso reescrevemos os coeficientes  $a_{v,j}$  e  $b_{v,j}$  a partir dessas relações, obtendo a forma

$$a_{v,j} = \frac{\psi_{v,j}(j) - e^{-ik\ell}\psi_{v,j}(v)}{e^{ik\ell} - e^{-ik\ell}}, \quad (\text{A.6})$$

$$b_{v,j} = \frac{\psi_{v,j}(v) - e^{-ik\ell}\psi_{v,j}(j)}{e^{ik\ell} - e^{-ik\ell}}. \quad (\text{A.7})$$

Dessa forma teremos a equação da função de onda na aresta na forma

$$\psi_{v,j}(x) = \frac{e^{ikx}\psi_{v,j}(j) - e^{ik(x-\ell)}\psi_{v,j}(v)}{e^{ik\ell} - e^{-ik\ell}} + \frac{e^{-ik(x-\ell)}\psi_{v,j}(v) - e^{-ikx}\psi_{v,j}(j)}{e^{ik\ell} - e^{-ik\ell}}, \quad (\text{A.8})$$

isolando os termos que multiplicam  $\psi_{v,j}(v)$  e  $\psi_{v,j}(j)$

$$\psi_{v,j}(x) = \frac{e^{-ik(x-\ell)} - e^{ik(x-\ell)}}{e^{ik\ell} - e^{-ik\ell}}\psi_{v,j}(v) + \frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{e^{ik\ell} - e^{-ik\ell}}\psi_{v,j}(j). \quad (\text{A.9})$$

Assim, obtemos

$$\psi_{v,j}(x) = \frac{1}{e^{ik\ell} - e^{-ik\ell}} [(e^{ik(\ell-x)} - e^{-ik(\ell-x)})\psi_{v,j}(v) + (e^{ikx} - e^{-ikx})\psi_{v,j}(j)]. \quad (\text{A.10})$$

A partir da forma do seno em termos de exponenciais, a qual é

$$\text{sen}(x) = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}, \quad (\text{A.11})$$

permite reescrever a equação de onda na forma

$$\psi_{v,j}(x) = \frac{\text{sen}(k\ell - kx)\psi_{v,j}(v) + \text{sen}(kx)\psi_{v,j}(j)}{\text{sen}(k\ell)}. \quad (\text{A.12})$$

Aplicando a condição de Neumann no vértice  $v$ , temos que a soma da derivada de todas as funções de onda que partem desse vértice é nula, logo

$$\sum_{j \in N_v} \left( \frac{d\psi_{v,j}(x)}{dx} \right)_{x=0} = 0. \quad (\text{A.13})$$

Dessa forma, tomando a derivada da função de onda que obtivemos anteriormente,

$$\left( \frac{d\psi_{v,j}(x)}{dx_{v,j}} \right)_{x=0} = \frac{-k\cos(k\ell)\psi_{v,j}(v) + k\psi_{v,j}(j)}{\text{sen}(k\ell)}. \quad (\text{A.14})$$

Agora substituindo na equação anterior para termos a condição do tipo Neumann nos vértices,

$$\sum_{j \in N_v} \frac{k\psi_{v,j}(j) - k\cos(k\ell)\psi_{v,j}(v)}{\text{sen}(k\ell)} = 0, \quad (\text{A.15})$$

temos  $d_v$  equações com borda no vértice  $v$ , cada uma com outra ponta em um vértice  $j$  vizinho de  $v$ , ou seja,  $j \in N_v$ , assim, simplifica-se o somatório, multiplicando a primeira parte pelo grau do vértice e mantendo a soma apenas na parte com  $j$ , em que ele atua,

$$\sum_{j \in N_v} \psi_{v,j}(j) = d_v \cos(k\ell)\psi_{v,j}(v), \quad (\text{A.16})$$

Finalmente, substituindo essa relação na equação (A.2) que define a operação ao multiplicar a matriz laplaciana harmônica sobre as autofunções do grafo quântico, obtemos

$$\Delta_G(v)\psi_{v,j}(v) = (1 - \cos k\ell)\psi_{v,j}(v). \quad (\text{A.17})$$

Dessa forma, ao considerar que a aplicação desse operador  $\Delta_G$ , definido sobre em funções de onda no grafo retorna um conjunto de autovalores de  $\lambda_\eta$ , definidos por

$$\Delta_G(v)\psi_\eta(v) = \lambda_\eta\psi_\eta(v). \quad (\text{A.18})$$

Portanto é possível estabelecer a relação entre os autovalores  $\lambda_\eta$  da matriz laplaciana harmônica e dos autovalores de energia de grafo quântico com condições do tipo Neumann em suas arestas e com todas as arestas com mesmo comprimento  $\ell$ , sendo definida como

$$\lambda_\eta = (1 - \cos k_\eta\ell), \quad (\text{A.19})$$

obtendo assim uma forma interessante de obter o espectro de energia de uma estrutura definida por uma dinâmica de elementos quânticos

$$k_\eta = \frac{1}{\ell} \arccos(1 - \lambda_\eta), \quad (\text{A.20})$$

com os valores para o número de onda definidos como periódicos em intervalos de tamanho  $2\pi$ . Isso revela que com essas restrições impostas (grafo com comprimento constante das arestas e apenas condição de contorno do tipo Neumann nos vértices), o espectro dos grafos quânticos é definido basicamente pela sua topologia. Finalizando, considerando a relação entre o número de onda e a energia  $\mathcal{E}$  de uma partícula, como  $k = \sqrt{2m\mathcal{E}/\hbar^2}$ , temos os valores de energia dos autoestados do sistemas em função dos autovalores  $\lambda_\eta$ ,

$$\mathcal{E}_\eta = \frac{\hbar^2}{2m\ell^2} [\arccos(1 - \lambda_\eta)]^2. \quad (\text{A.21})$$

## APÊNDICE B – DEDUÇÃO DO COEFICIENTE DE TRANSMISSÃO EM GRAFOS QUÂNTICOS

Primeiro trataremos do caso de um grafo quântico  $\Gamma_{P_2}$  e obteremos a sua transmissão em função de  $k$  e  $\alpha$ ). Nesse caso teremos dois vértices, nos quais uma "lead" de entrada é ligada ao vértice  $v_1$  e uma "lead" de saída é ligada a  $v_2$ , sendo ambos conectados entre si por uma aresta de comprimento  $\ell$ . Como só teremos duas famílias de caminhos ( $P_{1,2}$  e  $P_{2,1}$ ), o sistema de equações que definirá a função de Green será

$$\begin{cases} P_{1,2} = r_2 e^{ik\ell} P_{2,1} + t_2 e^{ik\ell}, \\ P_{2,1} = r_1 e^{ik\ell} P_{1,2}. \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

Substituindo a segunda equação na primeira,

$$P_{1,2} = r_1 r_2 e^{2ik\ell} P_{1,2} + t_2 e^{ik\ell}. \quad (\text{B.2})$$

Simplificando em termos de  $P_{1,2}$ ,

$$P_{1,2}(1 - r_1 r_2 e^{2ik\ell}) = t_2 e^{ik\ell}, \quad (\text{B.3})$$

logo teremos a solução

$$P_{1,2} = \frac{t_2 e^{ik\ell}}{(1 - r_1 r_2 e^{2ik\ell})}. \quad (\text{B.4})$$

O coeficiente de transmissão é obtido multiplicando a transmissão do vértice de entrada pela soma das famílias que partem desse vértice, de forma que

$$T_{\Gamma_{P_2}} = \frac{t_1 t_2 e^{ik\ell}}{(1 - r_1 r_2 e^{2ik\ell})}. \quad (\text{B.5})$$

Nesse caso, como ambos os vértices terão grau  $d = 2$ , os respectivos coeficientes de transmissão e reflexão nos vértices são os mesmos, apresentados em função de  $k$  e  $\alpha$  como

$$t_1 = t_2 = t(k, \alpha) = \frac{2ik}{2ik - \alpha}, \quad (\text{B.6})$$

$$r_1 = r_2 = r(k, \alpha) = \frac{\alpha}{2ik - \alpha}. \quad (\text{B.7})$$

Logo, o coeficiente de transmissão nesse grafo quântico será

$$T_{\Gamma_{P_2}} = \frac{-4k^2 e^{ik\ell} / (2ik - \alpha)^2}{(1 - \alpha^2 e^{2ik\ell} / (2ik - \alpha)^2)}, \quad (\text{B.8})$$

que pode ser simplificado, resultando na forma

$$T_{\Gamma_{P_2}} = \frac{4k^2 e^{ik\ell}}{4k^2 + 4i\alpha k - \alpha^2 + \alpha^2 e^{2ik\ell}}. \quad (\text{B.9})$$

A qual podemos reescrever na forma

$$T_{\Gamma_{P_2}} = \frac{4k^2 e^{ik\ell}}{4k^2 + \alpha[4ik - \alpha(1 - e^{2ik\ell})]}. \quad (\text{B.10})$$

Tomando o módulo quadrado, obtemos a probabilidade de transmissão

$$|T_{\Gamma_{P_2}}|^2 = \frac{16k^4}{(4k^2 + \alpha[4ik - \alpha(1 - e^{2ik\ell})])(4k^2 - \alpha[4ik + \alpha(1 - e^{-2ik\ell})])}. \quad (\text{B.11})$$

Fazendo os limites para a condição do tipo Neumann ( $\alpha \rightarrow 0$ ),

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} |T_{\Gamma_{P_2}}|^2 = 1, \quad (\text{B.12})$$

obtendo probabilidade 1 para qualquer valor de  $k$ , indicando que para  $\alpha = 0$ , a partícula é totalmente transmitida através desse grafo. Outro caso limite é o da condição do tipo Dirichlet, no qual temos ( $\alpha \rightarrow \infty$ ), nesse caso,

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} |T_{\Gamma_{P_2}}|^2 = 0. \quad (\text{B.13})$$

Fazendo para valores de  $k$  muito altos em relação à  $\alpha$ , obtemos o limite  $\frac{\alpha}{k} \rightarrow 0$ , logo

$$\lim_{\frac{\alpha}{k} \rightarrow 0} |T_{\Gamma_{P_2}}|^2 = \lim_{\frac{\alpha}{k} \rightarrow 0} \frac{16k^2}{(4k + \alpha[4i - \alpha(1 - e^{2ik\ell})/k])(4k - \alpha[4i + \alpha(1 - e^{-2ik\ell})/k])}. \quad (\text{B.14})$$

$$\lim_{\frac{\alpha}{k} \rightarrow 0} |T_{\Gamma_{P_2}}|^2 = \lim_{\frac{\alpha}{k} \rightarrow 0} \frac{16k^2}{(4k + 4i\alpha)(4k - 4i\alpha)}. \quad (\text{B.15})$$

$$\lim_{\frac{\alpha}{k} \rightarrow 0} |T_{\Gamma_{P_2}}|^2 = \lim_{\frac{\alpha}{k} \rightarrow 0} \frac{16k}{16k - 16\alpha/k}. \quad (\text{B.16})$$

$$\lim_{\frac{\alpha}{k} \rightarrow 0} |T_{\Gamma_{P_2}}|^2 = 1. \quad (\text{B.17})$$

o que mostra que em limites conforme aumentamos o valor de  $k$ , a amplitude de transmissão e por consequência seu módulo quadrado (probabilidade de transmissão), tendem ao comportamento igual da condição do tipo Neumann, o que também pode ser visto tomando esse limite no coeficiente de transmissão, onde obtemos  $\lim_{\frac{\alpha}{k} \rightarrow 0} T_{\Gamma_{P_2}} = e^{ik\ell}$ .

Um outro caso é para um grafo com dois vértices, os quais são conectados por duas arestas de comprimentos diferentes. Assim, teremos um sistema de equações na forma

$$\begin{cases} P_{1,2} = r_2 e^{ik\ell} P_{2,1} + t_2 e^{ik\ell} P_{2,3} + t_2 \\ P_{2,1} = r_1 e^{ik\ell} P_{1,2} + t_1 e^{ik\ell} P_{1,3} \\ P_{1,3} = r_3 e^{ik\beta\ell/2} P_{3,1} + t_3 e^{ik\beta\ell/2} P_{3,2} \\ P_{3,1} = r_1 e^{ik\beta\ell/2} P_{1,3} + t_1 e^{ik\beta\ell/2} P_{1,2} \\ P_{2,3} = r_3 e^{ik\beta\ell/2} P_{3,2} + t_3 e^{ik\beta\ell/2} P_{3,1} \\ P_{3,2} = r_2 e^{ik\beta\ell/2} P_{2,3} + t_2 e^{ik\beta\ell/2} P_{2,1} + t_2 \end{cases} \quad (\text{B.18})$$

Usando condições de contorno do tipo Neumann, como os graus dos vértices são  $d_1 = d_2 = 3$  e  $d_3 = 2$ , temos os coeficientes de reflexão

$$r_1 = r_2 = -\frac{1}{3}, \quad (\text{B.19})$$

$$t_1 = t_2 = \frac{2}{3}, \quad (\text{B.20})$$

$$r_3 = 0, \quad (\text{B.21})$$

$$t_3 = 1. \quad (\text{B.22})$$

Portanto, teremos o sistema de equações na forma

$$\begin{cases} P_{1,2} = -\frac{1}{3}e^{ik\ell}P_{2,1} + \frac{2}{3}e^{ik\ell}P_{2,3} + \frac{2}{3}, \\ P_{2,1} = -\frac{1}{3}e^{ik\ell}P_{1,2} + \frac{2}{3}e^{ik\ell}P_{1,3}, \\ P_{1,3} = e^{ik\beta\ell/2}P_{3,2}, \\ P_{3,1} = -\frac{1}{3}e^{ik\beta\ell/2}P_{1,3} + \frac{2}{3}e^{ik\beta\ell/2}P_{1,2}, \\ P_{2,3} = e^{ik\beta\ell/2}P_{3,1}, \\ P_{3,2} = -\frac{1}{3}e^{ik\beta\ell/2}P_{2,3} + \frac{2}{3}e^{ik\beta\ell/2}P_{2,1} + \frac{2}{3}. \end{cases} \quad (\text{B.23})$$

Resolvendo esse sistema de equações, obtemos

$$\begin{cases} P_{1,2} = (6e^{ik\ell} - 4e^{i\beta kl+2ik\ell} - 2e^{2i\beta kl+ik\ell})/g \\ P_{2,1} = (4e^{i\beta kl+ik\ell} - 2e^{2i\beta kl+2ik\ell} - 2e^{2ik\ell})/g \\ P_{1,3} = (6e^{i\beta kl} - 2e^{i\beta kl+2ik\ell} - 4e^{2i\beta kl+ik\ell})/g \\ P_{3,1} = (-2e^{\frac{3}{2}i\beta kl} + 4e^{\frac{1}{2}i\beta kl+ik\ell} - 2e^{\frac{3}{2}i\beta kl+2ik\ell})/g \\ P_{2,3} = (-2e^{2i\beta kl} + 4e^{i\beta kl+ik\ell} - 2e^{2i\beta kl+2ik\ell})/g \\ P_{3,2} = (6e^{\frac{1}{2}i\beta kl} - 2e^{\frac{1}{2}i\beta kl+2ik\ell} - 4e^{\frac{3}{2}i\beta kl+ik\ell})/g, \end{cases} \quad (\text{B.24})$$

onde  $g$  é dado por

$$g = 9 - e^{2ik\ell} - 8e^{i\beta kl+ik\ell} - e^{2i\beta kl} + e^{2i\beta kl+2ik\ell}. \quad (\text{B.25})$$

Portanto, como o coeficiente de transmissão será dado por  $t_1$  vezes a soma dos caminhos que partem do vértice 1 ( $P_{1,2} + P_{1,3}$ ), teremos

$$T(k, \beta) = \frac{2}{3} \left( \frac{6e^{ik\ell} - 4e^{i\beta kl+2ik\ell} - 2e^{2i\beta kl+ik\ell} + 6e^{i\beta kl} - 2e^{i\beta kl+2ik\ell} - 4e^{2i\beta kl+ik\ell}}{9 - e^{2ik\ell} - 8e^{i\beta kl+ik\ell} - e^{2i\beta kl} + e^{2i\beta kl+2ik\ell}} \right), \quad (\text{B.26})$$

simplificando,

$$T(k, \beta) = \frac{2}{3} \left( \frac{6e^{i\beta kl} - 6e^{i\beta kl+2ik\ell} - 6e^{2i\beta kl+ik\ell} + 6e^{ik\ell}}{9 - e^{2ik\ell} - 8e^{i\beta kl+ik\ell} - e^{2i\beta kl} + e^{2i\beta kl+2ik\ell}} \right), \quad (\text{B.27})$$

assim, sua forma final é

$$T(k, \beta) = \frac{4(e^{ik\ell} + e^{i\beta kl} - e^{i\beta kl+2ik\ell} - e^{2i\beta kl+ik\ell})}{9 - e^{2ik\ell} - e^{2i\beta kl} - 8e^{i\beta kl+ik\ell} + e^{2i\beta kl+2ik\ell}}. \quad (\text{B.28})$$



## APÊNDICE C – ALGUNS ESTADOS GRAFO

Nesse apêndice serão demonstrados alguns métodos para obter os estados grafo a partir da estrutura definida. Como apresentado na seção 4.1.5.3, portas Z-controladas atuando em dois qubits invertem a fase quando os dois qubits tiverem valor igual a 1. Uma análise desse tipo dada sobre quais qubits uma determinada porta atua dado seu estado inicial, permite obter o estado final de forma mais eficiente.

Aqui abordaremos o caso dos estados dos subgrafos abrangentes de  $K_3$  ou  $C_3$ . Para o subgrafo  $F_1$ , não há porta atuando sobre os qubits, logo o seu estado é o próprio estado inicial  $|+++ \rangle$

$$|F_1 \rangle = |+++ \rangle = \frac{1}{\sqrt{2^3}}(|000 \rangle + |001 \rangle + |010 \rangle + |011 \rangle + |100 \rangle + |101 \rangle + |110 \rangle + |111 \rangle). \quad (\text{C.1})$$

Já nos subgrafos  $F_2$  ao  $F_4$  temos uma porta aplicada entre dois qubits específicos, sendo

$$|F_2 \rangle = \hat{U}_{CZ}^{\{1,2\}} |+++ \rangle, \quad (\text{C.2})$$

$$|F_3 \rangle = \hat{U}_{CZ}^{\{1,3\}} |+++ \rangle, \quad (\text{C.3})$$

$$|F_4 \rangle = \hat{U}_{CZ}^{\{2,3\}} |+++ \rangle. \quad (\text{C.4})$$

Nesses estados, teremos uma inversão no sinal quando temos simultaneamente valor 1 nos qubits apresentados no índice do operador  $\hat{U}_{CZ}^{\{j,k\}}$ , fazendo com que ocorra uma inversão de sinal quando. Por exemplo, quando o valor dos qubits  $i$  e  $j$  forem simultaneamente 1, como para o  $|F_1 \rangle$ , onde teremos uma inversão de sinal em seus kets com valor  $|110 \rangle$  e  $|111 \rangle$ , pois sua porta atua sobre os qubits 1 e 2. Portanto, esses estados em base computacional quântica são

$$|F_2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2^3}}(|000 \rangle + |001 \rangle + |010 \rangle + |011 \rangle + |100 \rangle + |101 \rangle - |110 \rangle - |111 \rangle), \quad (\text{C.5})$$

$$|F_3 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2^3}}(|000 \rangle + |001 \rangle + |010 \rangle + |011 \rangle + |100 \rangle - |101 \rangle + |110 \rangle - |111 \rangle), \quad (\text{C.6})$$

$$|F_4 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2^3}}(|000 \rangle + |001 \rangle + |010 \rangle - |011 \rangle + |100 \rangle + |101 \rangle + |110 \rangle - |111 \rangle). \quad (\text{C.7})$$

Nos casos dos estados  $|F_5 \rangle$  ao  $|F_7 \rangle$ , temos duas portas atuando simultaneamente e finalmente no estado  $|F_8 \rangle$  todas as portas possíveis atuam. Dessa forma teremos

$$|F_5 \rangle = \hat{U}_{CZ}^{\{1,3\}} \hat{U}_{CZ}^{\{2,3\}} |+++ \rangle, \quad (\text{C.8})$$

$$|F_6\rangle = \hat{U}_{CZ}^{\{1,2\}} \hat{U}_{CZ}^{\{2,3\}} |+++ \rangle, \quad (\text{C.9})$$

$$|F_7\rangle = \hat{U}_{CZ}^{\{1,2\}} \hat{U}_{CZ}^{\{1,3\}} |+++ \rangle, \quad (\text{C.10})$$

$$|F_8\rangle = \hat{U}_{CZ}^{\{1,2\}} \hat{U}_{CZ}^{\{1,3\}} \hat{U}_{CZ}^{\{2,3\}} |+++ \rangle. \quad (\text{C.11})$$

Utilizando o mesmo método, analisando em quais kets haverá inversão de sinal, como por exemplo para o  $|F_5\rangle$ , onde teremos uma inversão de sinal nos kets  $|011\rangle$  e  $|101\rangle$  e duas no  $|111\rangle$ , mantendo o seu sinal positivo. Portanto, para  $|F_5\rangle$  a  $|F_8\rangle$ , as suas formas finais serão

$$|F_5\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^3}} (|000\rangle + |001\rangle + |010\rangle - |011\rangle + |100\rangle - |101\rangle + |110\rangle + |111\rangle), \quad (\text{C.12})$$

$$|F_6\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^3}} (|000\rangle + |001\rangle + |010\rangle - |011\rangle + |100\rangle + |101\rangle - |110\rangle + |111\rangle), \quad (\text{C.13})$$

$$|F_7\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^3}} (|000\rangle + |001\rangle + |010\rangle + |011\rangle + |100\rangle - |101\rangle - |110\rangle + |111\rangle), \quad (\text{C.14})$$

$$|F_8\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^3}} (|000\rangle + |001\rangle + |010\rangle - |011\rangle + |100\rangle - |101\rangle - |110\rangle - |111\rangle). \quad (\text{C.15})$$

A partir desses estados obtidos, definimos o operador de randomização do estado grafo

$|F_8\rangle$ , *queserna forma*  $\rho_{K_3}^p = (1-p)^3 |F_1\rangle\langle F_1| + p(1-p)^2 (|F_2\rangle\langle F_2| + |F_3\rangle\langle F_3| + |F_4\rangle\langle F_4|) + p^2(1-p) (|F_5\rangle\langle F_5| + |F_6\rangle\langle F_6| + |F_7\rangle\langle F_7|) + p^3 |F_8\rangle\langle F_8|$ , (C.16) Teremos  
sua respectiva matriz densidade na forma

$$\rho_{K_3}^p \doteq \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \gamma_p & 1 & \gamma_p & \gamma_p & \gamma_p^3 \\ 1 & 1 & 1 & \gamma_p & 1 & \gamma_p & \gamma_p & \gamma_p^3 \\ 1 & 1 & 1 & \gamma_p & 1 & \gamma_p & \gamma_p & \gamma_p^3 \\ \gamma_p & \gamma_p & \gamma_p & 1 & \gamma_p & \gamma_p^2 & \gamma_p^2 & \gamma_p^2 \\ 1 & 1 & 1 & \gamma_p & 1 & \gamma_p & \gamma_p & \gamma_p^3 \\ \gamma_p & \gamma_p & \gamma_p & \gamma_p^2 & \gamma_p & 1 & \gamma_p^2 & \gamma_p^2 \\ \gamma_p & \gamma_p & \gamma_p & \gamma_p^2 & \gamma_p & \gamma_p^2 & 1 & \gamma_p^2 \\ \gamma_p^3 & \gamma_p^3 & \gamma_p^3 & \gamma_p^2 & \gamma_p^3 & \gamma_p^2 & \gamma_p^2 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.17})$$

onde  $\gamma_p = (1 - 2p)$ .

## APÊNDICE D – TRABALHOS PRODUZIDOS

Durante o mestrado foram desenvolvidos dois trabalhos. Um primeiro trabalho foi na parte de grafos quânticos, definindo a entropia média de espalhamento em grafos quânticos (29), o qual foi publicado dia 4 de junho de 2021 na revista Physical Review A de volume 103. O outro trabalho estende conceitos apresentados na randomização em estados grafo para estados hipergrafo (48) e está sendo finalizado.