

Universidade Federal do Paraná

Fabiano Manoel de Andrade

**MÉTODOS DE FUNÇÃO DE GREEN  
NA ANÁLISE DE GRAFOS QUÂNTICOS E  
CAMINHADAS QUÂNTICAS**

Tese apresentada ao Departamento de Física como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador: Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz

Curitiba - PR  
2009

*À minha mãe Maria de Fátima, meu pai Manoel Pedro,  
minhas irmãs Amanda e Rafaela e em especial à minha  
esposa Micheli e minha filha Julia.*

# Agradecimentos

Gostaria de agradecer a Deus por ter me dado forças, uma família maravilhosa e amigos que de alguma forma me ajudaram a chegar até aqui. Ao Prof. Marcos Gomes pela orientação e paciência desde 1999, quando começamos a trabalhar juntos e resolvi me aventurar pelo mundo fascinante da mecânica quântica. Aos meus amigos Cristiano Woellner, pelo seu incentivo nas horas mais difíceis e pelas discussões sobre física, matemática e linux; Marcos Santos, por me ajudar em muitas partes dessa tese com as suas dicas de programação em C, Fortran e Mathematica; e Jiusandro Kuhn, pelas discussões sobre física e linux. Agradeço ao Prof. Alexandre Schmidt que foi o precursor dos estudos da função de Green em grafos.

Gostaria de agradecer à minha família. Aos meus pais, Maria de Fátima e Manoel, às minhas irmãs Amanda e Rafaela. À minha querida esposa Micheli, pela convivência em todos esses 15 anos. À minha querida filha Julia, um enorme presente de Deus. Obrigado também aos meus amigos pelos momentos agradáveis que passamos juntos.

# Resumo

Nesta tese mostramos que a função de Green exata para grafos quânticos pode ser escrita exatamente na mesma forma funcional da chamada função de Green semiclássica generalizada para sistemas quânticos 1D. Tal resultado é muito importante devido ao fato que as funções de Green semiclássica generalizadas podem ser calculadas por métodos recursivos, um fator chave para resolver grafos quânticos arbitrários. De forma geral, a função de Green exata para grafos quânticos é dada como uma soma sobre caminhos clássicos, onde efeitos quânticos locais são levados em conta através das amplitudes de reflexão e transmissão definidas em cada vértice do grafo (e calculadas a partir das condições de contorno impostas nos vértices do grafo). Então, desenvolvemos dois procedimentos de simplificação para resolver nossos sistemas, reagrupamento dos caminhos e separação de um grafo grande em pequenos blocos. Grafos quânticos abertos e fechados são então analisados. Mostramos como obter as soluções de espalhamento para o primeiro e os autoestados para o últimos. Por exemplo, para grafos quânticos do tipo árvore binária e Sierpinski obtemos as probabilidades de transmissão como função do número de onda da onda plana incidente. Como uma outra aplicação, também discutimos quase-estados em grafos quânticos. Baseados em nossa construção para grafos quânticos, consideramos caminhadas quânticas discretas. Demonstramos que as duas formulações usadas na literatura, caminhadas quânticas com moeda e caminhadas quânticas de espalhamento, são equivalentes em 1D. Adicionalmente, pelo mapeamento das caminhadas quânticas discretas numa rede de Kronig-Penney generalizada, mostramos que é possível construir uma função de Green dependente da energia para o problema, mesmo em topologias arbitrárias. Podemos interpretar a expansão em série para a função de Green como uma expansão de Fourier, então cada termo representa um termo dependente do tempo do propagador discreto, sendo deslocamentos para certo número de passos de tempo. Assim, as probabilidades da caminhada para um número de passos qualquer são obtidas diretamente da funções de Green por meio de operadores de projeção apropriados, discutidos explicitamente neste trabalho.

# Abstract

In this thesis we show that the exact Green function for quantum graphs can be written in exactly the same functional form than the so called generalized semiclassical Green function for 1D quantum systems. Such result is very useful because generalized semiclassical Green functions can be calculated by recursive methods, a key factor to solve arbitrary quantum graphs. Generally, the exact Green function for quantum graphs is given as a sum over classical paths, where local quantum effects are taking into account through the quantum reflection and transmission amplitudes defined on each vertex of graph (and derived from proper boundary conditions imposed to the graph vertices). Then, we develop two simplifying procedures to solve our systems, namely, regrouping of paths and separation of a large graph into small blocks. Open and closed quantum graphs are then analyzed. We show how to obtain the scattering solutions for the former and eigenstates for the latter. For instance, for open binary trees and Sierpinski-like quantum graphs we obtain the transmission probabilities as function of the wavenumber of incident plane waves. As another application, we also discuss quasi-states in quantum graphs. Based on our constructions for quantum graphs, we consider discrete quantum walks. We demonstrate that the two major formulations in the literature, coined and the scattering, are equivalence in 1D. Moreover, by mapping discrete quantum walks in a generalized Kronig-Penney lattice, we show that it is possible to construct an energy dependent Green function for the problem, even in arbitrary topologies. Furthermore, we can interpret the series for such Green function as a Fourier expansion, so each term represents a time-dependent term of the discrete propagator, so being displacements at certain number of time steps. Hence, the walk probabilities for any number of steps are obtained direct from the Green function by means of appropriate projector operators, derived explicit in this work.

# Sumário

<b>Agradecimentos</b>	<b>ii</b>
<b>Resumo</b>	<b>iii</b>
<b>Abstract</b>	<b>iv</b>
<b>Sumário</b>	<b>v</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Objetivos e organização da tese . . . . .	3
<b>2 Grafos e métodos da função de Green em mecânica quântica</b>	<b>5</b>
2.1 Grafos e sua topologia . . . . .	5
2.2 Grafos quânticos . . . . .	8
2.3 A função de Green e sua forma semiclássica generalizada . . . . .	11
2.4 Interações pontuais gerais e a função de Green . . . . .	13
2.5 Função de Green para grafos quânticos . . . . .	16
<b>3 Estudo de grafos quânticos</b>	<b>20</b>
3.1 Como obter a função de Green para grafos quânticos . . . . .	20
3.2 Procedimentos de simplificação . . . . .	23
3.2.1 Reagrupando os caminhos . . . . .	23
3.2.2 Separando um grafo em blocos . . . . .	26
3.3 Estudo de diferentes casos . . . . .	28
3.4 Cálculo de autoestados e espalhamento em grafos abertos . . . . .	31
3.4.1 Autoestados . . . . .	31

3.4.2	Espalhamento . . . . .	34
3.5	Grafos quânticos representativos: o cubo . . . . .	34
3.5.1	Estados ligados . . . . .	37
3.5.2	Espalhamento . . . . .	39
3.6	Grafos quânticos representativos: árvore binária . . . . .	40
3.7	Grafos quânticos representativos: triângulo de Sierpinski . . . . .	44
3.8	Quase-estados em grafos quânticos . . . . .	49
3.8.1	Fórmulas de recorrência para os coeficientes de transmissão e reflexão . . . . .	51
3.8.2	Função de Green como amplitude de probabilidade . . . . .	53
<b>4</b>	<b>Caminhadas quânticas</b>	<b>61</b>
4.1	Caminhadas quânticas - “quantum walks” . . . . .	61
4.2	Caminhadas clássicas e cadeias de Markov . . . . .	63
4.3	Definindo caminhadas quânticas . . . . .	65
4.4	Caminhadas quânticas em uma linha . . . . .	66
4.5	Caminhadas quânticas com moeda . . . . .	67
4.6	Caminhadas quânticas em grafos não-direcionados . . . . .	76
4.7	Caminhadas quânticas em grafos direcionados . . . . .	81
4.8	Caminhadas quânticas discretas baseadas numa analogia interferométrica . . . . .	83
4.9	A relação entre os dois modelos de caminhadas quânticas discretas . . . . .	88
<b>5</b>	<b>Função de Green e as caminhadas quânticas</b>	<b>93</b>
5.1	Uma metodologia de funções de Green para as caminhadas quânticas . . . . .	93
5.2	O mapeamento . . . . .	93
5.3	Caminhadas quânticas e sua conexão com redes finitas . . . . .	97
5.4	A construção da função de Green para a rede de Kronig-Penney finita . . . . .	98
5.5	Conectando a solução da função de Green com as caminhadas quânticas . . . . .	100
5.6	Função de Green e os operadores de passo e caminho . . . . .	101
5.7	Função de Green para as caminhadas quânticas de espalhamento 1D . . . . .	106
5.8	Caminhadas quânticas de espalhamento e a soma de caminhos “a la Feynman” . . . . .	108
5.9	Caminhadas quânticas com moedas dependentes da energia . . . . .	113
<b>6</b>	<b>Conclusão e perspectivas futuras</b>	<b>118</b>
6.1	Conclusão . . . . .	118

6.2	Perspectivas futuras . . . . .	119
<b>A</b>	<b>Funções de Green independentes do tempo</b>	<b>121</b>
A.1	Formalismo . . . . .	121
A.2	Função de Green e teoria de perturbação . . . . .	125
A.2.1	Expansão perturbativa da função de Green . . . . .	125
A.2.2	Caso particular de uma rede com potenciais de suporte compacto . . . . .	126
<b>B</b>	<b>Funções de Green semiclássicas</b>	<b>128</b>
B.1	Descrevendo a mecânica quântica a partir de objetos clássicos . . . . .	128
B.2	O propagador semiclássico . . . . .	129
B.3	A função de Green semiclássica . . . . .	130
<b>C</b>	<b>Conservação de fluxo numa interação pontual</b>	<b>132</b>
<b>D</b>	<b>Demonstração de <math>U_c E = E U</math></b>	<b>134</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>136</b>



## Introdução

A primeira evidência do uso do conceito de grafos data de 1736, quando Euler utilizou-os para solucionar o problema clássico das pontes de Königsberg. Na cidade de Königsberg (na Prússia Oriental), o rio Pregal flui em torno da ilha de Kneiphof, dividindo-se em seguida em duas partes. Existem quatro áreas de terra que ladeiam o rio e essas áreas de terra estão interligadas por sete pontes. O problema das pontes de Königsberg consiste em determinar se, ao partir de alguma área de terra, é possível atravessar todas as pontes exatamente uma vez, para, em seguida, retornar à área de terra inicial. Usando um grafo com a mesma topologia do problema, Euler mostrou que é impossível caminhar exatamente uma única vez em cada ponte e retornar ao ponto de origem.

Um grafo pode ser entendido intuitivamente como um conjunto de elementos (vértices) ligados entre si por conexões (ligações). A estrutura de um grafo é totalmente determinada pela estrutura das conexões entre os diferentes vértices. O conceito matemático geral de um grafo (rede) como um grupo de elementos os quais estão conectados por alguma relação encontra aplicações em muitas áreas da ciência e da engenharia: na análise de circuitos elétricos, verificação de caminhos mais curtos, planejamento de projetos, identificação de compostos químicos, genética, cibernética, lingüística e ciências sociais. O sistema de ruas de uma cidade, a rede de neurônios do cérebro humano e a estrutura de um banco de dados digitais podem ser descritas por grafos, sendo assim, os grafos são uma das estruturas matemáticas que mais encontra aplicações no dia-a-dia.

O estudo do operador Laplaciano, o caso onde o operador Hamiltoniano do sistema têm todos os potenciais iguais a zero, em um grafo métrico, tem despertado muito interesse em física e matemática em termos da equação de difusão ou equação de Schrödinger. Esses sistemas tornaram-se conhecidos como *grafos quânticos* (“quantum graphs”). Porém, dependendo do aspecto particular a ser estudado, os mesmos sistemas podem receber outros nomes como redes quânticas (“quantum networks”) ou fios quânticos (“quantum

---

wires”). Grafos quânticos tem uma história longa na matemática e na física. Na física, a primeira aplicação foi provavelmente no contexto de modelos de elétrons livres em moléculas orgânicas, por volta de setenta anos atrás com Pauling [1], uma metodologia que foi adicionalmente desenvolvida nos anos subsequentes [2–6]. As moléculas eram visualizadas como um grupo de átomos fixos conectados por ligações, ao longo das quais os elétrons obedecem a equação de Schrödinger unidimensional com um potencial apropriado. O transporte de elétrons em moléculas [7], tais como proteínas e polímeros, podem seguir “pathways” unidimensionais (as ligações), mudando de um caminho para outro devido aos centros espalhadores (os vértices).

Grafos podem ser utilizados em um contexto topológico dando origem a teoria da conectividade molecular [8, 9]. Sob certas condições [10, 11], transporte de carga em sólidos são bem descritos por dinâmica unidimensional, como em filmes poliméricos [12]. Grafos quânticos têm também sido estudados em conexão com supercondutores desordenados [13], transição de Anderson em fios desordenados [14, 15], sistemas Hall quânticos [16], super-redes [17], fios quânticos [18] e sistemas quânticos mesoscópicos [19–22]. Implementações experimentais também foram feitas, em especial através de redes de microondas [23], e estudados em conexão com a tecnologia de tomografia laser [24].

De um ponto de vista mais fundamental, grafos quânticos têm também se tornado uma ferramenta muito poderosa para estudar diferentes aspectos em mecânica quântica. Por exemplo, propriedades espectrais de banda em redes [25], a relação de órbitas periódicas e teoria de localização [26] e espalhamento caótico e difusivo [27, 28]. A relevância dos grafos quânticos para o estudo de caos quântico foi demonstrada pelos trabalhos de Kottos e Smilansky [29, 30]. Eles analisaram a estatística espectral de grafos simples e mostraram que essa segue muito de perto as previsões da teoria das matrizes aleatórias. Eles propuseram uma dedução alternativa para a fórmula do traço e apontaram suas similaridades com a fórmula do traço de Gutzwiller [31, 32]. Uma das grandes surpresas no estudo de grafos quânticos é a possibilidade de se obter soluções analíticas exatas mesmo quando apresentam comportamento caótico [33–36]. Gnutzmann e Smilansky publicaram um artigo de revisão [37] discutindo os métodos recentes para estudo da estatística espectral em grafos quânticos e a relação para o caos quântico em geral.

O aspecto formal matemático, a construção de operadores auto-adjuntos, ou equações de onda com condições de contorno apropriadas em grafos, foi primeiro discutido por Ruedenberg e Scherr [3]. Eles consideraram grafos como idealizações de redes de fios ou guia de ondas no limite onde a largura dos fios é muito menor do que todas as outras escalas de comprimento do problema. Assim, negligenciando o tamanho lateral do fio, isto é, assumindo que as ondas permanecem propagando-se em um único modo transversal, substitui-se a equação de Schrödinger parcial por um operador diferencial ordi-

nário. Adicionalmente quando não há campo externo aplicado, o movimento nas ligações é livre. Esse caso é conhecido como grafos não-vestidos (“undressed graphs”). Grafos com potenciais não-nulos são referidos como grafos vestidos (“dressed graphs”) [33, 34, 38].

As numerosas possibilidades na construção de grafos quânticos tornam difíceis o uso de um único método para resolvê-los. De fato, um método geral deverá ser aplicado para: (i) ambos os casos de grafos abertos e fechados, fornecendo os estados de espalhamento para estes e o espectro de autoestados para aqueles; (ii) qualquer tipo de estrutura e conectividade das ligações e (iii) qualquer tipo de condição de contorno nos vértices, e além disso, permitir o caso de diferentes condições de contorno em cada vértice. Adicionalmente, o método deve: (iv) ser implementado através de algum tipo de hierarquia ou procedimento recursivo, no sentido de ser capaz de lidar com um número grande de ligações e vértices; e (v) funcionar mesmo no caso onde existe um potencial ao longo de cada ligação.

Existem na literatura propostas de extensões dos cálculos semiclássicos, resultando nas chamadas funções de Green semiclássicas generalizadas [39–41]. Nessa técnica a função de Green pode ser obtida por um procedimento recursivo, onde caminhos clássicos são usados na soma a “*la Feynman*” [39]. Utilizando-se dessa técnica, da Luz et al. [42] desenvolveram um método para obter a função de Green para grafos gerais. Para superar a dificuldade de parrear as funções de onda com diferentes condições de contorno em cada vértice ao longo de toda a rede, aplicaram uma construção recursiva usada na obtenção da função de Green para redes 1D de espalhadores pontuais gerais [43]. Também, baseado na abordagem de funções de Green [44], estudou-se a manifestação de oscilações de ponto-zero do vácuo de um campo quântico, conhecido como efeito Casimir, em grafos quânticos.

Os grafos podem ser utilizados no estudo das caminhadas quânticas, que representam a versão quântica das caminhadas clássicas. As caminhadas quânticas nos dias atuais tem atraído muita atenção devido a sua possível aplicação em computadores quânticos [45, 46]. Dada essa conexão, podemos utilizar as ferramentas usadas no estudo de grafos para estudar as caminhadas quânticas.

## 1.1 Objetivos e organização da tese

Das discussões anteriores, vemos que o conceito de grafos quânticos (e uma de suas ramificações, as caminhadas quânticas) encontra diversas aplicações práticas em física, como também dá origem à diferentes problemas fundamentais em mecânica quântica. Assim é importante desenvolver as mais diversas técnicas teóricas e experimentais para estudar tais problemas. Nesse sentido o estudo de grafos é facilmente motivado.

Deste modo, nosso objetivo principal nessa tese consiste no estudo de grafos através das funções de Green. Para isso, precisamos entender e melhorar o formalismo matemático necessário para calcular grafos quânticos abertos e fechados. Também estudamos a conexão entre as caminhadas quânticas e a teoria de espalhamento, possibilitando usar métodos de função de Green em caminhadas quânticas.

Esta tese é organizada da seguinte forma. No Capítulo 1 realizamos uma revisão bibliográfica sobre grafos quânticos e suas aplicações na física. No Capítulo 2 definimos grafos do ponto de vista topológico, mostramos como realizamos a quantização de um grafo de uma forma direta e introduzimos a técnica da função de Green semiclássica generalizada, mostrando que essa técnica fornece a função de Green exata para grafos quânticos, escrita em termos das amplitudes das interações pontuais gerais nos vértices do grafo e dos comprimentos das ligações. Esse resultado é central na tese e será usado nos capítulos seguintes. No Capítulo 3 mostramos os procedimentos de simplificação usados para encontrar a função de Green para grafos gerais de diversas topologias com alguns exemplos numéricos e também propomos um método de cálculo de quase-estados em grafos usando a função de Green. No Capítulo 4 introduzimos as caminhadas quânticas e como podemos usar a teoria de espalhamento no seu estudo. No Capítulo 5 fazemos uma abordagem utilizando funções de Green para o estudo das caminhadas quânticas. Finalmente, no Capítulo 6 apresentamos a conclusão, bem como as perspectivas futuras para o prosseguimento da presente linha de pesquisa.

# Capítulo 2

## Grafos e métodos da função de Green em mecânica quântica

### 2.1 Grafos e sua topologia

Um grafo  $\mathcal{G}(V, L)$  consiste de  $V$  vértices (ou nós ou pontos) conectados por  $L$  ligações (ou arestas). Um grafo com seis vértices e 10 ligações ( $V = 6, L = 10$ ) aparece ilustrado na Figura 2.1.

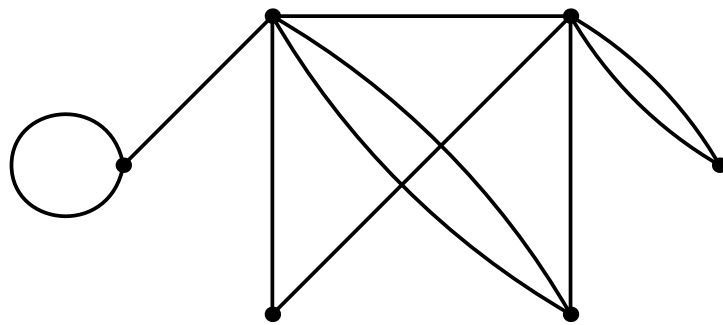


Figura 2.1: Um grafo com  $V = 6$  vértices e  $L = 10$  ligações.

Os grafos não estão necessariamente limitados ao plano e o fato da figura mostrar intersecções entre as ligações em pontos que não são vértices é completamente devido à representação planar e são irrelevantes. Um exemplo real de um grafo é uma rede de cabos coaxiais (ligações) conectados por junções (vértices). A topologia de um grafo, ou seja, o modo como os vértices e as ligações são conectados, é dado por meio de uma matriz de conectividade (também conhecida como matriz de adjacências)  $C_{i,j}$  de dimensões  $V \times V$

definida como

$$C_{i,j} = C_{j,i} = \begin{cases} m & \text{se } i \neq j \text{ onde } i \text{ e } j \text{ são conectados por } m \text{ ligações,} \\ 2m & \text{se } i = j \text{ e existem } m \text{ laços no vértice } i, \\ 0 & \text{se } i \text{ e } j \text{ não são conectados.} \end{cases} \quad (2.1)$$

Esta definição permite que os vértices sejam conectados por múltiplas ligações, além de permitir vértices auto-conectados por um ou múltiplos laços (neste caso o elemento diagonal da matriz conectividade corresponde ao dobro do número de laços).

A valência  $v_i$  de um vértice  $i$  é o número de vértices  $j$  conectados a  $i$ , com pesos dados pelo número de ligações paralelas (laços). Segue que,  $m$  ligações paralelas ( $m$  laços paralelos) contribuem com  $m$  ( $2m$ ) para a valência. Em termos da matriz conectividade,

$$v_i = \sum_{j=1}^V C_{i,j}. \quad (2.2)$$

A vizinhança  $\Gamma_i$  do vértice  $i$  consiste dos  $j$  vértices conectados a  $i$ . O contorno de um sub-grafo  $\hat{\mathcal{G}} \subset \mathcal{G}$ ,  $\Gamma(\hat{\mathcal{G}})$ , consiste dos vértices que não estão em  $\hat{\mathcal{G}}$ , mas que estão na união das vizinhanças dos vértices de  $\hat{\mathcal{G}}$ .

O número de ligações é expresso por

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^V \sum_{j=i}^V C_{i,j}. \quad (2.3)$$

A menos que especificado em contrário, assumiremos sempre grafos conectados, para os quais os vértices não podem ser divididos em dois subconjuntos não vazios tal que não exista ligações conectando os dois subconjuntos (não há vértices isolados ou inacessíveis). Isto é, para um grafo conectado a matriz conectividade não pode apresentar-se na forma de blocos diagonais pela permutação dos vértices.

Existem algumas classes de grafos que aparecem mais freqüentemente na literatura por seu maior interesse ou por sua aplicabilidade. Tais classes são listadas a seguir (alguns exemplos são mostrados na Figura 2.2):

- Grafos simples são grafos que não possuem laços e nenhuma ligação paralela conectando os seus vértices (sem múltiplas ligações entre dois vértices). Todos os grafos apresentados na Figura 2.2 são simples. Neste caso, para todo  $i$  e  $j$ ,  $C_{i,j} \in \{0, 1\}$ , e em particular todos os elementos diagonais são nulos,  $C_{i,i} = 0$ . Para grafos simples, a cardinalidade de  $\Gamma_i$  é a valência  $v_i$  para cada vértice. Quando definirmos grafos quânticos na Seção 2.2 mostraremos que todo grafo quântico conectado pode ser

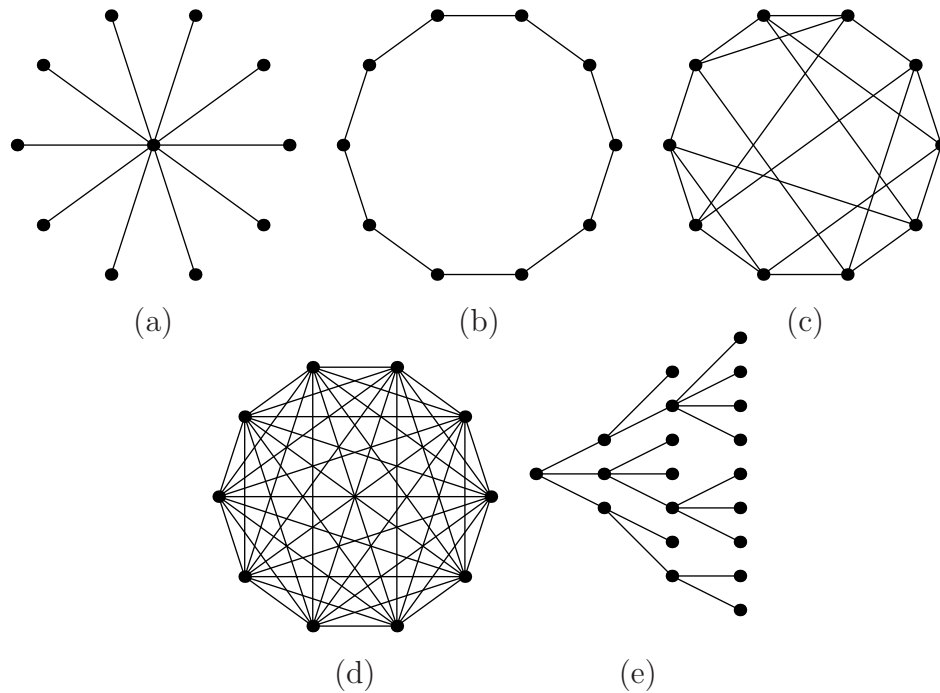


Figura 2.2: Alguns exemplos de grafos: (a) grafo estrela ( $L = 10$ ,  $V = 11$ ), (b) grafo anel ( $L = 10$ ,  $V = 10$ ), (c) grafo  $v$ -regular com  $v = 4$  ( $L = 20$ ,  $V = 10$ ), (d) grafo completo ( $L = 45$ ,  $V = 10$ ), (e) grafo árvore ( $L = 19$ ,  $V = 20$ ).

transformado em um grafo de topologia simples ao adicionar alguns vértices sem modificar o espectro de auto-funções.

- Grafos  $v$ -regulares são grafos simples cujos vértices tem a mesma valência  $v$ , Figura 2.2(c). Os grafos  $v$ -regulares mais simples são os anéis, para os quais  $v = 2$  e  $V = L$ . Um anel não trivial tem ao menos dois vértices. Um grafo  $v$ -regular é um grafo completo quando  $v = V - 1$ ;
- Grafos árvore são simples, conectados e simplesmente conectados, Figura 2.2(e);
- Grafos estrela são árvores consistindo de um vértice principal (central) com valência  $v$ , conectado a  $v$  vértices periféricos de valência um, Figura 2.2(a).

Em muitas aplicações é conveniente referir-se às ligações diretamente, e vamos usar letras minúsculas para denotar as ligações dos grafos. Se o grafo é simples, podemos usar os pontos finais das ligações como seus índices  $l = (i, j) = (j, i)$ . Se um grafo não é simples,  $(i, j)$  denotará o conjunto de todas as ligações que conectam os vértices  $i$  e  $j$ . Os parênteses serão sempre usados para denotar conjuntos com ligações não direcionais, a menos que mencionado em contrário.

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

$$S^{(i)} = \bigcup_{j \in \Gamma(i)} (i, j). \quad (2.4)$$

Se o grafo é simples, as ligações em uma estrela  $S^{(i)}$  são  $\{l = (i, j) : j \in \Gamma(i)\}$ .

Ligações direcionais (também chamadas de arcos na literatura) são ligações nas quais uma direção é especificada. Neste caso podemos nos referir como  $\vec{l} \equiv (Min(i, j), Max(i, j))$  ou por  $\overleftarrow{l} \equiv (Max(i, j), Min(i, j))$ . Novamente, para grafos não-simples,  $\vec{l}$  é o conjunto de todas as ligações direcionais começando em  $i$  e terminando em  $j$ .

## 2.2 Grafos quânticos

Na Seção anterior definimos e discutimos grafos do ponto de vista topológico. Aqui queremos discutir grafos *métricos* os quais permitem definir a equação de Schrödinger em grafos. Um grafo métrico é um grafo onde é atribuído um comprimento positivo  $\ell_l \in (0, \infty)$  para cada ligação  $l$ .

Para a descrição quântica atribuímos para cada ligação  $l = (i, j)$  uma coordenada  $x_l$  a qual indica a posição ao longo da ligação. O comprimento da ligação é denotado por  $\ell_l$  com  $0 \leq x_l \leq \ell_l$ .  $x_l$  assume o valor 0 em  $i$  e o valor  $\ell_l$  em  $j$ . Se a ligação  $l$  é um laço então  $i = j$ .

A função de onda  $\Psi$  é um vetor com  $L$  componentes, escrito como

$$\begin{pmatrix} \psi_{l_1}(x_{l_1}) \\ \psi_{l_2}(x_{l_2}) \\ \vdots \\ \psi_{l_L}(x_{l_L}) \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

onde o conjunto  $\{l_1, l_2, \dots, l_L\}$  consiste de  $L$  ligações diferentes. Chamaremos  $\psi_l(x_l)$  a componente de  $\Psi$  na ligação  $l$ , com as coordenadas  $x_l$  definidas acima. Quando não houver perigo de confusão, usaremos a notação  $\psi_l(x)$  para  $\psi_l(x_l)$ , subentendendo que  $x$  é a coordenada na ligação  $l$ .

O operador de Schrödinger em  $\mathcal{G}$  consiste de operadores unidimensionais em cada ligação [13, 47]:

$$\mathcal{H}_l = \left( -i \frac{d}{dx} - A_l \right)^2 + V_l(x). \quad (2.6)$$

Aqui,  $V_l(x)$  é um potencial assumido ser não-negativo e suave no intervalo  $[0, \ell]$  e  $A_l$  são



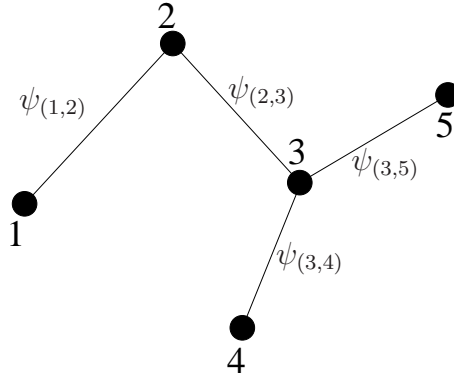


Figura 2.3: Um grafo  $\mathcal{G}(4,5)$  e as funções de onda em cada uma de suas ligações. As funções de onda precisam ser “casadas” através das condições de contorno em cada um dos vértices  $i = 1, 2, 3, 4$  do grafo.

os potenciais vetores magnéticos. Na literatura é bastante usual (mesmo em trabalhos enfocando caos quântico) tomar os potenciais  $V_l(x)$  iguais a zero. Sendo  $V_l(x) = 0$ , em cada ligação  $l$ , a componente  $\psi_l(x)$  da função de onda total  $\Psi$  é a solução da equação unidimensional

$$\left(-i\frac{d}{dx} - A_l\right)^2 \psi_l = k^2 \psi_l \quad \Rightarrow \quad \psi_l(x) = e^{-iA_l x} (c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}), \quad (2.7)$$

onde  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  e  $c_1$  e  $c_2$  constantes. Na Figura 2.3 mostramos esquematicamente essa construção para um grafo com  $V = 5$  vértices e  $L = 4$  ligações. Grafos com potenciais diferentes de zero ao longo das ligações são às vezes referidos como *grafos vestidos* [33, 34, 38, 42]. Ao longo desse trabalho sempre assumiremos  $V_l(x) = 0$ .

As funções de onda devem satisfazer as condições de contorno nos vértices, as quais asseguram continuidade e conservação de corrente de probabilidade. A imposição destas condições de contorno garantem que o operador seja auto-adjunto. O adjunto  $\mathcal{O}^\dagger$  de um operador  $\mathcal{O}$  é definido de tal forma que

$$\langle \phi | \mathcal{O} \psi \rangle = \langle \mathcal{O}^\dagger \phi | \psi \rangle \quad (2.8)$$

para todo  $\phi$  e  $\psi$ . Um operador  $\mathcal{O}$  é auto-adjunto se ele é seu próprio adjunto  $\mathcal{O}^\dagger$ , ou seja,  $\mathcal{O} = \mathcal{O}^\dagger$  [48]. Voltaremos a esse assunto na Seção 2.4 quando falarmos em interações pontuais gerais e lá mostraremos que em termos físicos isto implica que a evolução induzida pelo operador conserve probabilidade e os vértices não podem atuar como sumidouros ou fontes. A condição de continuidade requer que, em cada vértice  $i$ , a função de onda assuma um valor denotado por  $\varphi_i$  independente da ligação pela qual aproximamos do vértice. A conservação da corrente impõe uma condição nas derivadas das funções de onda nos vértices. As condições de contorno podem ser explicitamente especificadas da seguinte forma. Para todo vértice  $i = 1, \dots, V$ :

- Continuidade:

$$\psi_{i,j}(x)|_{x=0} = \varphi_i \quad \text{e} \quad \psi_{i,j}(x)|_{x=\ell_{i,j}} = \varphi_j \quad \text{para todo } i < j \text{ e } C_{i,j} \neq 0. \quad (2.9)$$

- Conservação de corrente:

$$\sum_{j < i} C_{i,j} \left( iA_{i,j} - \frac{d}{dx} \right) \psi_{j,i}(x)|_{x=\ell_{i,j}} + \sum_{j > i} C_{i,j} \left( -iA_{i,j} + \frac{d}{dx} \right) \psi_{i,j}(x)|_{x=0} = \gamma_i \varphi_i. \quad (2.10)$$

$\ell_{i,j}$  é o comprimento da ligação entres os vértices  $i$  e  $j$ . Em (2.10) o primeiro termo à esquerda representa as ligações chegando no vértice  $i$  ( $j < i$ ), enquanto que o segundo termo representa as ligações saindo do vértice  $i$  ( $j > i$ ). Os parâmetros  $\gamma_i$  são parâmetros livres que determinaram as condições de contorno. As condições de contorno em (2.9) e (2.10) tomam uma forma bem conhecida para vértices com valência  $v_i = 2$ , quando os potenciais são os mesmos nas duas ligações. Sem perda de generalidade, podemos colocar o vértice em  $x = 0$  e nesse caso a Equação (2.10) é dada explicitamente por

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left\{ \frac{d\psi_{i,j}}{dx} \Big|_{0+\epsilon} - \frac{d\psi_{j,i}}{dx} \Big|_{0-\epsilon} \right\} = \gamma_i \psi_i(0). \quad (2.11)$$

Esta é a bem conhecida condição de contorno para um potencial  $\delta$  de intensidade  $\gamma_i$ . Em livros de física esta condição de contorno é obtida pela integração da equação de Schrödinger ao longo de um intervalo  $2\epsilon$  centrado em  $x = 0$ . Este não é o caso quando estamos lidando com vértices mais complexos. Os caso especiais de  $\gamma_i = 0$  corresponde à condição de contorno de Neumann e  $\gamma_i = \infty$  à condição de contorno de Dirichlet.

A importância da condição de contorno de Neumann (também conhecida como condição de contorno de Kirchhoff) está no fato de que o espectro dos sistemas com valores finitos de  $\gamma_i$  aproximam ao espectro da condição de contorno de Neumann quando olhamos para energias maiores no espectro. Uma situação similar é bem conhecida para a equação de Schrödinger em domínios com contornos, onde condições de contorno intermediárias entre Dirichlet e Neumann são estudadas [49]. Note que, para o caso acima, com  $v_i = 2$  a condição de Neumann é trivial. De fato, (2.11) implica que a função de onda e a sua derivada sejam contínuas de tal forma que o ponto  $x = 0$  torna-se um ponto ordinário no intervalo. Assim, um vértice de Neumann com  $v_i = 2$  pode ser simplesmente apagado do grafo, sem qualquer efeito sobre o espectro ou sobre as funções de onda. O contrário também é verdadeiro. Qualquer grafo não-simples pode ser transformado em um grafo simples (sem laços ou múltiplas ligações) equivalente (com relação ao espectro e as funções de onda) pela adição de vértices de Neumann em cada laço e em cada ligação responsável pela múltipla conectividade.

A condição de contorno de Dirichlet implica que o valor da função de onda anula-se em todos os vértices. Isto isola as várias ligações e o espectro do grafo resume-se a união dos espectros de cada ligação, com a condição de contorno de Dirichlet em cada um dos terminais da ligação. As funções de onda neste caso são nulas em todas as ligações, exceto em uma ligação,  $l$ , onde

$$\psi_l = \frac{e^{iA_l x}}{\sqrt{\ell_l}} \operatorname{sen}\left(\frac{n_l \pi x}{\ell_l}\right), \quad k_n^{(l)} = \frac{n_l \pi}{\ell_l}, \quad \text{para todo } n_l \in \mathbb{N}^*, \quad (2.12)$$

onde  $\mathbb{N}^*$  representa o conjunto dos números naturais, excluindo zero. Nesse caso, o espectro do grafo é a união dos espectros individuais.

As condições de contorno mais gerais em um vértice de um grafo quântico (consistente com conservação de corrente de probabilidade [25]) são obtidas através de técnicas da extensão auto-adjunta [50, 51]. Seja um vértice  $V_i$  com  $L$  ligações, e [52, 53]  $\Psi_i = (\psi_{l_1}, \psi_{l_2}, \dots, \psi_{l=L})^T$  e  $\Psi'_i = (\psi'_{l_1}, \psi'_{l_2}, \dots, \psi'_{l=L})^T$ , a matriz transposta das funções de onda e de suas derivadas, respectivamente, no vértice  $V_i$ . A condição de contorno é especificada por matrizes  $A_i$  e  $B_i$  de ordem  $L \times N$ , onde  $A_i \Psi_i = B_i \Psi'_i$ . Asseguramos que o operador de Hamiltoniano seja auto-adjunto impondo conservação de corrente de probabilidade  $\Psi_i^\dagger \Psi'_i = \Psi'^{\dagger}_i \Psi_i$ . Como mostrado em [52, 53] a solução geral para este problema leva à  $A_i B_i^\dagger = B_i A_i^\dagger$ , resultando em  $L^2$  parâmetros reais e independentes para caracterizar a condição de contorno no vértice  $V_i$ . Em outras palavras, um vértice com as condições de contorno mais gerais consistente com conservação de fluxo é completamente determinado pelas suas amplitudes de espalhamento.

Finalmente notamos que o modelo acima pode ser considerado como uma generalização do modelo de Kronig-Penney [54] (que usa interações pontuais delta nos vértices) unidimensional múltiplo conectado [43].

## 2.3 A função de Green e sua forma semiclássica generalizada

As funções de Green são uma ferramenta especialmente importante na mecânica quântica [55], sendo definidas pela equação

$$[E - \mathcal{H}(\mathbf{x})]G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (2.13)$$

onde  $\mathcal{H}(\mathbf{x})$  é o operador Hamiltoniano

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}), \quad (2.14)$$

e  $E$  a energia. No apêndice **A** apresentamos uma discussão sobre as propriedades principais de  $G$ .

Recentemente tem havido um rápido e bem sucedido desenvolvimento na obtenção de funções de Green exatas e aproximadas. Entre as diferentes técnicas utilizadas, uma muito importante é a aproximação semiclássica, dada pela função de Green semiclássica de Van Vleck–Gutzwiller [32]. No apêndice **B** discutimos a metodologia utilizada para a obtenção da função de Green semiclássica.

Estudos mostram [56–58] que melhorias na função de Green semiclássica de Van Vleck–Gutzwiller [32] podem ser alcançadas escrevendo-se a função de Green em termos de somas sobre caminhos clássicos, mas incorporando-se efeitos quânticos locais através dos coeficientes de reflexão e transmissão do sistema. De fato, esta idéia foi usada com sucesso para estudar espalhamento por múltiplos potenciais em 1D [39, 40] e também no cálculo das autoenergias de poços unidimensionais simples e duplos [41, 59] dando origem a chamada função de Green semiclássica generalizada  $G^{(\text{s-gen})}$ . Esse nome é motivado pelo formato funcional de  $G^{(\text{s-gen})}$  ser muito parecido com a expressão usual da função de Green semiclássica (ver apêndice **B**, Equação (B.8)). A função de Green semiclássica generalizada  $G^{(\text{s-gen})}(x_f, x_i; E)$ , associada ao deslocamento de uma partícula com energia  $E$  entre os pontos  $x_i$  e  $x_f$ , dentro de uma região classicamente permitida, é dada por (em 1D)

$$G^{(\text{s-gen})}(x_f, x_i; E) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \sum_{\text{c.e.}} W_{\text{c.e.}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{\text{c.e.}}(x_f, x_i; k)\right]. \quad (2.15)$$

A soma acima é realizada sobre todos os possíveis caminhos de espalhamento (c.e.). Para cada c.e.,  $S_{\text{c.e.}}$  é a ação e  $W_{\text{c.e.}}$  é a amplitude semiclássica generalizada. A amplitude (ou peso)  $W_{\text{c.e.}}$  é construída da seguinte forma. Cada vez que a partícula choca-se contra um potencial local  $V$ , esta pode ser refletida ou transmitida. No primeiro caso,  $W_{\text{c.e.}}$  ganha um fator  $R$  (reflexão) e no segundo, ganha um fator  $T$  (transmissão). A  $W_{\text{c.e.}}$  total é dada pelo produto dos coeficientes quânticos  $R$  e  $T$  adquiridos a cada vez que a partícula é espalhada pelo potencial ao longo de cada c.e. particular. Apesar de não ser o intuito do presente trabalho discutir a dedução de (2.15), a qual é feita em detalhes em [39, 40], queremos comentar que  $G^{(\text{s-gen})}$  é obtida através de um procedimento recursivo, ou seja,  $G^{(\text{s-gen})}$  para  $n$  potenciais é obtida de  $G^{(\text{s-gen})}$  para  $n - 1$  potenciais. Estes detalhes no cálculo de (2.15), por exemplo, na obtenção de  $W_{\text{c.e.}}$ , serão feitos nos próximos Capítulos para o caso de grafos quânticos.

É importante salientar que a expressão (2.15) é exata quando o potencial é dado como

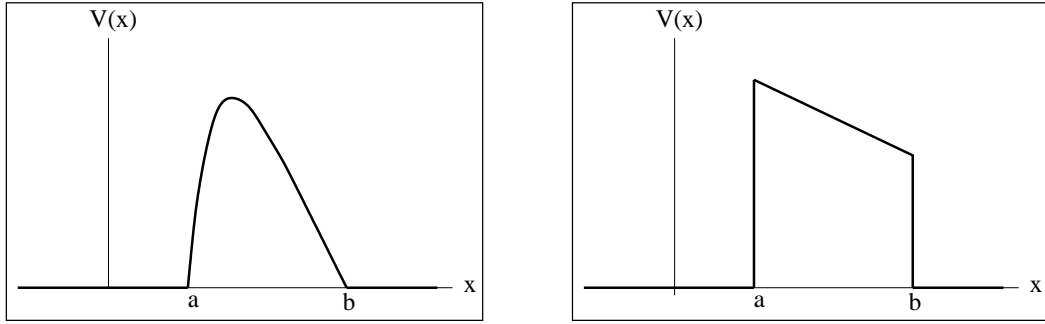


Figura 2.4: Exemplos de potenciais de suporte compacto

uma soma de potenciais de suporte compacto [39],

$$V(x) = \sum_{j=1}^N V^{(j)}(x), \quad (2.16)$$

onde  $V^{(j)}(x) = 0$  para  $x < a_j$  ou  $x > b_j$  com  $a_j < b_j$  e  $b_j < a_{j+1}$  ( $j = 1, 2, \dots, N - 1$ ). Exemplos de potenciais de suporte compacto são mostrados na Figura 2.4.

Como grafos quânticos podem ser pensados como uma rede de potenciais de suporte compacto, na verdade, interações pontuais, é de se esperar que a expressão acima forneça a função e Green exata para grafos. Na Seção 2.5 iremos mostrar que isto é verdade.

## 2.4 Interações pontuais gerais e a função de Green

Na construção da função de Green para grafos precisamos aplicar as diferentes condições de contorno de cada vértice ao longo de todo o grafo, porém podemos encarar os vértices como interações pontuais (ou seja, espalhadores) e traduzir essas condições de contorno em termos das amplitudes de transmissão e reflexão do processo. Vamos começar pelo caso de interações pontuais unidimensionais (na linha) e depois então generalizaremos para topologias arbitrárias.

É um fato bem conhecido que resolver a equação de Schrödinger unidimensional para um potencial delta situado na origem,  $\delta(x)$ , é equivalente à impor as condições de contorno ( $\psi'(x) \equiv d\psi/dx$ ) [60, 61]

$$\begin{pmatrix} \psi(0^+) \\ \psi'(0^+) \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(0^-) \\ \psi'(0^-) \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

onde os valores para os parâmetros são  $a = d = \omega = 1$ ,  $b = 0$  e  $c = \gamma$ , onde  $\gamma$  é a intensidade do potencial. Essa condição de contorno pode ser obtida, como vimos na Seção 2.2, impondo que a função de onda seja contínua em  $x = 0$ . Entretanto, o mesmo

não se aplica se o potencial em questão é a delta-linha,  $\delta'(x)$ : a condição de contorno satisfeita por  $\psi(x)$  não pode ser determinada a partir da equação de Schrödinger. A única condição *a priori* é que  $\psi'(x)$  seja contínua em  $x = 0$ . Por esta razão a extensão auto-adjunta é invocada [62, 63]. Usando tal procedimento, mostra-se que o potencial delta-linha  $\delta'$  é equivalente a resolver (2.17) com  $c = 0$ ,  $a = d = \omega = 1$  e  $b = \gamma$ .

Os dois exemplos acima não representam todas as possíveis interações pontuais unidimensionais. De fato, através da técnica da extensão auto-adjunta é mostrado que o caso mais geral é aquele no qual

$$|\omega| = 1 \quad \text{e} \quad ad - bc = 1, \quad \text{com} \quad a, b, c, d \quad \text{reais.} \quad (2.18)$$

Na verdade, as condições acima representam a situação mais geral onde há conservação de fluxo de probabilidade através da interação pontual (ver Apêndice C). Um aspecto importante associado a este caso geral é que não existe uma realização concreta para interações pontuais generalizadas. Em outras palavras, não é possível obter uma única função dependendo de  $(a, b, c, d, \omega)$  que reproduza todas as condições de contorno em (2.17) e (2.18). Então, não podemos escrever um Hamiltoniano  $H = H_0 + V(x)$ , pois não há uma forma simples para o potencial  $V(x)$ . Um procedimento diferente é representar uma interação pontual generalizada fazendo composição de triplas de funções delta e então tomar certos limites [64–66], o qual, também não pode ser colocado na forma de um potencial usual.

Porém, uma forma alternativa de caracterizar as condições de contorno (2.17) é através das amplitudes de espalhamento. Seja uma função de onda plana de número de onda  $k$  e incidente da esquerda (+) ou direita (−), escrita como

$$\psi^{(\pm)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} \exp[\pm ikx] + R^{(\pm)}(k) \exp[\mp ikx], & x \geq 0 \\ T^{(\pm)} \exp[\pm ikx] & x \leq 0. \end{cases} \quad (2.19)$$

$\psi$  satisfaz  $-d^2\psi(x)/dx^2 = k^2\psi(x)$  para  $x \neq 0$ . Substituindo a Equação (2.19) em (2.17), encontramos a seguinte forma para as amplitudes de espalhamento

$$R^{(\pm)} = \frac{c \pm ik(d - a) + bk^2}{-c + ik(d + a) + bk^2}, \quad T^{(\pm)} = \frac{2ik\omega^{\pm 1}}{-c + ik(d + a) + bk^2}. \quad (2.20)$$

Adicionalmente, impondo as condições [67],

$$\begin{aligned} |R^{(\pm)}|^2 + |T^{(\pm)}|^2 &= 1, & R^{(+)*}T^{(+)} + T^{(-)*}R^{(-)} &= 0, \\ R_k^{(\pm)*} &= R_{-k}^{(\pm)}, & T_k^{(\pm)*} &= T_{-k}^{(\mp)}, \end{aligned} \quad (2.21)$$

os parâmetros devem necessariamente obedecer a Equação (2.18). As condições em (2.21)

asseguram propriedades importantes, isto é, conservação de corrente de probabilidade e a existência do problema de espalhamento inverso (ver [67] para uma discussão detalhada). Adicionalmente, se impomos a invariância na reversão temporal, a qual é traduzida na relação  $T^{(+)} = T^{(-)}$ , então devemos ter  $\omega = \pm 1$ .

A partir de todos esses resultados vemos que existe uma equivalência completa em definir a interação pontual mais geral através de (2.17)-(2.18) ou especificar suas amplitudes de espalhamento (2.20)-(2.21). Observamos também que, eventualmente, podemos ter estados ligados para uma dada interação pontual dependendo dos parâmetros do potencial. Neste caso, as amplitudes quânticas  $R$  e  $T$  tem pólos na metade superior do plano complexo  $k$ , correspondendo aos autovalores. As autofunções podem ser obtidas a partir de uma extensão apropriada dos estados de espalhamento para aqueles valores de  $k$  [68].

A função de Green exata para potenciais arbitrários de suporte compacto foi obtida em [39], com uma extensão para potenciais mais gerais apresentada em [40]. Para a obtenção das funções de Green em [39], é necessário que  $R$  e  $T$  satisfaçam certas condições, que são as em (2.21). Assim, baseado em [39] podemos calcular a função de Green para interações pontuais gerais usando os coeficientes de reflexão e transmissão, os quais pela sua construção contém informações sobre as condições de contorno e são quantidades relevantes com uma interpretação física clara, sendo as quantidades medidas em situações reais [69, 70].

Então, de [39] podemos escrever a função de Green exata da seguinte forma. Definindo  $G_{+-}$  para  $x_f > 0 > x_i$ ,  $G_{-+}$  para  $x_i > 0 > x_f$ ,  $G_{++}$  para  $x_f, x_i > 0$  e  $G_{--}$  para  $x_f, x_i < 0$ , temos

$$\begin{aligned} G_{\pm\mp} &= \frac{m}{i\hbar^2 k} T^{(\pm)} \exp[ik|x_f - x_i|], \\ G_{\pm\pm} &= \frac{m}{i\hbar^2 k} [\exp[ik|x_f - x_i|] + R^{(\pm)} \exp[ik(|x_f| + |x_i|)]] . \end{aligned} \quad (2.22)$$

A vantagem do presente método é que pode ser facilmente usado para calcular funções de Green exatas para um número arbitrário (finito) de interações pontuais diferentes, tanto para uma linha infinita como para condições de contorno periódicas. Também podemos obter  $G$  para sistemas restritos tal como  $N$  potenciais numa meia-linha ou confinados em uma caixa infinita, com diferentes condições de contorno. Devemos mencionar que vários aspectos da reflexão e transmissão em interações pontuais têm sido discutidas em alguns contextos particulares, como, em potenciais dependentes do tempo [71], equação de Schrödinger não-linear [72] e fragmentação da função de onda por barreiras quânticas esparsas [73].

A técnica da função de Green semiclássica generalizada pode ser usada para o cálculo da função de Green para grafos quânticos bastante grandes [42]. Na próxima seção

mostraremos que a função de Green semiclássica generalizada fornece a função de Green exata para grafos quânticos.

## 2.5 Função de Green para grafos quânticos

Aqui queremos mostrar que a função de Green para grafos quânticos recai na forma apresentada em (2.15) para a função de Green semiclássica generalizada. Isto é importante pois a estrutura da função de Green semiclássica generalizada permite resolver problemas de forma recursiva, um aspecto muito importante na resolução de grafos quânticos gerais. Para isso vamos fazer o cálculo da função de Green usando sua expansão espectral (Apêndice A, Equação (A.17)) e então comparamos com a forma (2.15) para a função de Green semiclássica generalizada. Este cálculo representa a primeira contribuição inédita do nosso trabalho de doutorado.

Como já visto, um grafo é uma rede de  $V$  vértices conectados por  $L$  ligações, como mostra a Figura 2.5. Cada  $V_i$  ( $i = 1, \dots, V$ ) está ligado a  $L_i$  ( $\sum_i L_i = L$ ) ligações de comprimento  $\ell_{ij}$  ( $j \in \Gamma_i$ ). Se somente uma extremidade de uma ligação está ligada a um vértice, então dizemos que temos uma ligação semi-infinita. Em grafos fechados não há ligações semi-infinitas. Com discutido na Seção 2.2, ao longo de uma ligação, a função de onda  $\psi(x)$  é definida univocamente pela solução da equação de Schrödinger 1D. A função de onda total do sistema  $\Psi$  é dada pelas soluções parciais (em cada ligação) apropriadamente “casadas” pelas condições de contorno nos vértices, como vimos na Seção 2.2.

Considere agora um grafo com um único vértice  $V$  conectado a  $L$  ligações, Figura 2.5(c). O vértice  $V$  é interpretado como um potencial espalhador. Sendo  $\{\psi_n(x; \sigma), \psi_n^{(j)}(x; k)\}$  o grupo completo de soluções da equação de Schrödinger para este grafo com  $\psi_n(x; \sigma)$  e  $\psi_n^{(j)}(x; k)$  representando, respectivamente, a função de onda para os estados ligados e de espalhamento com energias  $E_\sigma$  e  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ , a função de Green associada ao deslocamento de uma partícula entre os pontos  $x_i$  e  $x_f$  com energia  $E$ , pode ser obtida através da expansão espectral da função de Green, dada pela Equação (A.17),

$$\begin{aligned} G(x_f, x_i; E) &= G^{(e.l.)}(x_f, x_i; E) + G^{(e.e.)}(x_f, x_i; E) \\ &= \sum_{\sigma} \frac{\psi_l(x_f, \sigma) \psi_n^*(x_i; \sigma)}{E - E_{\sigma}} + \int_0^{\infty} dk \sum_{j=1}^N \frac{\psi_l^{(j)}(x_f, k) \psi_n^{(j)*}(x_i, k)}{E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

onde  $G^{(e.l.)}$  representa a função de Green associada aos estados ligados (e.l.) e  $G^{(e.e.)}$  a função de Green associada aos estados de espalhamento (e.e.). A soma em  $j$  que aparece na equação acima é devido ao fato de precisarmos levar em conta a contribuição da função de onda de cada ligação  $j$  na ligação  $n$ . Isso é o equivalente ao que é feito no problema



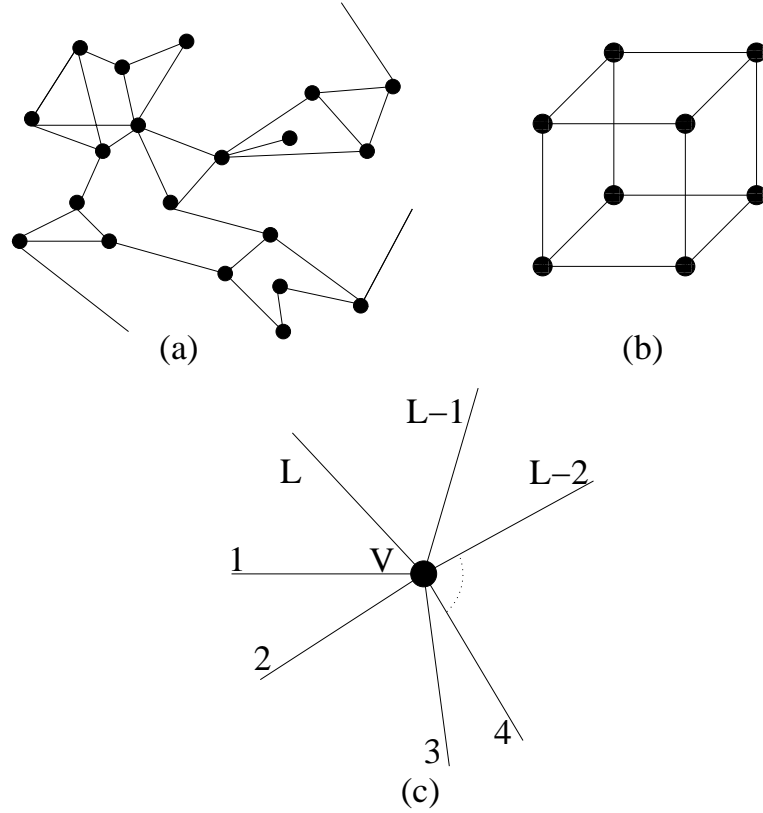


Figura 2.5: (a) Exemplo de um grafo quântico aberto, (b) fechado e (c) um grafo estrela com  $L$  ligações semi-infinitas.

1D onde temos duas ligações e levamos em conta duas soluções, uma que propaga-se da esquerda para a direita e a outra que propaga-se da direita para a esquerda [39–41].

A solução de espalhamento para uma onda plana de energia  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  chegando pela ligação  $j$  na ligação  $n$  é dada por (assumindo a origem no vértice  $V$ )

$$\psi_n^{(j)}(x; k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (\delta_{nj} \exp[-ikx] + S_{jn}(k) \exp[ikx]), \quad (2.24)$$

para  $n = 0, \dots, N$ . Aqui  $S_{nn} = R_n$  pode ser interpretado como o coeficiente de reflexão na ligação  $n$  e  $S_{jn} = T_{jn}$  como o coeficiente de transmissão da ligação  $j$  para a ligação  $n$ . A conservação da corrente de probabilidade no vértice  $V$  implica  $\mathbf{S}\mathbf{S}^\dagger = \mathbf{S}^\dagger\mathbf{S} = \mathbf{1}$  e das simetrias da equação de Schrödinger para potenciais reais, temos  $\mathbf{S}^\dagger(k) = \mathbf{S}(-k)$  [67]. Estas propriedades levam às seguintes relações para os coeficientes de espalhamento [42]

$$\begin{aligned} S_{jn}(k) &= S_{nj}^*(-k), \\ \sum_{j=1}^N S_{jl}(k) S_{jn}^*(k) &= \delta_{ln}, \end{aligned} \quad (2.25)$$

as quais são generalizações naturais das relações usuais para os coeficientes de espalha-

mento de espalhadores pontuais em uma linha [43, 67].

A função de Green com  $x_i$  na ligação  $n$  e  $x_f$  na ligação  $l$  é obtida inserindo (2.24) em (2.23), então ( $E = \hbar^2 \lambda^2 / (2m)$ )

$$\begin{aligned}
G_{ln}(x_f, x_i; \lambda) &= G^{(e.l.)}(x_f, x_i; E) \\
&+ \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{dk}{\lambda^2 - k^2} \{ \delta_{nl} \exp[-ik(x_f - x_i)] \\
&+ S_{nl}(k) \exp[ik(x_f + x_i)] + S_{ln}^*(k) \exp[-ik(x_f + x_i)] \\
&+ \sum_{j=1}^N S_{jm}(k) S_{jn}^*(k) \exp[ik(x_f - x_i)] \}. \tag{2.26}
\end{aligned}$$

Usando as relações em (2.25) a equação fica

$$\begin{aligned}
G_{ln}(x_f, x_i; \lambda) &= G^{(e.l.)}(x_f, x_i; E) \\
&+ \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dk}{\lambda^2 - k^2} \{ \delta_{nl} \exp[-ik(x_f - x_i)] \\
&+ S_{nl}(k) \exp[ik(x_f + x_i)] \}. \tag{2.27}
\end{aligned}$$

A integral envolvendo  $\exp[-ik(x_f - x_i)]$  na equação acima, leva a função de Green de uma partícula livre. Para a outra integral consideramos um contorno ao longo do eixo real fechado por um semicírculo infinito na metade superior do plano complexo. A contribuição dos pólos nos integrandos é devido ao denominador  $\lambda^2 - k^2$  e a possíveis singularidades de  $S_{nl}(k)$ . Se  $V$  não possui estados ligados então  $G^{(e.l.)} = 0$  e  $S_{nl}(k)$  não possui pólos. Para um grande número de casos os termos da integração resultantes dos pólos de  $S_{nl}(k)$  cancelam-se exatamente com  $G^{(e.l.)}$  [74–77], o que é mostrado rigorosamente para interações pontuais em [77]. Com isso em mente, a integração acima pode ser realizada e escrevendo o vetor de onda como  $k$ , a função de Green é dada por

$$G_{ln}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \{ \delta_{nl} \exp[ik|x_f - x_i|] + S_{nl}(k) \exp[ik(x_f + x_i)] \}. \tag{2.28}$$

Uma vez obtida a função de Green usando a expansão espectral, vamos agora mostrar que a função de Green semiclássica generalizada, Equação (2.15) fornece exatamente a Equação (2.28), portanto sendo exata nesse caso. A soma é realizada sobre todos os possíveis caminhos de espalhamento conectando a posição inicial da partícula em  $x_i$  na ligação  $n$  e posição final  $x_f$  na ligação  $l$ . Para cada caminho de espalhamento, a ação clássica é obtida da propagação livre ao longo das ligações que compõe o caminho, ou  $S_{c.e.} = kL_{c.e.}$ , com  $L_{c.e.}$  sendo o comprimento total do caminho de espalhamento. A amplitude  $W_{c.e.}$  é dada pelo produto dos coeficientes quânticos obtidos a cada vez que a partícula é espalhada por um vértice ao longo de um caminho.

Para uma partícula com  $x_i$  na ligação  $n$  e  $x_f$  na ligação  $l$  temos duas situações: (a) As ligações  $n$  e  $l$  coincidem e temos dois caminhos possíveis: propagação direta da partícula entre o ponto  $x_i$  e o ponto  $x_f$ , o que corresponde a  $\exp[ik|x_f - x_i|]$ ; propagação da partícula do ponto  $x_i$  até o vértice  $V$  onde é refletida e então propagação até o ponto  $x_f$ , o que corresponde a  $S_{nn}(k) \exp[ik(x_f + x_i)]$ , onde  $S_{nn}(k)$  é o coeficiente de reflexão. Assim a função de Green nessa situação fica,  $G_{nn}^{(\text{sgen})}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \{\exp[-ik|x_f - x_i|] + S_{nn}(k) \exp[ik(x_f + x_i)]\}$ ; (b) As ligações  $n$  e  $l$  não coincidem e temos somente um caminho: propagação da partícula do ponto  $x_i$  até o vértice aonde é transmitida para a ligação  $l$ , seguida da propagação até o ponto  $x_f$ , o que corresponde ao termo  $S_{nl}(k) \exp[ik(x_f + x_i)]$ , com  $S_{nl}(k)$  sendo o coeficiente de transmissão da ligação  $n$  para a ligação  $l$ . A função de Green fica  $G_{ln}^{(\text{sgen})}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \{S_{nl}(k) \exp[ik(x_f + x_i)]\}$ . Essas duas situações podem ser resumidas numa mesma equação como

$$G_{ln}^{(\text{sgen})}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \{\delta_{nl} \exp[ik|x_f - x_i|] + S_{nl}(k) \exp[ik(x_f + x_i)]\}, \quad (2.29)$$

que é exatamente o mesmo resultado que foi obtido usando a expansão espectral da função de Green, equação (2.28). É interessante mencionar a facilidade pela qual obtivemos a função de Green usando a fórmula da função de Green semiclássica generalizada para o grafo em comparação ao método da expansão espectral.

Para grafos mais complicados, com  $N$  vértices, podemos usar uma expansão perturbativa (ver Apêndice A). Neste caso recaímos em séries que novamente podem ser somadas exatamente e o resultado final para a função de Green fica [39]

$$G_{ln}(x_f, x_i; E) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \sum_{\text{c.e.}} W_{\text{c.e.}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{\text{c.e.}}(x_f, x_i; k)\right], \quad (2.30)$$

que tem exatamente a mesma estrutura da função de Green semiclássica generalizada da Equação (2.15). Isso mostra que a função de Green semiclássica generalizada fornece o resultado exato para grafos arbitrários [42]. A expressão em (2.30) é então dada por uma soma sobre todas as amplitudes de probabilidades de todos os possíveis caminhos conectando  $x_i$  a  $x_f$ .

Neste capítulo vimos a construção geral da função de Green em grafos. Mostramos que para um grafo arbitrário, sua função de Green exata pode ser escrita na forma (2.30) acima. Porém, no próximo Capítulo iremos discutir em detalhes o poder do método de função de Green e resolver grafos quânticos. Iremos mostrar com exemplos que as regras de construção de (2.30) permite desenvolvermos um método recursivo e assim resolver uma enorme gama de classes de sistemas de forma direta e eficiente. Iremos aplicar os procedimentos através de vários casos particulares.

## Estudo de grafos quânticos

Neste Capítulo pretendemos apresentar todos os detalhes de construção e técnicas de simplificação que a fórmula (2.15) permite para a obtenção de funções de Green para grafos arbitrários. Com o propósito de fazer isso de forma mais didática, iremos resolver casos particulares e discutiremos como usar o procedimento numa situação geral.

Para as discussões que faremos vamos adotar a seguinte notação:

- $r_V^{(l_i)}$  é o coeficiente de reflexão do vértice  $V$  na ligação  $l_i$ ;
- $t_V^{(l_i, l_j)}$  é o coeficiente de transmissão do vértice  $V$  da ligação  $l_i$  para a ligação  $l_j$ ;
- $P_j$  é a contribuição de uma família de caminhos;
- $G_{l_i l_j}(x_f, x_i; k)$  é a função de Green para uma partícula de energia  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  com ponto inicial  $x_i$  na ligação  $l_i$  e ponto final  $x_f$  na ligação  $l_j$ .

### 3.1 Como obter a função de Green para grafos quânticos

Primeiro, queremos exemplificar que as séries infinitas que aparecem na fórmula (2.15) são na verdade séries geométricas e portanto sempre podem ser somadas exatamente. Vamos considerar um grafo linear muito simples com dois vértices na Figura 3.1(a).

Vamos considerar o caso onde a partícula é transmitida através dos dois vértices. Para obtermos a função de Green, precisamos somar todos os possíveis caminhos de espalhamento para uma partícula sair do ponto  $x_i$  na ligação semi-infinita  $i$  e chegar ao ponto  $x_f$  na ligação semi-infinita  $f$ . A partícula deixa  $x_i$  vai até o vértice  $A$ . No vértice  $A$ , a

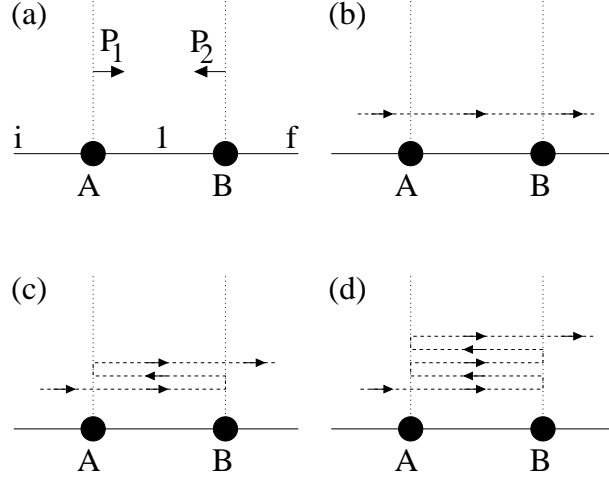


Figura 3.1: (a) Famílias de caminhos  $P_1$  e  $P_2$ . (b)-(d) Exemplos esquemáticos de caminhos de espalhamento possíveis.

partícula pode tunelar ou ser refletida. Como estamos interessados na função de Green com ponto de chegada  $x_f$  na ligação semi-infinita  $f$ , não consideramos o caso de reflexão, uma vez que nesse caso a partícula nunca mais retornaria à ligação semi-infinita  $f$ . Assim, considere a partícula tunelando o vértice  $A$ . Neste caminho,  $W_{ce}$  ganha uma contribuição  $t_A^{(i,1)}$ , sendo  $t_A^{(i,1)}$  o coeficiente de transmissão do vértice  $A$  da ligação semi-infinita  $i$  para a ligação 1. Entre os vértices  $A$  e  $B$  a partícula pode sofrer  $M$  múltiplas reflexões. A contribuição para  $W_{ce}$  é  $[r_A^{(1)}]^M [r_B^{(1)}]^M$ , onde  $r_A^{(1)}$  é o coeficiente de reflexão do vértice  $A$  na ligação 1 e  $r_B^{(1)}$  é o coeficiente de reflexão do vértice  $B$  na ligação 1. Em seguida, a partícula tunela o vértice  $B$  e  $W_{ce}$  ganha a contribuição  $t_B^{(1,f)}$ , sendo  $t_B^{(1,f)}$  o coeficiente de transmissão do vértice  $B$  da ligação 1 para a ligação semi-infinita  $f$ , finalmente chegando em  $x_f$ . As Figuras 3.1(b)-(d) mostram três exemplos esquemáticos para estes caminhos de espalhamento, onde as contribuições para  $W_{ce}$  são dadas por: (b)  $t_A^{(i,1)} t_B^{(1,f)}$ , (c)  $t_A^{(i,1)} r_A^{(1)} r_B^{(1)} t_B^{(1,f)}$  e (d)  $t_A^{(i,1)} [r_A^{(1)}]^2 [r_B^{(1)}]^2 t_B^{(1,f)}$ , respectivamente.

A função de Green é dada então pela soma de todas as contribuições desses possíveis caminhos de espalhamento. Usando a Equação (2.15) com a origem no vértice  $A$ , a função de Green é escrita como

$$\begin{aligned}
 G(x_f, x_i, k) &= \frac{m}{ik\hbar^2} \left\{ t_A^{(i,1)} \exp[-ikx_i] \right. \\
 &\quad \times \sum_{M=0}^{\infty} [r_A^{(1)}]^M [r_B^{(1)}]^M \exp[ik(2M+1)\ell] \\
 &\quad \left. \times t_B^{(1,f)} \exp[ikx_f] \right\}. \tag{3.1}
 \end{aligned}$$

Como os coeficientes de reflexão e transmissão possuem módulo entre 0 e 1, a soma acima sempre converge e é de fato uma série geométrica. Realizando a soma acima, podemos

escrever

$$G(x_f, x_i, k) = \frac{m}{ik\hbar^2} \frac{t_A^{(i,1)} t_B^{(1,f)} \exp[ik\ell]}{1 - r_A^{(1)} r_B^{(1)} \exp[ik\ell]} \exp[ik(x_f - x_i)]. \quad (3.2)$$

Nesta expressão, podemos associar formalmente um coeficiente de transmissão global, que abrange ambos os vértices  $A$  e  $B$ , representando um vértice efetivo de coeficiente de transmissão

$$T_{if} = \frac{t_A^{(i,1)} t_B^{(1,f)} \exp[ik\ell]}{1 - r_A^{(1)} r_B^{(1)} \exp[ik\ell]}. \quad (3.3)$$

Sendo assim, agrupando adequadamente vários vértices, podemos então encarar esses vários vértices como se fossem um único vértice com um coeficiente de transmissão e reflexão global. Esse é um dos procedimentos de simplificação que podemos utilizar para obter a função de Green para grafos mais complicados (o que será discutido na Seção 3.2).

O procedimento acima consiste em simplificar os infinitos caminhos individuais de espalhamento e então fazer a soma dos mesmos, mas quando o número de vértices aumenta isso pode ser bastante tedioso e trabalhoso. No entanto, existe uma forma mais simples e direta de realizar a soma acima. Esta forma consiste em uma classificação diagramática, organizando os caminhos possíveis em famílias e então fazemos a soma das famílias.

Para ilustrar esta idéia, tendo em mente a Figura 3.1(a), considere a partícula deixando o ponto  $x_i$ , chegando ao vértice  $A$  e tunelando. Note que todos os possíveis caminhos de espalhamento deixando o vértice  $A$ , na direção de  $B$ , podem ser agrupados em uma família de caminhos  $P_1$  como mostra a Figura 3.1(a).  $P_1$  representa: i) propagação até o vértice  $B$  seguido de reflexão, e a partir daí todos possíveis caminhos de espalhamento deixando o vértice  $B$  em direção ao vértice  $A$  (uma família de caminhos que chamaremos de  $P_2$ , Figura 3.1(a)); ii) propagação até o vértice  $B$ , transmissão no vértice  $B$  e chegando em  $x_f$ . Assim a forma de  $G(x_f, x_i, E)$  é

$$G(x_f, x_i, k) = \frac{m}{ik\hbar^2} \exp[ik(-x_i)] t_A^{(i,1)} P_1, \quad (3.4)$$

com  $P_1$  escrito como

$$P_1 = \exp[ik\ell] \left\{ r_B^{(1)} P_2 + t_B^{(1,f)} \exp[ik(x_f)] \right\}. \quad (3.5)$$

Notamos então que  $P_2$ , por sua vez, pode ser escrito em termos de  $P_1$  como

$$P_2 = \exp[ik\ell] r_A^{(1)} P_1. \quad (3.6)$$

Em (3.5) o ‘{’ representa a “bifurcação” dos caminhos. A forma algébrica equivalente de (3.5) é

$$P_1 = \exp[ik\ell] (r_B^{(1)} P_2 + t_B^{(1,f)} \exp[ik(x_f)]). \quad (3.7)$$

É interessante notar que a tarefa de realizar a soma dos caminhos de espalhamento foi substituída por um sistema de equações lineares envolvendo as famílias de caminhos  $P_1$  e  $P_2$ . Isso acontece devido a natureza recursiva do problema. Resolvendo (3.6) e (3.7) para  $P_1$  temos

$$P_1 = \frac{t_B^{(1,f)} \exp[ik\ell] \exp[ikx_f]}{1 - r_A^{(1)} r_B^{(1)} \exp[ik\ell]}. \quad (3.8)$$

Substituindo (3.8) em (3.4) obtemos novamente a equação (3.2). Este método é outro procedimento de simplificação que será utilizado na obtenção das funções de Green e será discutido na próxima Seção e, na verdade, é um tipo de forma diagramática de Feynman para calcular  $G$ .

## 3.2 Procedimentos de simplificação

Como mencionado anteriormente, para obter a função de Green exata é necessário encontrar todos os infinitos possíveis caminhos que começam em  $x_i$  e alcançam  $x_f$  para identificar as amplitudes de espalhamento ao longo de cada caminho e finalmente somar todas as contribuições como indicado na equação (2.15). Para um grafo quântico geral, esta tarefa pode ser bastante complicada. Porém, a natureza do problema permite o uso de dois procedimentos que simplificam drasticamente os cálculos: (i) reagrupar os infinitos caminhos em famílias finitas de caminhos e (ii) dividir um grafo grande em blocos menores, resolver cada bloco separadamente e juntar as soluções apropriadamente. Para a solução de um grafo geral, utilizamos os dois procedimentos em conjunto.

Em seguida exemplificamos os dois procedimentos mencionados acima analisando em detalhes alguns casos fornecendo uma explanação detalhada da nossa metodologia.

### 3.2.1 Reagrupando os caminhos

Um grafo em cruz é mostrado na Figura 3.2(a). Este grafo possui três vértices, duas ligações e duas ligações semi-infinitas. Vamos primeiro discutir a função de Green para uma partícula de número de onda  $k$ , inicialmente na ligação semi-infinita  $i$  ( $-\infty < x_i < 0$ ) alcançar a ligação semi-infinita  $f$  ( $0 < x_f < +\infty$ ). Observamos que o vértice  $O$  é a origem (extremo) da ligação semi-infinita  $f$  ( $i$ ). Na soma em (2.15), devemos levar em conta todos os possíveis múltiplos caminhos de espalhamento, os quais são as múltiplas reflexões e transmissões entre as ligações 1 e 2 de comprimentos  $\ell_1$  e  $\ell_2$ , respectivamente. Na Figura 3.2(b) mostramos exemplos esquemáticos de possíveis caminhos inicialmente em  $i$  e alcançando  $f$ : (i) transmissão direta de  $i$  para  $f$  através do vértice central  $O$ , tal que  $W = t_O^{(i,f)}$  e  $L_{c.e.} = x_f - x_i$ ; (ii) transmissão para a ligação 1, uma reflexão no vértice  $A$  e

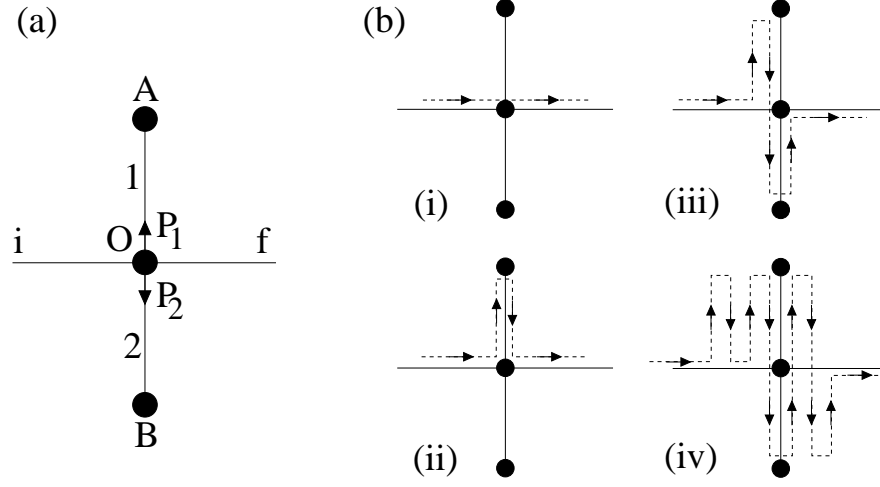


Figura 3.2: (a) Um grafo em cruz. Os  $P_j$ 's representam todos os caminhos iniciando no vértice  $O$  ao longo da ligação  $j$  e finalmente tunelando  $O$  para alcançar a ligação semi-infinita  $f$ . (b) Quatro exemplos esquemáticos de caminhos possíveis.

transmissão no vértice central  $O$  para a ligação semi-infinita  $f$ , então  $W = t_O^{(i,1)} r_A^{(1)} t_O^{(1,f)}$  e  $L_{c.e.} = x_f - x_i + 2\ell_1$ ; (iii) transmissão para a ligação 1, uma reflexão em  $A$ , transmissão para a ligação 2, uma nova reflexão, agora no vértice  $B$  e finalmente transmissão para a ligação semi-infinita  $f$  através do vértice  $O$ , então  $W = t_O^{(i,1)} r_A^{(1)} t_O^{(1,2)} r_B^{(2)} t_O^{(2,f)}$  e  $L_{c.e.} = x_f - x_i + 2(\ell_1 + \ell_2)$ ; (iv) transmissão para a ligação 1, reflexão em  $A$ , reflexão em  $O$ , reflexão em  $A$ , transmissão em  $O$  para a ligação 2, reflexão em  $B$ , transmissão em  $O$  para a ligação 1, reflexão em  $A$ , outra transmissão para a ligação 2 e finalmente transmissão para a ligação semi-infinita  $f$  através do vértice  $O$ , então  $W = t_O^{(i,1)} [r_A^{(1)}]^3 r_O^{(1)} [t_O^{(1,2)}]^2 [r_B^{(2)}]^2 t_O^{(2,1)} t_O^{(2,f)}$  e  $L_{c.e.} = x_f - x_i + 6\ell_1 + 4\ell_2$ .

Essa proliferação infinita de caminhos pode ser classificada e então somada de uma forma simples pelo fato dos caminhos poderem ser fatorados. Como para cada caminho temos inicialmente uma propagação de  $x_i$  para  $O$  ao longo de  $i$  e finalmente a propagação de  $O$  para  $x_f$  ao longo de  $f$ , podemos escrever a função de Green como

$$G_{fi}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} T_{ij} \exp[ik(x_f - x_i)]. \quad (3.9)$$

Aqui,  $T_{ij}$  inclui todas as contribuições resultantes dos caminhos na região  $A—O—B$  do grafo com (ver Figura 3.2)

$$T_{ij} = \begin{cases} t_O^{(i,f)} \\ t_O^{(i,1)} P_1 \\ t_O^{(i,2)} P_2 \end{cases} \quad (3.10)$$

Novamente ‘ $\{$ ’ representa as bifurcações dos caminhos. A sua forma algébrica equivalente é

$$T_{ij} = t_O^{(i,f)} + t_O^{(i,1)} P_1 + t_O^{(i,2)} P_2. \quad (3.11)$$



O primeiro termo é simplesmente a amplitude para o caminho direto, isto é, o tunelamento direto de  $i$  para  $f$  através de  $O$ . O segundo (terceiro) termo representa o tunelamento da ligação semi-infinita  $i$  para a ligação 1 (2) e todos os possíveis caminhos subsequentes que a partícula pode seguir até alcançar a ligação semi-infinita  $f$ . A maneira de obtermos as famílias de caminhos,  $P_1$  e  $P_2$ , é bastante simples. Considere, por exemplo,  $P_1$  (Figura 3.2(a)): todos os caminhos nesta família começam em  $O$ , viajam ao longo da ligação 1 em direção ao vértice  $A$ , sofre uma reflexão em  $A$  e então retorna para o vértice  $O$ . Esta parte do caminho resulta em um termo  $r_A^{(1)} \exp[2ik\ell_1]$ . Uma vez em  $O$ , uma partícula pode ser refletida, então voltando a fazer parte da família de caminhos  $P_1$ , ou tunelar para a ligação 2, passando a fazer parte da família de caminhos  $P_2$ , ou ainda tunelar para a ligação semi-infinita  $f$ , assim terminando o caminho. O mesmo tipo de análise pode ser feita para  $P_2$ , logo podemos escrever

$$\left\{ \begin{array}{l} P_1 = r_A^{(1)} \exp[2ik\ell_1] \\ P_2 = r_B^{(2)} \exp[2ik\ell_2] \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} r_O^{(1)} P_1 \\ t_O^{(1,2)} P_2 \\ t_O^{(1,f)} \\ r_O^{(2)} P_2 \\ t_O^{(2,1)} P_1 \\ t_O^{(2,f)} \end{array} \right. , \quad (3.12)$$

com a forma algébrica equivalente de  $P_1$  e  $P_2$  sendo

$$\left\{ \begin{array}{l} P_1 = r_A^{(1)} \exp[2ik\ell_1] (r_O^{(1)} P_1 + t_O^{(1,2)} P_2 + t_O^{(1,f)}) \\ P_2 = r_B^{(2)} \exp[2ik\ell_2] (r_O^{(2)} P_2 + t_O^{(2,1)} P_1 + t_O^{(2,f)}) \end{array} \right. . \quad (3.13)$$

Resolvendo o sistema de equações (3.13) temos a solução final para o problema,

$$\begin{aligned} P_1 &= \frac{1}{g} \left\{ r_A^{(1)} t_O^{(1,f)} \exp[2ik\ell_1] + r_A^{(1)} r_B^{(2)} (t_O^{(1,2)} t_O^{(2,f)} - r_O^{(2)} t_O^{(1,f)}) \exp[2ik(\ell_1 + \ell_2)] \right\} \\ P_2 &= \frac{1}{g} \left\{ r_B^{(2)} t_O^{(2,f)} \exp[2ik\ell_2] + r_A^{(1)} r_B^{(2)} (t_O^{(2,1)} t_O^{(1,f)} - r_O^{(1)} t_O^{(2,f)}) \exp[2ik(\ell_1 + \ell_2)] \right\}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

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

Similarmente, podemos considerar o caso onde ambos os pontos inicial e final estão na ligação semi-infinita  $i$ . Neste caso, a função de Green é escrita

$$G_{ii}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \{ \exp[ik|x_f - x_i|] + R \exp[-ik(x_f + x_i)] \}, \quad (3.15)$$

com

$$R = r_O^{(i)} + t_O^{(i,1)} P_1 + t_O^{(i,2)} P_2. \quad (3.16)$$

As expressões para os  $P$ 's são a mesmas daquelas em (3.14) onde, entretanto, devemos substituir  $t_O^{(n,f)} \leftrightarrow t_O^{(n,i)}$ ,  $n = 1, 2$ . Na linguagem de teoria de espalhamento, estaríamos simplesmente mudando o canal de saída da partícula.

Finalmente consideramos o caso onde o ponto final  $x_f$  está em uma das ligações, vamos supor na ligação 1. Coloquemos a origem da ligação 1 no vértice  $O$ , então  $0 \leq x_f \leq \ell_1$ . A função de Green é escrita

$$G_{1i}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \exp[-ikx_i] (t_O^{(i,1)} P_1 + t_O^{(i,2)} P_2). \quad (3.17)$$

Aqui não devemos levar em conta qualquer caminho onde a partícula sofre tunelamento para a ligação semi-infinita  $f$ , pois nesse caso ela nunca alcançaria o ponto  $x_f$  na ligação 1. Assim, os  $P$ 's são dados por

$$\begin{cases} P_1 = \exp[ikx_f] + r_A^{(1)} \exp[2ik\ell_1] (\exp[-ikx_f] + r_O^{(1)} P_1 + t_O^{(1,2)} P_2) \\ P_2 = r_B^{(2)} \exp[2ik\ell_2] (r_O^{(2)} P_2 + t_O^{(2,1)} P_1). \end{cases} \quad (3.18)$$

Resolvendo a equação acima e inserindo os resultados na expressão (3.17) para  $G_{1i}$ , obtemos o resultado final

$$G_{1i}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{2\hbar^2 k} \frac{\Gamma}{g} (\exp[ik(x_f - x_i)] + r_A^{(1)} \exp[ik(2\ell_1 - x_f - x_i)]), \quad (3.19)$$

com  $\Gamma = \{t_O^{(i,1)} + r_B^{(2)} (t_O^{(i,2)} t_O^{(2,1)} - r_O^{(2)} t_O^{(i,1)}) \exp[2ik\ell_2]\}$  e

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

Caso tivéssemos colocado o ponto  $x_f$  na ligação 2 o resultado seria o mesmo acima com a troca dos índices  $1 \leftrightarrow 2$ .

### 3.2.2 Separando um grafo em blocos

Nesta seção iremos discutir como simplificar os cálculos para um grafo grande pela decomposição deste em blocos. Para isso, vamos considerar como exemplo o grafo em árvore mostrado na Figura 3.3(a): uma ligação semi-infinita conectada ao vértice  $O$ , do qual emergem 3 ligações, 1, 2 e 3, terminando, respectivamente, nos vértices  $A$ ,  $B$  e  $C$ . Cada um destes vértices, por sua vez, está conectado a outras três ligações semi-infinitas.

Iremos analisar somente a função de Green para a posição inicial  $-\infty < x_i < 0$ , na ligação semi-infinita  $i$ , e posição final  $0 < x_f < +\infty$  na ligação semi-infinita  $f$ , a qual está conectada ao vértice  $A$ , Figura 3.3(a). Observamos que nesta situação particular não precisamos considerar qualquer caminho no qual a partícula, antes de chegar à ligação

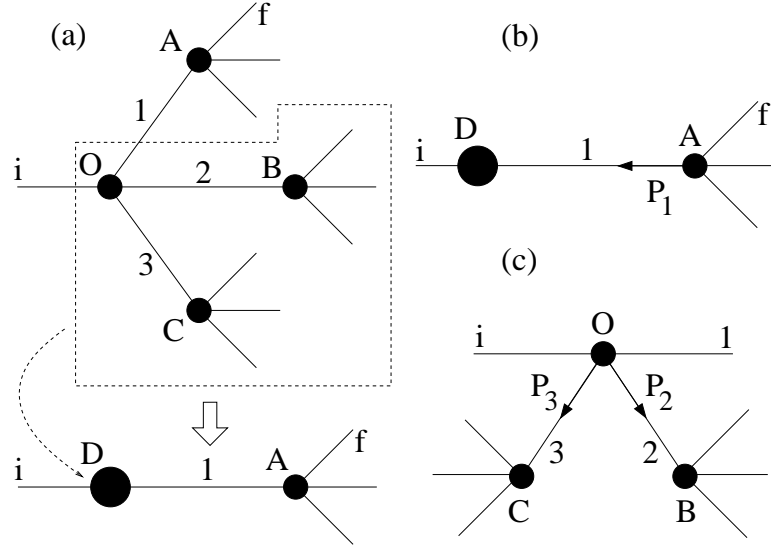


Figura 3.3: (a) Um grafo em árvore. Tomando a região  $C—O—B$  com um único vértice  $D$ , o grafo original e reduzido a um grafo linear como ilustrado em (b). No grafo reduzido em (b),  $P_1$  representa a família de caminhos que sofrem múltiplas reflexões entre  $D$  e  $A$  e finalmente sofre tunelamento no vértice  $A$ . Em (c) mostramos o grafo auxiliar para o cálculo de  $r_D^{(1)}$  e  $t_D^{(i,1)}$ .

semi-infinita  $f$ , atinja qualquer outra ligação semi-infinita, pois nestes casos a partícula deixaria o grafo, não alcançando a ligação semi-infinita  $f$ .

Nosso primeiro passo para simplificar a solução do problema é encarar a região marcada por linhas pontilhadas na Figura 3.3(a) como um único vértice efetivo  $D$ . Toda a informação sobre a estrutura interna dessa região está contida nas amplitudes quânticas  $r_D^{(1)}$  e  $t_D^{(i,1)}$ . Assim, o grafo original foi reduzido a um grafo linear como mostrado na Figura 3.3(b). Considerando o grafo na Figura 3.3(b), a função de Green procurada pode ser escrita como

$$G_{fi}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} T_{if} \exp[ik(x_f - x_i)], \quad (3.20)$$

com  $T_{if} = t_D^{(i,1)} \exp[ik\ell_1](r_A^{(1)} P_1 + t_A^{(1,f)})$ . Da discussão na Seção anterior a família de caminhos  $P_1$  é dada por  $P_1 = r_D^{(1)} \exp[2ik\ell_1](r_A^{(1)} P_1 + t_A^{(1,f)})$ , ou

$$P_1 = \frac{r_D^{(1)} t_A^{(1,f)}}{1 - r_D^{(1)} r_A^{(1)} \exp[2ik\ell_1]} \exp[2ik\ell_1]. \quad (3.21)$$

Ainda precisamos determinar os coeficientes  $t_D^{(i,1)}$  e  $r_D^{(1)}$ . Fazemos isso com a ajuda do grafo quântico auxiliar da Figura 3.3(c). Lembramos que  $t_D^{(i,1)}$  ( $r_D^{(1)}$ ) representa a contribuição dos caminhos para a partícula ir da ligação semi-infinita  $i$  (ligação 1) para a ligação 1 no bloco  $B—O—C$ . Analisando a Figura 3.3(c) e comparando com a Figura 3.2(a) notamos que são iguais, assim temos que  $t_D^{(i,1)} = t_O^{(i,1)} + t_O^{(i,3)} P_3 + t_O^{(i,2)} P_2$  e

$r_D^{(1)} = r_O^{(1)} + t_O^{(1,3)} P_3 + t_O^{(1,2)} P_2$ , onde os  $P$ 's obedecem

$$\begin{cases} P_3 = r_C^{(3)} \exp[2ikl_3](r_O^{(3)} P_3 + t_O^{(3,2)} P_2 + t_O^{(3,1)}) \\ P_2 = r_B^{(2)} \exp[2ikl_2](r_O^{(2)} P_2 + t_O^{(2,3)} P_3 + t_O^{(2,1)}) \end{cases} \quad (3.22)$$

A solução de (3.22) é dada por (3.14) com as substituições apropriadas dos índices  $A \rightarrow C$ ,  $1 \rightarrow 3$  e  $f \rightarrow 1$ .

### 3.3 Estudo de diferentes casos

Uma grande vantagem em escrever a função de Green em termos de  $r$ 's e  $t$ 's gerais em cada vértice é que especificando valores apropriados para estas amplitudes quânticas podemos obter a solução de alguns grafos em termos de outros. Atribuindo  $r_N^{(i)} = 0$  e  $t_N^{(i,j)} = 1$  para o nó  $N$  é equivalente a remover esse vértice do grafo. Por outro lado, atribuindo o valor  $t_N^{(i,j)} = 0$  estamos removendo a ligação  $j$  do grafo.

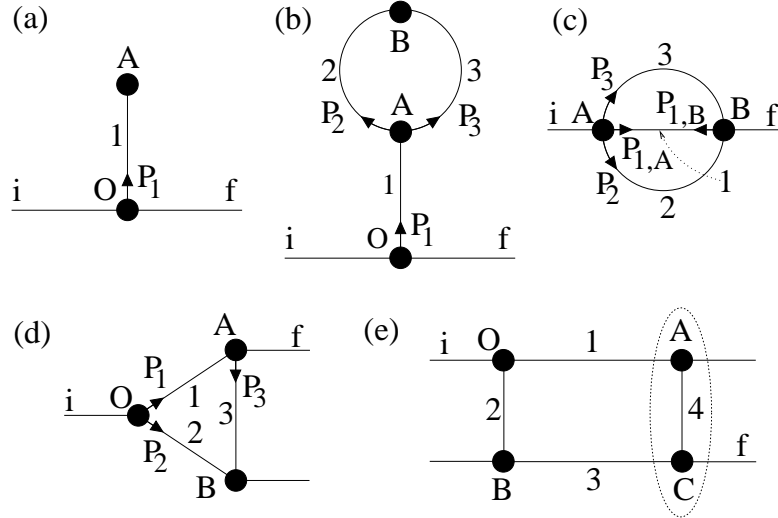


Figura 3.4: Vários grafos diferentes: (a) um grafo com três ligações, (b) o mesmo grafo (a) mas agora com o vértice A com uma estrutura interna, (c) um pequeno grafo complexo, (d) e (e) são exemplos de grafos onde a solução do primeiro pode ser usada no segundo.

Vamos considerar o grafo na Figura 3.4(a). A função de Green exata é obtida atribuindo os valores  $t_O^{(i,2)} = t_O^{(1,2)} = r_B^{(2)} = 0$  nas soluções do grafo em cruz da Figura 3.2. Da mesma forma, a solução para o grafo 3.4(b), se os pontos finais não estiverem nas ligações 2 e 3, é obtida da função de Green exata para o grafo na Figura 3.4(a). Para isto basta considerar a região  $A-B-A$  como um único vértice, digamos  $C$ , e realizar a substituição  $r_A^{(1)} \rightarrow r_C$ . Da Figura 3.4(b), vemos que  $r_C$  é dado por  $r_C = r_A^{(1)} + t_A^{(1,2)} P_2 + t_A^{(1,3)} P_3$  com

os  $P$ 's obtidos de

$$\begin{cases} P_2 = r_B^{(2)} \exp[2ik\ell_2](r_A^{(2)} P_2 + t_A^{(2,3)} P_3 + t_A^{(2,1)}) \\ \quad + t_B^{(2,3)} \exp[ik(\ell_2 + \ell_3)](r_A^{(3)} P_3 + t_A^{(3,2)} P_2 + t_A^{(3,1)}) \\ P_3 = r_B^{(3)} \exp[2ik\ell_3](r_A^{(3)} P_3 + t_A^{(3,2)} P_2 + t_A^{(3,1)}) \\ \quad + t_B^{(3,2)} \exp[ik(\ell_2 + \ell_3)](r_A^{(2)} P_2 + t_A^{(2,3)} P_3 + t_A^{(2,1)}). \end{cases} \quad (3.23)$$

Para o grafo na Figura 3.4(c), considere o caso onde ambos os pontos inicial e final estão na ligação 1, com  $0 < x_i, x_f < \ell_1$ . Definimos  $r_C$  ( $t_C$ ) como as amplitudes quânticas para uma partícula que chega ao vértice  $A$  pela ligação 1, sofre todo o múltiplo espalhamento nas ligações 2 e 3 e finalmente sai pelo vértice  $A$  ( $B$ ) para a ligação 1. Da mesma forma, definimos  $r_D$  e  $t_D$  como os amplitudes para uma partícula que chega no vértice  $B$ . Então, temos que

$$\begin{aligned} G_{11}(x_f, x_i; k) &= \frac{m}{i\hbar^2 k} \left\{ \exp[ik|x_f - x_i|] + \exp[ik(\ell_1 - x_i)](r_D P_{1,B} + t_D P_{1,A}) \right. \\ &\quad \left. + \exp[ikx_i](r_C P_{1,A} + t_C P_{1,B}) \right\}, \end{aligned} \quad (3.24)$$

onde os  $P$ 's são dados por

$$\begin{cases} P_{1,A} = \exp[ikx_f] + \exp[ik\ell_1](r_D P_{1,B} + t_D P_{1,A}) \\ P_{1,B} = \exp[ik(\ell_1 - x_f)] + \exp[ik\ell_1](r_C P_{1,A} + t_C P_{1,B}). \end{cases} \quad (3.25)$$

Resolvendo o sistema acima, a função de Green (3.24) é escrita como

$$\begin{aligned} G_{11}(x_f, x_i; k) &= \frac{m}{i\hbar^2 k g} \left\{ g \exp[ik|x_f - x_i|] \right. \\ &\quad + r_C \exp[ik(x_f + x_i)] + r_D \exp[ik(2\ell_1 - x_f + x_i)] \\ &\quad + r_C r_D \exp[ik(2\ell_1 + x_f - x_i)] + r_C r_D \exp[ik(2\ell_1 - x_f + x_i)] \\ &\quad + (1 - t_C \exp[ik\ell_1]) \exp[ik(\ell_1 + x_f - x_i)] \\ &\quad \left. + (1 - t_D \exp[ik\ell_1]) \exp[-ik(\ell_1 - x_f + x_i)] \right\}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

com  $g = (1 - t_C \exp[ik\ell_1])(1 - t_D \exp[ik\ell_1]) - r_C r_D \exp[2ik\ell_1]$ . Finalmente, as amplitudes são dadas por  $r_C = r_A^{(1)} + t_A^{(1,2)} P_2 + t_A^{(1,3)} P_3$ , onde

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

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

$$\begin{cases} P_2 = r_B^{(2)} \exp[2ik\ell_2](r_A^{(2)}P_2 + t_A^{(2,3)}P_3) \\ \quad + t_B^{(2,3)} \exp[ik(\ell_2 + \ell_3)](r_A^{(3)}P_3 + t_A^{(3,2)}P_2) + \exp[ik\ell_2]t_B^{(2,1)} \\ P_3 = r_B^{(3)} \exp[2ik\ell_3](r_A^{(3)}P_3 + t_A^{(3,2)}P_2) \\ \quad + t_B^{(3,2)} \exp[ik(\ell_2 + \ell_3)](r_A^{(2)}P_2 + t_A^{(2,3)}P_3) + \exp[ik\ell_3]t_B^{(3,1)} \end{cases} \quad (3.28)$$

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

Para ambas as Figuras 3.4(d) e 3.4(e), assumindo que os pontos inicial e final estão nas ligações semi-infinitas  $i$  e  $f$ , respectivamente, a função de Green é simplesmente

$$G_{fi}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} T_{if} \exp[ik(x_f + x_i)]. \quad (3.29)$$

Aqui consideramos que a origem de cada ligação semi-infinita está localizada no vértice correspondente. O coeficiente  $T_{if}$  é então dado por  $T_{if} = t_O^{(i,1)}P_1 + t_O^{(i,2)}P_2$ . Para o caso da Figura 3.4(d),  $P_1$  e  $P_2$  são obtidos do seguinte sistema algébrico

$$\begin{cases} P_1 = r_A^{(1)} \exp[2ik\ell_1](r_O^{(1)}P_1 + t_O^{(1,2)}P_2) + \exp[ik\ell_1](t_A^{(1,3)}P_3 + t_A^{(1,f)}) \\ P_2 = r_B^{(2)} \exp[2ik\ell_2](r_O^{(2)}P_2 + t_O^{(2,1)}P_1) \\ \quad + t_B^{(2,3)} \exp[ik(\ell_2 + \ell_3)](r_A^{(3)}P_3 + t_A^{(3,f)}) \\ \quad + t_B^{(2,3)}t_A^{(3,1)} \exp[ik(\ell_1 + \ell_2 + \ell_3)](r_O^{(2)}P_2 + t_O^{(2,1)}P_1) \\ P_3 = r_B^{(3)} \exp[2ik\ell_3](r_A^{(3)}P_3 + t_A^{(3,f)}) \\ \quad + t_B^{(3,2)} \exp[ik(\ell_2 + \ell_3)](r_O^{(2)}P_2 + t_O^{(2,1)}P_1) \\ \quad + r_B^{(3)}t_A^{(3,1)} \exp[ik(\ell_1 + 2\ell_3)](r_O^{(1)}P_1 + t_O^{(1,2)}P_2). \end{cases} \quad (3.30)$$

Acima, a família de caminhos  $P_3$  auxiliar é inserida para simplificar a montagem do sistema de equações, bem como sua solução. Este procedimento é sempre possível. De forma geral, para cada ligação  $j$  podemos associar uma família de caminhos  $P_j$ .

Para o grafo na Figura 3.4(e) podemos usar o mesmo grupo de equações se tratarmos a região compreendida pelos vértices  $A$  e  $C$  como um único vértice, como é ilustrado pelas linhas pontilhadas nessa mesma Figura. Neste caso, usando os procedimentos previamente discutidos, precisamos simplesmente fazer as seguintes substituições no sistema

de equações (3.30) ou em sua solução

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

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

Como podemos perceber, os resultados para um grafo podem ser usados de forma recursiva na solução de outros grafos mais complicados. Até o momento apresentamos somente soluções analíticas, na próxima seção apresentaremos alguns resultados numéricos.

## 3.4 Cálculo de autoestados e espalhamento em grafos abertos

### 3.4.1 Autoestados

Considere novamente o grafo quântico com três ligações na Figura 3.4(a). A forma explícita da função de Green para este grafo com  $x_i$  na ligação semi-infinita  $i$  e  $x_f$  na ligação semi-infinita  $f$  é dada por

$$G_{fi}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 kg} \left\{ t_O^{(i,f)} + r_A^{(1)} (t_O^{(i,1)} t_O^{(1,f)} - r_O^{(1)} t_O^{(i,f)}) \exp[2ik\ell_1] \right\} \exp[ik(x_f - x_i)], \quad (3.31)$$

com  $g = 1 - r_O^{(1)} r_A^{(1)} \exp[2ik\ell_1]$ . E, para ambos  $x_i$  e  $x_f$  ( $x_f > x_i$ ) na ligação 1, temos

$$\begin{aligned}
G_{11}(x_f, x_i; k) &= \frac{m}{i\hbar^2 kg} (\exp[-ikx_i] + r_O^{(1)} \exp[ik\ell_1] \exp[-ik(\ell_1 - x_i)]) \\
&\quad \times (\exp[ikx_f] + r_A^{(1)} \exp[ik\ell_1] \exp[ik(\ell_1 - x_f)]), \quad (3.32)
\end{aligned}$$

com  $g = 1 - r_O^{(1)} r_A^{(1)} \exp[2ik\ell_1]$ . Os estados ligados são calculados a partir dos resíduos de  $G(x_f, x_i; k)$ . Os pólos, ou seja, os autovalores  $k_n$  de  $G_{11}(x_f, x_i; k)$  estão todos contidos no termo  $1/g$  [25], devido às propriedades gerais das funções de Green, como discutido no Apêndice A.

Como um exemplo, considere como condição de contorno no vértice  $O$ , uma interação  $\delta$  generalizada [25], e no vértice  $A$  a condição de contorno  $\psi'(A) = \lambda\psi(A)$ . Então o

coeficiente de reflexão no vértice  $O$  é dado por ( $\hbar = m = 1$ )

$$r_O^{(1)} = r_O^{(i)} = r_O^{(f)} = r_O = \frac{2\gamma - (N-2)ik}{Nik - 2\gamma} \quad (3.33)$$

e o coeficiente de transmissão é

$$t_O^{(i,1)} = t_O^{(1,i)} = t_O^{(i,f)} = t_O^{(f,i)} = t_O = \frac{2ik}{Nik - 2\gamma}, \quad (3.34)$$

onde  $N = 3$  (o número de ligações) e  $\gamma$  é a intensidade da  $\delta$ . Para o vértice  $A$  temos  $r_A^{(1)} = (ik - \lambda)/(ik + \lambda)$ . Como o sistema é aberto, somente existirão autoestados se as condições de contorno nos vértices e os valores dos parâmetros utilizados permitam que o sistema suporte autoestados, por exemplo, como é o caso de uma delta quando  $\gamma < 0$ . É um fato conhecido que qualquer pólo dos coeficientes de espalhamento na metade superior do plano complexo  $k$ , ao longo do eixo imaginário representa um autovalor [67] da interação pontual. Por exemplo, para uma  $\delta$  em 1D com intensidade  $\gamma$  negativa (uma  $\delta$  atrativa), o coeficiente de transmissão é  $t_\delta = 2ik/(2ik - 2\gamma)$  e a energia  $E = \hbar^2 k^2/(2m)$  é negativa para  $k = -i\gamma$  [61, 76] que é o pólo de  $t_\delta$ . Desta forma, os autovalores são obtidos fazendo  $k = ik_n$  na igualdade  $g = 0$ . Obtemos a seguinte equação transcendental para os autovalores

$$\left(\frac{\gamma + k_n}{\gamma + 3k_n}\right) \left(\frac{\lambda + k_n}{\lambda - k_n}\right) \exp[-2k_n \ell_1] = 1. \quad (3.35)$$

Usando a fórmula

$$\lim_{E \rightarrow E_n} \frac{(E - E_n)}{g} = \frac{\hbar^2}{2m} \lim_{k \rightarrow k_n} \frac{(k^2 - k_n^2)}{g} = \frac{\hbar^2 k_n}{m g'_n}, \quad (3.36)$$

onde usamos a regra l'Hôpital e  $g'_n = \left. \frac{dg}{dk} \right|_{k=k_n}$ , os resíduos da equação (3.31) são

$$\begin{aligned} \psi_n^{(f)}(x_f) \psi_n^{(i)*}(x_i) &= \lim_{k \rightarrow k_n} (k^2 - k_n^2) G(x_f, x_i; k) \\ &= \frac{1}{i g'_n} \left\{ \left( \frac{2k_n}{3k_n + \gamma} \right) \exp[+k_n x_i] \right\} \left\{ \left[ 1 + \left( \frac{k_n + \lambda}{k_n - \lambda} \right) \exp[-2k_n \ell_1] \right] \exp[-k_n x_f] \right\} \end{aligned} \quad (3.37)$$

e, para a equação (3.32), encontramos

$$\begin{aligned} \psi_n^{(1)}(x_f) \psi_n^{(1)*}(x_i) &= \lim_{k \rightarrow k_n} (k^2 - k_n^2) G(x_f, x_i; k) \\ &= \frac{1}{i g'_n} \left\{ \exp[k_n x_i] - \left( \frac{k_n + \gamma}{3k_n + \gamma} \right) \exp[-k_n \ell] \exp[k_n(\ell_1 - x_i)] \right\} \\ &\quad \times \left\{ (\exp[-k_n x_f] + \left( \frac{k_n + \lambda}{k_n - \lambda} \right) \exp[-k_n \ell] \exp[-k_n(\ell_1 - x_f)]) \right\}, \end{aligned} \quad (3.38)$$



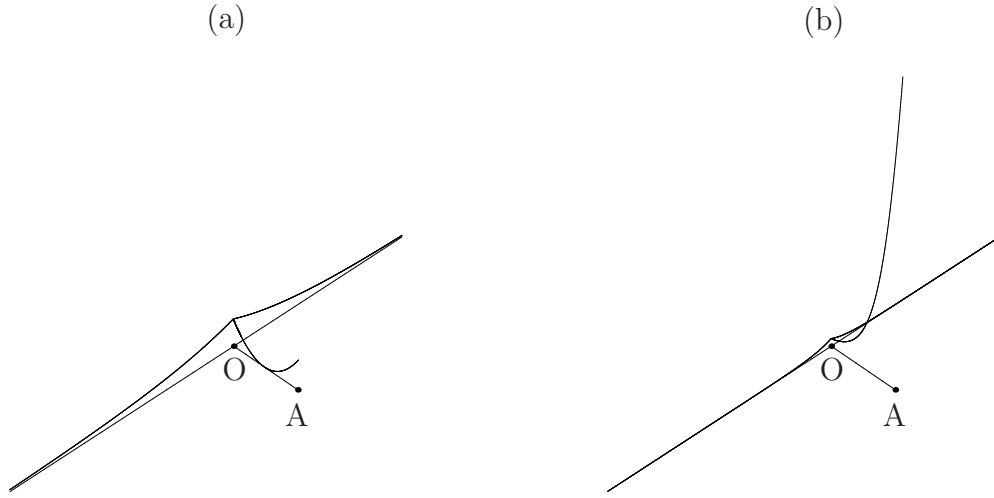


Figura 3.5: As funções de onda para o grafo de três ligações da Figura 3.4(a) com uma  $\delta$  de intensidade  $\gamma = -3,0$  no vértice  $O$ ,  $\ell = 1,0$  e condição de contorno  $\psi'(A) = \lambda\psi(A)$  no vértice  $A$  com  $\lambda = 2,0$  (a) para o primeiro autoestado com  $k_1 = 0,463618$  e (b) para o segundo autoestado com  $k_2 = 2,022448$ . Notamos que o primeiro autoestado está mais espalhado pelo grafo e é gerado pela delta atrativa no vértice  $O$ , enquanto que o segundo autoestado está mais localizado no vértice  $A$ .

com o termo  $\frac{1}{ig'_n}$  acima fornecendo a constante de normalização correta para a função de onda total do sistema  $|\Psi|^2$ . Assim, as funções de onda são dadas por

$$\psi_n^{(i)}(x) = \psi_n^{(f)}(x) = \mathcal{N} \left[ 1 + \left( \frac{k_n + \lambda}{k_n - \lambda} \right) \exp[-2k_n \ell_1] \right] \exp[-k_n x], \quad (3.39)$$

$$\psi_n^{(1)}(x) = \mathcal{N} \left[ \exp[-k_n x] + \left( \frac{k_n + \lambda}{k_n - \lambda} \right) \exp[-k_n(2\ell_1 - x)] \right], \quad (3.40)$$

onde  $\mathcal{N}$  é a constante de normalização. Os resultados acima são exatamente os mesmos daqueles obtidos pela solução da equação de Schrödinger.

Encontramos um caso interessante para os valores de  $\gamma = -3,0$ ,  $\ell_1 = 1,0$  e  $\lambda = 2,0$  onde temos dois autoestados. O primeiro autoestado, com  $k_1 = 0,463618$ , que é gerado pela delta atrativa e o segundo, com  $k_2 = 2,022448$ , que é gerado pela condição de contorno no vértice  $A$ . Na Figura 3.5 mostramos os gráficos das funções de onda obtidas através da função de Green. Como é esperado, notamos que a função de onda para o autoestado de menor energia encontra-se mais espalhada pelo gráfico, enquanto o de maior energia está mais localizado no vértice  $A$ .

### 3.4.2 Espalhamento

Para grafos quânticos abertos,  $G$  pode ser identificada como a amplitude total de espalhamento. Ainda considerando o grafo da Figura 3.4(a), a função de Green em (3.31) pode ser colocada na forma geral

$$G_{fi}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} T_{if} \exp[ik(x_f - x_i)]. \quad (3.41)$$

Assim,  $|T_{if}|^2$ , que depende dos coeficientes de reflexão e transmissão de cada vértice, é a probabilidade total para uma partícula com vetor de onda  $k$  incidente pela ligação semi-infinita  $i$  ser transmitida para a ligação semi-infinita  $f$ . Na Figura 3.6 mostramos o comportamento de  $|T_{if}|^2$  com função de  $k$  para  $\lambda = 1.0$ ,  $\gamma = 1.0$  e  $\ell_1 = 1.0$ .

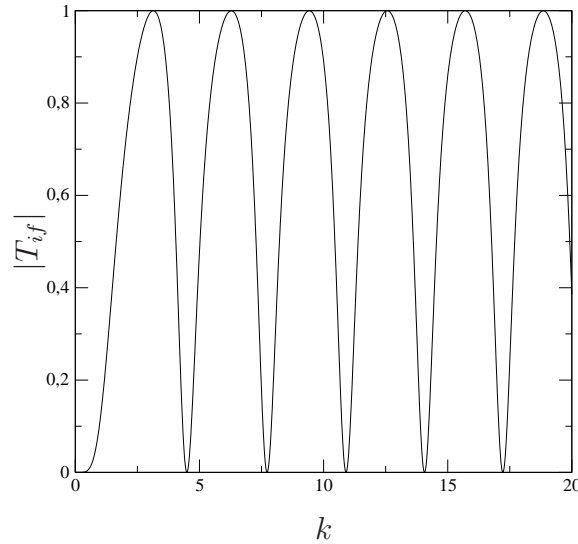


Figura 3.6: Probabilidade de espalhamento para o grafo de três ligações da Figura 3.4(a) com uma  $\delta$  de intensidade  $\gamma = 1.0$  no vértice  $O$ ,  $\ell_1 = 1.0$  e condição de contorno  $\psi'(A) = \lambda\psi(A)$  no vértice  $A$  com  $\lambda = 1.0$

## 3.5 Grafos quânticos representativos: o cubo

A função de Green para grafos quânticos fechados pode ser obtida pelo procedimento de reagrupamento discutido nas seções anteriores. Exemplificaremos este procedimento na obtenção da função de Green para o grafo cúbico quântico da Figura 3.7(a), com as ligações (arestas) de comprimento  $\ell$ . Na Figura 3.7(b) mostramos uma representação planar para o grafo cúbico quântico. Considere o caso onde as posições inicial e final estejam na ligação 1. Nosso primeiro passo para simplificar a solução do problema é tomar as regiões marcadas por linhas tracejadas na Figura 3.7(c) como dois vértices  $I$  e  $J$ , Figura 3.7(d). O passo seguinte é tomar estes dois vértices como sendo um único

vértice  $K$ , com coeficientes  $R$  e  $T$ . Toda a informação da estrutura interna do vértice estará contida nestes coeficientes. Assim, reduzimos o grafo original a um simples grafo circular. Considerando a Figura 3.7(e), com  $x_i$  e  $x_f (> x_i)$  na ligação 1, a função de Green procurada pode ser escrita como

$$G_{11}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 kg} \left\{ \exp[ik(x_f - x_i)] + \exp[ikx_i](RP_{1K} + TP_{2K}) \right. \\ \left. + \exp[ik(\ell - x_i)](RP_{2K} + TP_{1K}) \right\}, \quad (3.42)$$

com  $P_{1K}$  e  $P_{2K}$  dados por

$$\begin{cases} P_{1K} = \exp[ikx_f] + \exp[ik\ell](RP_{2K} + TP_{1K}) \\ P_{2K} = \exp[ik(\ell - x_f)] + \exp[ik\ell](RP_{1K} + TP_{2K}). \end{cases} \quad (3.43)$$

Resolvendo os sistema acima, a função de Green (3.42) fica,

$$G_{11}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 kg} \left\{ (1 - T \exp[ik\ell]) \exp[ik(x_f - x_i)] \right. \\ \left. + R(\exp[ik(x_f - x_i)] + \exp[ik(2\ell - x_f - x_i)]) \right. \\ \left. + [T + (R^2 - T^2) \exp[ik\ell]] \exp[ik(\ell - x_f + x_i)] \right\}, \quad (3.44)$$

com  $g = (1 - T \exp[ik\ell])^2 - R^2 \exp[2ik\ell]$ .

Precisamos determinar os coeficientes  $R$  e  $T$ . Isso é feito com a ajuda do grafo auxiliar na Figura 3.7(f). Primeiro, vamos relembrar que  $R$  ( $T$ ) representa a contribuição dos caminhos para uma partícula ir da ligação 1 para a ligação 1 pela reflexão (transmissão) no vértice  $K$ . Analisando a Figura 3.7(f), temos que

$$T = t_I^{(1,3)} \exp[ik\ell](r_J^{(3)} P_3 + t_J^{(3,9)} P_9 + t_J^{(3,11)} P_{11} + t_J^{(3,1)}) \\ + t_I^{(1,9)} \exp[ik\ell](r_J^{(9)} P_9 + t_J^{(9,3)} P_3 + t_J^{(9,11)} P_{11} + t_J^{(9,1)}) \\ + t_I^{(1,11)} \exp[ik\ell](r_J^{(11)} P_{11} + t_J^{(11,3)} P_3 + t_J^{(11,3)} P_{11} + t_J^{(11,1)}), \quad (3.45)$$

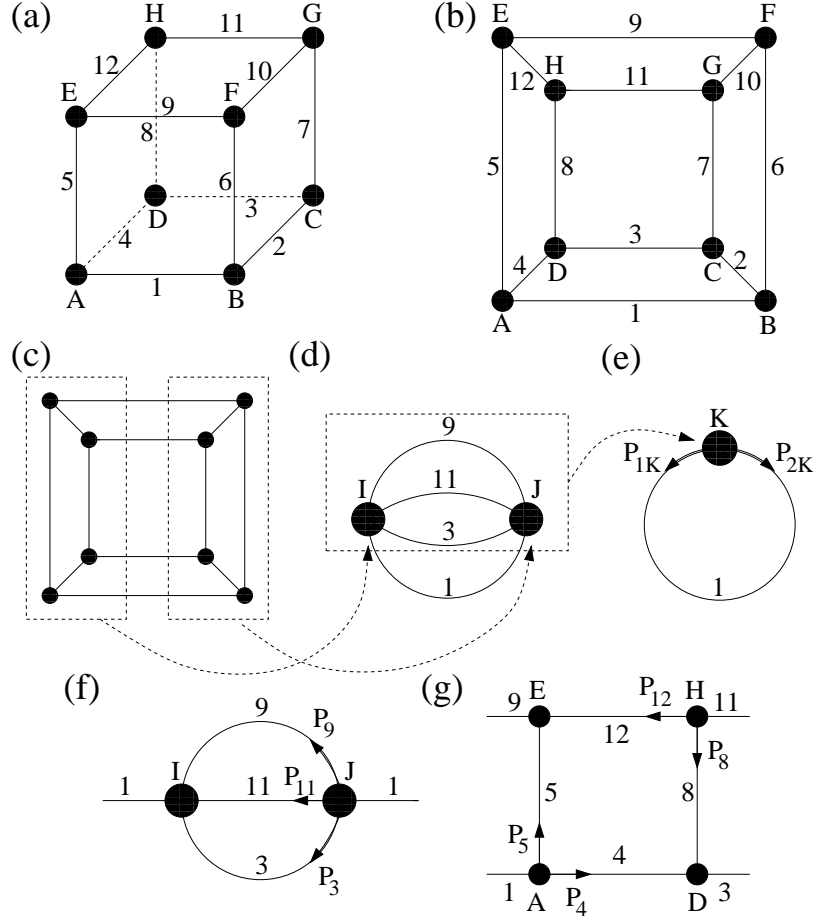


Figura 3.7: (a) Grafo cúbico. As letras são os índices dos vértices e os números os índices das arestas. (b) Uma representação planar do grafo cúbico. (c)-(e) mostra o procedimento de reagrupamento dos vértices, (f) grafo auxiliar para a determinação de  $R$  e  $T$  e (g) a estrutura interna do vértice  $I$ .

onde os  $P$ 's são

$$\left\{ \begin{array}{l} P_3 = r_I^{(3)} \exp[2ikl](r_J^{(3)} P_3 + t_J^{(3,9)} P_9 + t_J^{(3,11)} P_{11} + t_J^{(3,1)}) \\ \quad + t_I^{(3,9)} \exp[2ikl](r_J^{(9)} P_9 + t_J^{(9,3)} P_3 + t_J^{(9,11)} P_{11} + t_J^{(9,1)}) \\ \quad + t_I^{(3,11)} \exp[2ikl](r_J^{(11)} P_{11} + t_J^{(11,3)} P_3 + t_J^{(11,9)} P_9 + t_J^{(11,1)}) \\ P_9 = r_I^{(9)} \exp[2ikl](r_J^{(9)} P_9 + t_J^{(9,3)} P_3 + t_J^{(9,11)} P_{11} + t_J^{(9,1)}) \\ \quad + t_I^{(9,3)} \exp[2ikl](r_J^{(3)} P_3 + t_J^{(3,9)} P_9 + t_J^{(3,11)} P_{11} + t_J^{(3,1)}) \\ \quad + t_I^{(9,11)} \exp[2ikl](r_J^{(11)} P_{11} + t_J^{(11,3)} P_3 + t_J^{(11,9)} P_9 + t_J^{(11,1)}) \\ P_{11} = r_I^{(11)} \exp[2ikl](r_J^{(11)} P_{11} + t_J^{(11,3)} P_3 + t_J^{(11,9)} P_9 + t_J^{(11,1)}) \\ \quad + t_I^{(11,3)} \exp[2ikl](r_J^{(3)} P_3 + t_J^{(3,9)} P_9 + t_J^{(3,11)} P_{11} + t_J^{(3,1)}) \\ \quad + t_I^{(11,9)} \exp[2ikl](r_J^{(9)} P_9 + t_J^{(9,3)} P_3 + t_J^{(9,11)} P_{11} + t_J^{(9,1)}) \end{array} \right. \quad (3.46)$$

E para  $R$ ,

$$R = r_I^{(1)} + t_I^{(1,3)} P_3 + t_I^{(1,9)} P_9 + t_I^{(1,11)} P_{11}, \quad (3.47)$$

onde os  $P$ 's são os mesmos da equação (3.46), com a troca dos índices  $I \leftrightarrow J$ .

Finalmente, precisamos determinar os coeficientes  $r_{I(J)}$  e  $t_{I(J)}$  em termos dos coeficientes de cada vértice. Devido a simetria do cubo, os coeficientes dos vértices  $I$  e  $J$  possuem a mesma solução, então iremos somente discutir a solução do vértice  $I$ . Olhando para a Equação (3.46), pode parecer que existem muitos coeficientes quânticos para serem calculados, mas de fato isso não é verdade. Devido à simetria da estrutura interna do vértice  $I$ , somente três coeficiente precisam ser calculados:  $r_I^{(1)}$ ,  $t_I^{(1,3)}$  e  $t_I^{(1,11)}$ , Figura 3.7(f). Da Figura 3.7(g), podemos escrever

$$r_I^{(1)} = r_A^{(1)} + t_A^{(1,4)} P_4 + t_A^{(1,5)} P_5, \quad (3.48)$$

onde

$$\left\{ \begin{array}{l} P_4 = r_D^{(4)} \exp[2ik\ell] (r_A^{(4)} P_4 + t_A^{(4,5)} P_5 + t_A^{(4,1)}) \\ \quad + t_D^{(4,8)} \exp[2ik\ell] (r_H^{(8)} P_8 + t_H^{(8,12)} P_{12}) \\ P_5 = r_E^{(5)} \exp[2ik\ell] (r_A^{(5)} P_5 + t_A^{(5,4)} P_4 + t_A^{(5,1)}) \\ \quad + t_E^{(5,12)} \exp[2ik\ell] (r_H^{(12)} P_{12} + t_H^{(12,8)} P_8) \\ P_8 = t_D^{(8,4)} \exp[2ik\ell] (r_A^{(4)} P_4 + t_A^{(4,5)} P_5 + t_A^{(4,1)}) \\ \quad + r_D^{(8)} \exp[2ik\ell] (r_H^{(8)} P_8 + t_H^{(8,12)} P_{12}) \\ P_{12} = t_E^{(12,5)} \exp[2ik\ell] (r_A^{(5)} P_5 + t_A^{(5,4)} P_4 + t_A^{(5,1)}) \\ \quad + r_E^{(12)} \exp[2ik\ell] (r_H^{(12)} P_{12} + t_H^{(12,8)} P_8). \end{array} \right. \quad (3.49)$$

E

$$t_I^{(1,3)} = \exp[ik\ell] \{ t_A^{(1,4)} (r_D^{(4)} P_4 + t_D^{(4,8)} P_8 + t_D^{(4,3)}) + t_A^{(1,5)} (r_E^{(5)} P_5 + t_E^{(5,12)} P_{12}) \}, \quad (3.50)$$

com os mesmo  $P$ 's dados pelo sistema de equações (3.49), com a troca dos índices  $A \leftrightarrow B$ ,  $1 \leftrightarrow 3$  e  $5 \leftrightarrow 8$ . Finalmente,

$$t_I^{(1,11)} = t_A^{(1,4)} P_4 + t_A^{(1,5)} P_5, \quad (3.51)$$

novamente como os mesmos  $P$ 's dados pelo sistema de equações (3.49), com a troca do índices  $A \leftrightarrow H$ ,  $1 \leftrightarrow 11$ ,  $4 \leftrightarrow 8$  e  $5 \leftrightarrow 12$ .

### 3.5.1 Estados ligados

Vamos obter os estados ligados a partir da função de Green usando a já discutida interação  $\delta$  como condição de contorno em cada um dos vértices do grafo cúbico. Para simplificar vamos usar a mesma intensidade  $\gamma$  para a  $\delta$  em todos os vértices. Com isso, todos coeficientes de reflexão são iguais a  $r = (\gamma - (N - 2)ik)/(Nik - \gamma)$  e todos os coeficientes de transmissão são iguais a  $t = 2ik/(Nik - \gamma)$ , com  $N = 3$ , o número de ligações em cada vértice. Como já foi discutido, os autovalores são os pólos da função

Estado	k
1	0.7944961
2	1.4636884
3	2.0660811
4	3.1415927
5	3.3405048
6	4.4483350
7	5.1165344
8	6.2831853
9	6.3874619
10	7.5585595

Tabela 3.1: Os dez primeiros valores de  $k$  calculados numericamente a partir de  $g = 0$  para o grafo cúbico quântico usando como condição de contorno uma interação  $\delta$  em cada vértice, de intensidade  $\gamma = 1.0$

de Green, que são obtidos fazendo  $g = 0$ . Na Tabela 3.1 mostramos os dez primeiros autovalores para o grafo cúbico quântico.

Com o intuito de comparar os autovalores encontrados através da função de Green, resolvemos a equação de Schrödinger para o grafo cúbico quântico. Em cada ligação  $i$  a componente da função de onda total  $\Psi$  é a solução da equação de Schrödinger unidimensional

$$-\frac{d^2\psi^{(i)}(x)}{dx^2} = k^2\psi^{(i)}(x), \quad (3.52)$$

onde  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ . As soluções são na forma

$$\psi^{(i)}(x) = A_i \exp[ikx] + B_i \exp[-ikx], \quad (3.53)$$

com  $i = 1, \dots, 12$ . Os coeficientes  $A_i$  e  $B_i$  são determinados pelas condição de contorno nos vértices. Considerando em cada vértice como condição de contorno uma interação  $\delta$  de intensidade  $\gamma$  temos  $\psi^{(i)}(x_n) = \psi^{(j)}(x_n) = \psi_n$  ( $x = x_n$  é a coordenada do vértice  $n$ ), para todo  $i, j$  encontrado o vértice  $n$ , e  $\sum_i \psi'^{(i)}(x_n) = \gamma\psi_n$ . Então, usando esta condição de contorno para o grafo cúbico quântico e colocando a origem das ligações nos vértices  $A, C, F$  e  $H$ , obtemos um sistema de 24 equações. Resolvendo este sistema obtemos os autovalores e autofunções. Pela análise das soluções encontramos quatro grupos de autofunções. No primeiro grupo, com número quântico  $\nu = (1 + 4m)$ ,  $m = 0, 1, 2, \dots$ , as autofunções são todas iguais em todas as ligações. O segundo grupo, com números quânticos  $\nu = (2 + 4m)$ ,  $m = 0, 1, 2, \dots$ , possui  $\psi^{(1)} = \psi^{(5)}$ ,  $\psi^{(2)} = \psi^{(12)}$ ,  $\psi^{(3)} = \psi^{(8)}$ ,

$\psi^{(6)} = \psi^{(9)}$  e  $\psi^{(7)} = \psi^{(11)}$ . O terceiro grupo, com números quânticos  $\nu = (3 + 4m)$ ,  $m = 0, 1, 2, \dots$ , possui também  $\psi^{(1)} = \psi^{(5)}$ ,  $\psi^{(2)} = \psi^{(12)}$ ,  $\psi^{(3)} = \psi^{(8)}$ ,  $\psi^{(6)} = \psi^{(9)}$  e  $\psi^{(7)} = \psi^{(11)}$ , mas as autofunções estão mais localizadas nas ligações 2 e 12. Finalmente, o quarto grupo, com números quânticos  $\nu = (4 + 4m)$ ,  $m = 0, 1, 2, \dots$  possui  $\psi^{(1)} = \psi^{(3)} = \psi^{(5)} = \psi^{(8)}$ ,  $\psi^{(2)} = \psi^{(12)}$ ,  $\psi^{(6)} = \psi^{(7)} = \psi^{(8)} = \psi^{(11)}$  e  $B_i = -A_i$ . Os autovalores encontrados aqui são exatamente iguais àqueles obtidos a partir do pólos da função de Green para o grafo cúbico quântico.

### 3.5.2 Espalhamento

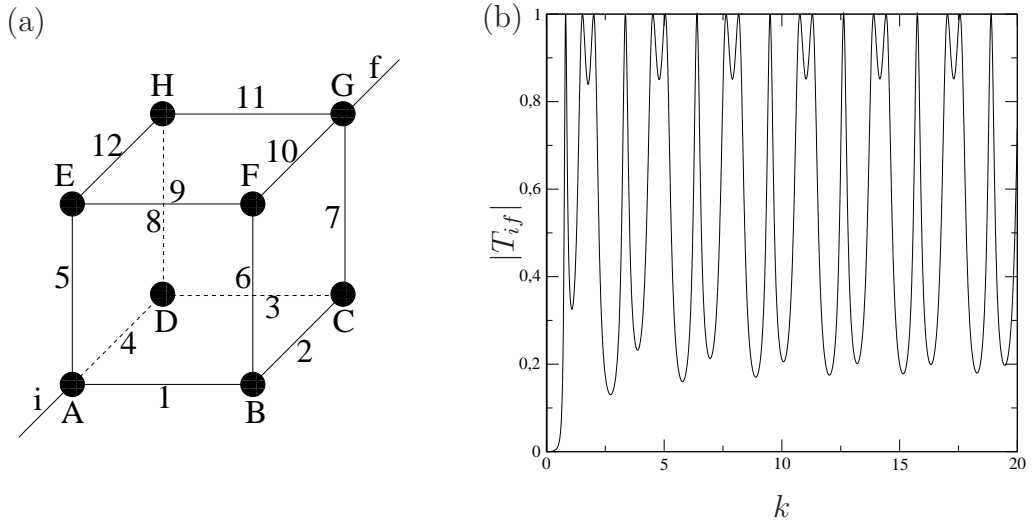


Figura 3.8: (a) Grafo cúbico quântico com duas ligações semi-infinitas nos vértices  $A$  e  $G$ . (b) Coeficiente de transmissão para o grafo cúbico quântico de arestas  $\ell = 1.0$  e usando como condição de contorno uma interação  $\delta$  em cada vértice de intensidade  $\gamma = 1.0$ .

Podemos analisar também espalhamento no grafo cúbico quântico. Para isso vamos adicionar duas ligações semi-infinitas nos vértices  $A$  e  $G$  do mesmo, Figura 3.8(a). Com o ponto inicial  $x_i$  na ligação semi-infinita  $i$  e ponto final  $x_f$  na ligação semi-infinita  $f$  a função de Green pode ser escrita como

$$G_{fi}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} T_{if} \exp[ik(x_f + x_i)]. \quad (3.54)$$

Na Figura 3.8(b) mostramos o comportamento do coeficiente de transmissão  $T_{if}$  para o grafo cúbico quântico de arestas  $\ell = 1.0$  e usando como condição de contorno uma interação  $\delta$  em cada vértice de intensidade  $\gamma = 1.0$ .

### 3.6 Grafos quânticos representativos: árvore binária

Como já foi mencionado, o fato de podermos escrever a função de Green em termos de  $r$ 's e  $t$ 's gerais em cada vértice permite usarmos um procedimento recursivo para obter a solução para grafos mais complicados. O grafo quântico binário em árvore na Figura 3.9(d) é um bom exemplo disso. Para ilustrar o procedimento, vamos primeiro calcular o coeficiente de transmissão e reflexão para o grafo na Figura 3.9(a). De fato, esse cálculo já foi realizado quando obtivemos  $r_I^{(1)}$  e  $t_I^{(1,11)}$  para o grafo cúbico quântico na Figura 3.7(g). Então agrupando os quatro vértices  $A$ ,  $B$ ,  $C$  e  $D$  num único vértice  $\alpha$ , o coeficiente de reflexão  $R_\alpha$  é dado por

$$R_\alpha = r_A^{(i)} + t_A^{(i,1)} P_1 + t_A^{(i,2)} P_2 \quad (3.55)$$

onde

$$\left\{ \begin{array}{l} P_1 = r_B^{(1)} \exp[2ik\ell] (r_A^{(1)} P_1 + t_A^{(1,2)} P_2 + t_A^{(1,i)}) \\ \quad + t_B^{(1,3)} \exp[2ik\ell] (r_D^{(3)} P_3 + t_D^{(3,4)} P_4) \\ P_2 = r_C^{(2)} \exp[2ik\ell] (r_A^{(2)} P_2 + t_A^{(2,1)} P_1 + t_A^{(2,i)}) \\ \quad + t_C^{(2,4)} \exp[2ik\ell] (r_D^{(4)} P_4 + t_D^{(4,3)} P_3) \\ P_3 = t_B^{(3,1)} \exp[2ik\ell] (r_A^{(1)} P_1 + t_A^{(1,2)} P_2 + t_A^{(1,i)}) \\ \quad + r_B^{(3)} \exp[2ik\ell] (r_D^{(3)} P_3 + t_D^{(3,4)} P_4) \\ P_4 = t_C^{(4,2)} \exp[2ik\ell] (r_A^{(2)} P_2 + t_A^{(2,1)} P_1 + t_A^{(2,i)}) \\ \quad + r_C^{(4)} \exp[2ik\ell] (r_D^{(4)} P_4 + t_D^{(4,3)} P_3). \end{array} \right. \quad (3.56)$$

E o coeficiente de transmissão,  $T_\alpha$ , é

$$T_\alpha = t_A^{(i,1)} P_1 + t_A^{(i,2)} P_2. \quad (3.57)$$

O sistema de equações para determinar o coeficiente  $T_\alpha$  é o mesmo daquele em (3.56) com a seguinte troca de índices  $1 \leftrightarrow 3$ ,  $2 \leftrightarrow 4$ ,  $A \leftrightarrow D$  e *leftrightarrow*. Resolvendo o sistema (3.56) obtemos uma expressão para  $R_\alpha$  e  $T_\alpha$ . Agora, vamos inserir nos vértices  $B$  e  $C$  outro grafo binário, como mostrado na Figura 3.9(a), resultando no grafo da Figura 3.9(b). Usamos a solução do sistema (3.56), mas agora, no lugar de  $r_B$  e  $r_C$ , colocamos a expressão  $R_\alpha$  e, no lugar de  $t_B$  e  $t_C$ , colocamos a expressão para  $T_\alpha$ , obtendo os coeficientes  $R_\beta$  e  $T_\beta$ . O passo final é inserir novamente um grafo binário em cada um dos vértices centrais, gerando o grafo binário em árvore da Figura 3.9(c). Novamente usamos a solução da Equação (3.56), mas desta vez com a expressão de  $R_\beta$  no lugar de  $r_B$  e  $r_C$  e a expressão de  $T_\beta$  no lugar de  $t_B$  e  $t_C$ , obtendo os coeficientes  $R_\gamma$  e  $T_\gamma$ . Finalmente, usamos mais uma vez a solução, com a expressão de  $R_\gamma$  no lugar de  $r_B$  e  $r_C$  e a expressão de  $T_\gamma$  no lugar de  $t_B$  e  $t_C$ , obtendo os coeficientes  $R$  e  $T$  para o grafo quântico binário em árvore, Figura 3.9(d). Esse processo recursivo pode ser continuado quantas vezes



desejamos.

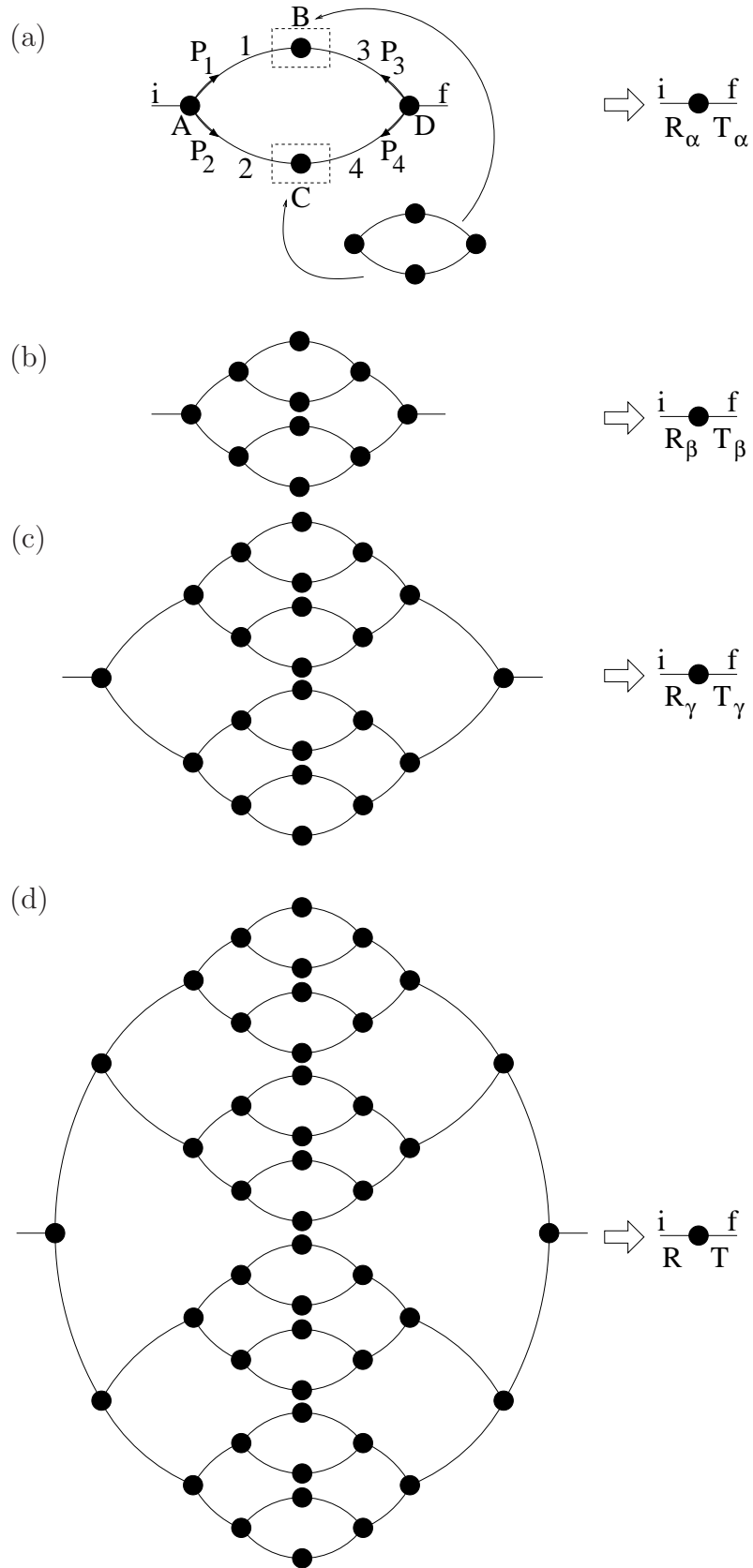


Figura 3.9: (a) Um grafo binário em árvore simples com coeficientes  $R_\alpha$  e  $T_\alpha$ . (b) Grafo resultante da inserção de dois grafos binários no grafo da Figura (a) com coeficientes  $R_\beta$  e  $T_\beta$ . (c) Grafo resultante de uma nova inserção de grafos binários com coeficientes  $R_\gamma$  e  $T_\gamma$  e em (d) o grafo binário final com coeficientes  $R$  e  $T$ .

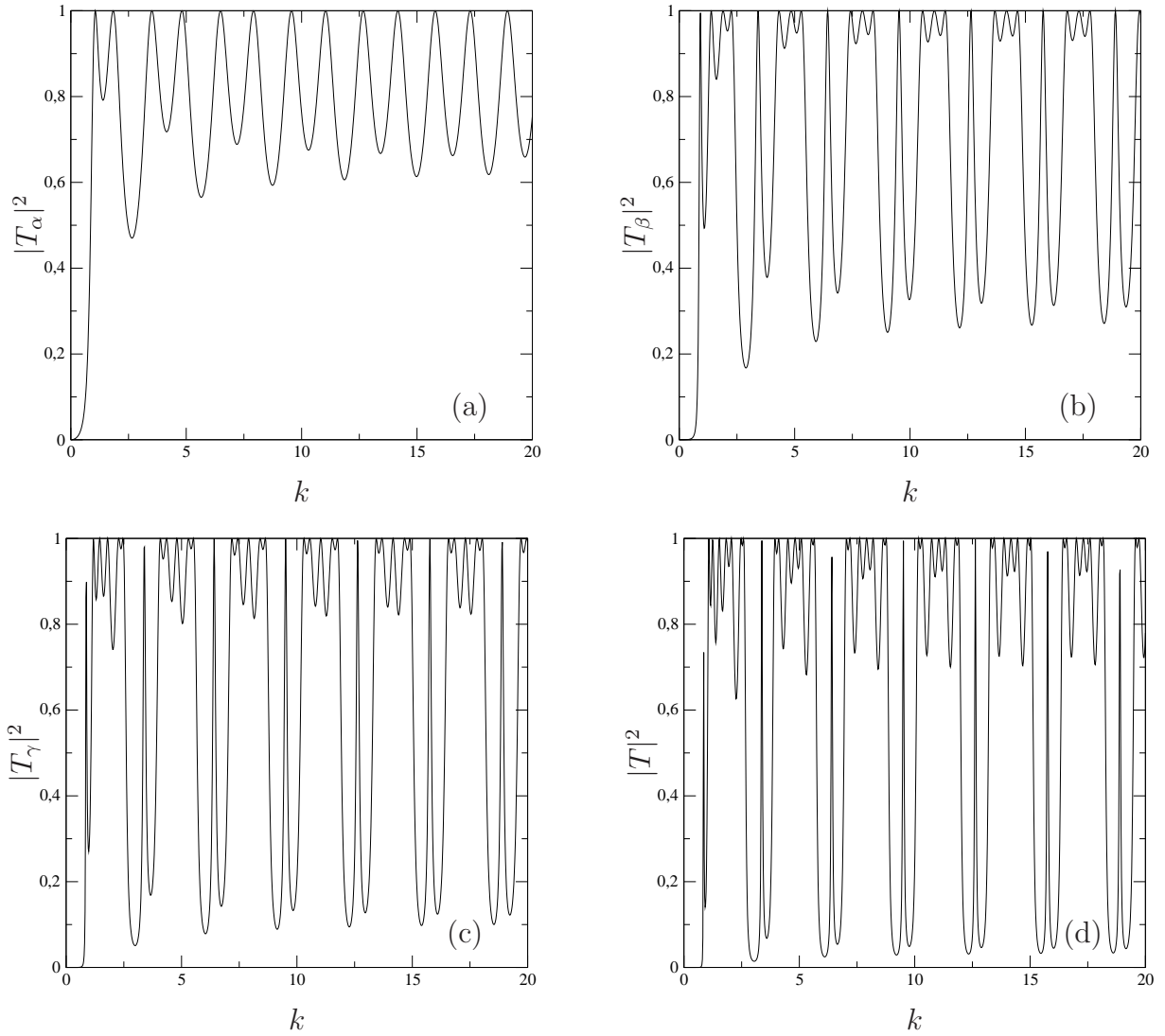


Figura 3.10: Comportamento do coeficiente de transmissão para os grafos em árvore da Figura 3.9. Todas as ligações possuem o mesmo comprimento  $\ell = 1,0$  e em cada vértice uma condição de contorno  $\delta$  com intensidade  $\gamma = 1,0$ . (a)  $t_\alpha$  para o grafo da Figura 3.9(a), (b)  $t_\beta$  para o grafo da Figura 3.9(b), (c)  $t_\gamma$  para o grafo da Figura 3.9(c) e (d)  $T$  para o grafo da Figura 3.9(d).

Como um exemplo, vamos usar todas as ligações com o mesmo comprimento  $l = 1,0$  e uma interação  $\delta$  com intensidade  $\gamma = 1,0$  como condição de contorno nos vértices. O vértice com duas ligações possuem  $r_B = \gamma/(2ik - \gamma)$  e  $t_B = 2ik/(2ik - \gamma)$  e os vértices com três ligações  $r_A = (\gamma - ik)/(3ik - \gamma)$  e  $t_A = 2ik/(3ik - \gamma)$ . Na Figura 3.10 mostramos o comportamento de  $T_\alpha$ ,  $T_\beta$ ,  $T_\gamma$  e  $T$ . Notamos que aumentando a complexidade do grafo em árvore também aumentamos a complexidade dos coeficientes de transmissão e, de forma geral, a probabilidade de transmissão diminui para um mesmo  $k$ . Esse fato é bastante natural, uma vez que ocorre um aumento significativo do comprimento do caminho necessário para a partícula sair da ligação semi-infinita  $i$  e alcançar a ligação semi-infinita  $f$ , além de também aumentar o número de vértices, aumentando a probabilidade

de reflexão da partícula. Essa metodologia recursiva pode ser utilizado  $n$  vezes sem muitas dificuldades, uma vez que somente precisamos resolver o sistema de equações uma única vez. É claro que no limite onde  $n \rightarrow \infty$ , a probabilidade de transmissão tende a 0.

### 3.7 Grafos quânticos representativos: triângulo de Sierpinski

Uma das muitas razões para o interesse em redes auto-similares é que elas servem como modelos de base para diferentes sistemas físicos. Na Seção anterior já estudamos o caso de um grafo em árvore e o uso de um procedimento recursivo na obtenção da função de Green. Aqui iremos aplicar o mesmo procedimento recursivo para obter a função de Green para o triângulo de Sierpinski<sup>1</sup>. O triângulo de Sierpinski foi considerado nos trabalhos de Bondarenko et al. [78, 79], onde discutem seus coeficientes quânticos. Porém, o caso mais geral de coeficientes quânticos dependentes da energia não é discutido e não é apresentada uma forma esquemática de reagrupar as contribuições do múltiplo espalhamento para obtenção da função de Green, o que será apresentado nessa Seção. O grafo de Sierpinski também foi estudado em termos de sua relação com redes de pequeno mundo (“small-world networks”) em [80] e é construído recursivamente adicionando triângulos menores no grafo. Na Figura 3.11 mostramos três estágios para o triângulo de Sierpinski.

Como o triângulo de Sierpinski de estágio- $n$  possui três ligações semi-infinitas, a matriz de espalhamento é de ordem 3 que escrevemos como

$$S^{(n)}(k) = \begin{pmatrix} R_{11}^{(n)}(k) & T_{12}^{(n)}(k) & T_{13}^{(n)}(k) \\ T_{21}^{(n)}(k) & R_{22}^{(n)}(k) & T_{23}^{(n)}(k) \\ T_{31}^{(n)}(k) & T_{32}^{(n)}(k) & R_{33}^{(n)}(k) \end{pmatrix}. \quad (3.58)$$

Devido a simetria do triângulo, devemos ter  $R_{ii}^{(n)}(k) = R_k^{(n)}$ ,  $i = 1, 2, 3$  e  $T_{ij}^{(n)}(k) = T_k^{(n)}$ ,  $i, j = 1, 2, 3$ ,  $i \neq j$ . A função de Green para o triângulo de Sierpinski é dada por

$$G_T(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} T_k^{(n)} \exp[ik(x_f + x_i)], \quad (3.59)$$

para o caso de transmissão, e

$$G_R(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} (\exp[ik|x_f - x_i|] + R_k^{(n)} \exp[ik(x_f + x_i)]), \quad (3.60)$$

para o caso de reflexão. Para simplificar a análise, vamos assumir que todos os vértices

<sup>1</sup>Em homenagem ao matemático polonês Waclaw Sierpinski que descobriu algumas de suas propriedades em 1916.

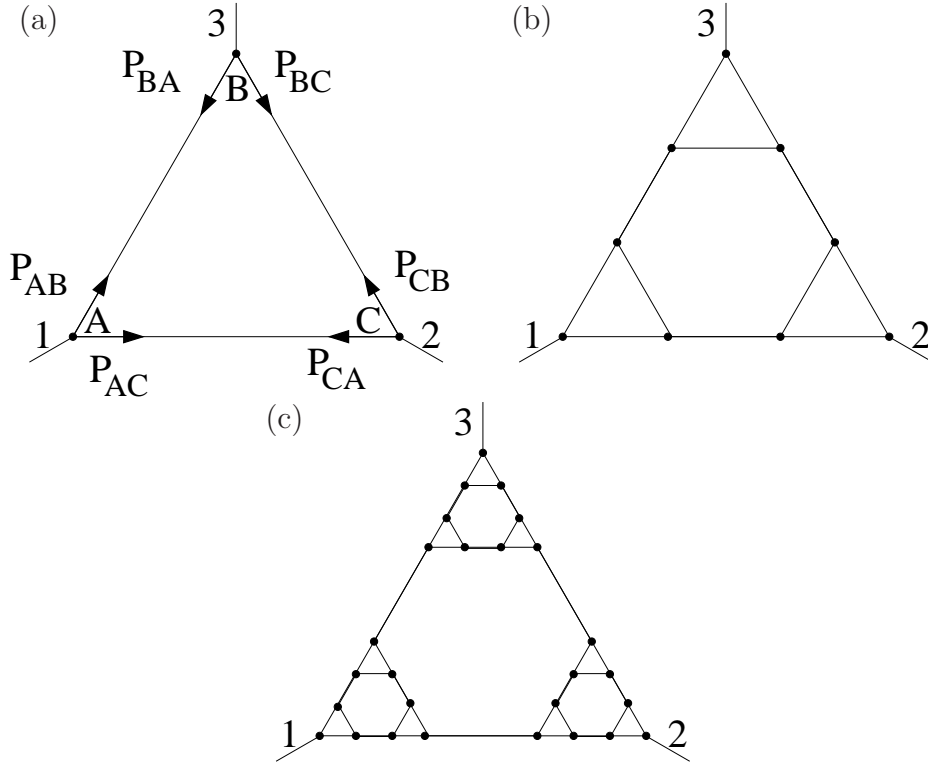


Figura 3.11: Triângulo de Sierpinski: (a) estágio-1 ( $TS_1$ ), (b) estágio-2 ( $TS_2$ ) e (c) estágio-3 ( $TS_3$ )

do triângulo são iguais e seus coeficientes de reflexão e transmissão são  $r_k$  e  $t_k$  ( $k$  denota a dependência com a energia), respectivamente, e que o comprimento da ligação entre os vértices é  $\ell$ . Os coeficientes quânticos para o estágio-1 do triângulo de Sierpinski são obtidos através da solução do seguinte sistema de equações,

$$\begin{cases} P_{AB} = \exp[ik\ell](r_k P_{BA} + t_k P_{BC}) \\ P_{AC} = \exp[ik\ell](r_k P_{CA} + t_k P_{CB} + t_k) \\ P_{BC} = \exp[ik\ell](r_k P_{CB} + t_k P_{CA} + t_k) \\ P_{BA} = \exp[ik\ell](r_k P_{AB} + t_k P_{AC}) \\ P_{CA} = \exp[ik\ell](r_k P_{AC} + t_k P_{AB}) \\ P_{CB} = \exp[ik\ell](r_k P_{BC} + t_k P_{BA}) \end{cases}, \quad (3.61)$$

com

$$T_k^{(1)} = t_k(P_{AB} + P_{AC}) \quad \text{e} \quad R_k^{(1)} = r_k + t_k(P_{CA} + P_{CB}). \quad (3.62)$$

Resolvendo o sistema de Equações (3.61), os coeficientes de reflexão e transmissão para o estágio-1 do triângulo de Sierpinski da Figura 3.11(a) são dados por

$$R_k^{(1)} = r_k + \frac{2t_k^2(r_k + (t_k^2 - r_k^2) \exp[ik\ell]) \exp[2ik\ell]}{(1 - (r_k + t_k) \exp[ik\ell])(1 + t_k \exp[ik\ell] + (t_k^2 - r_k^2) \exp[2ik\ell])}, \quad (3.63)$$

$$T_k^{(1)} = \frac{t_k^2 (1 + (t_k - r_k) \exp [ik\ell]) \exp [ik\ell]}{(1 - (r_k + t_k) \exp [ik\ell]) (1 + t_k \exp [ik\ell] + (t_k^2 - r_k^2) \exp [2ik\ell])}. \quad (3.64)$$

Dada a sua estrutura recursiva, os coeficientes de espalhamento para o estágio- $n + 1$  são obtidos através dos coeficientes de espalhamento do estágio- $n$ . Vamos definir

$$D_k^{(n)} = (1 - (R_k^{(n)} + T_k^{(n)}) \exp [ik\ell]) (1 + T_k^{(n)} \exp [ik\ell] + ([T_k^{(n)}]^2 - [R_k^{(n)}]^2) \exp [2ik\ell]), \quad (3.65)$$

então

$$R_k^{(n+1)} = R_{k/3}^{(n)} + \frac{2[T_{k/3}^{(n)}]^2 (R_{k/3}^{(n)} + ([T_{k/3}^{(n)}]^2 - [R_{k/3}^{(n)}]^2) \exp [ik\ell/3]) \exp [2ik\ell/3]}{D_{k/3}^{(n)}}, \quad (3.66)$$

e

$$T_k^{(n+1)} = \frac{[T_{k/3}^{(n)}]^2 (1 + (T_{k/3}^{(n)} - R_{k/3}^{(n)}) \exp [ik\ell/3]) \exp [ik\ell/3]}{D_{k/3}^{(n)}}, \quad (3.67)$$

onde realizamos uma divisão por 3 do comprimento das ligações em cada novo estágio do triângulo de Sierpinski. Desta forma, usando as expressões em (3.66) e (3.67), juntamente com as formas para  $R_k^{(1)}$  e  $T_k^{(1)}$  em (3.63) e (3.64), podemos obter os coeficientes de espalhamento para o triângulo de Sierpinski com interações pontuais gerais em seus vértices para qualquer estágio. Nas Figuras 3.12 e 3.13 mostramos o comportamento do coeficiente de reflexão e transmissão, respectivamente, para o triângulo de Sierpinski até o estágio-5, com o comprimento da ligação para o estágio-1  $\ell = 1, 0$  e condição de contorno delta com intensidade  $\gamma = 1, 0$  em cada vértice. Notamos que a cada estágio do triângulo de Sierpinski a estrutura torna-se cada vez mais seletiva a quais  $k$  podem ser transmitidos. Também notamos que esse comportamento é diferente daquele observado no grafo em árvore, Figura 3.10, onde observamos um aumento da amplitude de reflexão, mas sem mudar muito a sua forma original. Aqui, a cada estágio os coeficientes quânticos tem uma mudança no seu comportamento como função de  $k$  de forma bastante pronunciada.

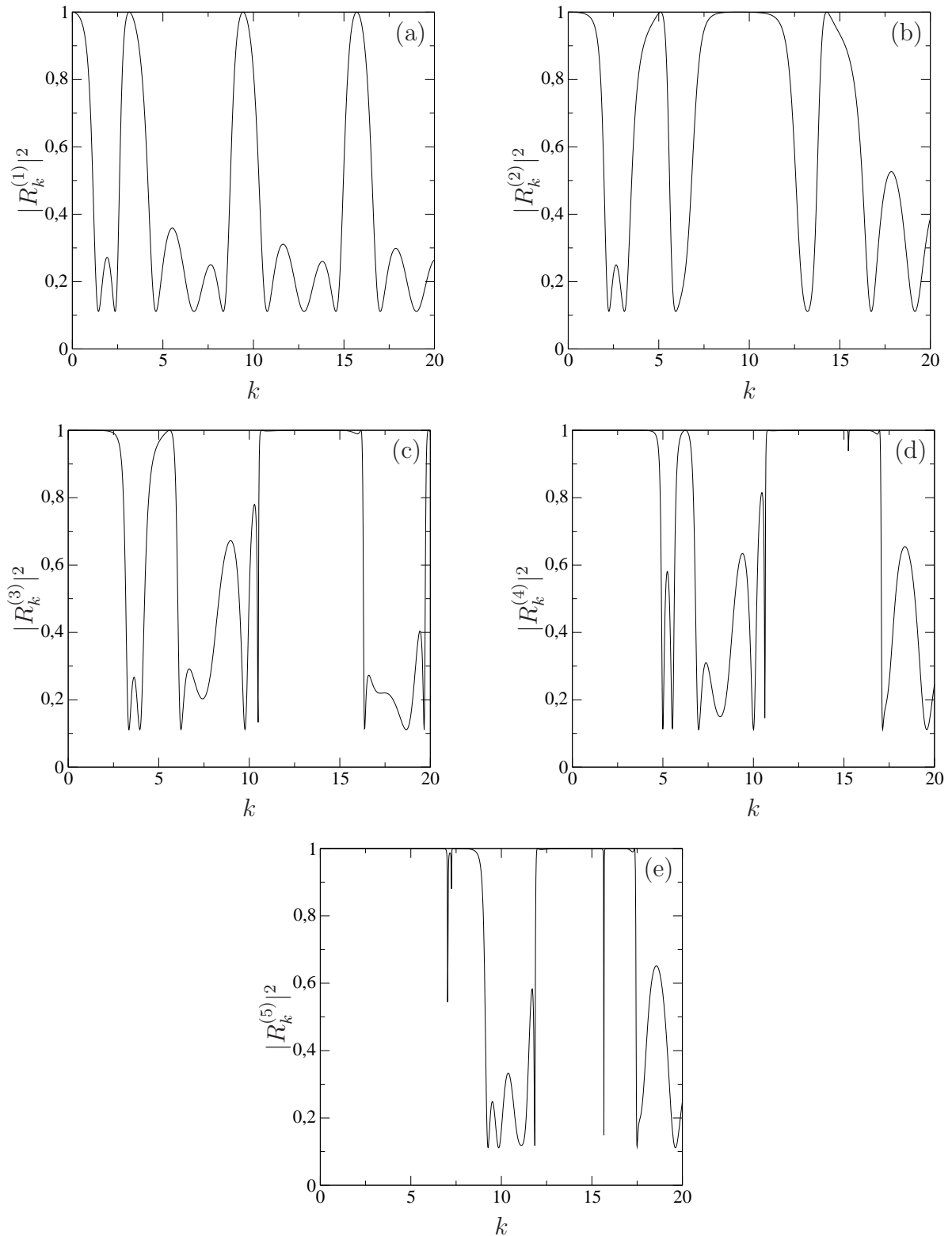


Figura 3.12: Comportamento do coeficiente de reflexão para os cinco primeiros estágios do triângulo de Sierpinski com a comprimento da ligação para o estágio-1  $\ell = 1,0$  e, em cada vértice, uma condição de contorno  $\delta$  com intensidade  $\gamma = 1,0$ . (a)  $R_k^{(1)}$  (b)  $R_k^{(2)}$  (c)  $R_k^{(3)}$ , (d)  $R_k^{(4)}$  e (e)  $R_k^{(5)}$ .

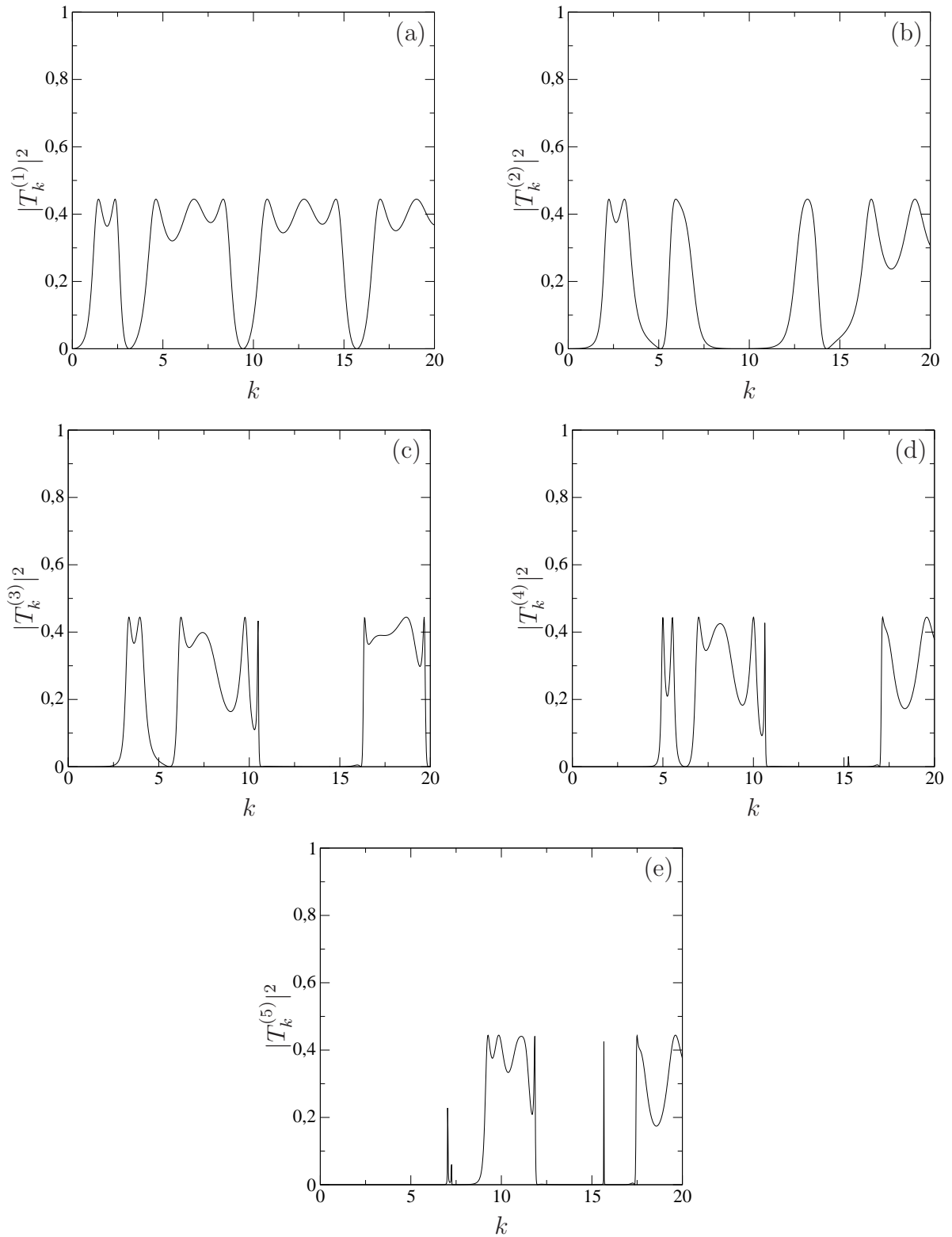


Figura 3.13: Comportamento do coeficiente de transmissão para os cinco primeiros estágios do triângulo de Sierpinski com a comprimento da ligação para o estágio-1  $\ell = 1,0$  e, em cada vértice, uma condição de contorno  $\delta$  com intensidade  $\gamma = 1,0$ . (a)  $T_k^{(1)}$  (b)  $T_k^{(2)}$  (c)  $T_k^{(3)}$ , (d)  $T_k^{(4)}$  e (e)  $T_k^{(5)}$ .



### 3.8 Quase-estados em grafos quânticos

Em física atômica, molecular, nuclear e de partículas [81, 82], encontramos com frequência situações onde observamos picos muito pronunciados na amplitude do coeficiente de transmissão de uma onda espalhada por um potencial. Isto ocorre devido ao fato do potencial suportar estados quase-ligados. Vamos aplicar a função de Green para estudar tais problemas em grafos.

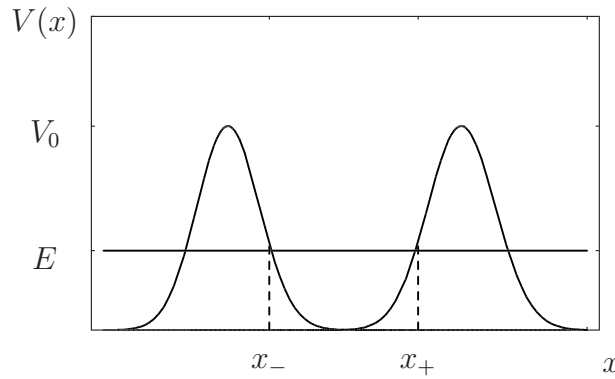


Figura 3.14: Exemplo de barreira que suporta quase-estados

Inicialmente, faremos uma breve discussão do que são estados quase-ligados em potenciais de suporte compacto e então discutiremos o caso de grafos com interações pontuais. Para exemplificar, consideramos o potencial mostrado na Figura 3.14. Vamos considerar a função de onda do sistema, que inicialmente é uma onda plana incidente da esquerda com energia  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ , então a função de onda de espalhamento é dada por

$$\psi_k(x) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} \exp[+ikx] + R^{(+)}(k) \exp[-ikx], & x \rightarrow -\infty \\ T^{(+)}(k) \exp[+ikx], & x \rightarrow +\infty \end{cases}. \quad (3.68)$$

Supondo que a altura do potencial à esquerda de  $x_-$  e à direita de  $x_+$  seja infinita, então seria possível uma partícula permanecer confinada na região entre  $x_-$  e  $x_+$ , ou seja, o sistema teria estados ligados, com energia  $E$  bem definida. Estes são estados ligados genuínos no sentido de que são autoestados do Hamiltoniano: são *estados estacionários* com um tempo de vida infinito. O princípio da incerteza de Heisenberg diz que  $\Delta E \Delta t \approx \hbar$ , então, se a energia possui incerteza nula, o tempo de vida do estado deve ser infinito [82].

Na situação de uma barreira finita, Figura 3.14, a partícula pode ficar confinada, mas não infinitamente. Uma partícula inicialmente entre  $x_-$  e  $x_+$  tem uma probabilidade de escapar desta região, mesmo se  $E < V_0$ , devido ao tunelamento quântico. Entretanto, para algumas energias particulares, chamadas de *quase-energias*, a partícula pode ficar aprisionada por um longo tempo. O valor dessas energias e o tempo característico de

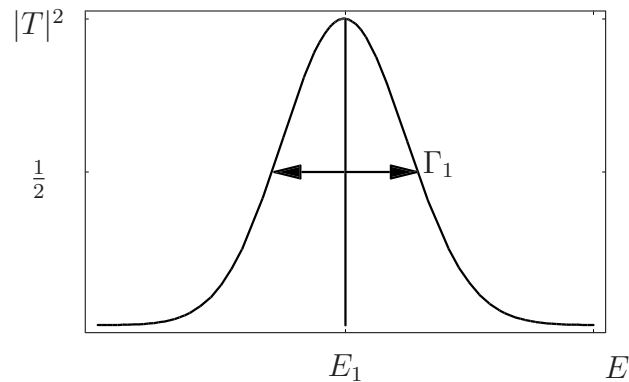


Figura 3.15: Comportamento típico do coeficiente de transmissão de um potencial que suporta um quase-estado, mostrando pico no formato de curva de sino na energia  $E_1$  e uma largura igual à  $\Gamma_1$ .

aprisionamento depende da forma do potencial. Voltando à discussão do espalhamento de uma onda plana, a situação torna-se muito interessante quando a energia da partícula incidente for próxima a energia de um quase-estado,

$$E_{\text{incidente}} \approx E_{\text{quase-estado}}. \quad (3.69)$$

Neste intervalo de energia, o módulo quadrado do coeficiente de transmissão exibe picos e a energia do máximo do pico é a própria energia do quase-estado. A largura desses quase-estados, representada por  $\Gamma_1$  [81], é definida através da largura a meia altura do pico do coeficiente de transmissão, como mostrado na Figura 3.15.

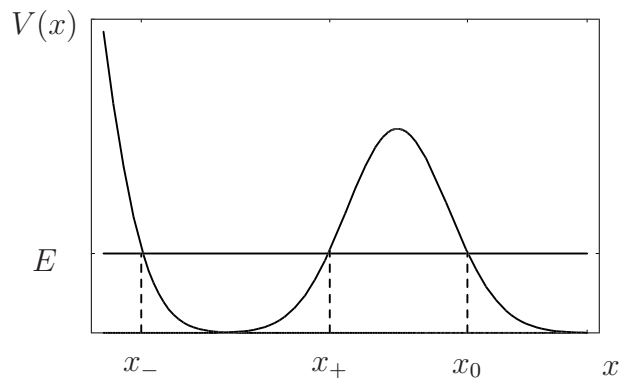


Figura 3.16: Potencial com o lado esquerdo infinito

Vamos agora considerar o caso onde um dos lados do potencial é infinito, Figura 3.16. Neste caso, o sistema também pode possuir quase-estados, pois uma partícula confinada neste potencial pode tunelar através da barreira da direita. A função de onda de espalha-

mento de uma onda incidente pela direita é agora dada por

$$\psi_k(x) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \{ \exp[-ikx] + R^{(-)}(k) \exp[ikx] \}, \quad x \rightarrow \infty. \quad (3.70)$$

Por analogia com o caso anterior, poderíamos fazer um gráfico do módulo do coeficiente de reflexão  $|R^{(-)}|^2$  como função da energia para identificar os quase-estados. O problema é que o potencial à esquerda é infinito, o que leva o coeficiente de reflexão a ter o valor  $|R^{(-)}|^2 = 1$  para todos os valores de energia. Logo não podemos tirar informação dos quase-estados de um potencial desta forma.

O que foi discutido acima também se aplica a grafos e o mesmo problema surge se o grafo possui somente uma ligação semi-infinita como mostra a Figura 3.17. Aqui propomos um método usando a função de Green para obter informações sobre os quase-estados para este tipo de grafo.

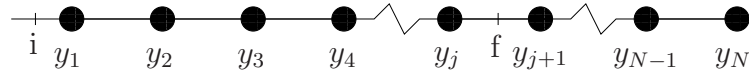


Figura 3.17: Grafo aberto unidimensional com somente uma ligação semi-infinita que pode possuir quase-estados.

Considere o grafo aberto da Figura 3.17. Usando os procedimentos de simplificação da Seção 3.2 podemos obter a função de Green facilmente. Para facilitar o entendimento, aqui utilizaremos uma notação um pouco diferente da usada nas Seções anteriores. Vamos calcular a função de Green para o caso onde  $x_i < y_1$  está na semi-ligação  $i$  e  $x_f$  está na ligação  $j$  entre  $y_j$  e  $y_{j+1}$  do grafo. Tal como nas Seções anteriores precisamos classificar e somar todos os caminhos de espalhamento e a função de Green é dada por

$$G_{j,i}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \frac{T_{(1,j)}^{(+)} \exp[ik(x_f - x_i + y_j - y_1)]}{1 - R_{(1,j)}^{(-)} R_{(j+1,N)}^{(+)} \exp[ik(y_{j+1} - y_j)]}, \quad (3.71)$$

onde  $T_{(1,j)}^{(+)}$  é o coeficiente de transmissão à esquerda (+) de  $y_1$  do bloco  $(1, j)$  englobando todos os vértices entre  $y_1$  e  $y_j$ ,  $R_{(1,j)}^{(-)}$  é o coeficiente de reflexão à direita (-) de  $y_j$  do bloco  $(1, j)$  englobando todos os vértices entre  $y_j$  e  $y_1$  e  $R_{(j+1,N)}^{(+)}$  é o coeficiente de reflexão à esquerda (+) de  $y_{j+1}$  do bloco  $(1, j)$  englobando todos os vértices à direita de  $y_{j+1}$ .

### 3.8.1 Fórmulas de recorrência para os coeficientes de transmissão e reflexão

Os coeficientes de reflexão e transmissão globais são obtidos recursivamente em termos dos coeficientes de reflexão e transmissão de cada vértice individual. Para entender

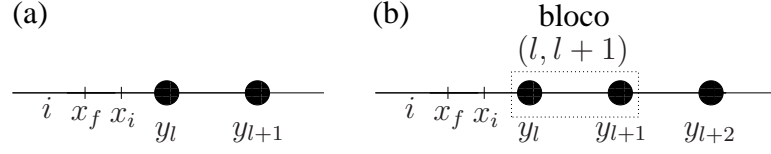


Figura 3.18: Grafo aberto unidimensional (a) com somente dois vértices e (b) com três vértices.

essa construção vamos assumir que temos um grafo composto somente de dois vértices colocados em  $y_l$  e  $y_{l+1}$  e que  $x_i, x_f < y_l < y_{l+1}$ , com  $x_i$  e  $x_f$  na mesma ligação semi-infinita  $i$ , Figura 3.18(a). Realizando a soma de todos os caminhos de espalhamento obtemos a função de Green para o grafo da Figura 3.18(a),

$$G_{i,i} = \exp[ik|x_f - x_i|] + r_l^{(+)} \exp[-ik(x_f + x_i - 2y_l)] + \frac{r_{l+1}^{(+)} t_l^{(+)} t_l^{(-)} \exp[2ik(y_{l+1} - y_l)] \exp[-ik(x_f + x_i - 2y_l)]}{1 - r_l^{(-)} r_{l+1}^{(+)} \exp[2ik(y_{l+1} - y_l)]}. \quad (3.72)$$

Na expressão acima podemos associar um coeficiente de reflexão global à direita do bloco  $(l, l+1)$ ,  $R_{(l,l+1)}^{(-)}$ , composto dos dois vértices  $y_l$  e  $y_{l+1}$  como

$$R_{(l,l+1)}^{(+)} = r_l^{(+)} + \frac{r_{l+1}^{(+)} t_l^{(+)} t_l^{(-)} \exp[2ik(y_{l+1} - y_l)]}{1 - r_l^{(-)} r_{l+1}^{(+)} \exp[2ik(y_{l+1} - y_l)]}. \quad (3.73)$$

De forma análoga, calculando  $G$  para  $x_i, x_f > y_l > y_{l+1}$  podemos associar um coeficiente de reflexão à esquerda do bloco  $(l, l+1)$ ,  $R_{(l,l+1)}^{(-)}$ , que é dado por

$$R_{(l,l+1)}^{(-)} = r_{l+1}^{(-)} + \frac{r_l^{(-)} t_{l+1}^{(-)} t_{l+1}^{(+)} \exp[2ik(y_{l+1} - y_l)]}{1 - r_l^{(-)} r_{l+1}^{(+)} \exp[2ik(y_{l+1} - y_l)]}. \quad (3.74)$$

Agora, considerando o caso  $x_i < y_l < y_{l+1} < x_f$ , a função de Green é dada por

$$G_{l+1,i} = \frac{t_{l+1}^{(+)} t_{l+1}^{(+)} \exp[ik(y_{l+1} - y_l)]}{1 - r_l^{(-)} r_{l+1}^{(+)} \exp[2ik(y_{l+1} - y_l)]} \exp[ik(x_f - x_i - (y_{l+1} - y_l))], \quad (3.75)$$

e novamente podemos associar um coeficiente de transmissão à esquerda do bloco  $(l, l+1)$ ,  $T_{(l,l+1)}^{(+)}$ , como

$$T_{(l,l+1)}^{(+)} = \frac{t_l^{(+)} t_{l+1}^{(+)} \exp[ik(y_{l+1} - y_l)]}{1 - r_l^{(-)} r_{l+1}^{(+)} \exp[2ik(y_{l+1} - y_l)]}. \quad (3.76)$$

De forma similar obtemos o coeficiente de transmissão à direita do bloco  $(l, l+1)$ ,  $T_{(l,l+1)}^{(-)}$ , calculando  $G$  para  $x_i > y_{l+1} > y_l > x_f$  e sua forma é

$$T_{(l,l+1)}^{(-)} = \frac{t_l^{(-)} t_{l+1}^{(-)} \exp[ik(y_{l+1} - y_l)]}{1 - r_l^{(-)} r_{l+1}^{(+)} \exp[2ik(y_{l+1} - y_l)]}. \quad (3.77)$$

Para obtermos fórmulas de recorrência para os coeficientes de transmissão e reflexão, vamos realizar a adição de um terceiro vértice, como mostrado na Figura 3.18(b), situado em  $y_{l+2}$ , lembrando que o bloco  $(l, l+1)$  tem vértices nos pontos  $y_l$  e  $y_{l+1}$ . Vamos analisar o caso onde  $x_i, x_f < y_l < y_{l+1} < y_{l+2}$  e seja  $R_{(l,l+1)}^{(\pm)}$  e  $T_{(l,l+1)}^{(\pm)}$  os coeficientes de reflexão e transmissão, respectivamente, do bloco  $(l, l+1)$  obtidos acima. Com base nos procedimentos de simplificação da Seção 3.2 e pela inspeção da Equação (3.73) podemos inferir a forma do coeficiente de reflexão para o bloco  $(l, l+2)$  formado pelos vértices  $y_l$ ,  $y_{l+1}$  e  $y_{l+2}$ ,  $R_{(l,l+2)}^{(+)}$ , como

$$R_{(l,l+2)}^{(+)} = R_{(l,l+1)}^{(+)} + \frac{T_{(l,l+1)}^{(+)} T_{(l,l+1)}^{(-)} r_{l+2}^{(+)} \exp[2ik(y_{l+2} - y_{l+1})]}{1 - R_{(l,l+1)}^{(-)} r_{l+2}^{(+)} \exp[2ik(y_{l+2} - y_{l+1})]}. \quad (3.78)$$

Com base nesses dois casos, podemos fazer a generalização para um bloco  $(l, l+n)$  contendo  $n+1$  vértices. Assim, o coeficiente de reflexão à direita do bloco  $(l, l+n)$  é dado por

$$R_{(l,l+n)}^{(+)} = R_{(l,l+n-1)}^{(+)} + \frac{T_{(l,l+n-1)}^{(+)} T_{(l,l+n-1)}^{(-)} r_{l+n}^{(+)} \exp[2ik(y_{l+n} - y_{l+n-1})]}{1 - R_{(l,l+n-1)}^{(-)} r_{l+n}^{(+)} \exp[2ik(y_{l+n} - y_{l+n-1})]}. \quad (3.79)$$

e o coeficiente de reflexão à esquerda do bloco  $(l, l+n)$ ,  $R_{(l,l+1)}^{(-)}$ , é dado por

$$R_{(l,l+n)}^{(-)} = r_n^{(-)} + \frac{t_n^{(+)} t_n^{(-)} R_{(l,l+n-1)}^{(-)} \exp[2ik(y_{l+n} - y_{l+n-1})]}{1 - R_{(l,l+n-1)}^{(-)} r_{l+n}^{(+)} \exp[2ik(y_n - y_{n-1})]}. \quad (3.80)$$

Procedemos da mesma forma para obter os coeficientes de transmissão à esquerda,  $T_{(l,l+n)}^{(+)}$ , e à direita,  $T_{(l,l+n)}^{(-)}$ , do bloco  $(l, l+n)$ , e eles são dados por

$$T_{(l,l+n)}^{(+)} = \frac{T_{(l,l+n-1)}^{(+)} t_{l+n}^{(+)} \exp[ik(y_{l+n} - y_{l+n-1})]}{1 - R_{(l,l+n-1)}^{(-)} r_{l+n}^{(+)} \exp[2ik(y_{l+n} - y_{l+n-1})]} \quad (3.81)$$

e

$$T_{(l,l+n)}^{(-)} = \frac{T_{(l,l+n)}^{(-)} t_{l+1}^{(-)} \exp[ik(y_{l+n} - y_{l+n-1})]}{1 - R_{(l,l+n-1)}^{(-)} r_{l+n}^{(+)} \exp[2ik(y_{l+n} - y_{l+n-1})]}. \quad (3.82)$$

### 3.8.2 Função de Green como amplitude de probabilidade

Uma vez obtida as fórmulas de recorrência para os coeficientes de transmissão e reflexão voltemos a função em (3.71). A função de Green para um sistema quântico pode ser interpretada como a amplitude de probabilidade de uma partícula sair de um ponto

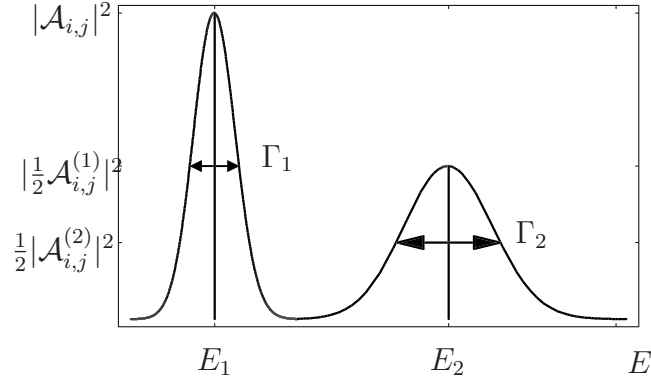


Figura 3.19: Comportamento típico para um potencial que possui dois quase-estados.  $\mathcal{A}_{i,j}^{(1)}$  e  $\mathcal{A}_{i,j}^{(2)}$  são as alturas dos picos 1 e 2, respectivamente.

$x_i$  e chegar ao ponto  $x_f$  com energia  $E$  fixa [83]. Então, na Equação (3.71), podemos interpretar a amplitude

$$\mathcal{A}_{i,j} = \frac{T_{1,j}^{(+)}}{1 - R_{1,j}^{(-)} R_{j+1,N}^{(+)} \exp [ik(y_{j+1} - y_j)]} \quad (3.83)$$

como sendo a amplitude de probabilidade para que uma partícula saia do ponto  $x_i$  e chegue ao ponto  $x_f$  com energia  $E$ . Se o grafo suportar pelo menos um quase-estado, uma onda incidente com energia  $E$  próxima da energia desse quase-estado, terá uma probabilidade muito grande de tunelar, entrando na região de confinamento. Desta forma, num gráfico de  $|\mathcal{A}_{i,j}|^2$  como função de  $E$ , teremos picos cada vez que a energia  $E$  for próxima de  $E_{\text{quase-estado}}$ , ver Figura 3.19. Com isto, podemos então obter a informação sobre as energias dos quase-estados e suas respectivas larguras. Aqui um detalhe técnico: a amplitude  $|\mathcal{A}_{i,j}|^2$  não está normalizada, mas isto não acarreta nenhum problema, uma vez que, estamos somente interessados na energia e na largura do quase-estado.

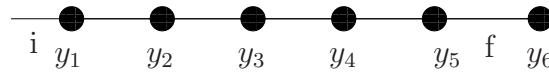


Figura 3.20: Grafo linear com seis vértices para o cálculo das energias dos quase-estados. No vértice  $y_6$  utilizamos uma condição de contorno de Neumann ou Dirichlet como descrito no texto.

Uma característica interessante do uso da função de Green para o estudo de quase-estados em grafos é a possibilidade de calcular diretamente quase-estados localizados entre dois vértices específicos. Também é possível analisar a influência de diferentes interações pontuais (condições de contorno) na largura e energia dos quase-estados. Para exemplificar, vamos considerar o caso de um grafo linear com seis vértices (Figura 3.20) usando  $\hbar = m = 1$ , comprimentos das ligações todas iguais a  $\ell = 1,0$ . Para as condições de contorno, assumimos deltas com intensidade  $\gamma = 1,0$  em cada um dos vértices, menos

no vértice  $y_6$ , onde utilizamos condição de contorno de Dirichlet,  $r_6 = -1, 0$  ou Neumann,  $r_6 = 1, 0$ . Nas Figuras 3.21 e 3.22 mostramos os comportamentos para  $\mathcal{A}_{i,j}$  para as condições de contorno de Dirichlet e Neumann, respectivamente.

A análise das Figuras deixa claro a presença de quase-estados como função da energia. Fica também evidente a influência da condição de contorno utilizada no vértice  $y_6$  nas auto-energias e nas larguras dos quase-estados. Os quase-estados no caso de Neumann possuem larguras e energias menores quando comparados aos auto-estados no caso de Dirichlet. Outra observação clara é o aumento no número de quase-estados quando colocamos o ponto final mais próximo do vértice  $y_6$ . Isso ocorre devido ao aumento da “dificuldade” da partícula escapar do grafo por causa do aumento das múltiplas reflexões dentro do grafo. Com o efeito, há um estreitamento da largura à meia altura,  $\Gamma$ , e conseqüentemente um aumento do tempo de vida do quase-estado.

Observando a forma de  $\mathcal{A}_{i,j}$  na Equação (3.83), podemos notar que a amplitude  $\mathcal{A}_{i,j}$  é dada pela razão entre o coeficiente de transmissão do ponto inicial,  $x_i$ , para o ponto final,  $x_f$ , e um termo que é 1 menos o produto dos coeficientes de reflexão dos blocos à esquerda e à direita da ligação e da exponencial complexa do comprimento da ligação onde está situado o ponto final,  $x_f$ . Esse termo no denominador está associado aos autovalores de energia [41, 59], sendo dado pela soma das possíveis órbitas periódicas na ligação em questão. De forma geral, a amplitude para os quase-estados localizados entre dois vértices  $I$  e  $J$  de um grafo arbitrário é dada por

$$\mathcal{A}_{I,J} = \frac{T_{I,J}}{1 - R_{I,J} R_{J,I} \exp[2ik\ell_{I,J}]}, \quad (3.84)$$

onde  $T_{I,J}$  é o coeficiente de transmissão global para a partícula ser transmitida para a ligação entre os vértices  $I$  e  $J$ ,  $R_{I,J}$  o coeficiente de reflexão global à direita do vértice  $I$  e  $R_{J,I}$  é o coeficiente de reflexão global à esquerda do vértice  $J$ .

Para exemplificar (3.84) vamos analisar o grafo mais elaborado mostrado na Figura 3.23 e calcular as amplitudes para os quase-estados. Como dito acima, podemos usar diferentes condições de contorno e comprimentos de ligação no grafo, mas aqui utilizaremos uma condição de contorno do tipo delta com intensidade  $\gamma = 1, 0$  em cada um dos vértices, menos no vértice  $E$  onde utilizamos a condição de contorno Dirichlet ou Neumann. Todas as ligações tem o mesmo comprimento  $\ell = 1, 0$ . Com as ligações com o mesmo comprimento, devido a simetria, temos três ligações diferentes onde podemos calcular os quase-estados, entre os vértices  $AE$ ,  $AB$  e  $BC$ . Nas Figuras 3.24 e 3.25 mostramos o comportamentos para esses três casos para as condições de contorno de Dirichlet e Neumann, respectivamente. Novamente, notamos a forte influência do tipo de condição de contorno utilizada no vértice  $E$  nas larguras e energias dos quase-estados, bem como da

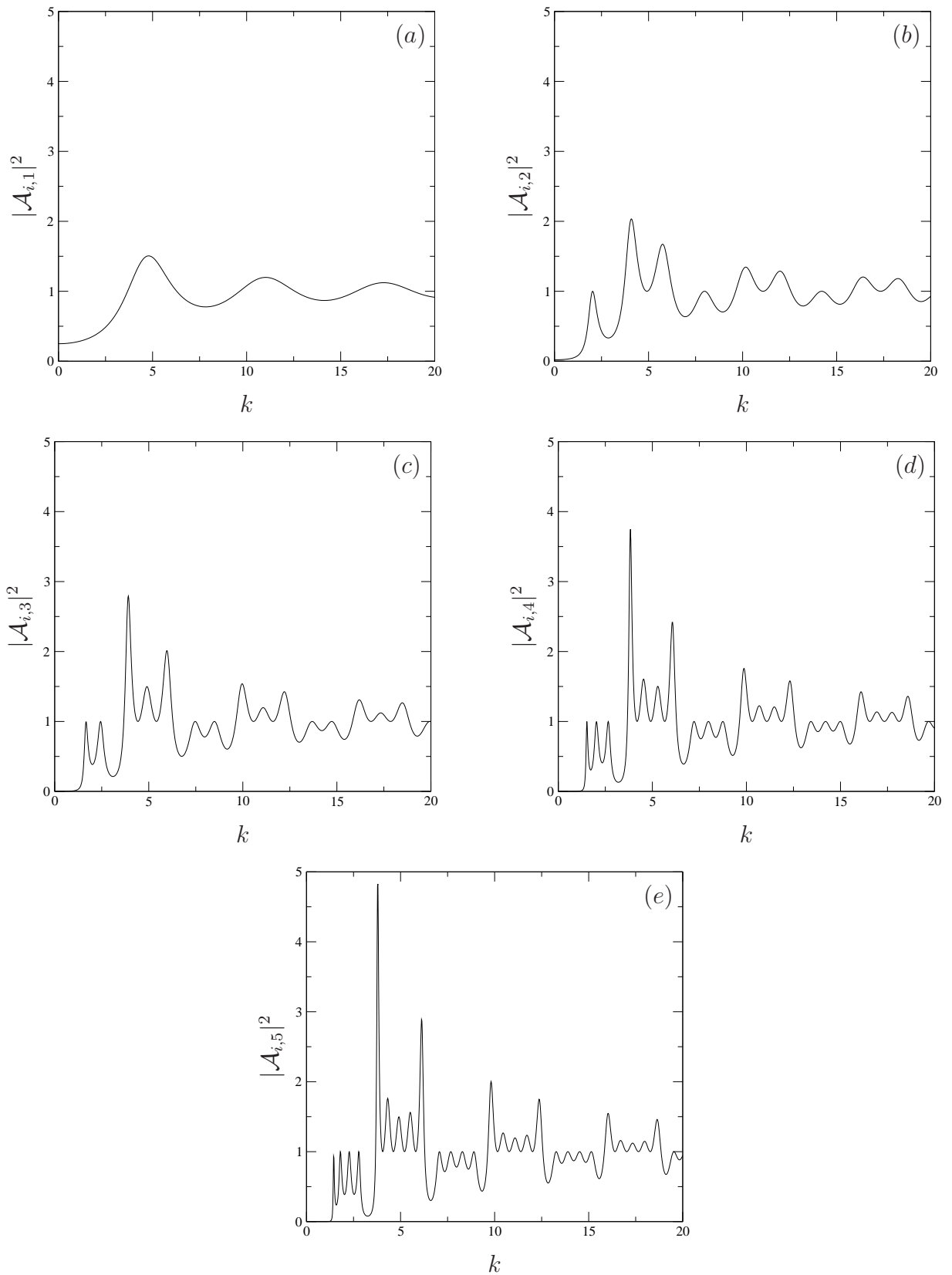


Figura 3.21: Comportamento da amplitude  $A_{i,j}$  como função da energia usando a condição de contorno de Dirichlet ( $r_6 = -1$ ) no vértice  $y_6$  da Figura 3.20. Amplitudes para os quase-estados localizados em (a) ligação 1, (b) ligação 2, (c) ligação 3, (d) ligação 4 e (e) ligação 5.



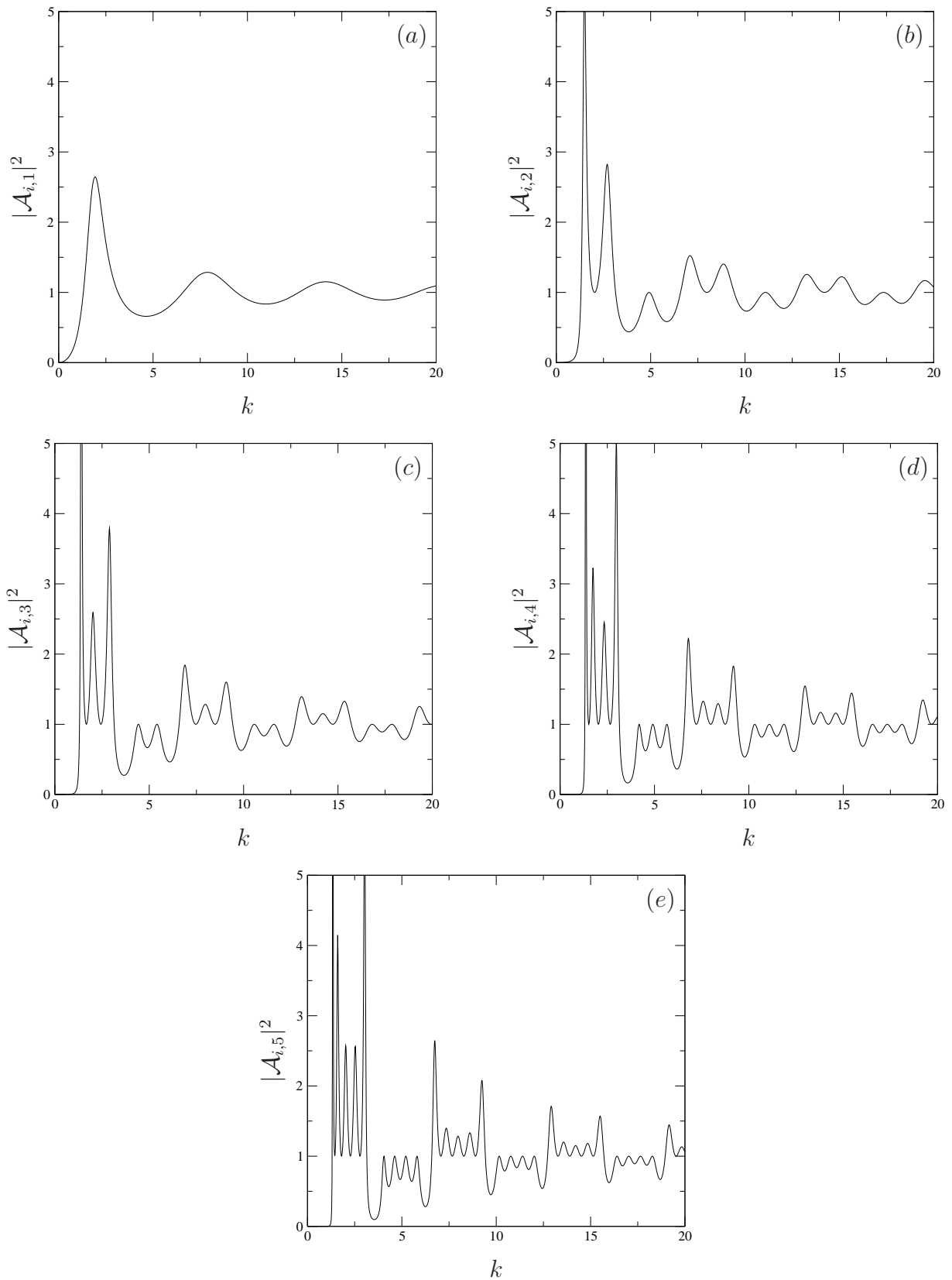


Figura 3.22: Comportamento da amplitude  $A_{i,j}$  como função da energia usando a condição de contorno de Neumann ( $r_6 = 1$ ) no vértice  $y_6$  da Figura 3.20. Amplitudes para os quase-estados localizados em (a) ligação 1, (b) ligação 2, (c) ligação 3, (d) ligação 4 e (e) ligação 5.

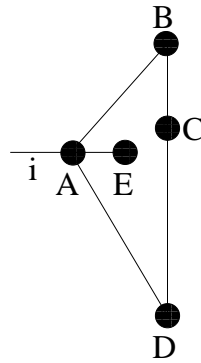


Figura 3.23: Grafo geral aberto para o cálculo dos quase-estados. No vértice  $E$  utilizamos uma condição de contorno de Neumann ou Dirichlet como descrito no texto.

posição onde estamos calculando o quase-estado. Essa influência da condição de contorno também foi observada nesse mesmo grafo no cálculo dos coeficientes de transmissão [42]. Como era de se esperar, nesse caso o perfil das amplitudes é mais complicado que aquelas do grafo linear apresentados anteriormente.

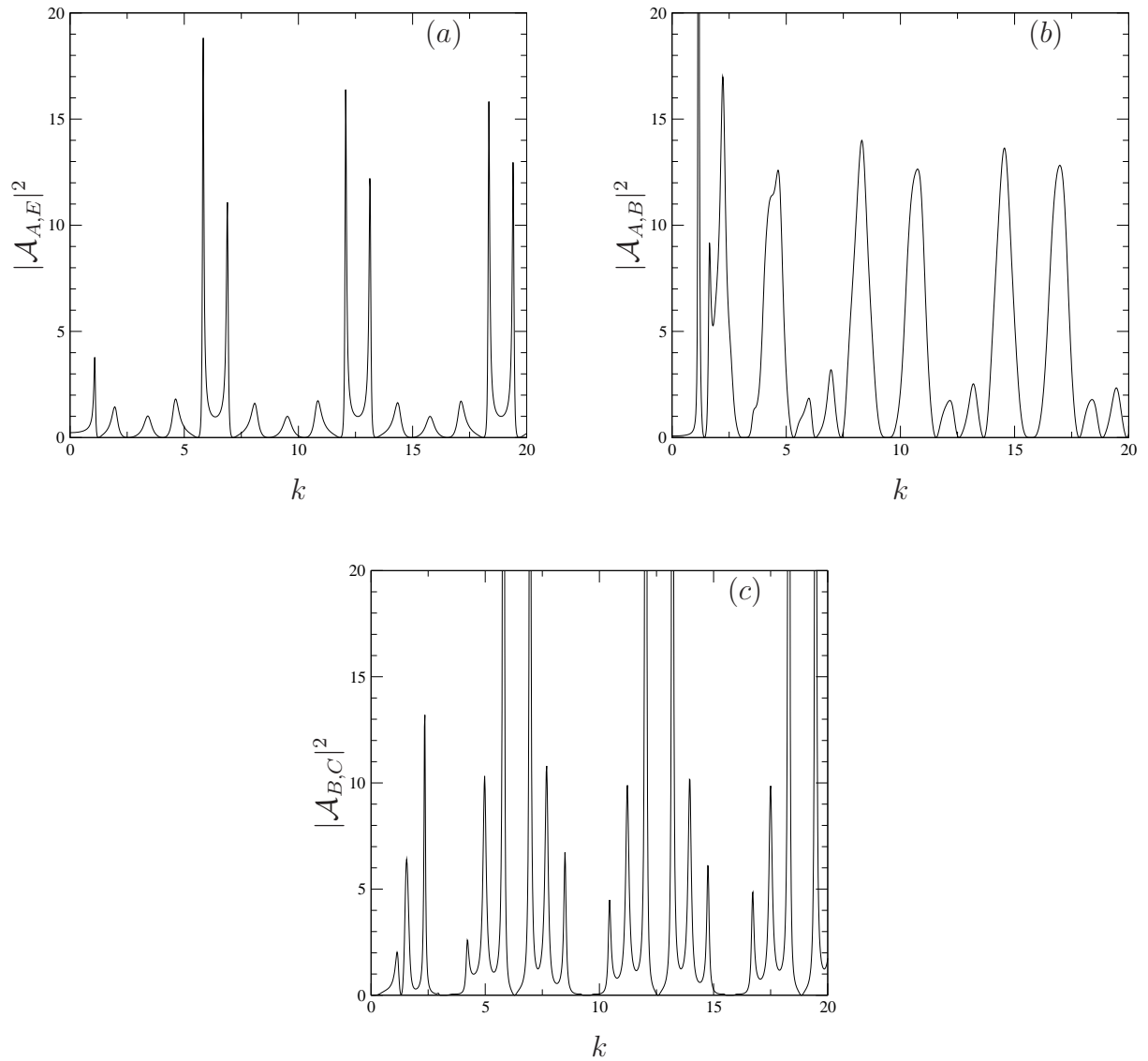


Figura 3.24: Comportamento da amplitude  $\mathcal{A}_{I,J}$  como função da energia usando a condição de contorno de Dirichlet ( $r_E = -1$ ) no vértice  $E$  da Figura 3.23. Amplitudes são para os quase-estados localizados entre os vértices (a)  $A$  e  $E$ , (b)  $A$  e  $B$  e (c)  $B$  e  $C$ .

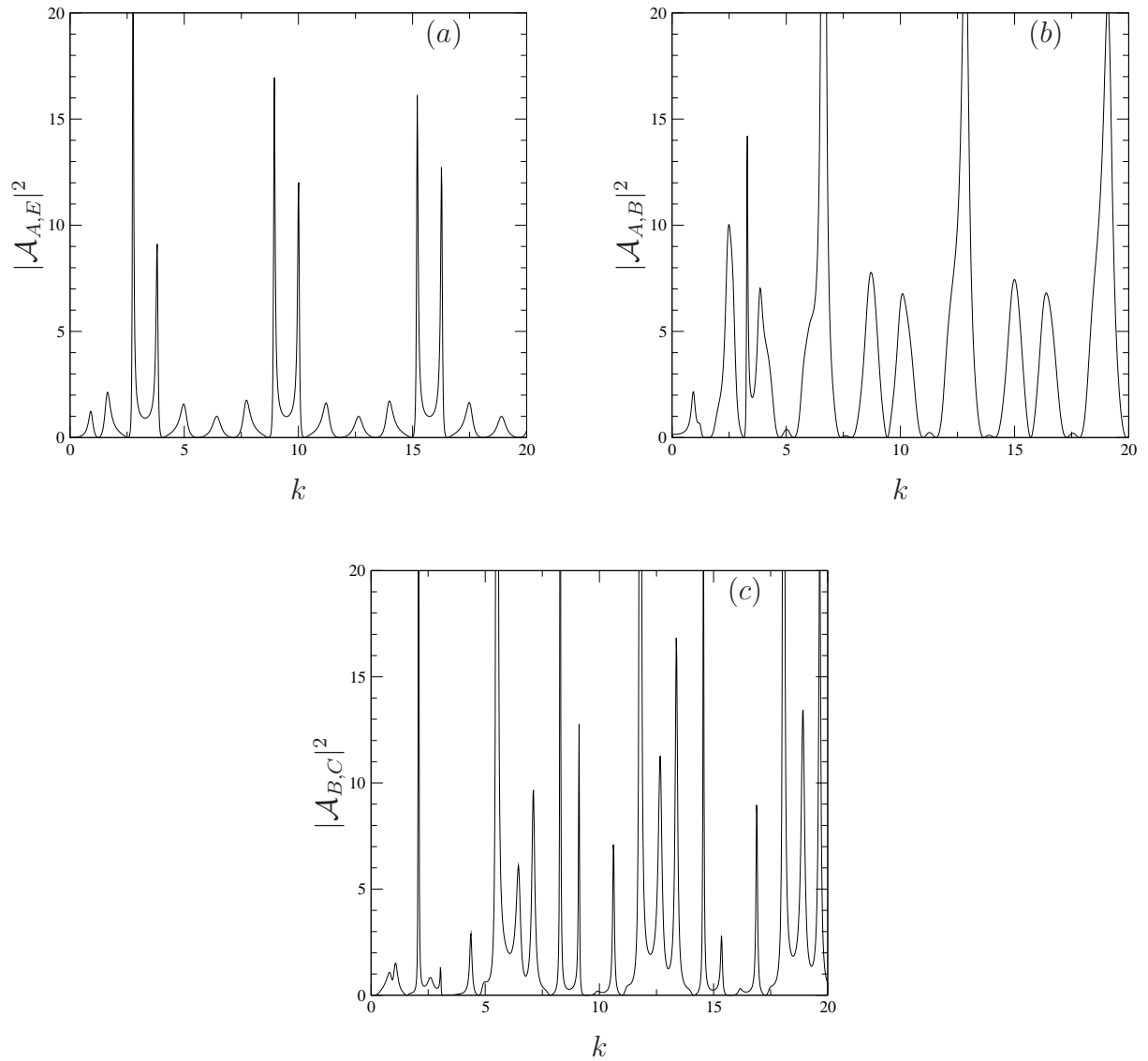


Figura 3.25: Comportamento da amplitude  $\mathcal{A}_{I,J}$  como função da energia usando a condição de contorno de Neumann ( $r_E = 1$ ) no vértice  $E$  da Figura 3.23. As amplitudes são para os quase-estados localizados entre os vértices (a)  $A$  e  $E$ , (b)  $A$  e  $B$  e (c)  $B$  e  $C$ .

## Caminhadas quânticas

### 4.1 Caminhadas quânticas - “quantum walks”

As caminhadas aleatórias quânticas ou simplesmente caminhadas quânticas representam as versões quânticas das caminhadas aleatórias clássicas (caminhadas clássicas) usuais. É um assunto bastante recente dentro da Física e apesar de alguns autores usarem tal nome para se referir ao fenômeno quântico [84, 85], em verdade, no belíssimo trabalho de Feynman sobre computadores mecânico-quânticos [86], encontramos uma proposta que pode ser interpretada como uma caminhada quântica (contínua) [87]. Porém, o primeiro artigo que explicitamente discute o conceito de caminhadas quânticas foi publicado em 1993 por Y. Aharonov, L. Davidovich e N. Zagury [88].

Caminhadas quânticas estão intimamente relacionadas com computação quântica e, de forma muito elegante, podem ser descritas em termos da terminologia empregada em informação quântica [88]. Isto não é de se estranhar pois caminhadas clássicas têm sido adotadas com sucesso no desenvolvimento de diversos algoritmos que resolvem de forma bastante eficiente diferentes problemas computacionais [89]. Assim, as conexões entre os casos clássicos e quânticos mostram a potencial utilidade dos últimos em ciência da computação (computação quântica). Recentemente, vários novos algoritmos empregam caminhadas quânticas, ao invés de clássicas, e se mostram muito mais robustos e rápidos que os primeiros. Como exemplo podemos citar o algoritmo de Shor para fatorar números grandes [90] e o algoritmo de Grover para realizar pesquisa num banco de dados não organizado [91].

Demonstrações experimentais do algoritmo de Grover têm sido realizadas em vários sistemas incluindo ressonância magnética nuclear [92–94], ótica linear [95, 96] e sistemas de íons aprisionados [97], usando átomos de Rydberg individuais [98], ótica clássica [99] e recentemente implementado em cadeias lineares de íons aprisionados [100]. Também foi

mostrado por Shenvi et al. [101], que é possível realizar buscas em um banco de dados com a topologia de um hipercubo mais rapidamente do que pode ser feito classicamente. Este é um algoritmo baseado em um oráculo, o qual é uma máquina abstrata usada para estudar problemas de decisão. Um oráculo pode ser pensado como um caixa preta que é capaz de decidir em problemas de decisão em um único passo, isto é, um oráculo tem a habilidade de reconhecer soluções para certos problemas [102].

Outra aplicação bem sucedida foi demonstrada por Childs et al. [103], que também construíram um problema com um oráculo que pode ser resolvido por um algoritmo quântico, explorando uma caminhada quântica, exponencialmente mais rápido que qualquer outro algoritmo clássico. Ambainis [104, 105] usou caminhadas quânticas para construir um algoritmo para distinção de elementos e sua generalização, um problema extensivamente estudado tanto na computação clássica como na quântica. Estes resultados são extremamente promissores, mas ainda estão muito longe da diversidade de problemas em que as caminhadas clássicas fornecem as melhores soluções conhecidas. As caminhadas clássicas sustentam muitos métodos em física computacional, como simulações de Monte Carlo, então uma alternativa quântica mais eficiente pode presumidamente abrir uma potencial aplicação de computadores quânticos para resolver problemas em física.

Todos estes resultados despertam um grande interesse teórico no entendimento das propriedades das caminhadas quânticas. Entretanto, a dinâmica das caminhadas quânticas desvia-se bastante da sua análoga clássica [103, 106, 107]. Entre as diferenças, as caminhadas quânticas propagam-se muito mais rapidamente do que as caminhadas clássicas. Em particular em 1D, ou seja em uma linha, o desvio padrão da posição da partícula realizando uma caminhada quântica aumenta linearmente com o número de passos ao invés de com sua raiz quadrada, como no caso clássico [108, 109].

Existem muitas propostas da implementação das caminhadas quânticas usando uma grande variedade de sistemas físicos, incluindo ressonância magnética nuclear [110, 111], cavidades em eletrodinâmica quântica [88, 112–114], armadilhas de íons [115], ótica clássica [116–123], ótica quântica [124, 125], multi-portas óticas [126–130], redes óticas e micro armadilhas [131–135], pontos quânticos [136–138], redes de guias de onda [139] e também em redes lógicas gerais [140, 141]. Nenhuma destas propostas entretanto consideram caminhadas quânticas em grafos gerais, com a maioria descrevendo somente uma implementação unidimensional. Em um artigo recente, Manouchehri et al. [142] apresentam um esquema novo com simplificações consideráveis na evolução das caminhadas quânticas em grafos gerais não direcionados, o qual pode ser realizado usando um condensado de Bose-Einstein dentro de uma rede ótica. Este esquema é particularmente elegante pois não é necessário que a partícula (o caminhante) desloque-se entre os vértices.

Existem basicamente três tipos de caminhadas quânticas [129]. O primeiro tipo, ca-

minhadas quânticas com tempo discreto é baseada em estados “moeda”, em inglês “*coined quantum walk*” devido a Watrous [143]. Esse modelo faz uso de um sistema quântico adicional, *uma moeda quântica*, para definir qual será o sentido da caminhada [88]. No segundo tipo, a dinâmica do sistema quântico é descrita através de um Hamiltoniano usando tempo contínuo [107]. E o terceiro tipo de caminhadas quânticas, também discreto, é baseado num modelo ótico físico de multi-portas que foi recentemente introduzido por Hillery et al. [126–128].

Nos dois primeiros tipos de caminhadas quânticas em grafos, a formulação usa como estados de base ortonormais os vértices do grafo. Se uma partícula está no estado  $|n\rangle$  significa que está localizada no vértice  $n$ . O terceiro tipo de caminhada é baseado na analogia do grafo com um interferômetro com multi-portas óticas, onde as multi-portas são os vértices do grafo. Neste caso a caminhada acontece nas ligações do grafo ao invés de ocorrer nos vértices e cada ligação possui dois estados, correspondendo aos dois possíveis sentidos de deslocamento na ligação.

Nesta tese focamos nossa atenção somente nos modelos com tempo discreto, onde iremos discutir os diferentes aspectos de evolução, desenvolvendo métodos de função de Green para os mesmos. Está fora do escopo do presente trabalho discutirmos grafos quânticos e métodos de função de Green no contexto de computação quântica.

## 4.2 Caminhadas clássicas e cadeias de Markov

Antes de considerarmos as caminhadas quânticas, é interessante lembrar o formalismo da caminhas clássicas, incorporada na noção de cadeias de Markov. Uma cadeia de Markov é um processo estocástico onde o estado futuro depende apenas do estado presente, e não dos estados passados e as variáveis aleatórias que dependem do tempo estão definidas em um espaço de estados discreto [144].

Considere um sistema sofrendo transições aleatórias entre um grupo discreto de posições. Seja um vetor coluna  $p$  com elementos positivos e com a soma sendo igual a 1, assim representando a probabilidade dos estados associados com as posições. Para cada estado possível existe um vetor coluna correspondente que fornece a probabilidade de transição para outro estado. A transição em si é um processo aleatório, podendo ser descrita por uma matriz  $M$  onde cada elemento  $ij$  é dado por

$$M_{ij} = Pr(i|j), \quad (4.1)$$

onde  $Pr(i|j)$  é a probabilidade de transição do posição  $i$  para a posição  $j$ . O estado após

um processo aleatório é dado por

$$p' = Mp. \quad (4.2)$$

Aplicações repetidas do processo aleatório são determinadas pela ação repetida da matriz  $M$ .

Seja o caso de uma partícula realizando uma caminhada (o caminhante) clássica com  $n$  passos de mesmo tamanho  $\ell$ , executada ao longo de uma linha, com  $p$  a probabilidade de um passo ser dado para a direita, e  $q = 1 - p$  a probabilidade do passo para esquerda. Sendo  $d$  o número de passos tomados para a direita e  $e$  o número de passos para a esquerda, com  $d + e = n$ , a probabilidade  $P_n(j)$  de encontrar a partícula na posição  $j = d - e$ , após  $n$  passos, é dada por

$$P_n(j) = \begin{cases} 0, & \text{se } j + n \text{ é ímpar} \\ \binom{n}{\frac{j+n}{2}} p^d q^{n-d}, & \text{se } j + n \text{ é par.} \end{cases} \quad (4.3)$$

Se o caminhante possui a mesma probabilidade  $\frac{1}{2}$  de ir tanto para a esquerda quanto para a direita, a matriz de transição é dada por

$$M = \begin{pmatrix} \ddots & & & & & \\ & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & \\ & & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \\ & & & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ & & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

e nesse caso a Equação (4.3) se reduz a

$$P_n(j) = \begin{cases} 0, & \text{se } j + n \text{ é ímpar} \\ \frac{1}{2^n} \binom{n}{\frac{j+n}{2}}, & \text{se } j + n \text{ é par.} \end{cases} \quad (4.5)$$

Assim, o caminhante na posição  $j$  vai para a posição  $j - 1$  e  $j + 1$  com probabilidade  $\frac{1}{2}$  em cada caso. Na Tabela 4.1 é mostrada a evolução de uma caminhada clássica com o caminhante começando em  $j = 0$  para até 5 passos. Nesta tabela as linhas subsequentes são obtidas pela adição de metade do valor de cada célula em uma dada linha para cada uma das duas células diagonalmente abaixo.

A generalização para uma caminhada em espaços com topologia de grafos é direta. Um exemplo simples é aquele onde uma partícula move-se numa rede onde cada vértice é ligado a outros 6 vértices (cada vértice com valência igual a seis,  $|V| = 6$ ) e a partícula evolui de acordo com as probabilidades fornecidas pelo lançamento de um dado. Uma



$j \Rightarrow$	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
$n \Downarrow$											
0						1					
1					1/2	0	1/2				
2				1/4	0	2/4	0	1/4			
3			1/8	0	3/8	0	3/8	0	1/8		
4		1/16	0	4/16	0	6/16	0	4/16	0	1/16	
5	1/32	0	5/32	0	10/32	0	10/32	0	5/32	0	1/32

Tabela 4.1: Evolução de uma caminhada clássica com  $p = q = \frac{1}{2}$ . A probabilidade é zero se  $j + n$  é ímpar e dada pela distribuição binomial, Equação (4.3), se  $j + n$  for par.

caminhada clássica em uma linha também pode ser vista como uma caminhada em um grafo  $\mathcal{G} = (V, L)$  com cada vértice com valência igual a dois,  $|V| = 2$ .

### 4.3 Definindo caminhadas quânticas

A Equação (4.2) tem uma forma muito similar à evolução temporal de um estado  $|\psi\rangle$  pela ação do operador de evolução temporal  $U$ ,

$$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle; \quad (4.6)$$

com a condição de normalização  $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ . A evolução para passos adicionais é dada pela aplicação sucessiva do operador  $U$ . Porém, se for realizado uma medida no sistema fazendo a projeção nos estados de base (depois de cada aplicação de  $U$ ), o resultado é análogo a um processo estocástico. Desta forma, pode ser descrito através de uma cadeia de Markov com os elementos da matriz de transição dados por

$$M_{ij} = U_{ij}^* U_{ij} = |U_{ij}|^2, \quad (4.7)$$

correspondendo ao  $ij$ -ésimo termo de  $U$ . Isto ocorre devido a perda de correlação entre os estados [145]. Este “limite clássico”, ou seja, o processo de medida que não é uma evolução unitária, é a forma natural na qual uma operação quântica sugere uma caminhada quântica.

Iremos introduzir as caminhadas quânticas em grafos nas próximas seções. Para maiores detalhes e aplicações, o leitor interessado poderá consultar os vários e excelentes artigos de revisão de Kempe [145], Tregenna et al. [146], Ambainis [147], Kendon [148] e

Caminhadas Clássicas	Caminhadas Quânticas
1. inicia na origem: $x = 0$	1. inicia na origem: $x = 0$
2. lançar uma moeda: CARA ou COROA	2. lançar uma moeda quântica: $ j\rangle \otimes  -\rangle \xrightarrow{\mathbf{H}_c} \frac{1}{\sqrt{2}}( j\rangle \otimes  -\rangle +  j\rangle \otimes  +\rangle)$ $ j\rangle \otimes  +\rangle \xrightarrow{\mathbf{H}_c} \frac{1}{\sqrt{2}}( j\rangle \otimes  -\rangle -  j\rangle \otimes  +\rangle)$
3. mover de uma unidade para esquerda <b>OU</b> direita de acordo com o estado da moeda:	3. mover de uma unidade para esquerda <b>E</b> direita de acordo com o estado da moeda quântica:
CARA: $x \rightarrow x - 1$	$ j\rangle \otimes  -\rangle \xrightarrow{\mathbf{S}_p}  j - 1\rangle \otimes  -\rangle$
COROA : $x \rightarrow x + 1$	$ j\rangle \otimes  +\rangle \xrightarrow{\mathbf{S}_p}  j + 1\rangle \otimes  +\rangle$
4. repetir as etapas 2 e 3 $n$ vezes	4. repetir os passos 2 e 3 $n$ vezes
5. medir a posição $-n \leq x \leq n$	5. medir a posição $-n \leq x \leq n$
6. repetir as etapas 1 a 5 muitas vezes $\rightarrow$ dist. prob. $P(j, n)$ binomial	6. repetir as etapas 1 a 5 muitas vezes $\rightarrow$ dist. prob. $P(j, n)$ bimodal
desvio padrão $\sigma_{cl} = \sqrt{n}$	desvio padrão $\sigma_q \sim n$

Tabela 4.2: Etapas para uma caminhada clássica (esquerda) e uma caminhada quântica (direita) numa linha. O símbolo  $|j\rangle \otimes |\sigma\rangle$  denota um caminhante quântico na posição (vértice)  $j$  como estado da moeda em  $\sigma$ . As operações quânticas  $\mathbf{H}_c$  e  $\mathbf{S}_p$  são definidas pelos seus efeitos sobre  $|j\rangle \otimes |\sigma\rangle$  com dado no texto.

Konno [149].

## 4.4 Caminhadas quânticas em uma linha

As caminhadas quânticas em uma linha é um exemplo simples que mostra muitas das propriedades das caminhadas quânticas. Ela também é frequentemente útil para análise de grafos mais complicados. Nas caminhadas clássicas em uma linha, a escolha de ir para a esquerda ou direita é dada aleatoriamente pelo lançamento de uma moeda. As etapas para uma caminhada clássica numa linha são dadas na Tabela 4.2 [150] (coluna da esquerda).

Para entender melhor a construção dos modelos das caminhadas quântica discreta, vamos revisar as caminhadas clássicas. Para tanto, discutiremos novamente a formulação mais simples de uma caminhada clássica numa linha dando um enfoque um pouco diferente do usual.

Considere um caminhante que inicia sua caminhada na origem  $x = 0$ , e sempre realiza passos de comprimento fixo  $\ell$ , movendo com velocidade constante  $v$ . A cada tempo em que alcança uma posição  $x(t = n\tau) = x_n = \pm j\ell$  ( $j = 0, 1, 2, \dots$ ) em  $\frac{t}{\tau} = n = 0, 1, 2, \dots$ ,

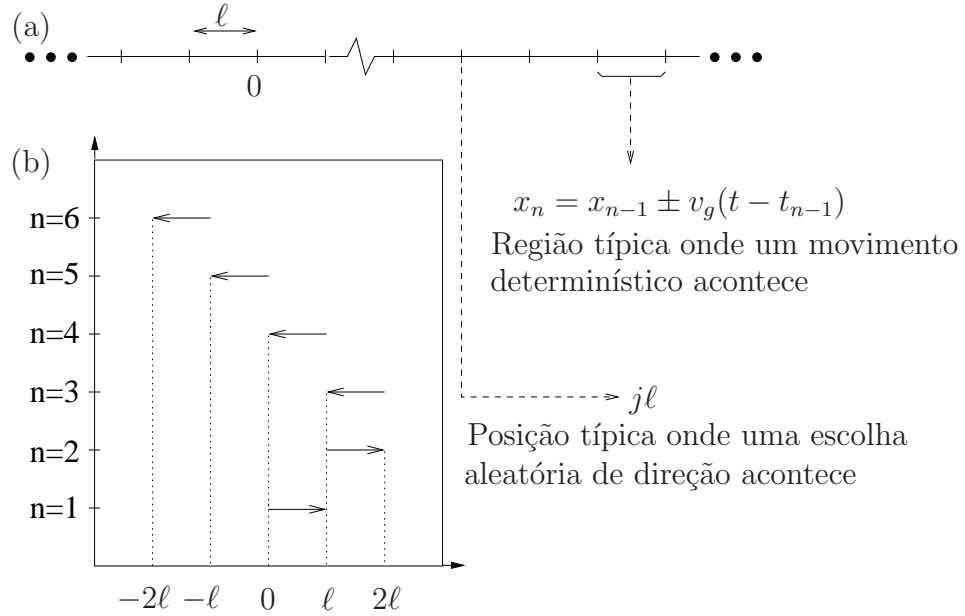


Figura 4.1: (a) Uma caminhada clássica encarada como uma alternância entre um processo estocástico e um processo determinístico. (b) Exemplo de uma caminho possível para  $t = 6\tau$ . Sua probabilidade é  $p^2(1-p)^4$ .

onde  $\tau = \frac{\ell}{v}$ , o caminhante escolhe uma nova direção aleatoriamente, a qual pode ser para a direita ( $\sigma = +1$ ) com probabilidade  $p$  ou para a esquerda ( $\sigma = -1$ ) com probabilidade  $1-p$ . Então, uma caminhada pode ser caracterizada por dois processos acontecendo em uma rede fictícia: (i) um puramente estocástico (escolha de direções), que ocorre nos “sítios da rede”  $\pm m\ell$ ; e (ii) outro puramente determinístico (movimento balístico:  $x(t) = x_{n-1} + \sigma v_g(t - t_{n-1})$ , para  $(n-1)\tau \leq t \leq n\tau$ ), que ocorre ao longo das “ligações da rede”. Não é necessário associar uma rede para as caminhadas clássicas, entretanto esta associação facilita bastante a formulação do problema. Desta forma, podemos associar um grafo unidimensional onde os vértices representam os sítios da rede e as ligações as conexões da rede. Está interpretação está esquematicamente representada na Figura 4.1.

Tendo a descrição acima como ponto de vista, existem duas possíveis implementações das caminhadas quânticas discretas, baseadas em qual dos processos (i) ou (ii) é assumido como primário para descrever os estados quânticos. Como veremos, os modelos apresentam diferenças qualitativas importantes.

## 4.5 Caminhadas quânticas com moeda

Na implementação das caminhadas quânticas onde o processo puramente estocástico (definição da nova direção) é assumido como primário, os vetores do espaço de Hilbert

descrevem o estado do sistema no instante de tempo  $n\tau$ , exatamente quando, no caso clássico, o caminhante realiza uma escolha probabilística da direção do próximo passo. Assim, podemos definir uma caminhada quântica num grafo usando os vértices como estados de base ortonormais  $|j\rangle$ ,  $j \in \mathbb{Z}$ , onde  $\mathbb{Z}$  é o conjunto dos números inteiros. Usando a visão de Feynman [86] e Deutsch [151], onde computação quântica é um processo paralelo, a cada passo a partícula desloca-se, em superposição, para a esquerda e direita com mesma amplitude (possivelmente com um diferença de fase). Nosso objetivo é então encontrar um operador unitário  $U$  que realize a evolução temporal do sistema quântico. O comportamento aleatório se dá quando realizamos medidas. A cada passo, devemos realizar uma transformação unitária

$$U|j\rangle = a|j-1\rangle + b|j\rangle + c|j+1\rangle, \quad (4.8)$$

com  $a, b, c \in \mathbb{C}$ . Ou seja, a partícula desloca-se para a esquerda com amplitude  $a$ , permanece no mesmo lugar com amplitude  $b$  ou desloca-se para a direita com amplitude  $c$ . O processo deve comportar-se da mesma forma em todos os vértices. Então,  $a$ ,  $b$  e  $c$  devem ser independentes de  $j$ , assim como as probabilidades para se deslocar para a direita/esquerda são independentes nas caminhadas clássicas. Entretanto, a definição de uma caminhada quântica dessa forma é fisicamente inaceitável, uma vez que o processo global resultante é necessariamente não-unitário, como veremos a seguir. A dinâmica quântica pura deve ser unitária, o que significa ser completamente determinística e reversível.

**Teorema 1.** (Ambainis [147]) e Meyer [152]) *A transformação  $U$  como definida pela Equação (4.8) é unitária se e somente se uma das seguintes condições é verdadeira:*

1.  $|a| = 1, |b| = 0, |c| = 0$
2.  $|a| = 0, |b| = 1, |c| = 0$
3.  $|a| = 0, |b| = 0, |c| = 1$

*Demonstração.* Escrevendo  $U$  em formato matricial temos

$$U = \begin{pmatrix} \ddots & a & & & & \\ & b & a & & & \\ & c & b & a & & \\ & & c & b & & \\ & & & & c & \ddots \end{pmatrix}.$$

Desde que  $U$  é unitário, suas colunas devem formar um conjunto ortonormal, assim

$$\begin{aligned}c^*a &= 0 \\ a^*b + b^*c &= 0 \\ |a|^2 + |b|^2 + |c|^2 &= 1.\end{aligned}$$

Das duas primeiras equações, pelo menos dois, entre  $a$ ,  $b$  ou  $c$ , devem ser iguais a zero e, da terceira equação, segue que um dos casos 1-3 é satisfeito.  $\square$

Assim, as únicas transformações são aquelas triviais: a cada passo, a partícula sempre desloca-se para a direita ou sempre permanece na mesma posição ou sempre desloca-se para a esquerda. Estes não são casos interessantes. Isso pode ser resolvido aumentando o espaço de Hilbert pela introdução de um grau de liberdade adicional, às vezes chamado de *quiralidade* ou de *moeda*. A essa construção dá-se o nome de *caminhadas quânticas com moeda*, devido a Watrous [143]. Se a partícula tem um grau de liberdade extra que assista seu movimento, então é possível construir processos unitários de translação. Este espaço de Hilbert da moeda é necessário para dar o caráter estocástico correto para o sistema e sua função é similar ao que definimos como “movendo para a direita” e “movendo para a esquerda” nas caminhadas clássicas.

Como no caso clássico, não é necessário associar uma rede para as caminhadas quânticas. Entretanto esta analogia facilita bastante a formulação do problema. Assim, interpretaremos uma caminhada quântica como um partícula movendo-se livremente nos vértices de um grafo unidimensional. Adicionalmente, podemos associar uma distância característica  $\ell = \Delta j = 1$  entre dois vértices do grafo.

Os estados quânticos  $|j\rangle$  definidos nos vértices geram o espaço de Hilbert de posição  $\mathcal{H}_p$ . Adicionalmente, para qualquer  $j$  existe uma moeda quântica, a qual possui dois estados,  $|-\rangle$  e  $|+\rangle$ , correspondendo a esquerda e direita, respectivamente, os quais geram o espaço de Hilbert bidimensional da moeda  $\mathcal{H}_c$ . O espaço de Hilbert que descreve o espaço do sistema inteiro,  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_p \otimes \mathcal{H}_c$ , onde  $\otimes$  representa o produto direto dos espaços de Hilbert, é dado por  $|j\rangle \otimes |\sigma\rangle$ , onde  $j \in \mathbb{Z}$  e  $\sigma = \pm$ . Um passo nesta caminhada consiste em duas etapas:

1. A aplicação de uma rotação no espaço da moeda  $\mathcal{H}_c$  através de um operador moeda  $\mathbf{C}_c$  unitário

$$\begin{aligned}\mathbf{C}_c |-\rangle &= a|-\rangle + c|+\rangle \\ \mathbf{C}_c |+\rangle &= b|-\rangle + d|+\rangle.\end{aligned}\tag{4.9}$$

2. A aplicação de um operador de deslocamento  $\mathbf{S}_p$  condicional nos estados  $|j\rangle$  dependente do estado da moeda

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_p |j\rangle \otimes |-\rangle &= |j-1\rangle \otimes |-\rangle \\ \mathbf{S}_p |j\rangle \otimes |+\rangle &= |j+1\rangle \otimes |+\rangle.\end{aligned}\quad (4.10)$$

Um passo na evolução discreta da caminhada é então dada pelo operador unitário  $\mathbf{U}_c = \mathbf{S}_p \cdot (\mathbf{1}_p \otimes \mathbf{C}_c)$  e para  $n$  passos é

$$|\psi_n\rangle = \mathbf{U}_c^n |\psi_i\rangle. \quad (4.11)$$

O operador  $(\mathbf{1}_p \otimes \mathbf{C}_c)$  indica a operação de identidade no subespaço de posição e a operação  $\mathbf{C}_c$  no subespaço da moeda, sendo unitário para qualquer

$$\mathbf{C}_c = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in \mathbf{U}(2), \quad (4.12)$$

com  $a, b, c, d \in \mathbb{C}$ . Aqui  $\mathbb{C}$  é o conjunto dos números complexos e  $\mathbf{U}(2)$  é o conjunto das matrizes unitárias  $2 \times 2$ . Sendo  $\mathbf{C}_c$  unitário, seus elementos devem satisfazer as relações [153]

$$|a|^2 + |c|^2 = |b|^2 + |d|^2 = 1, \quad ac^* + bd^* = 0, \quad c = -\Delta b^*, \quad d = \Delta a^*, \quad (4.13)$$

onde  $\Delta = \det \mathbf{C}_c = ad - bc$  com  $|\Delta| = 1$ . O operador  $\mathbf{S}_p$  é também claramente unitário uma vez que preserva norma, pois somente troca as amplitudes associadas com os vetores de base e pode ser escrito como

$$\mathbf{S}_p = \sum_j |j+1\rangle \langle j| \otimes |+\rangle \langle +| + \sum_j |j-1\rangle \langle j| \otimes |-\rangle \langle -|, \quad (4.14)$$

ou

$$\mathbf{S}_p = \mathbf{S} \otimes |+\rangle \langle +| + \mathbf{S}^\dagger \otimes |-\rangle \langle -|, \quad (4.15)$$

onde

$$\mathbf{S}|j\rangle = |j+1\rangle, \quad \mathbf{S}^\dagger|j\rangle = |j-1\rangle. \quad (4.16)$$

O operador de rotação da moeda  $\mathbf{C}_c$  pode ser especificado por qualquer matriz unitária, sendo possível definir uma rica família de caminhadas com diferentes  $\mathbf{C}_c$ 's [154]. De fato, o operador  $\mathbf{C}_c$  em geral pode ser escrito como um operador com 3 parâmetros [155]. Podemos escrever o operador unitário na forma

$$\mathbf{C}_c^{(\rho, \theta, \phi)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\rho} & \sqrt{1-\rho} e^{i\theta} \\ \sqrt{1-\rho} e^{i\phi} & -\sqrt{\rho} e^{i(\theta+\phi)} \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

onde  $0 \leq \theta, \phi \leq \pi$  são ângulos arbitrários e  $0 \leq \rho \leq 1$ . O parâmetro  $\rho$  controla a tendência do operador moeda, sendo que para  $\rho = \frac{1}{2}$  temos um operador não-tendencioso ou “honesto”, no sentido de tratar os estados (direções)  $|-\rangle$  e  $|+\rangle$  de forma equivalente. Sem perda de generalidade, como mostrado em [146], podemos nos restringir a operadores moeda mais simples e ainda assim abranger todo comportamento utilizando estados iniciais da moeda diferentes. Nesse sentido, uma moeda unitária freqüentemente utilizada é a chamada moeda Hadamard<sup>1</sup>

$$\mathbf{H}_c = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.18)$$

Podemos pensar em  $\mathbf{H}_c$  como o correspondente quântico ao lançamento de uma moeda no qual decidimos em qual direção mover. Para entender essa analogia, considere a moeda Hadamard e a modificação na qual, entre  $\mathbf{H}_c$  e  $\mathbf{S}_p$ , medimos o estado. Identificando

$$|-\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |+\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4.19)$$

então temos

$$\mathbf{H}_c|\mp\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-\rangle \pm |+\rangle). \quad (4.20)$$

Note a inversão entre  $|-\rangle$  e  $|+\rangle$  na notação usual para sistemas de spin  $\frac{1}{2}$  usada na física [82]. Essa forma é muito popular na matemática e na ciência da computação [156]. Assim, a moeda Hadamard gera uma combinação linear dos estados  $|-\rangle$  e  $|+\rangle$ . Sendo o estado inicial  $|j\rangle \otimes |-\rangle$ , então o estado depois de aplicar  $\mathbf{H}_c$  será  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|j\rangle \otimes |-\rangle + |j\rangle \otimes |+\rangle)$  e realizando a medida produz  $|j\rangle \otimes |-\rangle$  e  $|j\rangle \otimes |+\rangle$  com probabilidade  $\frac{1}{2}$  cada. Se o estado é  $|j\rangle \otimes |+\rangle$ , então o estado depois de aplicar  $\mathbf{H}_c$  será  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|j\rangle \otimes |-\rangle - |j\rangle \otimes |+\rangle)$ . Realizando uma medida produz novamente  $|j\rangle \otimes |-\rangle$  e  $|j\rangle \otimes |+\rangle$  com probabilidade  $\frac{1}{2}$  cada. Desta forma,  $\mathbf{H}_c$  é equivalente a obter probabilisticamente os estados  $|j\rangle \otimes |-\rangle$  e  $|j\rangle \otimes |+\rangle$ . Na Tabela 4.2 comparamos as etapas para realizar uma caminhada clássica e quântica numa linha usando a transformação Hadamard. Outros operadores moeda representam situações com diferentes probabilidades de obter os estados  $|j\rangle \otimes |-\rangle$  e  $|j\rangle \otimes |+\rangle$ , como no caso clássico de moedas tendenciosas. Na Figura 4.2 mostramos esquematicamente as duas etapas (4.9) e (4.10) onde a moeda sofre uma transformação Hadamard. A caminhada quântica resultante é geralmente chamada de caminhada Hadamard.

Podemos nos perguntar: O que faz uma caminhada quântica serem “quântica”? A

<sup>1</sup>Em homenagem ao matemático francês Jacques Salomon Hadamard (8 de Dezembro de 1865 - 17 de outubro de 1963), também conhecida como transformação de Walsh-Hadamard, é um exemplo de uma classe de transformadas generalizadas de Fourier

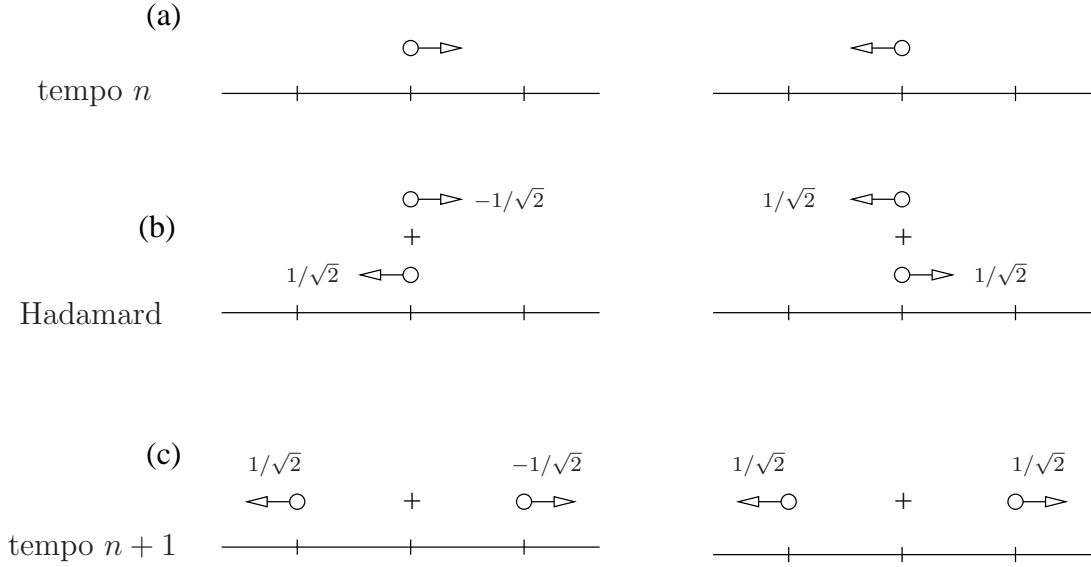


Figura 4.2: A dinâmica da caminhada Hadamard: Em (a) começamos no tempo  $n$  com a partícula no estado  $|+\rangle$  (“direita”) ou  $|-\rangle$  (“esquerda”). O resultado da transformação Hadamard é mostrado em (b), a partícula agora encontra-se numa sobreposição dos estados  $|-\rangle$  e  $|+\rangle$  com as amplitudes indicadas e então sofre um deslocamento condicional para em o estado em (c) no tempo  $n + 1$ .

reposta é a *interferência* que ocorre entre diferentes caminhos tomados pelo caminhante quântico. Para ilustrar isso, vamos realizar a evolução da caminhada quântica, sem realizar medidas intermediárias, usando a transformação Hadamard para alguns passos começando no estado inicial  $|\psi_i\rangle = |0\rangle \otimes |+\rangle$ :

$$\begin{aligned}
t=0 & \quad |0\rangle \otimes |+\rangle \\
t=1 & \xrightarrow{\mathbf{H}_c} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |-\rangle - |0\rangle \otimes |+\rangle) \\
& \xrightarrow{\mathbf{S}_p} \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1\rangle \otimes |-\rangle - |1\rangle \otimes |+\rangle) \\
t=2 & \xrightarrow{\mathbf{H}_c} \frac{1}{\sqrt{4}}(|-1\rangle \otimes |-\rangle + |-1\rangle \otimes |+\rangle - |1\rangle \otimes |-\rangle + |1\rangle \otimes |+\rangle) \\
& \xrightarrow{\mathbf{S}_p} \frac{1}{\sqrt{4}}(|-2\rangle \otimes |-\rangle + |0\rangle \otimes |+\rangle - |0\rangle \otimes |-\rangle + |2\rangle \otimes |+\rangle) \\
t=3 & \xrightarrow{\mathbf{H}_c} \frac{1}{\sqrt{8}}(|-2\rangle \otimes |-\rangle + |-2\rangle \otimes |+\rangle + \overline{|0\rangle \otimes |-\rangle} - \underline{|0\rangle \otimes |+\rangle} \\
& \quad - \overline{|0\rangle \otimes |-\rangle} - \underline{|0\rangle \otimes |+\rangle} + |2\rangle \otimes |-\rangle - |2\rangle \otimes |+\rangle) = \\
& \quad \frac{1}{\sqrt{8}}(|-2\rangle \otimes |-\rangle + |-2\rangle \otimes |+\rangle - 2|0\rangle \otimes |+\rangle + |2\rangle \otimes |-\rangle - |2\rangle \otimes |+\rangle) \\
& \xrightarrow{\mathbf{S}_p} \frac{1}{\sqrt{8}}(|-3\rangle \otimes |-\rangle + |-1\rangle \otimes |+\rangle - 2|-1\rangle \otimes |-\rangle + |1\rangle \otimes |-\rangle - |3\rangle \otimes |+\rangle).
\end{aligned} \tag{4.21}$$



$j \Rightarrow$	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
$n \Downarrow$											
0						1					
1					1/2	0	1/2				
2				1/4	0	2/4	0	1/4			
3			1/8	0	1/8	0	5/8	0	1/8		
4		1/16	0	2/16	0	2/16	0	10/16	0	1/16	
5	1/32	0	5/32	0	4/32	0	4/32	0	17/32	0	1/32

Tabela 4.3: Evolução de uma caminhada quântica numa linha usando a moeda Hadamard para  $n$  passos. Note que a distribuição começa a diferir da distribuição clássica da Tabela 4.1 depois do passo  $n = 3$ .

O resultado dos primeiros dois passos é o mesmo de uma caminhada clássica. Se, depois do segundo passo, medirmos o estado, obtemos os estados  $j = -2$  e  $j = 2$  com probabilidade  $\frac{1}{4}$  e  $j = 0$  com probabilidade  $\frac{1}{2}$ . Mas no terceiro passo, na aplicação do operador Hadamard, o estado  $|0\rangle \otimes |-\rangle$  (marcado com uma linha horizontal superior em (4.21)) sofre interferência destrutiva enquanto que o estado  $|0\rangle \otimes |-\rangle$  (marcado com uma linha horizontal inferior em (4.21)) sofre interferência construtiva. Na Tabela 4.3 mostramos as probabilidades da evolução para uma caminhada quântica para até 5 passos usando o operador Hadamard. Comparando com a Tabela 4.1, podemos notar que a distribuição começa a diferir da distribuição clássica depois do terceiro passo.

No tempo  $n$ , teremos  $2^n$  termos, com amplitude  $\pm \frac{1}{\sqrt{2^n}}$ . Cada um desses termos corresponde a um caminho em uma caminhada clássica. Para obter as amplitudes para a caminhada Hadamard em uma posição  $j$  particular, precisamos somar as amplitudes de todos os caminhos que terminam na posição  $j$ , levando em conta seu estado moeda. Para a partícula alcançar uma posição  $j$  no tempo  $n$ , ela deve mover  $e = \frac{n-j}{2}$  passos para a esquerda e  $d = \frac{n+j}{2}$  passos para a direita. Os detalhes para obtenção das amplitudes são discutidos em [157]. Assim, as amplitudes  $a_+^{\mathbf{H}^c}(j, n)$  e  $a_-^{\mathbf{H}^c}(j, n)$  para a caminhada Hadamard para o estado no vértice  $j$ , com estado moeda  $|+\rangle$  e  $|-\rangle$ , são dadas por

$$\begin{aligned}
 a_-^{\mathbf{H}^c}(j, n) &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_k \binom{e-1}{k} \binom{d}{k} (-1)^{e-k-1}, \\
 a_+^{\mathbf{H}^c}(j, n) &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_k \binom{e-1}{k-1} \binom{d}{k} (-1)^{e-k}
 \end{aligned} \tag{4.22}$$

respectivamente, com  $-j \leq n < j$  e para  $j = n$  a amplitude é  $\frac{1}{\sqrt{2^n}}$ .

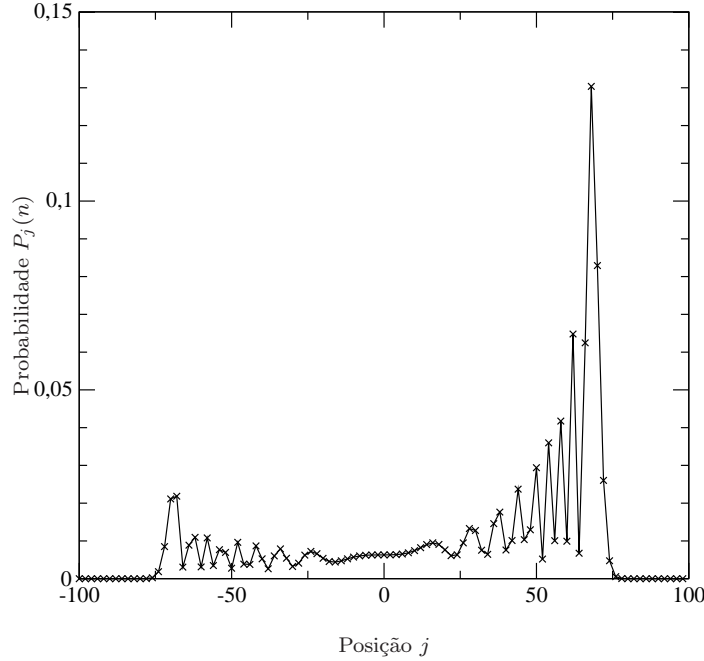


Figura 4.3: A distribuição de probabilidade para uma caminhada quântica após  $n = 100$  passos. Gerado com o operador moeda  $\mathbf{H}_c$  e estado inicial  $|\psi\rangle = |0\rangle \otimes |+\rangle$ . O estado inicial  $|\psi\rangle = |0\rangle \otimes |-\rangle$  gera o mesmo gráfico refletido sobre o eixo vertical. Somente as probabilidades para pontos pares são mostrados, uma vez que a probabilidade é zero para pontos ímpares.

Na Figura 4.3 mostramos a distribuição de probabilidade para uma caminhada quântica usando a moeda Hadamard com estado inicial  $|0\rangle \otimes |+\rangle$  para  $n = 100$  passos. É evidente que o padrão de interferência desta caminhada é muito mais complicado do que a Gaussiana obtida no caso clássico. Podemos claramente discernir uma distribuição com dois picos.

Como podemos notar, essa caminhada quântica é assimétrica, possuindo um deslocamento para direita. Essa assimetria é devido ao fato da moeda Hadamard tratar os estados  $|-\rangle$  e  $|+\rangle$  de forma diferente, introduzindo uma fase  $-1$  somente no caso  $|+\rangle$  (ver Equação (4.20)) e de termos começado a caminhada com o estado  $|\psi\rangle = |0\rangle \otimes |+\rangle$ . Se realizarmos a evolução usando como estado inicial  $|\psi\rangle = |0\rangle \otimes |-\rangle$  obtemos o mesmo gráfico refletido sobre o eixo vertical,  $j = 0$ . Para obter uma distribuição simétrica podemos começar com uma superposição de  $|0\rangle \otimes |-\rangle$  e  $|0\rangle \otimes |+\rangle$  (notar que estes estados não sofrem interferência um com o outro, pois são ortogonais). Assim, uma forma de corrigir esta assimetria seria usar o estado inicial simétrico  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |+\rangle + i|0\rangle \otimes |-\rangle)$ . Como a transformação Hadamard não introduz nenhuma amplitude complexa, as trajetórias de  $|+\rangle$  permanecem reais e as trajetórias de  $|-\rangle$  continuaram puramente imaginárias, conseqüentemente não interferindo uma com a outra, produzindo uma distribuição simétrica.

Outra solução para eliminar a assimetria é o uso de uma outra moeda balanceada, ou

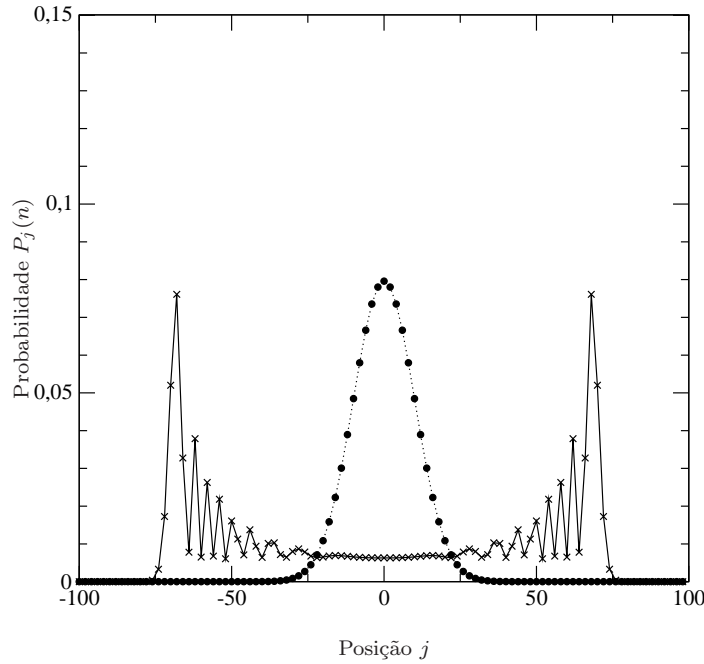


Figura 4.4: Comparação das distribuições de probabilidade para uma caminhada quântica (cruzes) e para uma caminhada clássica (círculos) para  $n = 100$  passos. A caminhada clássica possui uma distribuição Gaussiana e a caminhada quântica uma distribuição bimodal e claramente espalha-se muito mais rapidamente do que a caminhada clássica. Essa caminhada quântica também pode ser gerada usando o operador moeda  $\mathbf{Y}_c$  com estado inicial  $|\psi\rangle = |0\rangle \otimes |+\rangle$  ou usando  $\mathbf{H}_c$  com estado inicial  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |+\rangle + i|0\rangle \otimes |-\rangle)$ . Somente as probabilidades para pontos pares são mostrados, uma vez que a probabilidade é zero para pontos ímpares.

seja

$$\mathbf{Y}_c = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.23)$$

pois leva a uma situação simétrica mesmo quando iniciando com um estado assimétrico tal como  $|\psi\rangle = |0\rangle \otimes |+\rangle$  [145].

A Figura 4.4 mostra a distribuição de probabilidades para uma caminhada quântica simétrica, onde também mostramos a distribuição de probabilidade para uma caminhada clássica. O padrão da distribuição de probabilidade da caminhada quântica é bimodal e bastante complicado, dificultando a análise da variância e do desvio padrão desta caminhada. Ambainis et al. [108] fez uma análise da variância das caminhadas quânticas, mas apenas no limite assintótico.

A caminhada clássica simétrica numa linha depois de  $n$  passos tem variância  $\sigma_{cl}^2 = n$ , então o desvio padrão (distância percorrida com relação à origem) é da ordem de  $\sigma_{cl} = \sqrt{n}$ . Em contraste, pode ser mostrado que as caminhadas quânticas tem uma variância da ordem de  $\sigma_q^2 \sim n^2$ , o que implica que o desvio padrão é da ordem de  $\sigma_q \sim n$ . As caminhadas quânticas propagam-se quadraticamente mais rápidas que as caminhadas clássicas! Adicionalmente, a caminhada espalha-se quase uniformemente entre o intervalo  $[-\frac{n}{\sqrt{2}}, \frac{n}{\sqrt{2}}]$

como pode ser visto na Figura 4.4 e mostrada analiticamente em [108]. Novamente este comportamento contrasta com a caminhada clássica na qual a distribuição tem um pico ao redor da origem.

## 4.6 Caminhadas quânticas em grafos não-direcionados

Usando as idéias das caminhadas quânticas numa linha, podemos generalizar a definição para caminhadas quânticas em grafos gerais não-direcionados. Vários aspectos das caminhadas quânticas em grafos gerais e em dimensões maiores foram estudados recentemente [101, 158–160]. Vamos primeiro defini-las para grafos  $d$ -regulares. Caminhadas quânticas em grafos regulares foram primeiramente discutidas por Watrous [161]. Grafos regulares são grafos onde todos os vértices têm valência  $d$ , ou seja, todos os vértices possuem o mesmo número  $d$  de ligações. O subespaço de Hilbert da moeda,  $\mathcal{H}_c$ , possui dimensão  $d$ . Já o subespaço de Hilbert de posição,  $\mathcal{H}_p$ , possui valores discretos para cada vértice do grafo e tem dimensão  $V$ , que é o número de vértices. Da mesma forma que na caminhada quântica numa linha, a caminhada acontece no espaço  $\mathcal{H}_c \otimes \mathcal{H}_p$ . Em cada vértice as ligações são indexadas por um índice  $l$ . Isto é mostrado para um grafo regular arbitrário na Figura 4.5.

Seja  $V$  o grupo de vértices e  $L$  o grupo de ligações, então os estados de base são dados por  $|v\rangle \otimes |l\rangle$  para todo  $v \in V$  e  $l \in L$ , tal que a ligação  $l$  é incidente ao vértice  $v$ , ou seja, o estado associado com o vértice  $v$  apontando ao longo da ligação  $l$  é  $|v\rangle \otimes |l\rangle$  (correspondendo a  $|j\rangle \otimes |-\rangle$  numa linha, por exemplo). Nessa caminhada quântica, a partícula não está mais localizada nos vértices. Podemos pensar assim no espaço da moeda como diretamente associado com as ligações do grafo. O operador que realiza um passo nessa caminhada quântica é definido novamente por uma rotação no espaço da moeda ( $\mathbf{1}_p \otimes \mathbf{C}_c$ ) e um deslocamento  $\mathbf{S}_p$ . O operador moeda é novamente unitário e o deslocamento é definido por

$$\mathbf{S}_p |v\rangle \otimes |l\rangle = |v'\rangle \otimes |l'\rangle, \quad (4.24)$$

onde  $v'$  é o vértice conectado ao vértice  $v$  pela ligação  $l$  e indexado  $l'$  em  $v'$ . Existem muitas formas de indexar as ligações em cada vértice. Podemos fazer arbitrariamente, como foi feito na Figura 4.5, mas sempre que possível escolhemos de tal forma a refletir a simetria do grafo. Por exemplo, numa rede quadrada podemos usar os índices  $\uparrow, \rightarrow, \downarrow$  e  $\leftarrow$  para as direções correspondentes em cada caminho.

Para entendermos melhor como funciona essa caminhada, considere a Figura 4.5. Se

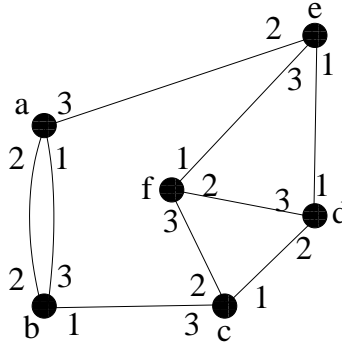


Figura 4.5: Um grafo regular. O espaço de posição tem letras a-f correspondendo a cada vértice e os números de 1-3 correspondem aos índices para cada ligação em cada vértice. As letras e os índices são atribuídos arbitrariamente.

começarmos a caminhada em  $|\psi_i\rangle = |a\rangle \otimes |1\rangle$ , temos

$$\begin{aligned}
 t=0 & \quad |a\rangle \otimes |1\rangle \\
 t=1 & \xrightarrow{\mathbf{C}_c} \alpha|a\rangle \otimes |1\rangle + \beta|a\rangle \otimes |2\rangle + \gamma|a\rangle \otimes |3\rangle \\
 & \xrightarrow{\mathbf{S}_p} \alpha|b\rangle \otimes |3\rangle + \beta|b\rangle \otimes |2\rangle + \gamma|e\rangle \otimes |2\rangle,
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

onde  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  são as amplitudes devido ao operador moeda. É importante ressaltar que o operador moeda atua em todos os vértices em um único passo. No exemplo acima, todos os outros estados possuem amplitude zero em nosso estado inicial.

O operador moeda  $\mathbf{C}_c$  é agora uma transformação unitária  $d$ -dimensional, o número de ligações em cada vértice, o que nos fornece uma grande liberdade de escolha. Em geral, se quisermos manter a condição de que o operador moeda seja balanceado em grafos gerais, ou seja, que todas as direções sejam obtidas com a mesma probabilidade, podemos usar a moeda transformada de Fourier discreta (TFD)

$$\mathbf{D}_c = \frac{1}{\sqrt{d}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & \omega & \omega^2 & \dots & \omega^{d-1} \\ 1 & \omega^2 & \omega^4 & \dots & \omega^{2(d-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \omega^{d-1} & \omega^{2(d-1)} & \dots & \omega^{(d-1)(d-1)} \end{pmatrix}. \tag{4.26}$$

Aqui  $\omega = e^{2\pi i/d}$  é a  $d$ -ésima raiz da unidade. De alguma forma esta é uma generalização da transformação Hadamard, dada pela Equação (4.18), pois a operação Hadamard é obtida da TFD com  $n = 2$ . A moeda TFD reproduz exatamente uma caminhada quântica com a mesma probabilidade  $\frac{1}{d}$  de deslocar ao longo de cada ligação, mas introduz diferenças de fases dependendo do caminho. Estas fases quebram a simetria das caminhadas quânticas da mesma forma que a moeda Hadamard  $\mathbf{H}_c$  faz nas caminhadas quânticas em uma linha.

Outro operador moeda utilizado é uma extensão da moeda balanceada  $\mathbf{Y}_c$ . Fisicamente, uma partícula em uma caminhada quântica pode ser considerada movendo-se através do grafo e sofrendo espalhamento nos vértices. Essa abordagem para a caminhada quântica será discutida em mais detalhes na Seção 4.8. Se a matriz da moeda corresponde a uma operação física de espalhamento, então a amplitude resultante deve respeitar a simetria da interação. Então a moeda balanceada reflete a simetria da caminhada quântica numa linha de uma forma que a moeda Hadamard não faz. Existem algumas moedas que produzem caminhadas quânticas correspondendo a processos físicos, tal como versões discretas das equações de Schrödinger e Dirac. Por exemplo, numa caminhada quântica numa rede quadrada, podemos usar como base  $\uparrow$ ,  $\rightarrow$ ,  $\downarrow$  e  $\leftarrow$ , estados correspondentes aos deslocamentos na direção da seta, poderíamos usar uma moeda na forma

$$\mathbf{C}_c = \begin{pmatrix} r & f & t & f \\ f & r & f & t \\ t & f & r & f \\ f & t & f & r \end{pmatrix}, \quad (4.27)$$

pois uma partícula chegando em qualquer vértice deverá ter a mesma amplitude associada com reflexão (r), transmissão (t) ou deflexão (f).

Para um grafo regular geral sem qualquer outra estrutura, existe somente um aspecto que quebra a simetria do problema: a ligação ao longo da qual a partícula está chegando no vértice. Então, uma moeda respeitando esta característica seria uma matriz na forma

$$\mathbf{C}_c = \begin{pmatrix} r & t & \dots & t \\ t & r & \dots & t \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t & t & \dots & r \end{pmatrix}, \quad (4.28)$$

atuando em cada vértice. Temos então a amplitude  $r$  para os elementos da diagonal e  $t$  para os elementos fora da diagonal. Os elementos fora da diagonal representam a amplitude a cada mudança de ligação possível. Impondo que esta matriz seja unitária, temos restrições sobre  $r$  e  $t$ . De fato, pela ortogonalidade das colunas, encontramos que

$$\begin{aligned} |r|^2 + (d-1)|t|^2 &= 1 \\ r^*t + rt^* + (d-2)|t|^2 &= 0. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Seja  $\alpha = |r|$  e  $\beta = |t|$  os valores absolutos de  $r$  e  $t$ . A ação da moeda dependerá da diferença de fase  $\Delta$  entre  $r$  e  $t$  ( $r^*t + rt^*$ ), pois qualquer fase global pode ser fatorada da

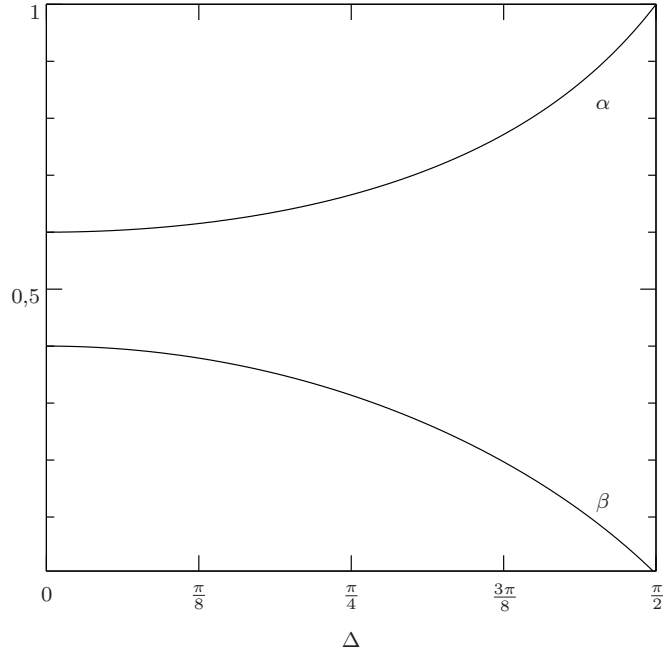


Figura 4.6: Variação dos valores absolutos dos elementos da diagonal  $\alpha$  e dos elementos não diagonais  $\beta$ , como função da diferença de fase com  $n = 5$ . Quando  $n \rightarrow \infty$ ,  $\alpha \rightarrow \infty$  e  $\beta \rightarrow 0$ .

matriz. Então, como  $r^*t + rt^* = 2\alpha\beta \cos \Delta$ , temos

$$\begin{aligned} \alpha^2 + (d-1)\beta^2 &= 1 \\ 2\alpha\beta \cos \Delta + (d-2)\beta^2 &= 0. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Para  $d = 2$ , existem 3 soluções para (4.30): a matriz identidade, a matriz de Pauli,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.31)$$

e a matriz simétrica  $\mathbf{Y}_c$  da Equação (4.30). Resolvendo esse sistema para  $\alpha$  e  $\beta$  leva a um conjunto contínuo de soluções para  $d > 2$ . Estas soluções são dadas por

$$\begin{aligned} \alpha &= \left( 1 + \frac{4(d-1) \cos \Delta}{(d-2)^2} \right)^{-1/2}, \\ \beta &= \frac{2\alpha \cos \Delta}{d-2}. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Estas soluções são mostradas na Figura 4.6 para  $d = 5$ . Quando  $\Delta \rightarrow \frac{\pi}{2}$ ,  $r$  e  $t$  tornam-se vetores ortogonais no plano complexo,  $\beta \rightarrow 0$ , e a moeda torna-se um múltiplo da identidade. Quando  $\Delta \rightarrow 0$ ,  $r$  e  $t$  tornam-se vetores paralelos, produzindo outra solução que pode ser escrita como uma matriz real (os elementos  $r$  e  $t$  devem possuir

sinais contrários). Para o caso  $\Delta = 0$  obtemos o operador de difusão de Grover [162] (*moeda Grover*)

$$\mathbf{G}_c = \begin{pmatrix} -1 + \frac{2}{d} & \frac{2}{d} & \cdots & \frac{2}{d} \\ \frac{2}{d} & -1 + \frac{2}{d} & \cdots & \frac{2}{d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{2}{d} & \frac{2}{d} & \cdots & -1 + \frac{2}{d} \end{pmatrix}, \quad (4.33)$$

o qual pode ser escrito como

$$\mathbf{G}_c = -\mathbf{1} + 2|\psi\rangle\langle\psi|, \quad (4.34)$$

onde

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{j=0}^d |j\rangle \quad (4.35)$$

é uma combinação linear de todos os estados do grafo. Esta escolha da moeda Grover possui somente elementos reais e assegura que as amplitudes espalham-se pelo grafo o mais rápido possível, pois usando o operador identidade como moeda não há movimento nenhum no grafo e a moeda Grover tem a propriedade de que a norma  $\|\mathbf{G}_c - \mathbf{1}\|$  tem um valor máximo [158], representando a moeda mais diferente possível da identidade. Quando  $n$  aumenta, todas as soluções, incluindo a moeda Grover, tendem para o operador unitário, o que não pode ser contornado, porém isso não significa que essa moeda não realize um emaranhamento entre os estados.  $\mathbf{G}_c$  não é uma moeda balanceada, pois a probabilidade de refletir ( $= \left(1 - \frac{2}{d}\right)^2$ ) é diferente da probabilidade de transmitir para as outras  $(d-1)$  direções ( $= \frac{4}{d^2}$ ).

Podemos estender a definição das caminhadas quânticas para grafos gerais não direcionados, Figura 4.7(a). Isto pode ser feito definindo o conjunto  $|v\rangle \otimes |l\rangle$  das ligações adjacentes como os estados de base e a adição de laços para os vértices como valência menor que  $d$ , onde  $d$  seria a maior valência, como na Figura 4.7(b). O deslocamento aplicado ao laço apenas mantém a caminhada no mesmo lugar.

No caso em que o operador moeda é condicionado à posição do vértice, onde utilizamos moedas com dimensões diferentes, então, como temos um número diferente de ligações em cada vértice, não podemos mais nos referir ao espaço no qual a caminhada acontece numa forma separável  $\mathcal{H}_c \otimes \mathcal{H}_p$ . Operadores moedas, com dimensionalidade diferentes, são aplicados ao subespaço gerado por cada vértice com diferentes números de ligações. Estes operadores  $\mathbf{C}_c^n$  podem ser matrizes unitárias arbitrárias como foi descrito nas Seções anteriores. No lugar de aplicar o operador  $\mathbf{1}_p \otimes \mathbf{C}_c$ , usamos uma generalização natural  $\mathbf{C}'_c$ , onde  $\mathbf{C}'_c$  é um novo operador que pode ser escrito numa forma diagonal em blocos nas



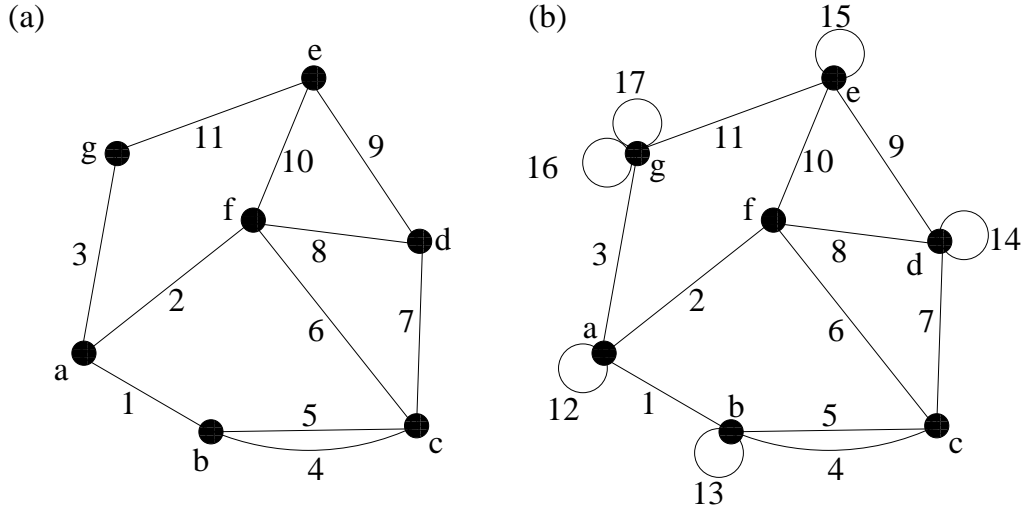


Figura 4.7: Um grafo não direcionado geral. Os vértices são indexados de  $a - g$  e as ligações de  $1 - 11$ . Em (b) o grafo é completado com laços de tal forma a torná-lo regular e usamos uma única moeda de dimensão 4. As letras e os índices são atribuídos arbitrariamente.

bases dos vértices ordenados

$$C'_c = \begin{pmatrix} C_c^{n_a} & & & & & & \\ & C_c^{n_b} & & & & & \\ & & C_c^{n_c} & & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & \ddots & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & \ddots \end{pmatrix}, \quad (4.36)$$

com cada  $n_v$  o número de ligações do vértice  $v$ . Então um passo unitário é dado por  $U_c = S_p C'_c$ .

## 4.7 Caminhadas quânticas em grafos direcionados

Definir uma caminhada quântica em grafos direcionados, Figura 4.8, é matematicamente mais trabalhoso. Seguindo Severini [163] é possível identificar uma caminhada quântica arbitrária pela associação de cada ligação do grafo com um estado independente, bastante similar à formulação para grafos não-direcionados. Então, qualquer emparelhamento entre as ligações chegando e saindo do vértice, no grafo onde cada vértice tem o mesmo número de ligações chegando e saindo, permitirá uma evolução unitária. Esta condição é claramente suficiente [164] e também pode ser mostrada necessária [163]. Um grafo que possui cada vértice com o mesmo número de ligações entrando e saindo é um grafo *Euleriano*, Figura 4.8(b). O operador moeda  $C_c$  aplica alguma transformação unitária no subespaço associado com as origens de cada ligação num vértice. Então, o operador de deslocamento  $S_p$  transfere a amplitude associada com cada ligação chegando a um vértice para alguma ligação saindo do mesmo vértice. Está implícito na escolha do operador de

deslocamento uma escolha para o emparelhamento entre as ligações entrando e saindo do vértice. Em caminhadas não direcionadas isto é feito de forma padrão, pelo emparelhamento das ligações entrando com eles mesmas. Mas em casos mais gerais de caminhadas em grafos direcionados esta opção nem sempre é possível.

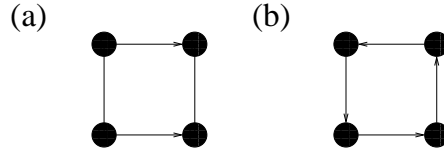


Figura 4.8: Dois grafos direcionados. Em (a) temos um grafo direcionado não-Euleriano e em (b) temos um grafo Euleriano, onde o número de ligação entrando é igual ao o número de ligações saindo de cada vértice.

Usando uma caminhada quântica direcionada, Hoyer et al. [165, 166] elaboraram um “toy model” que mostra um notável aumento na velocidade de propagação em relação à caminhada clássica, que passamos a discutir por seus aspectos interessantes. Seja uma caminhada clássica direcionada ao longo de uma linha com  $d - 1$  laços em cada vértice, como mostra a Figura 4.9. Estes laços podem ser considerados como pequenas dimensões adicionais fornecendo oportunidade para uma queda na velocidade de propagação. Clássicamente, em cada vértice a probabilidade de mover para o próximo vértice é  $1/d$ , então o valor esperado da posição no tempo  $T$  é  $T/d$ . Assim essa caminhada clássica será em uma escala de tempo da ordem de  $1/d$ ,  $\Theta(1/d)$ .

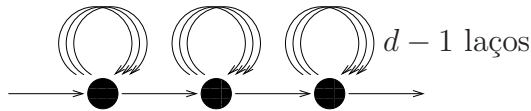


Figura 4.9: Caminhada direcionada na linha com  $d - 1$  laços em cada vértice.

Na versão quântica dessa caminhada, os estados de base são dados por

$$|j, \rightarrow\rangle, |j, 1\rangle, |j, 2\rangle, \dots, |j, d - 1\rangle, \quad (4.37)$$

para todos os valores inteiros não negativos de  $j$ . Aqui  $\rightarrow$  indica a ligação ao longo da linha e cada número indica cada um dos laços. Usamos a transformada de Fourier discreta de dimensão  $d$ , dada pela Equação (4.26), como uma operação moeda local em cada vértice. O emparelhamento das ligações é feito associando os laços com eles mesmos e associando as ligações chegando e saindo ao longo da linha, fornecendo a forma do operador de deslocamento  $\mathbf{S}$ ,

$$\begin{aligned} \mathbf{S}|j, \rightarrow\rangle &= |j + 1, \rightarrow\rangle \\ \mathbf{S}|j, k\rangle &= |j, k\rangle. \end{aligned} \quad (4.38)$$

Iniciamos a caminhada no estado  $|0, \rightarrow\rangle$  e aplicamos o operador de evolução repetidas vezes. Os resultados numéricos mostram que quando  $d \rightarrow \infty$ , o valor esperado da posição desta caminhada após  $T$  vai com  $T/2$ , independentemente de  $d$ . Assim, essa caminhada quântica evolui em um tempo  $\Theta(1)$ . Estes primeiros resultados sugerem que caminhadas quânticas em grafos direcionados podem produzir algoritmos quânticos rápidos, logo úteis. Porém o aumento na velocidade seja talvez mais difícil de ser obtido do que no caso de grafos não direcionados.

Na próxima Seção passamos a discutir uma segunda formulação das caminhadas quânticas discretas, a qual possibilita uma forma mais direta de aplicarmos métodos de função de Green, nosso propósito nessa tese.

## 4.8 Caminhadas quânticas discretas baseadas numa analogia interferométrica

Uma implementação de caminhadas quânticas onde o processo determinístico (evolução ao longo das ligações, ver Seção 4.4) é tomado como básico foi proposto recente por Hillery et al. [126] e baseia-se numa analogia com um interferômetro. Os vértices são encarados como elementos óticos conhecidos como  $2N$  portas, onde  $N$  é o número de ligações em cada vértice e as ligações correspondem aos caminhos que um fóton pode seguir através do interferômetro. Não existe moeda quântica nos vértices do grafo. Os estados são indexados pelas ligações ao invés dos vértices no grafo, e cada vértice possui dois estados, correspondendo aos dois possíveis sentidos de propagação. Se a ligação é indexada por  $(a, b)$ , corresponde a um fóton indo de  $a$  para  $b$  e o outro  $(b, a)$  corresponde a um fóton indo de  $b$  para  $a$ . Esta metodologia é facilmente estendida para grafos arbitrários, simplesmente escrevendo as regras de transição para cada vértice. Todas elas conjuntamente definem um operador unitário que avança a caminhada um passo. Esse modelo das caminhadas quânticas em grafos está relacionado de perto às redes óticas consideradas por Törmä et al. [167], tendo sido aplicado no estudo das caminhadas quânticas em hipercubos [129], para busca em grafos [168] e mais recentemente em busca em grafos altamente simétricos [169].

Temos assim dois modelos para as caminhadas quânticas discretas, a caminhada com moeda (Seção 4.5), tendo lugar nos vértices, e o que chamaremos de caminhadas nas ligações, onde a mesma acontece nas ligações entre os vértices. Representamos esquematicamente estas duas caminhadas na Figura 4.10 para o caso 1D. Passamos agora a descrever as caminhadas quânticas nas ligações.

Os vértices do grafo são indexados por inteiros, exatamente da mesma forma que foi

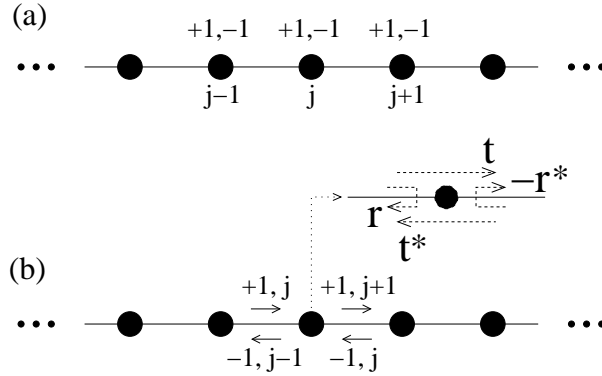


Figura 4.10: A “rede de Hilbert” associada à uma caminhada quântica, a qual não necessariamente é uma estrutura espacial, uma vez que os estados não precisam ser autovetores de posição. Os estados são definidos (a) nos vértices para as caminhadas quânticas com moeda e (b) nas ligações para as caminhadas quânticas nas ligações.

discutido na Seção 4.5. Considere o que acontece quando um fóton viajando na direção horizontal encontra um divisor de feixe vertical. O fóton tem uma certa amplitude de continuar na direção que estava indo, isto é, de ser transmitido e uma amplitude de mudar de direção, isto é, de ser refletido. O divisor de feixe tem dois modos de entrada, o fóton pode entrar pela esquerda ou direita e dois modos de saída, o fóton pode sair pela esquerda ou direita. O divisor de feixe define uma transformação unitária entre os modos de entrada e saída.

Precisamos traduzir essa analogia em termos de regras de transição para nossa caminhada quântica. Para isso, iremos usar uma notação um pouco diferente da comumente utilizada na literatura [126]. Ao longo de cada ligação, unindo dois vértices consecutivos  $j$  e  $j + 1$ , temos dois possíveis estados,  $|+1, j + 1\rangle$  e  $|-1, j\rangle$ , correspondendo aos dois possíveis sentidos de deslocamento do fóton. Observe que o espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$  não é mais dado com um produto direto. Cada estado da base,  $|\sigma, j\rangle$ , deste espaço é indexado por dois números quânticos. O primeiro,  $\sigma$ , define a “direção” de propagação e o segundo o vértice.

Suponha que o fóton incida sobre o vértice  $j$  pela esquerda, isto é, que esteja no estado  $|+1, j\rangle$ . Se o fóton for transmitido ele passará para o estado  $|+1, j + 1\rangle$  e se for refletido para o estado  $|-1, j - 1\rangle$ . Seja a amplitude de transmissão  $t$  e a amplitude de reflexão  $r$ . Então temos a regra de transição [126]

$$|+1, j\rangle \rightarrow r|-1, j - 1\rangle + t|+1, j + 1\rangle, \quad (4.39)$$

onde a condição de que o processo seja unitário implica que  $|r|^2 + |t|^2 = 1$ . A outra possibilidade é que o fóton incida sobre o vértice pela direita, isto é, esteja no estado  $|-1, j\rangle$ . Se este é transmitido, passará para o estado  $|-1, j - 1\rangle$  e se for refletido passará

para o estado  $|+1, j+1\rangle$ . A condição de que o divisor de feixe seja unitário nos fornece a outra regra de transição [126]

$$|-1, j\rangle \rightarrow -r^*|+1, j+1\rangle + t^*|-1, j-1\rangle, \quad (4.40)$$

onde  $z^*$  é o complexo conjugado de  $z$ . Estas regras especificam nossa caminhada e os coeficientes de reflexão e transmissão estão esquematicamente representados na Figura 4.10(b).

O caso onde  $t = 1$  e  $r = 0$  corresponde a propagação de uma partícula livre, onde um fóton no estado  $|+1, j+1\rangle$  simplesmente move um passo para a direita na caminhada. Se  $r \neq 0$ , então existe uma certa amplitude de mover para esquerda e direita. Um sistema físico análogo a esse é o movimento de uma partícula num potencial periódico. Os divisores de feixes podem ser pensados como centros espalhadores com o espalhamento resultante de um potencial localizado. Essa analogia das caminhadas quânticas com um espalhamento num potencial periódico será explorado na Capítulo 5, permitindo uma abordagem em termos de funções de Green para as caminhadas quânticas.

O operador  $\mathbf{U}$  que avança as caminhadas nas ligações de um passo é então dado por

$$\begin{aligned} \mathbf{U}|+1, j\rangle &= r|-1, j-1\rangle + t|+1, j+1\rangle \\ \mathbf{U}|-1, j\rangle &= -r^*|+1, j+1\rangle + t^*|-1, j-1\rangle. \end{aligned} \quad (4.41)$$

A evolução da caminhada para  $n$  passos é obtida pela aplicação consecutiva do operador  $\mathbf{U}$ ,

$$|\psi(n)\rangle = \mathbf{U}^n|\psi(0)\rangle, \quad (4.42)$$

e a probabilidade em uma dada ligação deve ser calculada levando em conta os dois sentidos de propagação. Dessa forma, a probabilidade de estar na ligação  $(j, j+1)$  é obtida pela projeção

$$P_{(j-1, j)}(n) = \sum_{\sigma} |\langle \sigma, j - \xi | \psi(n) \rangle|^2. \quad (4.43)$$

onde  $\xi = \frac{1-\sigma}{2}$  e  $\sigma = \mp$ . A soma acima é realizada nos dois possíveis sentidos de deslocamento da partícula em uma mesma ligação. Na Tabela 4.4 mostramos as probabilidades da evolução dessa caminhada quântica até 5 passos para o caso  $r = t = \frac{1}{\sqrt{2}}$  e estado inicial  $|+1, 0\rangle$ .

Na Figura 4.11 mostramos a distribuição de probabilidade para o caso  $r = t = \frac{1}{\sqrt{2}}$  e estado inicial  $|+1, 0\rangle$  para  $n = 100$  passos. Note que, da mesma forma que numa caminhada quântica com moeda, a distribuição de probabilidade não é Gaussiana. Além disso, a região onde a probabilidade de encontrar a partícula é alta, está compreendida entre  $-70$  e  $70$ . Uma análise assintótica dessa caminhada [126] mostra que a região de

<i>Estado</i> $\Rightarrow$	$ +1, -4\rangle$	$ +1, -3\rangle$	$ +1, -2\rangle$	$ +1, -1\rangle$	$ +1, 0\rangle$	$ +1, 1\rangle$	$ +1, 2\rangle$	$ +1, 3\rangle$	$ +1, 4\rangle$	$ +1, 5\rangle$	$ +1, 6\rangle$	
	$ -1, -5\rangle$	$ -1, -4\rangle$	$ -1, -3\rangle$	$ -1, -2\rangle$	$ -1, -1\rangle$	$ -1, 0\rangle$	$ -1, 1\rangle$	$ -1, 2\rangle$	$ -1, 3\rangle$	$ -1, 4\rangle$	$ -1, 5\rangle$	
$n \Downarrow$												
<b>0</b>						1						
<b>1</b>					1/2	1/2						
<b>2</b>				1/4	1/4	1/4	1/4					
<b>3</b>			1/8	1/8	0	4/8	1/8	1/8				
<b>4</b>		1/16	0	2/16	1/16	1/16	9/16	1/16	1/16			
<b>5</b>	1/32	1/32	4/32	0	4/32	0	4/32	16/32	1/32	1/32	1/32	

Tabela 4.4: Evolução da uma caminhada quântica nas ligações para  $n$  passos. As probabilidades para uma caminhada quântica com moeda, Tabela 4.3, são dadas pela soma das probabilidades dos estados  $|+1, j\rangle$  e  $|-1, j\rangle$ .

alta probabilidade encontra-se no intervalo  $-|t|n$  e  $|t|n$  e que as caminhada quânticas nas ligações também espalham-se quadraticamente mais rápido que as caminhadas clássicas.

Podemos escrever o operador  $\mathbf{U}$  na Equação (4.41) em termos de outros dois operadores. Seja o operador de translação  $T$  e de reversão  $R$  tais que

$$\begin{aligned}
T|\sigma, j\rangle &= |\sigma, j + \sigma\rangle, \\
T^\dagger|\sigma, j\rangle &= |\sigma, j - \sigma\rangle, \\
R|\sigma, j\rangle &= R^\dagger|\sigma, j\rangle = |-\sigma, j - \sigma\rangle.
\end{aligned} \tag{4.44}$$

Note que ambos são unitários e  $R^2 = \mathbf{1}$ . E também outros dois operadores  $\mathcal{T}$  e  $\mathcal{R}$ , para os quais os estados de base  $|\sigma, j\rangle$  são autovetores

$$\begin{aligned}
\mathcal{T}|\sigma, j\rangle &= t_j^{(\text{sinal}(\sigma))}|\sigma, j\rangle, & t_j^{(\text{sinal}(\sigma))} &= \rho_j \exp[i\sigma\phi_j], \\
\mathcal{R}|\sigma, j\rangle &= r_j^{(\text{sinal}(\sigma))}|\sigma, j\rangle, & r_j^{(\text{sinal}(\sigma))} &= \sigma\sqrt{1 - \rho_j^2} \exp[i\sigma\varphi_j],
\end{aligned} \tag{4.45}$$

com  $0 \leq \rho_j \leq 1$ ,  $0 \leq \phi_j, \varphi_j < 2\pi$  para qualquer  $j$  e  $\text{sinal}(\sigma)$  é dada por

$$\text{sinal}(\sigma) = \begin{cases} -, & \text{se } \sigma = -1 \\ +, & \text{se } \sigma = +1. \end{cases} \tag{4.46}$$

Por construção, temos as seguintes relações:  $r_j^{(-)} = -[r_j^{(+)}]^*$ ,  $t_j^{(-)} = [t_j^{(+)}]^*$ ,  $|t_j^{(\text{sinal}(\sigma))}|^2 + |r_j^{(\text{sinal}(\sigma))}|^2 = 1$ , e  $r_j^{(+)} [t_j^{(+)}]^* + [r_j^{(-)}]^* t_j^{(-)} = 0$ . Desta forma, o operador para a evolução dessa caminhada é então

$$U = T\mathcal{T} + R\mathcal{R}. \tag{4.47}$$

É importante comentar que a construção acima, representada pelas equações (4.44)–(4.47), é mais geral do que o modelo de caminhadas quânticas apresentada na Seção 4.5. Conforme descrito lá, utilizamos o mesmo operador moeda em todos os vértices, man-

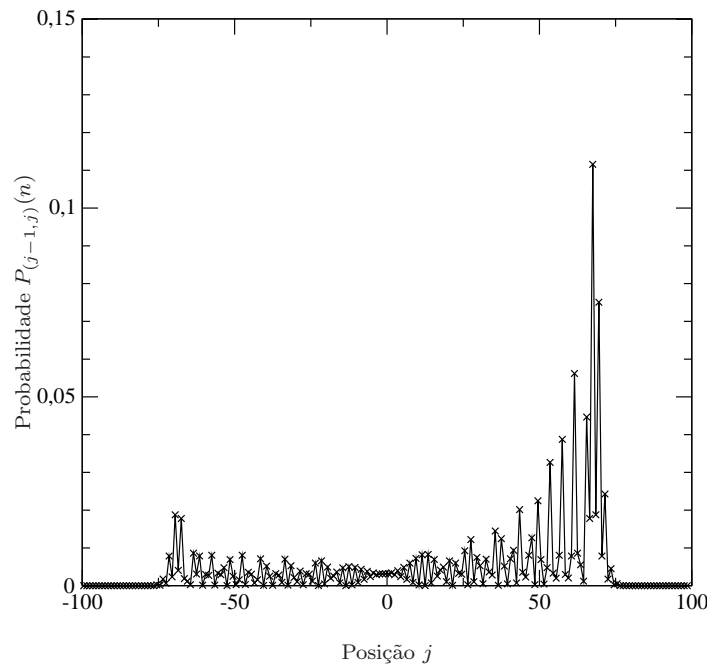


Figura 4.11: A distribuição de probabilidade para uma caminhada quântica após  $n = 100$  passos e estado inicial  $|\psi\rangle = | + 1, 0\rangle$ . Da mesma forma que numa caminhada quântica com moeda, é observado um deslocamento para a direita, devido ao estado inicial utilizado. Utilizando um estado inicial simétrico essa assimetria desaparece. A probabilidade é calculada nas ligações.

tendo constante a probabilidade de escolha entre direita e esquerda. Permitindo que na Equação (4.45)  $\rho$  e as fases dependam de  $j$ , estamos implicitamente assumindo distribuições de probabilidades dependentes da posição. Se fixarmos um mesmo  $\rho$ ,  $\varphi$  e  $\phi$  para qualquer  $j$ , resgatamos o caso usual. Situações utilizando diferentes moedas arranjadas em seqüências aperiódicas em [154], ou usando distribuição de Lévy [170], levam a comportamentos sub-balísticos das caminhadas quânticas, onde o desvio padrão está entre  $\sqrt{n}$  e  $n$ . Outra aplicação do uso de moedas diferentes está no estudo de decoerência nas caminhadas quânticas [148, 171], que fornece uma outra possível rota para o comportamento clássico das caminhadas quânticas [157]. Em [121], os autores usam um operador moeda dependente do tempo fornecendo uma explicação da utilidade das caminhadas quânticas com moeda para modelar caos quântico [172].

Os modelos de caminhadas quânticas apresentados são todos determinísticos no sentido mecânico quântico: dado um estado inicial  $|\Psi(0)\rangle$ , depois de  $n$  passos o estado  $|\Psi(n)\rangle$  é unicamente determinado por  $U^n|\Psi(0)\rangle$ , o qual é um estado perfeitamente permitido para o sistema. A estocasticidade entra nessa estrutura (isto é, aleatoriedade clássica) somente quando determinamos, através de medidas (de forma similar ao caso da moeda), a posição do caminhante.

## 4.9 A relação entre os dois modelos de caminhadas quânticas discretas

Nesta seção mostraremos que as caminhadas quânticas com moeda e as caminhadas quânticas nas ligações são equivalentes e que podemos obter a caminhada quântica com moeda a partir da caminhada nas ligações, utilizando um operador de projeção adequado. Tal resultado foi demonstrado para um caso particular em [126], aqui faremos uma demonstração totalmente geral, além de explicitamente construirmos os operadores de projeção de forma apropriada, o que não foi feito na literatura. No presente momento este resultado será demonstrado para a linha, porém acreditamos que isso seja verdade para grafos gerais, ficando assim como um tema para trabalho futuro.

Vamos começar examinando os espaços de Hilbert das duas caminhadas. Os estados de base ortonormais do espaço de Hilbert para as caminhadas com moeda na linha são dados por  $|j\rangle \otimes |-\rangle, |j\rangle \otimes |+\rangle$ , onde o estado  $|j\rangle$  corresponde ao vértice  $j$  e  $|-\rangle$  e  $|+\rangle$  aos estados da moeda. O espaço de Hilbert onde esta caminhada acontece é  $\mathcal{H}_c = L^2(\mathbb{Z}) \otimes L^2(\mathbb{Z}_2)$ . Os estado de base ortonormais do espaço de Hilbert das caminhadas nas ligações é  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}_2)$ , o qual é idêntico a  $\mathcal{H}_c$ .

O operador unitário que avança as caminhadas com moeda em um passo é dado por  $\mathbf{U}_c = \mathbf{S}_p \cdot (\mathbf{1}_p \otimes \mathbf{C}_c)$ , que usando a equação (4.15) pode ser escrito como

$$\mathbf{U}_c = (\mathbf{S} \otimes |+\rangle\langle +| + \mathbf{S}^\dagger \otimes |-\rangle\langle -|)(\mathbf{1}_p \otimes \mathbf{C}_c), \quad (4.48)$$

com  $\mathbf{C}_c \in U(2)$  sendo um operador moeda generalizado, Equação (4.12). Por motivo de clareza, o reescrevemos aqui como

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_c |-\rangle &= a|-\rangle + c|+\rangle \\ \mathbf{C}_c |+\rangle &= b|-\rangle + d|+\rangle. \end{aligned} \quad (4.49)$$

Seja o operador unitário  $\mathbf{U}$  que avança as caminhadas nas ligações de um passo

$$\begin{aligned} \mathbf{U} | - 1, j \rangle &= a | - 1, j - 1 \rangle + c | + 1, j + 1 \rangle \\ \mathbf{U} | + 1, j \rangle &= b | - 1, j - 1 \rangle + d | + 1, j + 1 \rangle. \end{aligned} \quad (4.50)$$

Vamos definir o operador isomorfo  $\mathbf{E} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}_c$ , o qual mapeia os estados das caminhadas nas ligações nos estados das caminhadas com moeda

$$\begin{aligned} \mathbf{E} | - 1, j \rangle &= |j\rangle \otimes |-\rangle \\ \mathbf{E} | + 1, j \rangle &= |j\rangle \otimes |+\rangle. \end{aligned} \quad (4.51)$$



Nós encontramos que (ver Apêndice D)

$$\mathbf{U}_c \mathbf{E} = \mathbf{E} \mathbf{U}, \quad (4.52)$$

de tal forma que as amplitudes das duas caminhadas são unitariamente equivalentes. Entretanto, existe uma diferença nas probabilidades. Esta diferença não está associada à dinâmica das caminhadas e sim com a forma que realizamos a projeção nos estados de base para obtermos as probabilidades. Nas caminhadas com moeda, a probabilidade no vértice  $j$  é obtida pela adição dos quadrados das amplitudes dos estados  $|j\rangle \otimes |-\rangle$  e  $|j\rangle \otimes |+\rangle$ . No mapeamento inverso  $\mathbf{E}^{-1}$ , estes estados correspondem a estados em diferentes ligações,  $| - 1, j\rangle$  e  $| + 1, j\rangle$ , respectivamente. A probabilidade numa dada ligação  $(j - 1, j)$  nas caminhadas nas ligações é obtida pela adição do quadrado das amplitudes dos estados na mesma ligação, isto é, dos estados  $| + 1, j\rangle$  e  $| - 1, j - 1\rangle$ . No entanto, da Equação (4.52) podemos escrever,  $\mathbf{U} = \mathbf{E}^{-1} \mathbf{U}_c \mathbf{E}$ . Desta forma, obtemos uma transformação direta entre o operador moeda e o operador das caminhadas nas ligações. Por exemplo, para o operador moeda geral da Equação (4.17) temos o operador  $\mathbf{U}^{(\rho, \theta, \phi)}$  dado por

$$\begin{aligned} \mathbf{U}^{(\rho, \theta, \phi)} | - 1, j\rangle &= \sqrt{\rho} | - 1, j - 1\rangle + \sqrt{1 - \rho} e^{i\phi} | + 1, j + 1\rangle \\ \mathbf{U}^{(\rho, \theta, \phi)} | + 1, j\rangle &= \sqrt{1 - \rho} e^{i\theta} | - 1, j - 1\rangle - \sqrt{\rho} e^{i(\theta + \phi)} | + 1, j + 1\rangle. \end{aligned} \quad (4.53)$$

Ou, usando o operador moeda com três parâmetros  $\xi$ ,  $\theta$ ,  $\zeta$  recentemente introduzido em [155],

$$\mathbf{C}_c^{(\xi, \theta, \zeta)} = \begin{pmatrix} e^{i\xi} \cos(\theta) & e^{i\zeta} \sin(\theta) \\ e^{-i\zeta} \sin(\theta) & -e^{-i\xi} \cos(\theta) \end{pmatrix}, \quad (4.54)$$

o operador  $\mathbf{U}^{(\xi, \theta, \zeta)}$  é dado por

$$\begin{aligned} \mathbf{U}^{(\xi, \theta, \zeta)} | - 1, j\rangle &= e^{i\xi} \cos(\theta) | - 1, j - 1\rangle + e^{-i\zeta} \sin(\theta) | + 1, j + 1\rangle \\ \mathbf{U}^{(\xi, \theta, \zeta)} | + 1, j\rangle &= e^{i\zeta} \sin(\theta) | - 1, j - 1\rangle - e^{-i\xi} \cos(\theta) | + 1, j + 1\rangle. \end{aligned} \quad (4.55)$$

Ao realizarmos a evolução de uma caminhada nas ligações de  $n$  passos, se fizermos a projeção do estado  $|\psi(n)\rangle$  nos vértices ao invés de realizarmos a projeção nas ligações, encontramos exatamente o mesmo resultado que o de uma caminhada com moeda. Na Figura 4.12 mostramos a comparação entre as duas caminhadas para a moeda Hadamard,  $a = \frac{1}{\sqrt{2}}$ ,  $b = \frac{1}{\sqrt{2}}$ ,  $c = \frac{1}{\sqrt{2}}$  e  $d = -\frac{1}{\sqrt{2}}$  em (4.50), ou  $\rho = \frac{1}{2}$  e  $\theta = \phi = 0$  em (4.53) com estado inicial  $|\psi(0)\rangle = | + 1, 0\rangle$ , ou ainda  $\xi = \zeta = 0$  e  $\theta = \frac{\pi}{4}$  em (4.55), com estado inicial  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(| - 1, 0\rangle + i | + 1, 0\rangle)$ . Note que as probabilidades da caminhada com moeda mostradas na Tabela 4.3 são obtidas pela soma probabilidades dos estados nas ligações incidentes em um mesmo  $j$ ,  $| + 1, j\rangle$  e  $| - 1, j\rangle$  na Tabela 4.4. Mais especificamente, para

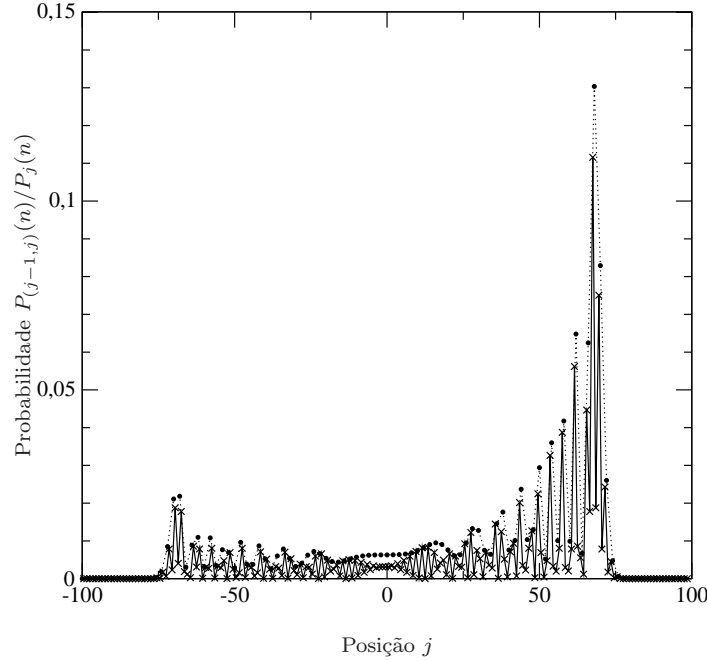


Figura 4.12: Comparação entre as distribuições de probabilidades para uma caminhada quântica nas ligações (cruzes) com uma caminhada quântica nos vértices (círculos) após  $n = 100$  passos e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = | +1, 0\rangle$  para  $a = \frac{1}{\sqrt{2}}$ ,  $b = \frac{1}{\sqrt{2}}$ ,  $c = \frac{1}{\sqrt{2}}$  e  $d = -\frac{1}{\sqrt{2}}$  em (4.50) ou  $\rho = \frac{1}{2}$  e  $\theta = \phi = 0$  em (4.53). A caminhada nos vértices é obtida pela projeção do estado  $|\psi(n)\rangle$  nos vértices. Esse é exatamente o mesmo resultado da caminhada Hadamard.

$n = 3$  na Tabela 4.4, o estado quântico é

$$\begin{aligned}
 |\psi(3)\rangle &= \frac{1}{8} | -1, -3\rangle + \frac{1}{8} | +1, -1\rangle + 0 | -1, -1\rangle + \\
 &\quad \frac{4}{8} | +1, 1\rangle + \frac{1}{8} | -1, 1\rangle + \frac{1}{8} | +1, 3\rangle,
 \end{aligned} \tag{4.56}$$

somando as probabilidades para os mesmos vértices temos:  $j = -3$ ,  $P_{-3}(3) = \frac{1}{8}$ ,  $j = -1$ ,  $P_{-1}(3) = \frac{1}{8}$ ,  $j = 1$ ,  $P_1(3) = \frac{5}{8}$ ,  $j = 3$ ,  $P_3(3) = \frac{1}{8}$  e 0 para os outros vértices, exatamente como na Tabela 4.3. Na Figura 4.13 mostramos o resultado das probabilidades para uma caminhada com moeda a partir da evolução de uma caminhada nas ligações, projetando o estado  $|\psi(n)\rangle$  nos vértices, para diferentes valores de  $\xi$ ,  $\theta$  e  $\zeta$ . Os resultados são exatamente os mesmos daqueles obtidos em [155] a partir da evolução de uma caminhada com moeda. Assim, estamos obtendo informações da caminhada com moeda a partir da evolução da caminhada nas ligações.

De forma geral, sendo  $|\psi(0)\rangle = | +1, 0\rangle$  o estado inicial de uma caminhada nas ligações e  $\mathbf{U}^n$  um operador unitário, após  $n$  passos o sistema estará no estado

$$\begin{aligned}
 |\psi(n)\rangle &= \mathbf{U}^n |\psi(0)\rangle \\
 &= a_{(-1,-n)}(n) | -1, -n\rangle + a_{(+1,-n+2)}(n) | +1, -n+2\rangle + \dots \\
 &\quad + a_{(-1,n-2)}(n) | -1, n-2\rangle + a_{(+1,n)}(n) | +1, n\rangle.
 \end{aligned} \tag{4.57}$$

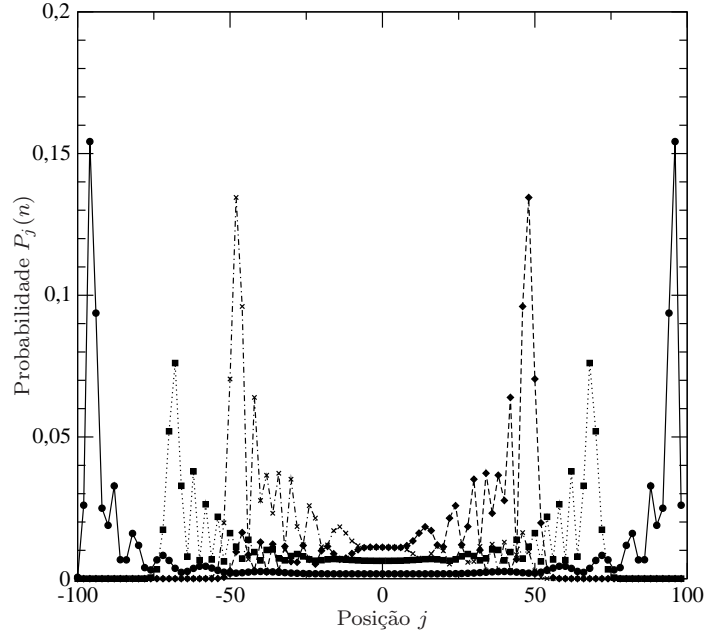


Figura 4.13: Distribuição de probabilidades de uma caminhada quântica nas ligações projetada nos vértices para  $n = 100$  passos usando a Equação (4.55) para  $(\xi, \theta, \zeta) = (0, \frac{\pi}{12}, 0)$  (círculos),  $(\xi, \theta, \zeta) = (0, \frac{\pi}{4}, 0)$  (quadrados),  $(\xi, \theta, \zeta) = (0, \frac{\pi}{3}, \frac{5\pi}{12})$  (triângulos) e  $(\xi, \theta, \zeta) = (\frac{5\pi}{12}, \frac{\pi}{3}, 0)$  (cruzes).

O estado  $|\psi(n)\rangle$  contém informação tanto de uma caminhada quântica nas ligações como de uma caminhada quântica com moeda. A probabilidade na ligação  $(j-1, j)$  é obtida pela projeção

$$\begin{aligned} P_{(j-1,j)}(n) &= |\langle -1, j-1 | \psi(n) \rangle|^2 + |\langle +1, j | \psi(n) \rangle|^2 \\ &= |a_{(-1,j-1)}(n)|^2 + |a_{(+1,j)}(n)|^2. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Se estivermos interessados nas probabilidades no vértice  $j$ , podemos usar o mesmo estado  $|\psi(n)\rangle$ , realizando a projeção no vértice,

$$\begin{aligned} P_j(n) &= |\langle -1, j | \psi(n) \rangle|^2 + |\langle +1, j | \psi(n) \rangle|^2 \\ &= |a_{(-1,j)}(n)|^2 + |a_{(+1,j)}(n)|^2. \end{aligned} \quad (4.59)$$

Também é possível obter informações para uma caminhada nas ligações a partir de uma caminhada com moeda. Sendo  $|\psi(0)\rangle = |j\rangle \otimes |+\rangle$  e  $\mathbf{U}_c$  um operador unitário, após  $n$  passos teremos o estado

$$\begin{aligned} |\psi(n)\rangle &= \mathbf{U}_c^n |\psi(0)\rangle \\ &= \sum_j |j\rangle \otimes [a_-(j, n)|-\rangle + a_+(j, n)|+\rangle]. \end{aligned} \quad (4.60)$$

Porém, nesse caso não é direto obter as probabilidades para uma caminhada nas ligações, sendo necessário primeiro usar o operador  $\mathbf{E}^{-1}$  no estado final,  $|\psi(n)\rangle$ , para mapear os

estados de uma caminhada com moeda nos estados da caminhada nas ligações. Só então podemos realizar a projeção do estado nas ligações do grafo. Isso é desvantajoso do ponto de vista prático, pois o operador  $\mathbf{E}^{-1}$  pode ser escrito em termos dos estados de base como

$$\mathbf{E}^{-1} = \sum_{j=-n}^n (|-1, j\rangle\langle -| \otimes \langle j| + |+1, j\rangle\langle +| \otimes \langle j|), \quad (4.61)$$

e sua aplicação no estado final requer o cálculo de várias projeções para a obtenção do estado de uma caminhada nas ligações. Desta forma, as caminhadas quânticas nas ligações mostram-se mais ricas, no sentido de conter informações de ambas as caminhadas de uma forma mais direta envolvendo menos etapas para o cálculo das probabilidades em ambos os modelos.

A analogia entre a caminhada quântica e um interferômetro discutida na Seção 4.8, nos permite abordar as caminhadas quânticas através da teoria de espalhamento. A aplicação da teoria de espalhamento para caminhadas quânticas foi feita pela primeira vez por Farhi e Gutmann [106]. Eles estudaram a propagação de uma caminhada com *tempo contínuo* e foram capazes de transformar o problema num problema de espalhamento pela adição de ligações semi-infinitas em grafos em árvore. Fazendo isso, eles calcularam o coeficiente de transmissão de uma raiz do grafo em árvore para uma das ligações semi-infinitas. A aplicação da teoria de espalhamento para o estudo das caminhadas quânticas *discretas* é recente [45, 79, 127–130, 169, 173] e tem sido chamada de caminhadas quânticas de espalhamento. Porém, apesar da grande aplicação desse modelo, as caminhadas quânticas como um interferômetro não representa o caso mais geral de espalhamento. No caso mais geral as amplitudes de espalhamento, ou seja, os elementos da matriz de espalhamento  $S_e$ , são dependentes da energia e essa dependência não é abordada no modelo interferométrico. No próximo Capítulo mostraremos que podemos utilizar a metodologia das funções de Green discutidas no Capítulo 3 para estudar as caminhadas quânticas e, neste caso, com amplitudes quânticas dependentes da energia.

## Função de Green e as caminhadas quânticas

### 5.1 Uma metodologia de funções de Green para as caminhadas quânticas

Nesse capítulo iremos desenvolver uma metodologia usando funções de Green para as caminhadas quânticas discretas de espalhamento discutida nas Seções anteriores. Para tal, vamos proceder em quatro etapas. Primeiro, construímos o mapeamento para as caminhadas quânticas 1D numa rede Kronig-Penney [54] generalizada, para a qual podemos calcular a função de Green  $G$  exata dependente da energia. Uma rede de Kronig-Penney é um modelo simplificado de um elétron em um potencial unidimensional periódico [174]. Então, discutimos como escolher as configurações apropriadas para o sistema mapeado de tal forma a modelar as características procuradas do problema original. Terceiro, mostramos como obter  $G$  e, a partir desta, como voltar para as caminhadas quânticas obtendo as quantidades relevantes. Finalmente, estendemos os resultados anteriores para as caminhadas quânticas em topologias mais gerais, ou seja, em grafos arbitrários.

### 5.2 O mapeamento

Como já foi enfatizado, as caminhadas quânticas não precisam representar uma dinâmica em uma rede física. Por outro lado, é muito útil associar o espaço de Hilbert da caminhada e sua “cinemática” [175, 176], a uma rede usual de um problema de espalhamento quântico 1D.

Na Figura 5.1 mostramos esquematicamente a correspondência entre o modelo da Figura 4.10(b) com uma rede do tipo Kronig-Penney de interações pontuais igualmente

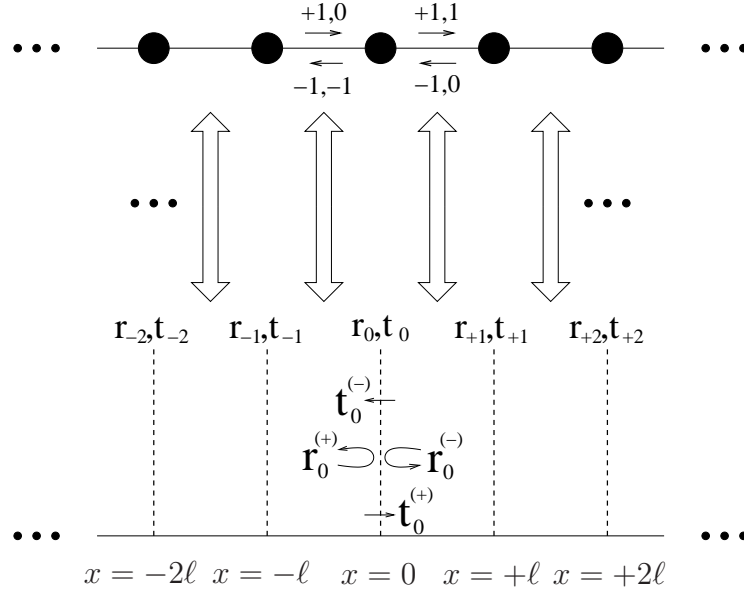


Figura 5.1: Associação esquemática entre o espaço de Hilbert das caminhadas quânticas e uma rede do tipo Kronig-Penney. Para cada interação pontual em  $x = \pm j\ell$  (de coeficientes de reflexão e transmissão  $r_{\pm j}$  e  $t_{\pm j}$ ) identificamos o estado  $\pm j$ .

espaçadas, ou seja, com potenciais de alcance zero, os quais generalizam o potencial delta como discutido na Seção 2.4. Como vimos, cada interação pontual em  $x = \pm j\ell$ ,  $j = 0, 1, \dots$  é caracterizada pelas amplitudes quânticas  $r_j^{(\pm)}$  e  $t_j^{(\pm)}$ . O super-escrito  $+$  ( $-$ ) indica uma reflexão ou transmissão de uma partícula chegando pela esquerda (direita) da interação pontual (vértice).

Vamos assumir que  $m = \hbar = 1$  e definir  $\tau = L/v$ , com  $v = v_{\text{fase}} = p/2 = k/2$  a velocidade. Também por conveniência adotamos  $\ell = 1$ . Então, podemos fazer uma associação direta entre o operador que avança um passo nas caminhadas quânticas  $\mathbf{U}$  com o propagador  $\mathcal{U}(\tau)$  para o sistema contínuo mapeando  $\mathbf{U}|\Psi(0)\rangle = |\Psi(1)\rangle$  em  $\mathcal{U}(\tau)|\Phi(0)\rangle = |\Phi(\tau)\rangle$ .

Para concretamente realizar essa correspondência, vamos começar com o caso simples de uma caminhada quântica nas ligações completamente tendenciosa: o caminhante sempre escolhe a mesma direção. Isto é obtido fazendo por exemplo  $\rho_j = 1$  e  $\phi_j = 0$  para qualquer  $j$  na Equação (4.45). A Equação (4.47) leva a  $\mathbf{U} = T$ . Se o estado inicial tem, por exemplo, somente a componente  $\sigma = +1$ , então a caminhada evolui somente para a direita. Tal situação tem um paralelo direto com uma partícula quântica propagando livremente numa linha. Em nossa rede de Kronig-Penney generalizada isto é equivalente a atribuir zero para todas as amplitudes de reflexão, de tal forma que a evolução temporal é simplesmente  $\mathcal{U}(t) = \exp[-i(\hat{p}^2/2)t]$  com  $\hat{p}$  o operador de momento para  $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$  e  $|p\rangle$  o autoestado de momento. Temos, então um mapeamento direto entre a dinâmica da caminhada quântica totalmente tendenciosa e a evolução de uma partícula livre numa linha. As quantidades correspondentes estão listadas na Tabela 5.1.

Caminhada quântica tendenciosa em 1D	Propagação livre numa linha
Operador de evolução: $\mathbf{U} = T$	Operador de evolução: $\mathcal{U}(\tau) = \exp[-i(\hat{p}^2/2)\tau]$ , com $\tau = L/v_{\text{fase}}$ e $\ell = 1$
Estado inicial: $ \Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{j=+\infty} \exp[ij\gamma]   +1, j \rangle$	Estado inicial: $ \Phi(0)\rangle =  p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp[ipx]  x\rangle$
Um passo: $\mathbf{U} \Psi(0)\rangle =  \Psi(1)\rangle = \exp[-i\gamma] \Psi(0)\rangle$	Um passo: $\mathcal{U}(\tau) \Phi(0)\rangle =  \Phi(\tau)\rangle = \mathcal{U}(\tau) p\rangle = \exp[-ip^2\tau/2] \Phi(0)\rangle$
Parâmetro de translação: $\gamma$	Parâmetro de translação: $p = k$

Tabela 5.1: A correspondência entre as quantidades relevantes na caminhada quântica tendenciosa e a propagação livre em 1D

Agora vamos considerar que na Equação (4.45) para qualquer  $j \neq 0$ , temos  $\rho_j = 1$  e  $\phi_j = \varphi_j = 0$ , e para  $j = 0$ , temos  $\rho_0$  e as fases  $\phi_0$  e  $\varphi_0$  com valores arbitrários. Seja o estado inicial de uma caminhada quântica dado por

$$|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{j=0} \exp[ij\gamma] | +1, j \rangle, \quad (5.1)$$

de tal forma que no tempo  $n = 0$  o caminhante não possa ser encontrado nas ligações com  $j > 0$ . Então, aplicando o operador de evolução  $n$  vezes, Equação (4.47), em  $|\Psi(0)\rangle$  obtemos

$$\begin{aligned} |\Psi(n)\rangle &= \mathbf{U}^n |\Psi(0)\rangle \\ &= \frac{\exp[-i\gamma n]}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \sum_{j=-\infty}^{j=0} \exp[ij\gamma] | +1, j \rangle \right. \\ &\quad \left. + r_0^{(+)} \sum_{j=-n}^{j=-1} \exp[-ij\gamma] | -1, j \rangle + t_0^{(+)} \sum_{j=1}^{j=n} \exp[ij\gamma] | +1, j \rangle \right\}, \quad (5.2) \end{aligned}$$

onde o termo em  $r_0^{(+)}$  é devido à reflexão em  $j = 0$  e o termo em  $t_0^{(+)}$  é devido a transmissão em  $j = 0$ . Definindo  $|\Psi_{\text{esp.}}\rangle = \lim_{n \rightarrow +\infty} \exp[i\gamma n] |\Psi(n)\rangle$ , encontramos

$$\begin{aligned} |\Psi_{\text{esp.}}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \sum_{j=-\infty}^{j=0} \exp[ij\gamma] | +1, j \rangle \right. \\ &\quad \left. + r_0^{(+)} \sum_{j=-\infty}^{j=-1} \exp[-ij\gamma] | -1, j \rangle + t_0^{(+)} \sum_{j=+1}^{j=+\infty} \exp[ij\gamma] | +1, j \rangle \right\}. \quad (5.3) \end{aligned}$$

Note que o estado acima é um autoestado de  $\mathbf{U}$ , isto é,  $\mathbf{U}|\Psi_{\text{esp.}}\rangle = \exp[-i\gamma]|\Psi_{\text{esp.}}\rangle$ .

A situação equivalente para o caso da rede é assumir que todos os  $r$ 's são nulos menos um, a amplitude de reflexão para a interação pontual na origem, ou  $r_j = 0$  e  $t_j = 1$  ( $j \neq 0$ ) e  $r_0^{(+)}(p) = r(p)$ ,  $t_0^{(+)}(p) = t(p)$ . Neste caso sabemos que a solução de espalhamento para uma partícula incidente pela esquerda é

$$|\Phi_{\text{esp.}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \int_{-\infty}^0 dx \exp[ipx]|x\rangle + r(p) \int_{-\infty}^0 dx \exp[-ipx]|x\rangle + t(p) \int_0^{+\infty} dx \exp[ipx]|x\rangle \right\}. \quad (5.4)$$

Comparando as Equações (5.3) e (5.4) fica evidente a correspondência entre os dois sistemas.

Podemos ir além e considerar agora que em dois vértices,  $j = 0$  e  $j = 1$ , a caminhada quântica não é totalmente tendenciosa, mas para  $j \neq 0, 1$  novamente  $\rho_j = 1$  e  $\phi_j = 0$ . Assim, repetindo o procedimento anterior para o estado inicial  $|\Phi(0)\rangle$ , obtemos após um cálculo longo mas direto,

$$|\Psi_{\text{esp.}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \sum_{j=-\infty}^{j=0} \exp[ij\gamma]|+1, j\rangle + r \sum_{j=-\infty}^{j=-1} \exp[-ij\gamma]|-1, j\rangle + t \sum_{j=+2}^{j=+\infty} \exp[ij\gamma]|+1, j\rangle + a|-1, 0\rangle + b \exp[i\gamma]|+1, 1\rangle \right\}, \quad (5.5)$$

onde

$$r = r_0^{(+)} + t_0^{(-)} a, \quad t = t_1^{(+)} b, \quad a = \frac{t_0^{(+)} r_1^{(+)} \exp[2i\gamma]}{1 - r_1^{(+)} r_0^{(-)} \exp[2i\gamma]}, \quad b = \frac{t_0^{(+)}}{1 - r_1^{(+)} r_0^{(-)} \exp[2i\gamma]}. \quad (5.6)$$

Esta expressão pode ser comparada com o problema associado de duas interações pontuais gerais localizadas em  $x = 0$  e  $x = \ell$ . O estado de espalhamento é dado por

$$|\Phi_{\text{esp.}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \int_{-\infty}^0 dx \exp[ipx]|x\rangle + r(p) \int_{-\infty}^0 dx \exp[-ipx]|x\rangle + t(p) \int_L^{+\infty} dx \exp[ipx]|x\rangle + a(p) \int_0^L dx \exp[-ipx]|x\rangle + b(p) \int_0^L dx \exp[ipx]|x\rangle \right\}, \quad (5.7)$$

onde os coeficientes  $r(p)$ ,  $t(p)$ ,  $a(p)$  e  $b(p)$  são obtidos das Equações em (5.6) pela substituição  $r_j^{(\pm)} \rightarrow r_j^{(\pm)}(p)$ ,  $t_j^{(\pm)} \rightarrow t_j^{(\pm)}(p)$  e  $\gamma \rightarrow p\ell = k\ell$ . Mais uma vez temos uma cor-



respondência direta entre as caminhadas quânticas e o espalhamento por duas interações pontuais.

Com base nesses dois exemplos podemos fazer a generalização para um número arbitrário de vértices onde a caminhada quântica não é totalmente tendenciosa de forma direta. Sempre podemos estabelecer uma correspondência biunívoca (um-para-um) entre uma caminhada quântica e um espalhamento em uma rede do tipo Kronig-Penney generalizada. A distribuição de probabilidade de direções na “rede” da caminhada quântica corresponde às amplitudes de espalhamento de uma interação pontual ao longo da rede do tipo Kronig-Penney generalizada. Ainda, o número quântico  $j$  está associado aos seu apropriado autovalor de posição  $x$ , da mesma forma para  $\sigma$  com respeito ao sinal de  $p$ . Finalmente, a evolução de um único passo dada por  $\mathbf{U}$  na caminhada quântica é equivalente a  $\mathcal{U}(t = \tau)$  para o sistema contínuo de espalhamento.

### 5.3 Caminhadas quânticas e sua conexão com redes finitas

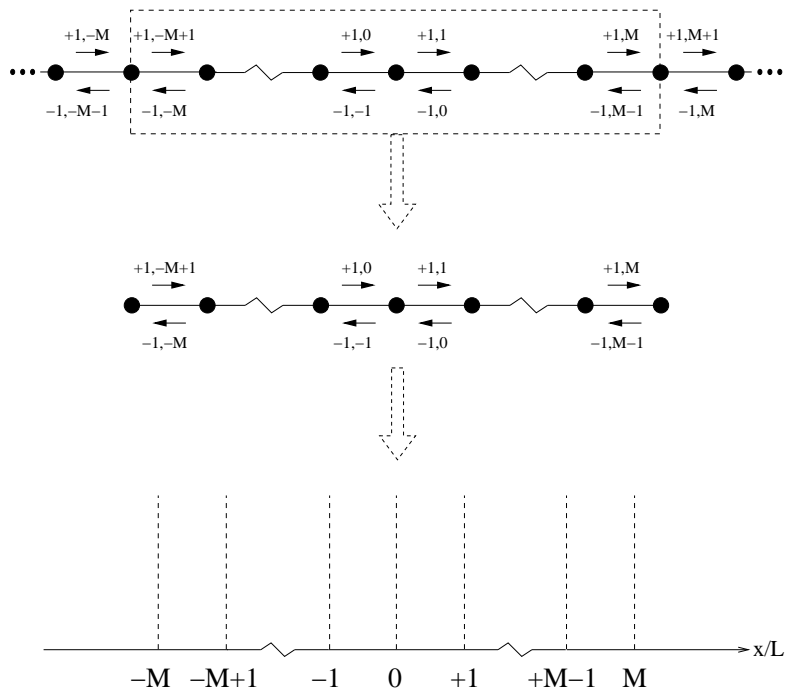


Figura 5.2: (a) Se sob certas condições (ver o texto) a dinâmica relevante do caminhante quântico está restrita aos estados  $|j| \leq M$ , (b) então, o sistema pode ser efetivamente descrito por uma “rede” de espaço de Hilbert finita; (c) daquele mapeamento leva para um grupo finito de interações pontuais gerais numa linha.

Calcular a função de Green exata para uma rede generalizada de Kronig-Penney pode ser uma tarefa difícil. Entretanto, um aspecto chave na solução das caminhadas quânticas

através do mapeamento proposto é que em muitos casos o sistema original pode ser associado com uma rede finita, isto é, para um número finito de interações pontuais numa linha e não para um número infinito de potenciais.

Para mostrar isso vamos inicialmente assumir que o caminhante está localizado na ligação próxima à origem, isto é,  $|\Psi(0)\rangle$  é  $|-1, -1\rangle$  ou  $|+1, +1\rangle$ . Agora, vamos supor que queremos discutir uma propriedade relacionada com tempos não maiores que  $n = N$  ou para uma situação onde o caminhante nunca ultrapassa o vértice em  $j = \pm J$ ,  $J > 0$ . Exemplos disso são: (a) determinar a probabilidade de estar no estado  $j$ , em outras palavras, calcular  $|\langle j, \sigma | \Phi(n) \rangle|^2$  para  $n$  até  $n = N$  e (b) obter o estado do sistema quando pela primeira vez o caminhante alcança a “distância”  $J$  a partir da origem, ( $j = 0$ ), conhecido como problema de primeira passagem na teoria das caminhadas clássicas [177]. Para (b), qualquer evolução com  $n$  arbitrário levando para  $\langle |j| > J, \sigma | \mathbf{U}^n | \Psi(0) \rangle \neq 0$  não é de interesse. Em (a), depois de  $N$  passos, o caminhante pode estar no máximo a uma distância  $|j| = N$  da origem. Conseqüentemente, como ilustrada na Figura 5.2, em ambas as situações a dinâmica da caminhada relevante pode ser associada com um segmento da rede de Kronig-Penney infinita, englobando  $2M + 1$  (para  $M$  igual a  $J$  ou  $N$ ) interações pontuais. Desta forma, a rede (grafo) de interesse é finita e portanto a construção da função de Green é similar àquela usada no Capítulo 3.

## 5.4 A construção da função de Green para a rede de Kronig-Penney finita

Uma vez estabelecido o devido mapeamento entre o problema das caminhadas quânticas e um grupo finito de interações pontuais gerais, o próximo passo é calcular a função de Green exata dependente da energia para as caminhadas quânticas. Baseado nas técnicas desenvolvidas em [39–41, 59] e discutidas no Capítulo 2, a função de Green para uma rede finita de Kronig-Penney generalizada foi obtida em [43] de forma fechada. Aqui, iremos resumir os aspectos mais relevantes para sua construção (para mais detalhes ver o Capítulo 2 e [43]).

A função de Green exata  $G$  é dada pela Equação (2.15), a qual aqui reescrevemos como

$$G(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \sum_{\text{c.e.}} W_{\text{c.e.}} \exp[iS_{\text{c.e.}}(x_f, x_i; k)], \quad (5.8)$$

onde a soma acima é realizada sobre todos os possíveis caminhos de espalhamento (c.e.) iniciando e terminando em pontos finais arbitrários  $x_i$  e  $x_f$ . Para cada c.e., a ação clássica é escrita como  $S_{\text{c.e.}} = k L_{\text{c.e.}}$ , com  $L_{\text{c.e.}}$  o comprimento total do c.e. A amplitude  $W_{\text{c.e.}}$  é dada pelo produto dos coeficientes quânticos adquiridos cada vez que a partícula é

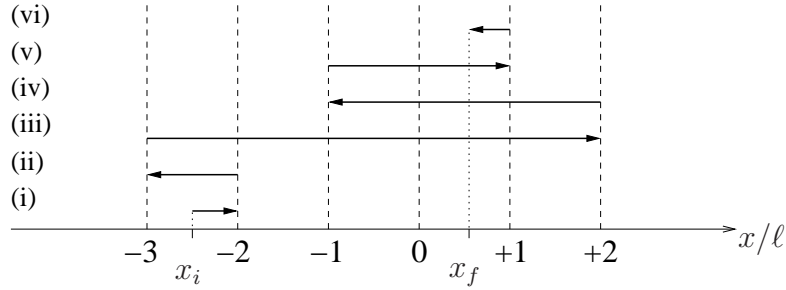


Figura 5.3: Um caminho de espalhamento representativo, composto por seis pedaços de trajetórias, (i)–(vi) para uma rede de Kronig-Penney finita com interações pontuais igualmente espaçadas. O comprimento total do caminho é de  $L_{s.p.} = 11\ell + (x_i - 2\ell) + (\ell - x_f)$ .

espalhada por um dado potencial de contato ao longo do caminho.

Para exemplificar a construção, vamos considerar uma rede com seis interações pontuais igualmente espaçadas. Um caminho de espalhamento representativo é mostrado na Figura 5.3. Os pontos finais são colocados em  $-3\ell < x_i < -2\ell$  e  $0 < x_f < +\ell$ . A partícula iniciando em  $x_i$  vai para a direita, é refletida em  $x = -2\ell$ , move-se para a esquerda, e refletida em  $x = -3\ell$ , e então vai para a direita, tunelando todos os potenciais até ser refletida por um em  $x = +2\ell$ . Nesta parte da trajetória, (i), (ii), e (iii), a amplitude parcial é  $W_{(i)+(ii)+(iii)} = r_{-2}^{(+)} r_{-3}^{(-)} t_{-2}^{(+)} t_{-1}^{(+)} t_0^{(+)} t_{+1}^{(+)} r_{+2}^{(+)}$ . A partir de  $x = +2\ell$ , a partícula move-se para a direita através de todos os potenciais até alcançar a interação pontual em  $x = -\ell$ , onde é refletida, finalmente alcançando o ponto final  $x_f$ . Nesta parte da trajetória, (iv), (v), e (vi), a amplitude é  $W_{(iv)+(v)+(vi)} = t_{+1}^{(-)} t_0^{(-)} r_{-1}^{(-)} t_0^{(+)} r_{+1}^{(+)}$ . A amplitude total para este c.e. particular é  $W_{s.p.} = W_{(i)+(ii)+(iii)} \times W_{(iv)+(v)+(vi)}$ . O comprimento do caminho de espalhamento é simplesmente  $L_{c.e.} = 11\ell + (-2\ell - x_i) + (\ell - x_f)$ , como podemos observar na Figura 5.3.

Para calcular a função de Green total, precisamos classificar e somar todos os infinitos caminhos de espalhamento do tipo exemplificado acima exatamente como foi feito para os grafos no Capítulo 3. Como vimos lá, isso sempre pode ser feito pelo reagrupamento dos possíveis caminhos de espalhamento em classes [178], permitindo obter  $G$  em uma forma fechada para qualquer número finito de potenciais. Usando tal procedimento, a função de Green exata para o sistema na Figura 5.3 é dada por

$$G(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \frac{\mathcal{T} \left( \exp[-ikx_i] + \mathcal{R}_- \exp[ikx_i] \right) \left( \exp[ikx_f] + \mathcal{R}_+ \exp[-ikx_f] \right)}{[1 - \mathcal{R}_+ \mathcal{R}_1][1 - \mathcal{R}_- \mathcal{R}_r] - \mathcal{T}^2 \mathcal{R}_- \mathcal{R}_+}, \quad (5.9)$$

onde

$$\mathcal{R}_1 = r_{-3}^{(-)} \exp[-3ik\ell], \quad \mathcal{R}_r = r_{+2}^{(+)} \exp[+2ik\ell], \quad (5.10)$$

Os coeficientes na Equação acima são dados por

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}^{(2,+)} &= r_{-2}^{(+)} + \frac{\left( r_{-1}^{(+)} - r_{-1}^{(-)} r_{-1}^{(+)} r_0^{(+)} \exp[2ikl] + r_0^{(+)} t_{-1}^{(-)} r_{-1}^{(+)} \exp[2ikl] \right) t_{-2}^{(-)} t_{-2}^{(+)} \exp[2ikl]}{1 - \left( r_{-2}^{(-)} r_{-1}^{(+)} + r_{-1}^{(-)} r_0^{(+)} \right) \exp[2ikl] - \left( r_{-1}^{(-)} r_{-1}^{(+)} - t_{-1}^{(-)} t_{-1}^{(+)} \right) r_{-2}^{(-)} r_0^{(+)} \exp[4ikl]} \\
\mathcal{R}^{(2,-)} &= r_0^{(-)} + \frac{\left( r_{-1}^{(-)} - r_{-2}^{(-)} r_{-1}^{(-)} r_{-1}^{(+)} \exp[2ikl] + r_{-2}^{(-)} t_{-1}^{(-)} r_{-1}^{(+)} \exp[2ikl] \right) t_0^{(-)} t_0^{(+)} \exp[2ikl]}{1 - \left( r_{-2}^{(-)} r_{-1}^{(+)} + r_{-1}^{(-)} r_0^{(+)} \right) \exp[2ikl] - \left( r_{-1}^{(-)} r_{-1}^{(+)} - t_{-1}^{(-)} t_{-1}^{(+)} \right) r_{-2}^{(-)} r_0^{(+)} \exp[4ikl]} \\
\mathcal{T}^{(2,+)} &= \frac{t_{-2}^{(+)} t_{-1}^{(+)} t_0^{(+)} \exp[2ikl]}{1 - \left( r_{-2}^{(-)} r_{-1}^{(+)} + r_{-1}^{(-)} r_0^{(+)} \right) \exp[2ikl] - \left( r_{-1}^{(-)} r_{-1}^{(+)} - t_{-1}^{(-)} t_{-1}^{(+)} \right) r_{-2}^{(-)} r_0^{(+)} \exp[4ikl]} \\
\mathcal{T}^{(2,-)} &= \frac{t_{-2}^{(-)} t_{-1}^{(-)} t_0^{(-)} \exp[2ikl]}{1 - \left( r_{-2}^{(-)} r_{-1}^{(+)} + r_{-1}^{(-)} r_0^{(+)} \right) \exp[2ikl] - \left( r_{-1}^{(-)} r_{-1}^{(+)} - t_{-1}^{(-)} t_{-1}^{(+)} \right) r_{-2}^{(-)} r_0^{(+)} \exp[4ikl]} \\
\mathcal{R}^{(3,+)} &= r_{+1}^{(+)} + \frac{r_{+2}^{(+)} t_{+1}^{(-)} t_{+1}^{(+)} \exp[2ikl]}{1 - r_{+1}^{(-)} t_{+2}^{(+)} \exp[2ikl]} \tag{5.11}
\end{aligned}$$

## 5.5 Conectando a solução da função de Green com as caminhadas quânticas

Como um procedimento final, precisamos extrair de  $G$  toda a informação desejada sobre as caminhadas quânticas. Assim, a questão a ser então considerada é como, a partir de  $G$ , obter informação sobre o problema original. Primeiro, notamos que, do mapeamento das caminhadas quânticas numa rede finita de interações pontuais e usando o método acima, obtemos a função de Green dependente da energia para o sistema. O interesse nas caminhadas quânticas é a evolução temporal, de tal forma que queremos determinar seu estado após  $n$  passos. Da forma exata da Equação (5.8) vemos que  $G$ , no domínio da energia, é dada como uma série onde cada termo representa um certo processo de espalhamento, ou seja,  $G$  está escrita como uma série de Fourier, onde cada termo pode ser interpretado estar no domínio temporal. No exemplo acima, Figura 5.3, a contribuição corresponde a uma evolução de  $n = 13$  passos de tempo. Então, podemos encarar a expansão na Equação (5.8) como uma decomposição de  $G$  no tempo: os termos individuais de  $G$  representam possíveis “caminhos” de evolução para um dado número de passos de tempo.

Em resumo, uma vez que o mapeamento é direto, podemos simplesmente associar cada termo na Equação (5.8) como sendo um possível caminho, gerado após um certo número de passos das caminhadas quânticas. Então, questões como qual o estado da

caminhada quântica depois de  $n$  passos, será dada como soma direta dos termos da série correspondentes a um número de múltiplos espalhamentos. Isto fornece o processo de interferência mecânico-quântica da caminhada na versão quântica.

A generalização para topologias arbitrárias é direta, uma vez que podemos escrever a função de Green exata para grafos gerais com interações pontuais generalizadas nos vértices, o grafo sendo visualizado assim como uma rede de Kronig-Penney generalizada múltiplo conectada.

## 5.6 Função de Green e os operadores de passo e caminho

Uma vez discutido o mapeamento das caminhadas quânticas numa rede de Kronig-Penney, aqui queremos exemplificar o uso da função de Green para o estudo de caminhadas quânticas, comparando nosso método com os resultados obtidos por Hillery et al. [127] e Košik [173], que usaram o modelo de multi-portas (discutido na Seção 4.8). Para isso, encaramos a caminhada quântica como sendo um grafo finito e calculamos a função de Green usando a Equação (5.8). O resultado é uma função geradora para os passos até uma distância  $J$  da origem.

Para extrair os caminhos individuais da função de Green usamos o *operador de passo*. Definimos o operador de passo para um caminho de  $n$  passos é como a  $n$ -ésima derivada com relação a  $z = \exp[ik\ell]$ , ou

$$\hat{\mathcal{P}}_n = \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial z^n} \Big|_{z=0}. \quad (5.12)$$

A probabilidade de uma partícula, inicialmente numa ligação semi-infinita  $i$ , alcançar uma ligação semi-infinita  $f$  depois de  $n$  passos, pode ser obtida da  $n$ -ésima derivada do coeficiente quântico  $A_z$ ,

$$P_{A_z}(n) = |\hat{\mathcal{P}}_n A_z|^2. \quad (5.13)$$

Os possíveis caminhos que contribuem para cada  $P_{A_z}(n)$  podem ser extraídos da função de Green pelo uso do *operador de caminho*,  $\hat{\mathcal{C}}$ , que definimos pela equação

$$\hat{\mathcal{C}} = \prod_I \frac{r_I^{n_I}}{n_I!} \frac{\partial^{n_I}}{\partial r_I^{n_I}} \Big|_{r_I=0} \prod_J \frac{t_J^{m_J}}{m_J!} \frac{\partial^{m_J}}{\partial t_J^{m_J}} \Big|_{t_J=0}. \quad (5.14)$$

Para entender as definições dadas acima, lembramos que a função de Green é obtida através da soma de todos os possíveis caminhos da partícula sair de  $x_i$  e alcançar  $x_f$  como energia fixa. Então, os termos com potências de  $\exp[ik\ell]$  da expansão representam diferentes comprimentos de caminhos de espalhamento sendo extraídos através do operador

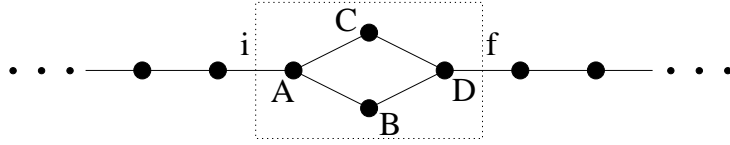


Figura 5.4: Um grafo em forma de um hipercubo bidimensional.

de passo e as contribuições de cada caminho são extraídos pelo operador de caminho.

Como um exemplo, considere o grafo no formato de um hipercubo bidimensional [129] na Figura 5.4. Os vértices à esquerda e à direita da região marcada possuem coeficiente de reflexão iguais a zero e coeficiente de transmissão igual a um de tal forma que ocorre propagação livre nessas regiões. Usando o resultados das Seções anteriores, podemos escrever a função de Green para uma partícula quântica atravessar este grafo como

$$G_{fi}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} T_{if} \exp[ik(x_f + x_i)], \quad (5.15)$$

onde  $T_{if}$  é o coeficiente de transmissão quântico obtido do múltiplo espalhamento dentro do hipercubo entre os vértice  $A$  e  $D$ . Para simplificar um pouco as expressões e facilitar o entendimento, vamos fazer o vértice  $A = D$  e neste caso o coeficiente de transmissão toma a forma

$$T_{if} = \frac{t_A^2 \exp[2ik\ell]}{g} \left\{ (t_B + t_C + 2(t_A - r_A)(r_C t_B + r_B t_C) \exp[2ik\ell] + (r_A - t_A)^2 (r_C^2 t_B - t_C (t_B + t_C) - r_B^2)) \exp[4ik\ell] \right\}, \quad (5.16)$$

com  $g$  dado por

$$g = 1 - 2r_A(r_B + r_C) \exp[2ik\ell] + \left( r_A^2(r_B^2 + 4r_B r_C + r_C^2 - t_B^2 - t_C^2) - 2t_A^2(r_B r_C + t_B t_C) \right) \exp[4ik\ell] - 2r_A(r_A^2 - t_A^2) \left( r_B r_C (r_B + r_C) - r_C t_B^2 - r_B t_C^2 \right) \exp[6ik\ell] + (r_A^2 - t_A^2) (r_B^2 - t_B^2) (r_C^2 - t_C^2) \exp[8ik\ell]. \quad (5.17)$$

Para comparar nossos resultados com os resultados em [127] precisamos fazer a simplificação  $B = C$ . Neste caso, temos

$$T_{if} = \frac{2t_A^2 t_B \exp[2ik\ell]}{1 - 2r_B(r_A + t_A) \exp[2ik\ell] + (r_B^2 - t_B^2)(r_A + t_A)^2 \exp[4ik\ell]}. \quad (5.18)$$

Agora, para refletir a simetria do grafo e para que as ligações nos vértices sejam todas equivalentes e se comportem da mesma maneira, respeitando a Equação (2.25), podemos usar os coeficientes de Grover no vértice  $A$ , que dão origem a moeda Grover nas caminhadas quânticas com moeda (Equação (4.33)): sendo  $d_j$  a valência do vértice  $j$ , então

$r_j = 2/d_j - 1$  e  $t_j = 2/d_j$ . Assim, os coeficientes de reflexão e transmissão do vértice  $A$  são  $r_A = -1/3$  e  $t_A = 2/3$ , respectivamente. No vértice  $B$  usamos  $r_B = 0$  e  $t_B = 1$ . Com esses valores temos

$$T_{if} = \frac{8 \exp[2ikl]}{9 - \exp[4ikl]}. \quad (5.19)$$

O resultado em [127] é

$$T(\theta) = \frac{8 \exp[3i\theta]}{9 - \exp[4i\theta]}, \quad (5.20)$$

onde  $\theta$  é o passo da caminhada. A diferença no nosso resultado é devido ao fato de que são necessários dois passos ( $\exp[2ikl]$ ) para realizar a transmissão do vértice  $A$  até o vértice  $D$  enquanto em [127] são necessários três passos ( $\exp[3i\theta]$ ) para a partícula ir da ligação  $i$  até a ligação  $f$ , simplesmente por que em [127] a posição inicial é definida de forma diferente.

A probabilidade de uma partícula inicialmente na ligação  $i$  alcançar a ligação  $f$  depois de  $n$  passos pode ser calculada através da aplicação do operador de passo no coeficiente de reflexão ou transmissão,

$$P_R(n) = |\hat{\mathcal{P}}_n R|^2 \quad \text{ou} \quad P_T(n) = |\hat{\mathcal{P}}_n T|^2. \quad (5.21)$$

No caso discutido acima, usando a Equação (5.19), temos que a probabilidade é

$$P_T(n) = \begin{cases} \left( \frac{8}{9^{(n+2)/4}} \right)^2 & \text{se } n = 2 \bmod 4 \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (5.22)$$

Assim, a probabilidade da partícula ser encontrada pela primeira vez na ligação  $f$  depois de um número qualquer de passos,  $P_{out}$  [127, 128], é dada por

$$P_{out} = \sum_{n=1}^{\infty} P_T(n) = \frac{4}{5}, \quad (5.23)$$

Os dois resultados acima são exatamente o mesmo resultados obtidos em [127, 128] usando o modelo interferométrico. Podemos definir o número de passos necessários para que a caminhada alcance um estado  $|\sigma, j\rangle$  (“hitting time”) [127, 128],  $h$ , que chamaremos de *tempo de chegada*, como

$$h = \frac{1}{P_{out}} \sum_{n=1}^{\infty} n P_T(n) = \frac{41}{20}, \quad (5.24)$$

o qual indica que o caminhante precisa realizar  $41/20 = 2,05$  passos para atravessar o hipercubo bidimensional e alcançar a ligação  $f$ . Apesar de ter sido definido, esse cálculo não foi realizado em [127, 128]. Notamos também que, com estes operadores a obtenção

de tais amplitudes é imediata, sendo então uma vantagem do método de função de Green.

A função de Green é obtida através de uma soma de todas os possíveis caminhos da partícula deixar o ponto  $x_i$  e alcançar o ponto  $x_f$ . Assim,  $T_{if}$  em (5.15)) tem a forma explícita

$$\begin{aligned}
T_{if} &= 2t_A^2 t_B \exp[2ik\ell] + 4r_B t_A^2 t_B (r_A + t_A) \exp[4ik\ell] \\
&\quad + 2t_A^2 t_B (r_A + t_A)^2 (3r_B^2 + t_B^2) \exp[6ik\ell] \\
&\quad + 8t_A^2 t_B (r_A + t_A)^3 (r_B^2 + t_B^2) \exp[8ik\ell] \\
&\quad + 2t_A^2 (r_A + t_A)^4 t_B (5r_B^4 + 10r_B^2 t_B^2 + t_B^4) \exp[10ik\ell] + \dots \\
&= 2t_A^2 t_B \exp[2ik\ell] \left[ 1 + 2r_B (r_A + t_A) \exp[2ik\ell] + (r_A + t_A)^2 (3r_B^2 + t_B^2) \exp[4ik\ell] \right. \\
&\quad \left. + 4(r_A + t_A)^4 (r_B^2 + t_B^2) \exp[6ik\ell] + (r_A + t_A)^3 (5r_B^4 + 10r_B^2 t_B^2 + t_B^4) \exp[8ik\ell] + \dots \right] \\
&= \frac{2 \exp[2ik\ell] t_A^2 t_B}{1 - 2r_B (r_A + t_A) \exp[2ik\ell] + (r_B^2 - t_B^2) (r_A + t_A)^2 \exp[4ik\ell]}, \tag{5.25}
\end{aligned}$$

a qual mostra a soma geométrica sobre as órbitas periódicas no grafo. Se queremos a contribuição da transmissão direta através do grafo, que seria transmissão em  $A$ , transmissão em  $B$  ou  $C$  e transmissão em  $D$ , o operador de caminho toma a forma

$$\hat{C} = \frac{t_A}{1!} \frac{\partial}{\partial t_A} \Big|_{t_A=0} \frac{t_B}{1!} \frac{\partial}{\partial t_B} \Big|_{t_B=0} \frac{t_D}{1!} \frac{\partial}{\partial t_D} \Big|_{t_D=0}. \tag{5.26}$$

Aplicando esse operador em (5.25) obtemos

$$\hat{C} T_{if} = 2t_A^2 t_B \exp[2ik\ell]. \tag{5.27}$$

Note que esse caminho tem comprimento igual a  $2\ell$ . Caso escolhêssemos um caminho de comprimento igual a  $3\ell$ , por exemplo, a contribuição seria nula, pois nesse caso a partícula entraria no grafo e não alcançaria a ligação semi-infinita  $f$ . A equação (5.22) mostra que a contribuição não será nula somente para aqueles caminhos que possuem comprimento  $n = 2\ell, 4\ell, 6\ell, 8\ell, \dots$

Agora, vamos voltar ao problema original com todos os vértices diferentes e formular uma pergunta mais difícil: qual é a contribuição dos caminhos que passam através do grafo, digamos, somente por sua parte inferior do grafo, correspondendo aos vértices  $A - B - D$ ? Nosso método pode ser utilizado para responder esta questão. Para tanto, vamos escrever o operador de passo para esse caminho

$$\hat{C}_P = \frac{t_A}{1!} \frac{\partial}{\partial t_A} \Big|_{t_A=0} \frac{t_B^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial t_B^n} \Big|_{t_B=0} \frac{t_D}{1!} \frac{\partial}{\partial t_D} \Big|_{t_D=0} \Big|_{r_C=t_C=0}, \tag{5.28}$$



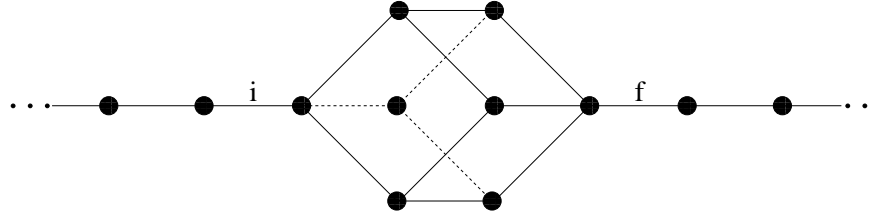


Figura 5.5: Um grafo em forma de um hipercubo tridimensional.

e então aplicando esse operador em  $T_{if}$ , encontramos

$$\hat{\mathcal{C}}_p T_{if} = \frac{t_A r_A^{\frac{n-1}{2}} t_B^n r_D^{\frac{n-1}{2}} t_D}{(1 - r_A r_B \exp[2ik\ell])^{\frac{n+1}{2}} (1 - r_B r_D \exp[2ik\ell])^{\frac{n+1}{2}}}, \quad (5.29)$$

de tal forma que obtemos uma forma fechada para as contribuições de todos os caminhos que passam somente pelos vértices  $A - B - D$  após  $n$  passos. Outra questão interessante é saber quais são as contribuições para um dado comprimento de caminho. Por exemplo, quais são os caminhos que contribuem para alcançar a ligação semi-infinita  $f$  com exatamente quatro passos,  $n = 4$ ? A resposta é obtida usando o operador de passo com  $n = 4$  em  $T_{if}$ ,

$$\begin{aligned} P_T(4) &= |\hat{\mathcal{P}}_4 T_{if}|^2 = \frac{1}{4!} \left. \frac{\partial^4 T_{if}}{\partial z^4} \right|_{z=0} \\ &= t_A t_D (r_A (r_B t_B + r_C t_C) + r_C (r_D t_C + t_B (t_A + t_D)) + r_B (r_D t_B + t_C (t_A + t_D))). \end{aligned} \quad (5.30)$$

Assim, inspecionando (5.30) podemos ver diretamente quais são as trajetórias que contribuem para tal processo. Isto é muito interessante porque em muitos casos queremos calcular o tempo de chegada [160], como fizemos acima, o que pode ser um cálculo complicado em outros métodos. Aqui, como mostramos acima, podemos obter o tempo de chegada uma forma bastante simples.

Um outro exemplo é o hipercubo tridimensional da Figura 5.5. A função de Green para este hipercubo tem a mesma forma da função de Green para o hipercubo bidimensional, com a diferença de que o coeficiente de transmissão guarda informação sobre a estrutura do hipercubo tridimensional. Na Seção 3.5.2, já calculamos a probabilidade de espalhamento para esse hipercubo como função de  $k$ , onde utilizamos interações deltas generalizadas nos vértices, mas aqui utilizaremos os coeficientes de Grover em todos os vértices para compararmos com [173]. Usando os valores dos coeficientes de Grover, o coeficiente de transmissão para o hipercubo tridimensional é dado por

$$T_{if} = \frac{24 \exp[3ik\ell]}{36 + 8 \exp[2ik\ell] - 11 \exp[4ik\ell] - 9 \exp[6ik\ell]}. \quad (5.31)$$

Este é o mesmo resultado obtido em [173], usando o modelo de multi-portas. Para o hipercubo tridimensional a probabilidade da partícula ser encontrada pela primeira vez na ligação  $f$  depois de um número qualquer de passos,  $P_{out}$ , e o tempo de chegada,  $h$ , foram calculados numericamente e são iguais a  $P_{out} = 0.5344130$  e  $h = 3,7009109$ . Notamos a diminuição no valor do  $P_{out}$  devido ao aumento do número de vértices entre  $i$  e  $f$ , aumentando a probabilidade da partícula ser refletida e não alcançar a ligação  $f$ . Este efeito também pode ser notado no aumento do valor do tempo de chegada para alcançar a ligação  $f$ , medido por  $h$ .

Em resumo, usando a função de Green para as caminhadas quânticas, podemos usar o operador de caminho para encontrar os possíveis caminhos que possuem o mesmo comprimento e com o operador de passo obter a contribuição de cada caminho com tal comprimento. O operador de caminho e de passo aqui definidos, representam contribuições originais dessa tese de doutorado.

## 5.7 Função de Green para as caminhadas quânticas de espalhamento 1D

A função de Green para as caminhadas quânticas nas ligações é obtida através da soma das amplitudes de todos os caminhos conectando o ponto inicial e final para o estado em questão. Como vimos na Seção 5.6, a função de Green é sempre obtida em uma forma fechada. No entanto, podemos obter as amplitudes para as caminhadas quânticas nas ligações através da expansão da função de Green e do uso dos operadores de caminho e de passo introduzidos.

No caso das caminhadas quânticas 1D, precisamos calcular as funções de Green para três possíveis situações:  $x_i > x_f$ ,  $x_i = x_f$  e  $x_i < x_f$ , como mostra a Figura 5.6. As funções de Green para esses três casos são obtidas de uma forma totalmente análoga ao que foi feito na Seção 5.4 para uma rede 1D de Kronig-Penney com interações pontuais gerais igualmente espaçadas de uma distância  $\ell$ . Para o estado inicial entre os vértices  $j-1$  e  $j$  e sentido  $\sigma$ , ou seja,  $|+1, j\rangle$  e  $|-1, j-1\rangle$ , essas funções de Green são dadas por ( $\theta^{(+)} = 1$  e  $\theta^{(-)} = 0$ )

$$G_{\text{sinal}(\sigma)}^L(x_f, x_i, k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \times \frac{\left(1 + e^{2ikx_f} R_{j-n}^{(-)}\right) \left[R_j^{(+)} e^{2ik\ell}\right]^{\theta(\text{sinal}(\sigma))} T_{j-1}^{(-)} e^{-ik(x_f + \sigma x_i - \ell)}}{\left(1 - R_{j-n}^{(-)} R_{j-n+1}^{(+)} e^{2ik\ell}\right) \left(1 - R_{j-1}^{(-)} R_j^{(+)} e^{2ik\ell}\right) - R_{j-n}^{(-)} T_{j-n+1}^{(+)} T_{j-1}^{(-)} R_j^{(+)} e^{4ik\ell}}, \quad (5.32)$$

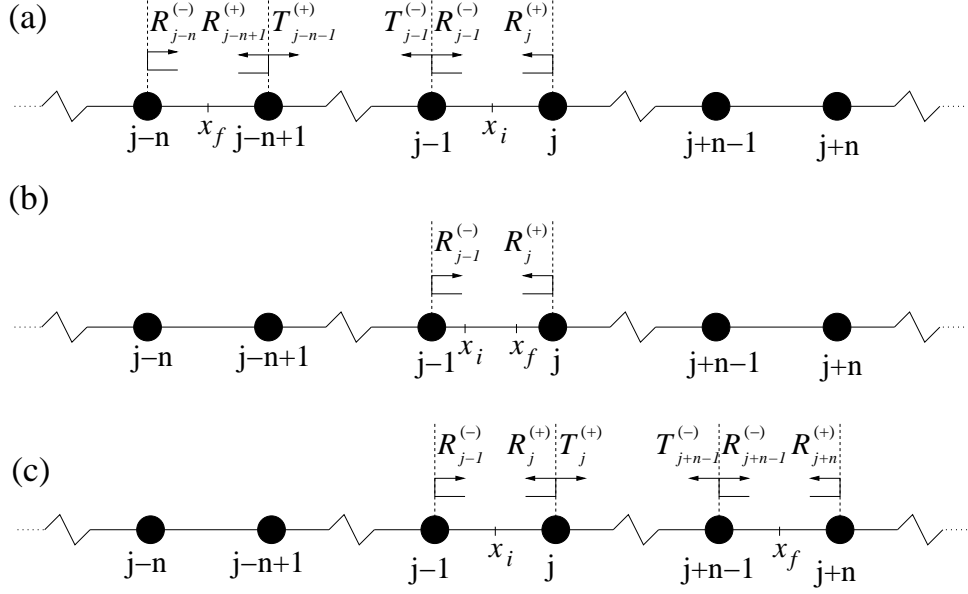


Figura 5.6: Grafo unidimensional mostrando as três situações para o cálculo das funções de Green para as caminhadas quânticas. Em (a)  $x_i > x_f$  e usamos  $G_{\sigma}^L$ , em (b)  $x_i = x_f$  e usamos  $G_{\sigma}^M$  e em (c)  $x_i < x_f$  e usamos  $G_{\sigma}^R$ .

$$G_{\text{sinal}(\sigma)}^M(x_f, x_i, k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \frac{\left( e^{2ikx_f} + e^{2ikl} R_j^{(+)} \right) \left[ R_{j-1}^{(-)} \right]^{\theta(-\text{sinal}(\sigma))} e^{-ik(x_f + \sigma x_i)}}{1 - R_{j-1}^{(-)} R_j^{(+)} e^{2ikl}}, \quad (5.33)$$

$$G_{\text{sinal}(\sigma)}^R(x_f, x_i, k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \times \frac{\left( e^{2ikx_f} + e^{2ikl} R_{j+n}^{(+)} \right) \left[ R_{j-1}^{(-)} e^{ik(l-x_f)} \right]^{\theta(\text{sinal}(\sigma))} T_j^{(+)} e^{-\sigma ikx_i}}{\left( 1 - R_{j-1}^{(-)} R_j^{(+)} e^{2ikl} \right) \left( 1 - R_{j+n-1}^{(-)} R_{j+n}^{(+)} e^{2ikl} \right) - R_{j-1}^{(-)} T_j^{(+)} T_{j+n-1}^{(-)} R_{j+n}^{(+)} e^{4ikl}}. \quad (5.34)$$

$G_{\text{sinal}(\sigma)}^L$  é para o caso  $x_i > x_f$ ,  $G_{\text{sinal}(\sigma)}^M$  para  $x_i = x_f$  e  $G_{\text{sinal}(\sigma)}^R$  para  $x_i < x_f$ . Os coeficientes de reflexão e transmissão globais são obtidos através dos coeficientes de reflexão e transmissão de cada vértice e de relações de recursão semelhantes àquelas obtidas na Seção 3.8 e são escritas aqui como

$$R_j^{(\pm)} = r_j^{(\pm)} + \frac{t_j^{(\pm)} R_{j\pm 1}^{(\pm)} t_j^{(\mp)} e^{2ikl}}{1 - r_j^{(\mp)} R_{j\pm 1}^{(\pm)} e^{2ikl}},$$

$$T_j^{(\pm)} = \frac{t_j^{(\pm)} T_{j\pm 1}^{(\pm)} e^{ikl}}{1 - r_j^{(\pm)} R_{j\pm 1}^{(\pm)} e^{2ikl}}. \quad (5.35)$$

Para um estado inicial como uma combinação linear dos estados  $|+1, j\rangle$  e  $|-1, j-1\rangle$ ,  $|\psi(0)\rangle = a|+1, j\rangle + b|-1, j-1\rangle$ , as funções de Green são dadas pela combinação linear

das funções de Green para cada um dos estados

$$G^X(x_f, x_i, k) = a G_+^X(x_f, x_i, k) + b G_-^X(x_f, x_i, k). \quad (5.36)$$

## 5.8 Caminhadas quânticas de espalhamento e a soma de caminhos “a la Feynman”

Podemos fazer uma análise de soma de caminhos para as caminhadas quânticas de espalhamento. Tal procedimento é interessante, pois aproxima o problema de caminhadas quânticas à idéia de história de caminhos de Feynman [179]. Portanto, de certa forma estamos fazendo a conexão mais direta entre os casos clássicos e quânticos.

Para a análise, suponha que o caminhante inicie a caminhada no estado  $|+1, j\rangle$ . Usando as funções de Green da Seção anterior e o operador de passo, vamos ver como a partícula evolui após 3 passos:

$$\begin{aligned} n=0 & \quad | + 1, 0 \rangle \\ n=1 & \xrightarrow{\mathcal{P}_1} r_0^{(+)} | - 1, -1 \rangle + t_0^{(+)} | + 1, 1 \rangle \\ n=2 & \xrightarrow{\mathcal{P}_2} r_0^{(+)} t_{-1}^{(-)} | - 1, -2 \rangle + t_0^{(+)} r_1^{(+)} | - 1, 0 \rangle + r_0^{(+)} r_{-1}^{(-)} | 1, 0 \rangle + t_0^{(+)} t_1^{(+)} | 1, 2 \rangle \\ n=3 & \xrightarrow{\mathcal{P}_3} r_0^{(+)} t_{-1}^{(-)} t_{-2}^{(-)} | - 1, -3 \rangle + r_0^{(+)} t_{-1}^{(-)} r_{-2}^{(-)} | 1, -1 \rangle + \\ & \quad \left( r_0^{(+)} r_{-1}^{(-)} r_0^{(+)} + t_0^{(+)} r_1^{(+)} t_0^{(-)} \right) | - 1, -1 \rangle + \\ & \quad \left( r_0^{(+)} r_{-1}^{(-)} t_0^{(+)} + t_0^{(+)} r_1^{(+)} r_0^{(-)} \right) | 1, 1 \rangle + \\ & \quad t_0^{(+)} t_{-1}^{(-)} r_{-2}^{(-)} | - 1, 1 \rangle + t_0^{(+)} t_1^{(-)} t_2^{(-)} | 1, 3 \rangle. \end{aligned} \quad (5.37)$$

Após  $n$  passos, a partícula poderá ser encontrada nos estados

$$| - 1, -n \rangle, | + 1, -n + 2 \rangle, \dots, | - 1, +n - 2 \rangle, | + 1, +n \rangle,$$

correspondendo a  $2n$  estados diferentes e  $2^n$  caminhos diferentes para esses estados. O mesmo se aplica se o caminhante iniciar a caminhada no estado  $| - 1, j \rangle$ . Na Figura 5.7 mostramos esquematicamente a evolução para até  $n = 5$  passos para o estado inicial  $| + 1, j \rangle$ . Para obter a amplitude de um estado entre dois vértices é necessário somar as amplitudes de todos os caminhos levando para esse estado. Uma análise cuidadosa da evolução dessa caminhada mostra que o número de caminhos para um estado  $|\sigma, j\rangle$  é dado

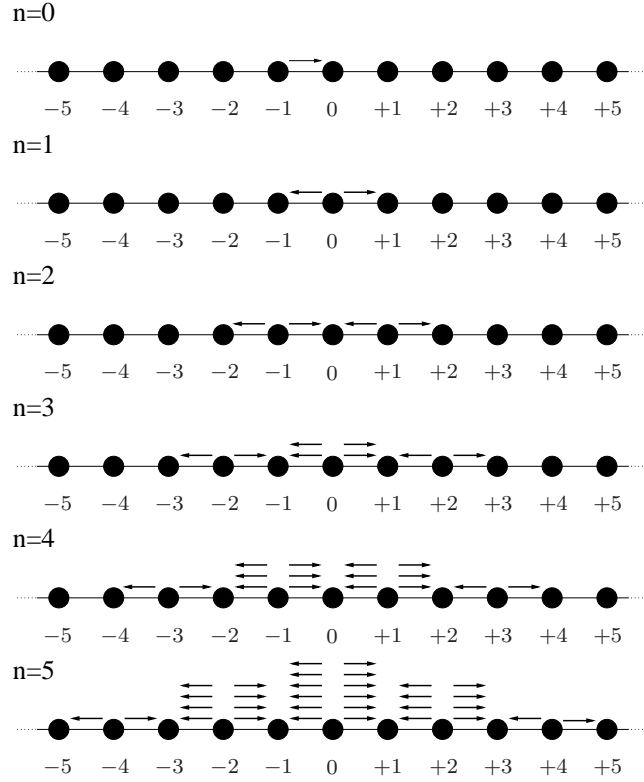


Figura 5.7: Evolução para até 5 passos de uma caminhada quântica de espalhamento com estado inicial  $|+1, 0\rangle$ . As setas representam o estado quântico e o número de setas o número de caminhos para o estado, Equação (5.38). Esquematicamente,  $\rightarrow$  corresponde a  $\sigma = +1$  e  $\leftarrow$  corresponde a  $\sigma = -1$ .

por

$$N_{\sigma,j} = \binom{n-1}{\frac{n+j}{2} - \frac{1+\sigma}{2}}. \quad (5.38)$$

Essa fórmula pode ser verificada na Figura 5.7. Como vimos na Seção 4.9, as caminhadas com moeda e as caminhadas de espalhamento estão relacionadas de perto. Aqui podemos observar uma relação entre o número de caminhos para um dado estado nas duas caminhadas. Nas caminhadas quânticas com moeda somamos as contribuições dos dois estados de moeda  $+$  e  $-$ , mapeados através de  $\mathbf{E}^{-1}$  nas direções de propagação  $-1$  e  $+1$  das caminhadas de espalhamento, respectivamente, isto para um mesmo  $j$ . Usando a Equação (5.38), o número de caminhos para um dado estado  $j$  na caminhada com moeda é então

$$N_j = N_{1,j} + N_{-1,j} = \binom{n-1}{\frac{n+j}{2} - \frac{1+1}{2}} + \binom{n-1}{\frac{n+j}{2} - \frac{1-1}{2}} = \binom{n}{\frac{n+j}{2}}. \quad (5.39)$$

A Equação 5.39 é exatamente o resultado binomial para o número de caminhos obtido em [157], usando uma análise combinatória aplicada à uma caminhada com moeda. Nossos cálculos aqui partem de caminhada de espalhamento.

Um caminhante quântico que, inicialmente no estado  $|+1, 0\rangle$ , caminhe  $e$  passos para a esquerda e  $d$  passos para a direita, com  $e + d = n$ , irá alcançar os estados  $|\sigma, j\rangle$  onde

$j = d - e + \sigma - 1$ , onde  $\sigma = \pm 1$ . Usando a expansão das funções de Green obtidas na Seção anterior para as caminhadas de espalhamento, Equações (5.32)-(5.34), com todas as interações pontuais possuindo os mesmos coeficientes de reflexão e transmissão,  $r_j^{(\pm)} = r^{(\pm)}$  e  $t_j^{(\pm)} = t^{(\pm)}$  e realizando a aplicação do operador de caminho, obtemos a seguinte forma para as amplitudes para o estado  $|-1, j\rangle$ ,

$$a_{-1,j}^{+1}(n) = \sum_{\substack{i=1 \\ (\text{ímpar})}}^n [r^{(-)}]^{\frac{i-1}{2}} [r^{(+)}]^{\frac{i+1}{2}} [t^{(-)}]^{e-\frac{i-1}{2}} [t^{(+)}]^{d-\frac{i+1}{2}} \binom{e-1}{\frac{i}{2}-1} \binom{d}{\frac{i}{2}}, \quad (5.40)$$

e para o estado  $|+1, j\rangle$ ,

$$a_{+1,j}^{+1}(n) = \sum_{\substack{i=2 \\ (\text{par})}}^n [r^{(-)}]^{\frac{i}{2}} [r^{(+)}]^{\frac{i}{2}} [t^{(-)}]^{e-\frac{i}{2}} [t^{(+)}]^{d-\frac{i}{2}} \binom{e}{\frac{i-1}{2}} \binom{d-1}{\frac{i-1}{2}}, \quad (5.41)$$

onde  $i$  é o número de inversões do sentido (reflexões) de movimento do caminhante,  $e$  é o número de passos para a esquerda,  $d$  é o número de passos para a direita,  $n = e + d$  e  $j = r - e + \sigma - 1$ .  $a_{+1,j}^{+1}(n)$  é válida somente para  $d < n$ . Para a situação com  $d = n$ ,  $a_{+1,n}^{+1}(n) = [t^{(+)}]^n$ . Para um caminhante quântico com estado inicial  $|-1, 0\rangle$ , a amplitude para o estado  $|-1, j\rangle$  é

$$a_{-1,j}^{-1}(n) = \sum_{\substack{i=2 \\ (\text{par})}}^n [r^{(+)}]^{\frac{i}{2}} [r^{(-)}]^{\frac{i}{2}} [t^{(+)}]^{d-\frac{i}{2}} [t^{(-)}]^{e-\frac{i}{2}} \binom{d-1}{\frac{i}{2}-1} \binom{e}{\frac{i}{2}}, \quad (5.42)$$

e para o estado  $|+1, j\rangle$ ,

$$a_{+1,j}^{-1}(n) = \sum_{\substack{i=1 \\ (\text{ímpar})}}^n [r^{(+)}]^{\frac{i-1}{2}} [r^{(-)}]^{\frac{i+1}{2}} [t^{(+)}]^{d-\frac{i-1}{2}} [t^{(-)}]^{e-\frac{i+1}{2}} \binom{d}{\frac{i-1}{2}} \binom{e-1}{\frac{i-1}{2}}, \quad (5.43)$$

onde agora  $j = r - l + \sigma + 1$ . Para a situação com  $l = n$ ,  $a_{+1,n}^{-1}(n) = [t^{(-)}]^n$ .

Na Figura 5.8 mostramos esquematicamente os possíveis caminhos para um caminhante quântico para  $n = 5$  passos e estado inicial  $|+1, 0\rangle$ , com a rede girada por  $45^\circ$  da configuração usual. Os caminhos com estado final  $|+1, j\rangle$  possuem um número par de reflexões e caminhos com estado final  $|-1, j\rangle$  possuem número ímpar de reflexões. O modelo de multi-portas pode ser obtido das equações acima fazendo  $r^{(+)} = r$ ,  $r^{(-)} = -r^*$ ,  $t^{(+)} = t$  e  $t^{(-)} = t^*$ . Neste caso temos um análise simples para a interferência dos caminhos. Caminhos que possuem um número ímpar de reflexões à esquerda possuem amplitudes com fase negativa, enquanto que caminhos com número par de reflexões à esquerda possuem amplitudes com fase positiva. Assim, estados que possuem mais de um caminho podem sofrer interferência destrutiva ou construtiva, dependendo do número de reflexões

à esquerda de cada caminho.

Para exemplificar a análise vamos utilizar os estados  $|+1, 1\rangle$  e  $|+1, 3\rangle$  da Figura 5.8. O estado  $|+1, 1\rangle$  possui seis possíveis caminhos, os três primeiros mostrados na Figura possuem uma única reflexão à esquerda, possuindo amplitude com fase negativa, enquanto que os outros três possuem duas reflexões à esquerda possuindo amplitude com fase positiva. Esses dois grupos de caminhos sofrem interferência destrutiva, diminuindo a amplitude e conseqüentemente a probabilidade. Já no caso do estado  $|+1, 3\rangle$ , todos os caminhos possuem somente uma única reflexão à esquerda, tendo todos os caminhos amplitude negativa, sofrerão interferência construtiva. O mesmo se aplica aos outros estados, onde podemos ter interferência destrutiva parcial ou total. Como um exemplo numérico, vamos utilizar os valores para o modelo de multi-portas equivalentes à moeda Hadamard na caminhada com moeda,  $r = t = 1/\sqrt{2}$ . Com estes valores o estado  $|+1, +1\rangle$  tem amplitude igual a 0 e o estado  $|+1, 3\rangle$  tem amplitude  $1/4\sqrt{2}$ , correspondendo às probabilidades 0 e  $1/2$ , respectivamente. Essas interferências construtivas e destrutivas fornecem o caráter quântico das caminhadas quânticas.

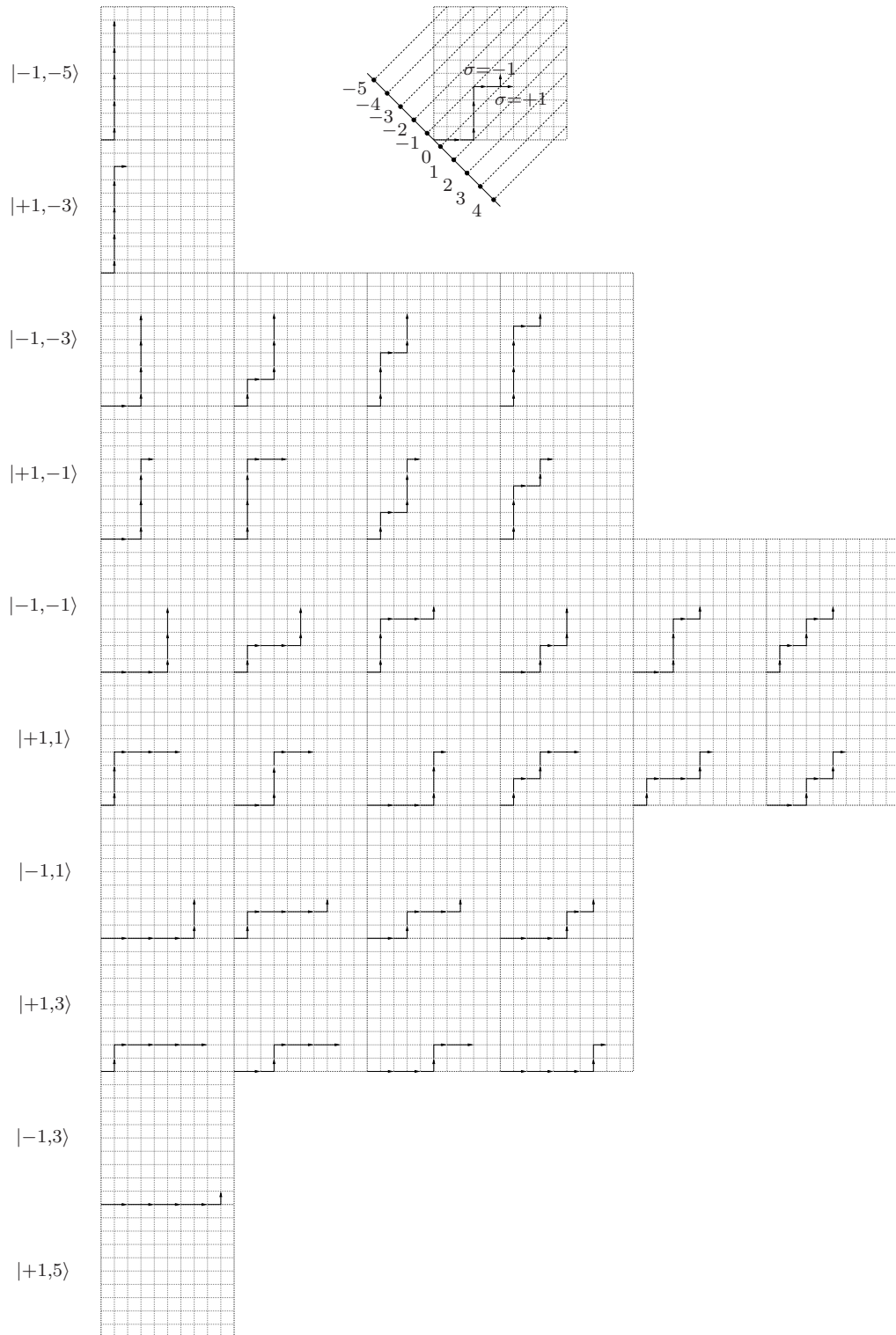


Figura 5.8: Representação esquemática dos possíveis estados e do número de caminhos para cada estado na caminhadas de espalhamento para  $n = 5$  passos. A rede está girada por  $45^\circ$  da configuração usual. O número de estados é  $2 \times 5 = 10$  e o número de caminhos é  $2^5 = 32$ , como pode ser verificado na Figura. Em detalhe mostramos um caminho com  $n = 5$  e  $\sigma = \pm 1$  e a configuração da rede.



## 5.9 Caminhadas quânticas com moedas dependentes da energia

No caso mais geral de espalhamento os coeficientes de reflexão e transmissão das interações pontuais dependem da energia. Vimos aplicações disso no estudo de grafos quânticos no Capítulo 3. No modelo de multi-portas usados na literatura, apesar de se usar os coeficientes  $r$  e  $t$  da matriz de espalhamento, nada é dito com relação à dependência com a energia desses coeficientes. Com a abordagem da função de Green para as caminhadas quânticas chegamos a uma situação onde os coeficientes de espalhamento das interações pontuais e conseqüentemente as amplitudes das caminhadas quânticas podem depender da energia. De fato, alguns autores [180, 181] já tem apontado essa analogia do operador moeda na caminhada quântica com moeda como uma matriz de espalhamento. A idéia de espalhamento em grafos aplicada as caminhadas quânticas foi usada recentemente por Childs [45] no sentido de implementar portais quânticos (“quantum gates”) dependentes da energia, porém nada é mencionado com relação à dinâmica da caminhada quântica.

Seja a matriz de espalhamento bidimensional

$$S_e(k) = \begin{pmatrix} r_j^{(+)}(k) & t_j^{(+)}(k) \\ t_j^{(-)}(k) & r_j^{(-)}(k) \end{pmatrix}. \quad (5.44)$$

Da mesma forma que obtivemos uma forma para o operador  $\mathbf{U}$  nas caminhadas nas ligações para diferentes operadores moeda, dado o mapeamento realizado pelo operador  $\mathbf{E}$  em (4.51), podemos encontrar o operador moeda associado à matriz de espalhamento acima. E esse operador tem a forma

$$\mathbf{C}_e(k) = \begin{pmatrix} t_j^{(-)}(k) & r_j^{(+)}(k) \\ r_j^{(-)}(k) & t_j^{(+)}(k) \end{pmatrix}, \quad (5.45)$$

onde agora temos um operador moeda dependente da energia. Esse operador é unitário, uma vez que os coeficientes de reflexão e transmissão satisfazem as seguintes relações [67]

$$\begin{aligned} |r_j^{(\pm)}(k)|^2 + |t_j^{(\pm)}(k)|^2 &= 1, & r_j^{(+)}(k)^* t_j^{(+)}(k) + t_j^{(-)}(k)^* r_j^{(-)}(k) &= 0, \\ r_j^{(\pm)}(k)^* &= t_j^{(\pm)}(-k), & t_j^{(\pm)}(k)^* &= t_j^{(\mp)}(-k), \end{aligned} \quad (5.46)$$

os quais são casos especiais das relações em (2.25). Da invariância temporal,  $t_j^{(+)}(k) = t_j^{(-)}(k)$  [128]. Assim podemos usar a matriz unitária em (5.45) para realizar a evolução das caminhadas quânticas. Podemos usar diferentes interações pontuais em cada vértice, mas aqui consideramos todos os vértices com as mesmas interações pontuais.

Em [77] os autores classificam como as interações pontuais gerais que impõe condições

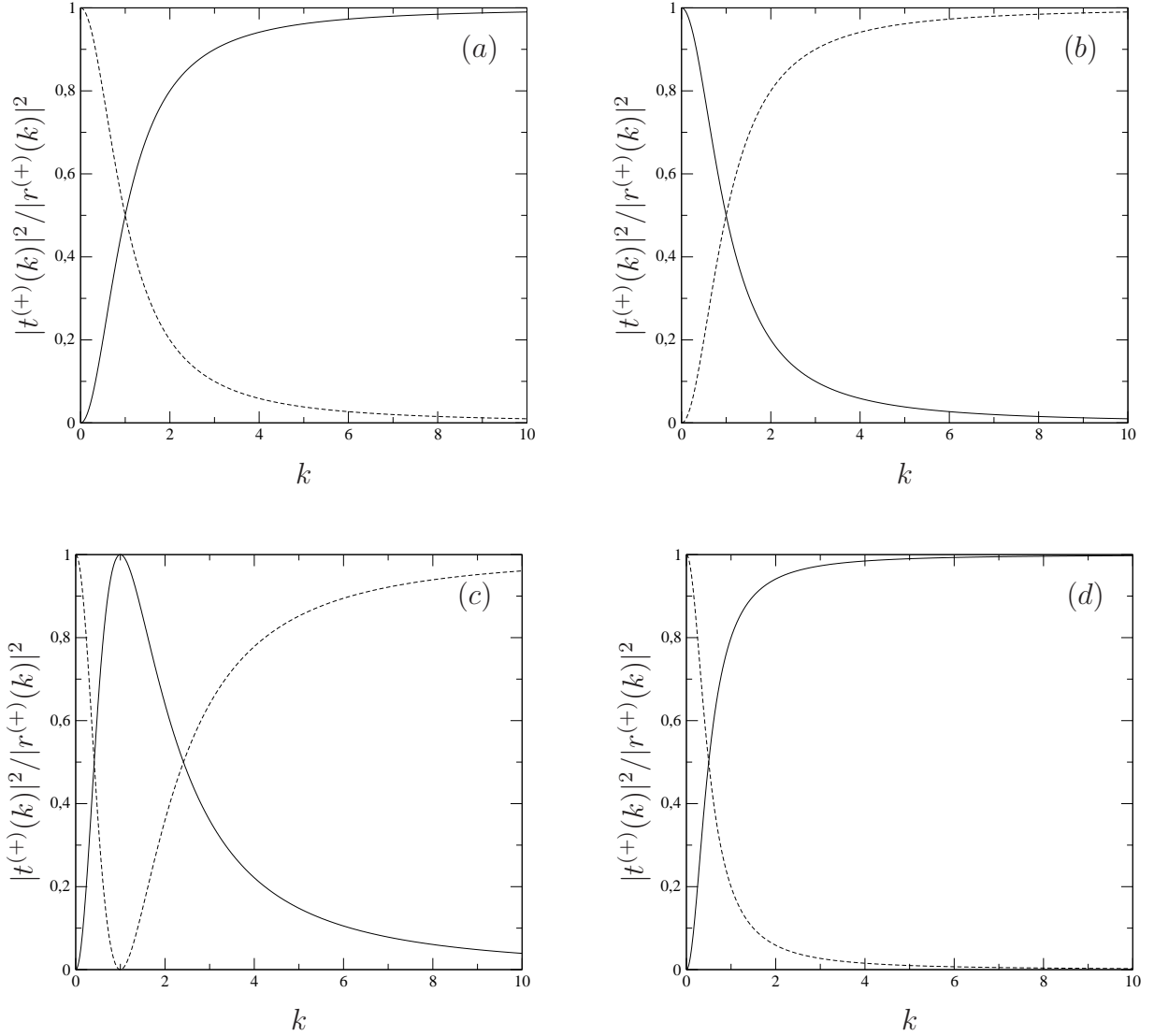


Figura 5.9: Comportamento dos coeficientes de reflexão (linha tracejada) e transmissão (linha cheia) para quatro casos de interações pontuais: (a) delta ( $\delta$ ), (b) delta linha ( $\delta'$ ) (c) cruzado e (d) assimétrico.

ao comportamento das funções de onda do sistema. Para ilustrar a evolução de uma caminhada quântica com matriz de espalhamento dependente da energia vamos utilizar quatro casos particulares discutidos em [77]. A forma geral dos coeficientes de reflexão e transmissão das interações pontuais gerais são definidas pelas Equações (2.20), as quais reescrevemos aqui usando nossa notação atual como

$$r^{(\pm)}(k) = \frac{c \pm ik(d - a) + bk^2}{-c + ik(d + a) + bk^2}, \quad t^{(\pm)}(k) = \frac{2ik\omega^{\pm 1}}{-c + ik(d + a) + bk^2}. \quad (5.47)$$

Com base em [77], os casos analisados serão: (i)  $a = d = \omega = 1$ ,  $b = 0$  e  $c = 2\gamma$ , (ii)  $a = d = \omega = 1$ ,  $b = 2\gamma$  e  $c = 0$ , (iii)  $a = d = 0$ ,  $\omega = 1$ ,  $b = \gamma$  e  $c = -\gamma^{-1}$  e (iv)  $a^{-1} = d = \gamma$ ,  $\omega = -i$ ,  $b = 0$  e  $c = \gamma^{-1}$ . Os dois primeiros potenciais são os potenciais  $\delta$

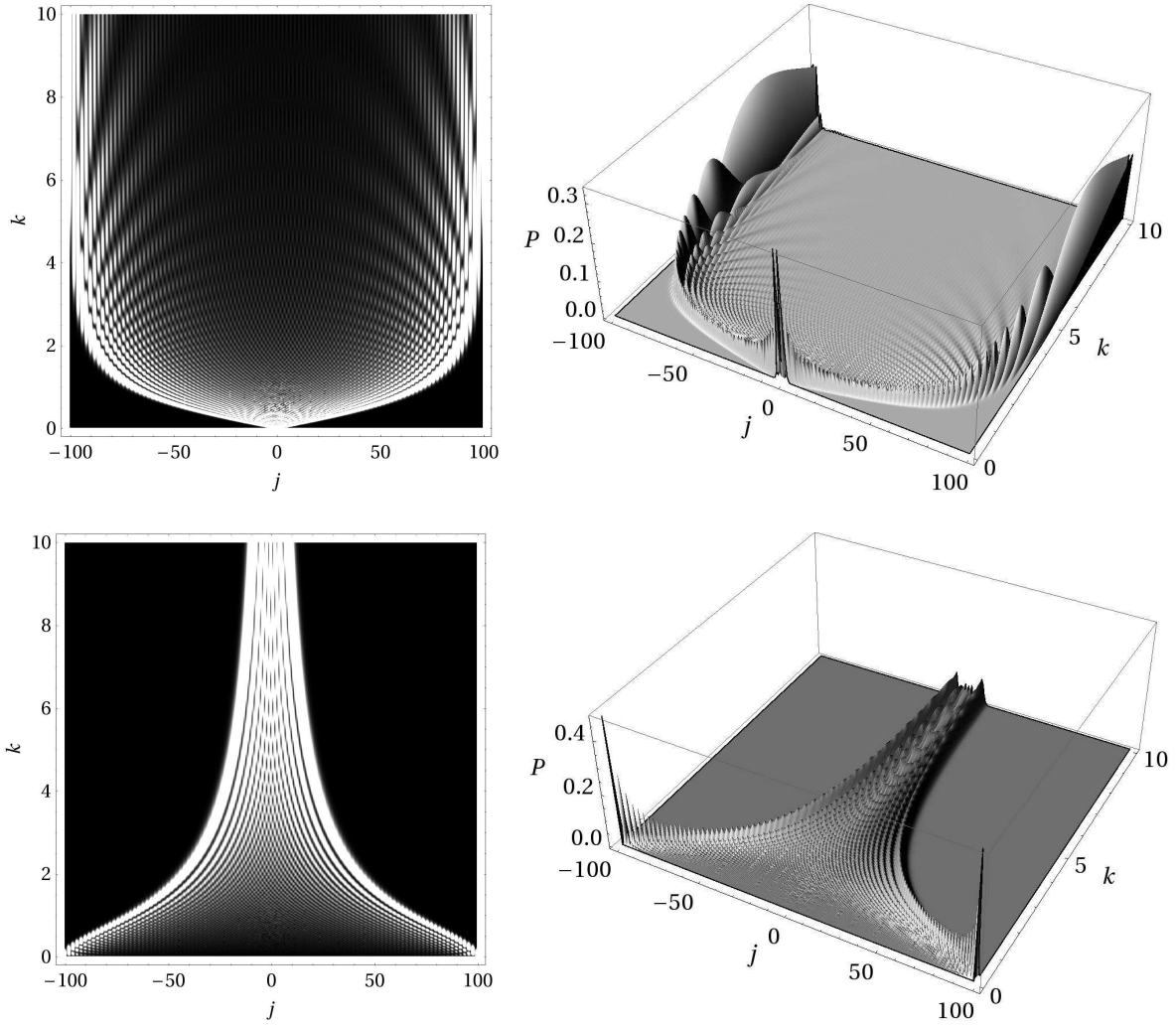


Figura 5.10: Evolução de uma caminhada quântica de espalhamento com função da energia,  $k$ , para os casos da delta (acima) e da delta linha (abaixo) discutidos no texto. À esquerda é mostrado um gráfico de densidade e à direita um gráfico tridimensional para os mesmo parâmetros.

e  $\delta'$ , respectivamente. O caso (iii) corresponde à condição de contorno na qual a função de onda  $\psi(x = 0^+) = \gamma\psi'(x = 0^-)$  e  $\psi'(x = 0^+) = -\gamma^{-1}\psi(x = 0^-)$ , chamando de caso cruzado, uma vez que os valores de  $\psi$  em um lado depende somente do valor de sua derivada do outro lado da interação pontual. Finalmente, chamaremos (iv) de caso assimétrico [182] porque inserindo seus parâmetros em (5.47), encontramos amplitudes quânticas diferentes à esquerda e à direita. Na Figura 5.9 mostramos o comportamento dos coeficientes de reflexão (linha tracejada) e transmissão (linha cheia) destas interações pontuais com função de  $k$  e nas Figuras 5.10 e 5.11 mostramos gráficos de densidade e tridimensionais da evolução de uma caminhada quântica de espalhamento para  $n = 100$  passos e estado inicial  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1, -1\rangle + |+1, 0\rangle)$ . Neste gráfico 0 é preto e 1 é branco.

No caso da delta, como podemos ver na Figura 5.9(a), o coeficiente de transmissão

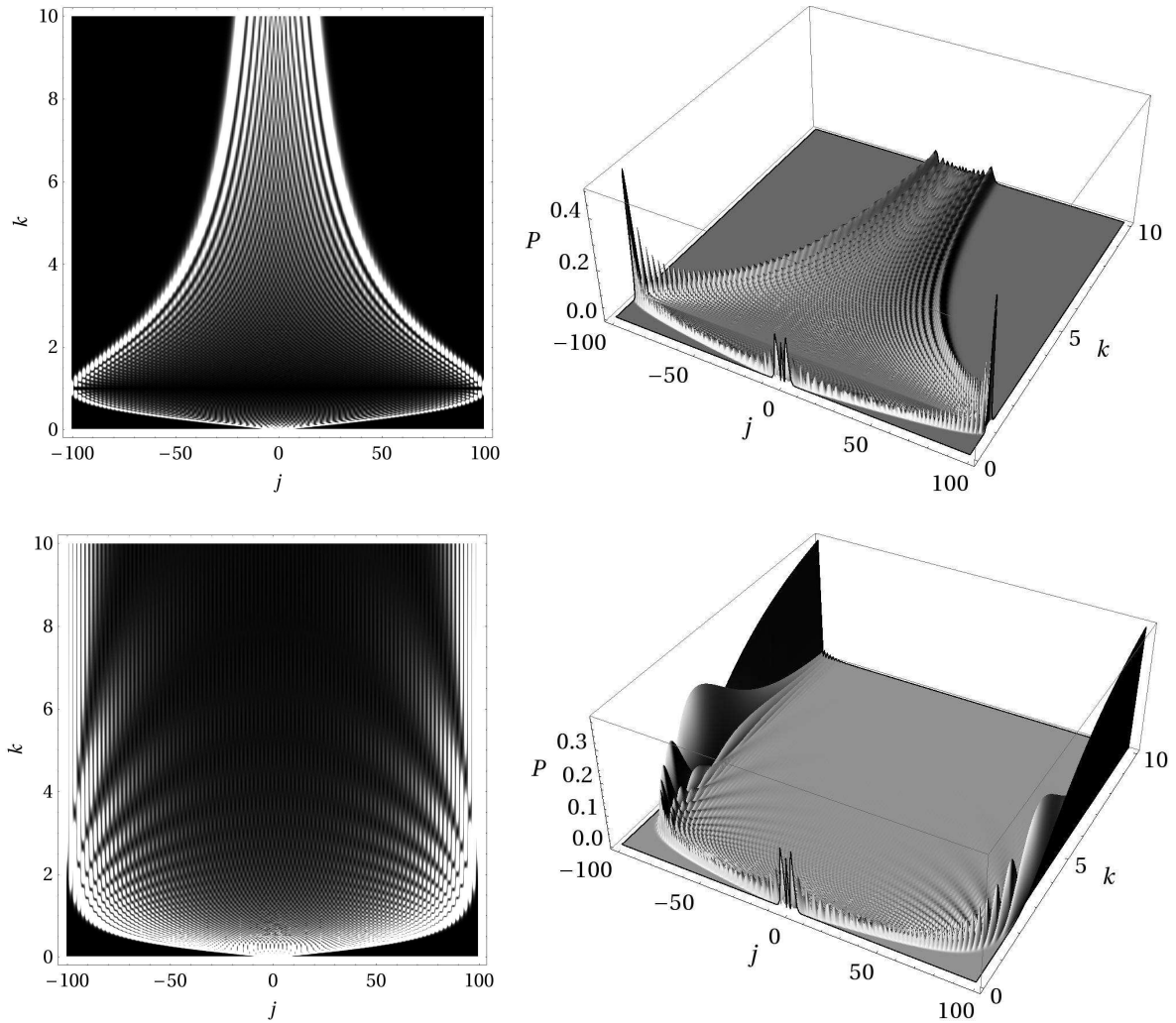


Figura 5.11: Evolução de uma caminhada quântica de espalhamento com função da energia,  $k$ , para os casos cruzado (acima) e assimétrico (abaixo) discutidos no texto. À esquerda é mostrado um gráfico de densidade e à direita um gráfico tridimensional para os mesmo parâmetros.

aumenta com o aumento de  $k$ , fazendo com que o caminhante se desloque para ligações cada vez mais longe do estado inicial, quase balísticamente. Com o aumento da intensidade  $\gamma$  da delta é observado a diminuição do coeficiente de transmissão para um mesmo  $k$ , assim o aumento de  $\gamma$  faz com que o caminhante espalhe-se mais lentamente como função de  $k$ . Já no caso da delta linha, o coeficiente de transmissão decai com o aumento de  $k$  (Figura 5.9(b)), fazendo com que a caminhada fique cada vez localizada ao redor da posição inicial da caminhada com o aumento de  $k$ . Aumentando  $\gamma$  observamos que o caminhante fique ainda mais localizado ao redor do estado inicial. O caso cruzado é bastante interessante. O coeficiente de transmissão possui um máximo em  $k = k_{max} = \sqrt{|1 - ad|}/|b| = 1/\gamma$  [77]. Para os parâmetros usados, o coeficiente de transmissão tem valor 1 para  $k_{max}$  e o caminhante tem movimento balístico. Para valores de  $k$  maiores, o coeficiente de transmissão diminui como função de  $k$  e o caminhante localiza-se ao redor da

posição inicial. Ao aumentarmos  $\gamma$ , o valor de  $k_{max}$  diminui e o coeficiente de transmissão diminui para um mesmo  $k$ , assim o caminhante realiza um deslocamento balístico para  $k$ 's menores, aumentando a localização. O caso assimétrico tem comportamento similar ao da delta, com a diferença que o caminhante espalha-se mais rapidamente devido ao fato de que o coeficiente de transmissão ser maior para um mesmo  $k$ , quando comparado ao caso delta e nesse caso com o aumento de  $\gamma$  o coeficiente de transmissão tem um valor assintótico  $4/(d + d^{-1})^2 = 1$  [77], fazendo o caminhante localizar-se a uma distância fixa, mesmo com o aumento de  $k$ .

## Conclusão e perspectivas futuras

### 6.1 Conclusão

Nesta tese mostramos que a função de Green para um grafo é dada por uma soma sobre trajetórias clássicas, mas levando em conta os efeitos quânticos locais, através dos coeficientes de reflexão e transmissão definidos com base nas condições de contorno em cada vértice do grafo. Matematicamente ela é dada por

$$G_{ln}(x_f, x_i; E) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \sum_{\text{c.e.}} W_{\text{c.e.}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{\text{c.e.}}(x_f, x_i; k)\right], \quad (6.1)$$

que tem exatamente a mesma estrutura da função de Green semiclássica generalizada. Isso permite resolver problemas de forma recursiva, um aspecto muito importante na resolução de grafos quânticos gerais.

Na primeira parte obtivemos a função de Green usando dois procedimentos de simplificação: o reagrupamento dos infinitos caminhos em classes finitas de trajetórias e a divisão do grafo em blocos. Usando esses dois procedimentos, obtivemos a função de Green para grafos abertos e fechados, analisando o espalhamento para o primeiro e os estados ligados para o segundo. Esses resultados são exatamente iguais àqueles obtidos pela solução da equação de Schrödinger. Também aplicamos o método para o grafo quântico binário em árvore e para o triângulo de Sierpinski, nos quais mostramos o uso de um procedimento recursivo para obtenção dos coeficientes de reflexão e transmissão.

Na segunda parte abordamos as caminhadas quânticas discretas do ponto de vista da teoria de espalhamento e mostramos que essas caminhadas são equivalentes às caminhadas quânticas com moeda. Através de um mapeamento da caminhada quântica em redes de Kronig-Penney generalizada, mostramos que é possível escrever uma função de Green para

as caminhadas quânticas discretas de espalhamento. As vantagens da aplicação de nosso método são a facilidade da construção da função de Green para grafos gerais, a introdução da dependência com a energia, a possibilidade de explorar caminhos específicos em um grafo através do operador de caminho, a possibilidade de obter a contribuição de cada órbita para um dado comprimento de caminho através do operador de passo, a obtenção dos resultados de forma genérica para qualquer condição de contorno nos vértices e a facilidade da obtenção dos coeficientes de reflexão e transmissão diretamente da função de Green.

Esperamos que esses aspectos técnicos no estudo de grafos quânticos e caminhadas quânticas possam auxiliar numa maior compreensão de tais sistemas, e como discutido, são base para diferentes aplicações interessantes em ciência. Obviamente que este trabalho não encerra estes assuntos, pelo contrário, suscita diferentes possibilidades de investigações e formulações de perguntas ainda sem respostas. A seguir listamos algumas destas possibilidades.

## 6.2 Perspectivas futuras

A construção de funções de Green abordada nessa tese deixa espaço para estudo de grafos com diferentes condições de contorno. Isso permite abordar vários problemas diferentes, sendo que alguns foram estudados nessa tese. Um problema interessante é o caso de redes unidimensionais desordenadas, onde temos diferentes interações pontuais ao longo da rede. Um estudo dos coeficientes quânticos para redes unidimensionais desse tipo, com interações pontuais distribuídas a partir de uma lei de probabilidade, já foi iniciado e serão reportados em um momento futuro.

Como vimos, é possível construir a função de Green para grafos gerais. Uma classe de grafos que não foi abordada aqui é aquele de redes de pequeno mundo [183]. Usando os procedimentos para a construção da função de Green, juntamente com a matriz adjacente desses grafos, acreditamos ser possível a obtenção da função de Green para redes de pequeno mundo, possibilitando o estudo de transporte quântico [184] em tais sistemas. Transporte em redes de pequeno mundo também tem sido estudado usando caminhadas quânticas com tempo contínuo [185–187]. O modelo das caminhadas quânticas usando tempo contínuo é dependente da energia e recentemente em [188, 189] foi mostrada a relação entre as caminhadas quânticas discretas e contínuas em [188, 189]. Nossa abordagem usando a função de Green para as caminhadas quânticas discretas introduz a dependência com a energia. Desta forma, podemos usar nosso modelo para estudar transporte em redes de pequeno mundo. Uma questão aberta é qual a relação entre nosso modelo com o modelo de caminhadas quântica usando tempo contínuo.

Para as caminhadas quânticas com dependência com a energia, discutimos somente o caso onde todas as interações pontuais eram iguais. Uma extensão natural seria utilizar interações pontuais dependentes da energia que são diferentes em cada vértice. Por exemplo, utilizar um grafo unidimensional com interações delta e delta-linha intercaladas por algum tipo de lei de probabilidade e observar a influência na evolução das caminhadas quânticas.

Esses seriam alguns dos problemas imediatos que poderiam ser abordados com base nos resultados obtidos nessa tese, porém representam somente algumas das possíveis variações onde podemos aplicar as funções de Green. Outros problemas que podem ser abordados seriam:

- Desenvolver um método de controle de propagação de sinais (aqui pacotes de onda) em grafos tipo tridente, protótipos de propagação em heteroestruturas. A idéia seria controlar o chaveamento de propagação do sinal simplesmente mudando os parâmetros do grafo (o que obviamente também depende da energia do estado inicial).
- Modelar grandes moléculas, formadas por diferentes tipos de átomos e conseqüentemente ligações, como grafos quânticos. De forma fenomenológica podemos associar a cada ligação do grafo um potencial efetivo diferente, que depende do tipo de ligação química que a molécula real apresenta entre os átomos correspondentes àquela ligação. O potencial efetivo seria determinado através de cálculos de química quântica. O esperado é que a partir da criação de uma tabela de potenciais efetivos possamos ter um método empírico onde para moléculas diferentes, mas contento os mesmos tipos de átomos e ligações, possamos fazer previsões qualitativas sobre o comportamento de deslocamento de carga nas mesmas a partir da determinação do grafo quântico equivalente.
- Analisar quando e como se origina caos quântico em grafos quânticos, caracterizando seus espectros de energia, propriedades dos autoestados, possíveis fenômenos de localização, etc.



## Funções de Green independentes do tempo

Neste apêndice, funções de Green independentes do tempo para o Hamiltoniano serão definidas e suas propriedades principais serão apresentadas [55].

### A.1 Formalismo

As funções de Green podem ser definidas como as soluções da equação diferencial não homogênea

$$[z - \mathcal{H}(\mathbf{x})]G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; z) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (\text{A.1})$$

sujeita a certas condições de contorno para  $\mathbf{x}$  ou  $\mathbf{x}'$ . Geralmente,  $z$  é uma variável complexa com  $E = \text{Re}(z)$ ,  $\eta = \text{Im}(z)$  e  $\mathcal{H}(\mathbf{x})$  é o operador Hamiltoniano independente do tempo, que possui as propriedades de ser linear, Hermitiano e o conjunto de suas autofunções, associadas à equação de autovalor,

$$\mathcal{H}(\mathbf{x})\psi_n(\mathbf{x}) = E_n\psi_n(\mathbf{x}), \quad (\text{A.2})$$

formar um conjunto completo,  $\{\psi_n(\mathbf{x})\}$ , que satisfaz as mesmas condições de contorno de  $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; z)$ . O conjunto de autofunções  $\{\psi_n(\mathbf{x})\}$  pode ser considerado ortonormal sem perda de generalidade

$$\int \psi_n^*(\mathbf{x})\psi_m(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \delta_{nm}. \quad (\text{A.3})$$

O fato das autofunções formarem um conjunto completo é expresso matematicamente por:

$$\int \psi_k(\mathbf{x})\psi_k^*(\mathbf{x}')dk + \sum_n \psi_n(\mathbf{x})\psi_n^*(\mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (\text{A.4})$$

onde  $k$  representa o espectro contínuo e  $n$  o espectro discreto de  $\mathcal{H}(\mathbf{x})$ .

Ao trabalhar com funções de Green é conveniente introduzir um espaço vetorial abstrato. A forma mais conveniente para introduzir este espaço é através da notação bra e ket de Dirac [190]. A notação é a seguinte

$$\psi_n(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi_n \rangle, \quad (\text{A.5})$$

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \mathcal{H}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \mathcal{H} | \mathbf{x}' \rangle, \quad (\text{A.6})$$

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; z) = \langle \mathbf{x} | G(z) | \mathbf{x}' \rangle, \quad (\text{A.7})$$

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{x}' \rangle = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (\text{A.8})$$

$$\int d\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| = 1, \quad (\text{A.9})$$

nessa nova notação

$$(z - \mathcal{H})G(z) = 1, \quad (\text{A.10})$$

$$\mathcal{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle, \quad (\text{A.11})$$

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}, \quad (\text{A.12})$$

$$\int |\psi_k\rangle \langle \psi_k| dk + \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = 1. \quad (\text{A.13})$$

A vantagem de usar a notação de Dirac é que as manipulações algébricas são facilitadas e não ficamos restritos à representação de posição.

Se todos os autovalores de  $z - \mathcal{H}$  são não nulos, ou seja  $z \neq \{E_n\}$ , então a equação (A.10) pode ser resolvida formalmente

$$G(z) = \frac{1}{z - \mathcal{H}}. \quad (\text{A.14})$$

Multiplicando a equação (A.14) pela equação (A.13)

$$G(z) = \frac{1}{z - \mathcal{H}} \left\{ \int |\psi_k\rangle \langle \psi_k| dk + \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \right\}, \quad (\text{A.15})$$

e utilizando a relação  $F(\mathcal{O})|\psi_n\rangle = F(\lambda_n)|\psi_n\rangle$ , onde  $\mathcal{O}$  é um operador,  $\lambda_n$  seu autovalor e  $F(\mathcal{O})$  é uma função desse operador. Esta relação pode ser provada expandindo a função  $F(\mathcal{O})$  numa série de Taylor. Então, utilizando a equação (A.11), a equação (A.15) fica

$$G(z) = \int dk \frac{|\psi_k\rangle \langle \psi_k|}{z - E_k} + \sum_n \frac{|\psi_n\rangle \langle \psi_n|}{z - E_n} \quad (\text{A.16})$$

ou na representação de posição

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; z) = \int dk \frac{\psi_k(\mathbf{x})\psi_k^*(\mathbf{x}')}{z - E_k} + \sum_n \frac{\psi_n(\mathbf{x})\psi_n^*(\mathbf{x}')}{z - E_n}, \quad (\text{A.17})$$

que é a expansão espectral de  $G$ . Como  $\mathcal{H}$  é um operador Hermitiano, todos os seus autovalores  $\{E_n\}$  são reais. Conseqüentemente, se  $Im\{z\} \neq 0$  e  $z \neq \{E_n\}$ , significa que  $G(z)$  é uma função analítica no plano  $z$  complexo, exceto naqueles pontos ou porções do eixo  $z$  real que correspondem aos autovalores de  $\mathcal{H}$ . Como pode ser visto da equação (A.16) ou (A.17),  $G(z)$  possui pólos simples na localização dos autovalores discretos de  $\mathcal{H}$ ; o contrário também é verdade: *os pólos de  $G(z)$  fornecem os autovalores do espectro discreto de  $\mathcal{H}$* . Se  $z = E$ , onde  $E$  pertence ao espectro contínuo de  $\mathcal{H}$ ,  $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; z)$  não é bem definida desde que o integrando em (A.17) possui uma singularidade. Entretanto, pode-se tentar definir  $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; z)$  aplicando-se o procedimento de limites. Em casos usuais, onde os autoestados associados com o espectro contínuo não decaem quando  $r \rightarrow \infty$ , os limites laterais de  $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E \pm i\eta)$  quando  $\eta \rightarrow 0^+$  existem, mas são diferentes. Conseqüentemente, este tipo de espectro contínuo produz uma linha de corte em  $G(z)$  ao longo do eixo  $z$  real.

Para  $E$  pertencendo ao espectro contínuo podemos definir duas funções de Green

$$G^{(+)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E + i\eta), \quad (\text{A.18})$$

$$G^{(-)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E - i\eta), \quad (\text{A.19})$$

com definições similares para para o operadores correspondentes,  $G^{(+)}(E)$  e  $G^{(-)}(z)$ . Da equação (A.17) temos

$$G^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; z) = G(\mathbf{x}', \mathbf{x}; z^*). \quad (\text{A.20})$$

Se  $z$  é real,  $z = E$  e  $E \neq \{E_n\}$ , segue de (A.20) que  $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E)$  é Hermitiano; em particular  $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E)$  é real. Por outro lado, para  $E$  pertencendo ao espectro contínuo, da equação (A.20) temos

$$G^{(-)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) = [G^{(+)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}; E)]^*, \quad (\text{A.21})$$

a qual mostra que

$$Re[G^{(-)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E)] = Re[G^{(+)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E)], \quad (\text{A.22})$$

$$Im[G^{(-)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E)] = -Im[G^{(+)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E)]. \quad (\text{A.23})$$

Usando a identidade

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm iy} = P \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x), \quad (\text{A.24})$$

onde  $P$  significa *valor principal de Cauchy*, juntamente com a equação (A.17) a desconti-

nuidade

$$\bar{G}(E) \equiv G^{(+)}(E) - G^{(-)}(E), \quad (\text{A.25})$$

pode ser expressa como

$$\bar{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) = -2\pi i \int \delta(E - E_k) \psi_k(\mathbf{x}) \psi_k^*(\mathbf{x}') dk - 2\pi i \sum_n \delta(E - E_n) \psi_n(\mathbf{x}) \psi_n^*(\mathbf{x}'). \quad (\text{A.26})$$

Para o elemento de matriz da diagonal principal, de (A.17) e (A.24), podemos escrever

$$\begin{aligned} G^{(\pm)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E) &= P \left\{ \int dk \frac{\psi_k(\mathbf{x}) \psi_k^*(\mathbf{x})}{z - E_k} + \sum_n \frac{\psi_n(\mathbf{x}) \psi_n^*(\mathbf{x})}{z - E_n} \right\} \\ &\mp i\pi \left\{ \int \delta(E - E_k) \psi_k(\mathbf{x}) \psi_k^*(\mathbf{x}) dk + \sum_n \delta(E - E_n) \psi_n(\mathbf{x}) \psi_n^*(\mathbf{x}) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

Integrando (A.27) sobre  $\mathbf{x}$

$$\begin{aligned} Tr\{G^{(\pm)}(E)\} &= P \left\{ \int dk \frac{1}{z - E_k} + \sum_n \frac{1}{z - E_n} \right\} \\ &\mp i\pi \left\{ \int \delta(E - E_k) dk + \sum_n \delta(E - E_n) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

A quantidade  $\int \delta(E - E_k) dk + \sum_n \delta(E - E_n)$  é a densidade de estados (DE) em  $E$ ,  $N(E)$ .  $N(E)dE$  fornece o número de estados no intervalo  $[E, E + dE]$ . A quantidade

$$\rho(\mathbf{x}; E) = \int \delta(E - E_k) \psi_k(\mathbf{x}) \psi_k^*(\mathbf{x}) dk + \sum_n \delta(E - E_n) \psi_n(\mathbf{x}) \psi_n^*(\mathbf{x}), \quad (\text{A.29})$$

é a densidade de estados por unidade de volume. Obviamente,

$$N(E) = \int \rho(\mathbf{x}; E) d\mathbf{x}. \quad (\text{A.30})$$

Usando as equações (A.26, A.27, A.28, A.29) podemos escrever

$$\rho(\mathbf{x}; E) = \mp \frac{1}{\pi} Im\{G^{(\pm)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E)\} = -\frac{1}{2\pi i} \bar{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E), \quad (\text{A.31})$$

e

$$N(E) = \mp \frac{1}{\pi} Im\{Tr\{G^{(\pm)}(E)\}\}. \quad (\text{A.32})$$

$G(z)$  pode ser expressa em termos da descontinuidade (A.25)

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left\{ \int \delta(E - E_k) dk \frac{\psi_k(\mathbf{x}) \psi_k^*(\mathbf{x}')}{z - E_k} + \sum_n \delta(E - E_n) \frac{\psi_n(\mathbf{x}) \psi_n^*(\mathbf{x}')}{z - E} \right\} \\ &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\bar{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E)}{z - E}, \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

onde utilizamos a equação (A.26) e a propriedade de filtragem da função delta

$$\frac{1}{z - E_n} = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\delta(E - E_n)}{z - E}. \quad (\text{A.34})$$

Em particular os elementos de matriz da diagonal principal de  $G$  são

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\rho(\mathbf{x}; E)}{z - E}. \quad (\text{A.35})$$

Notamos que  $\rho(\mathbf{x}; E)$  versus  $E$  pode consistir de uma soma de funções  $\delta$  (correspondendo ao espectro discreto de  $\mathcal{H}$ ) mais uma função contínua (correspondendo ao espectro contínuo de  $\mathcal{H}$ ) como mostrado em (A.29). A equação (A.35) mostra que a DE por unidade de volume (isto é, a parte imaginária de  $\mp G^\pm(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E)/\pi$ ) permite o cálculo de  $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E)$  (ambos  $Re\{G\}$  e  $Im\{G\}$  para todos os valores de  $z = E + i\eta$ ).

## A.2 Função de Green e teoria de perturbação

O problema de encontrar os autovalores do Hamiltoniano  $H = \tilde{H} + V$  pode ser resolvido em três passos: 1) calcular a função de Green  $\tilde{G}$  correspondendo a  $\tilde{H}$ ; 2) expressar  $G(z)$  como uma série perturbativa em termos de  $\tilde{G}(z)$  e  $V$ , onde  $G(z)$  é a função de Green associada com  $H$ ; e 3) extrair de  $G(z)$  a informação sobre os autovalores e autofunções de  $H$ .

### A.2.1 Expansão perturbativa da função de Green

Um problema muito importante e comum é o caso onde o Hamiltoniano de uma partícula  $H$  pode ser separado em uma parte não perturbada  $\tilde{H}$  e uma perturbação  $V$ , de tal forma que

$$H = \tilde{H} + V. \quad (\text{A.36})$$

É admitido que  $\tilde{H}$  é tal que seus autovalores e autofunções podem ser obtidos facilmente. A questão é determinar os autovalores e autofunções de  $H$ .

A função de Green  $\tilde{G}(z)$  e  $G(z)$  correspondendo a  $\tilde{H}$  e  $H$ , são respectivamente,

$$\tilde{G}(z) = \frac{1}{z - \tilde{H}} \quad e \quad (\text{A.37})$$

$$G(z) = \frac{1}{z - H}. \quad (\text{A.38})$$

Usando as equações (A.36) e (A.37) podemos reescrever a equação (A.38) da seguinte forma

$$\begin{aligned} G(z) &= \frac{1}{z - \tilde{H} - V} = \frac{1}{(z - \tilde{H})[1 - \frac{V}{(z - \tilde{H})}]} \\ &= \frac{\tilde{G}(z)}{1 - \tilde{G}(z)V}. \end{aligned} \quad (\text{A.39})$$

Como  $V$  é considerado uma perturbação, vamos expandir o operador  $\frac{1}{1 - \tilde{G}(z)V}$  em uma série

$$G = \tilde{G} + \tilde{G}V\tilde{G} + \tilde{G}V\tilde{G}V\tilde{G} + \dots \quad (\text{A.40})$$

Note que na equação acima não podemos inverter a ordem dos operadores, pois os operadores podem não comutar. A equação acima pode ser reescrita na forma compacta

$$\begin{aligned} G &= \tilde{G} + \tilde{G}V(\tilde{G} + \tilde{G}V\tilde{G} + \dots) \\ &= \tilde{G} + \tilde{G}VG. \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

Na representação de posição, a equação (A.40) fica

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}_f, \mathbf{x}_i; z) &= \tilde{G}(\mathbf{x}_f, \mathbf{x}_i; z) + \int d\mathbf{x}_1 \tilde{G}(\mathbf{x}_f, \mathbf{x}_1; z) V(\mathbf{x}_1) \tilde{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_i; z) \\ &\quad + \iint d\mathbf{x}_2 d\mathbf{x}_1 \tilde{G}(\mathbf{x}_f, \mathbf{x}_2; z) V(\mathbf{x}_2) \tilde{G}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1; z) V(\mathbf{x}_1) \tilde{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_i; z) + \dots \quad (\text{A.42}) \end{aligned}$$

A equação (A.42) é a expansão perturbativa da função de Green.

## A.2.2 Caso particular de uma rede com potenciais de suporte compacto

Vimos na Equação (2.22) que a função de Green de uma única interação pontual é dada de uma forma bastante simples envolvendo onda planas e os coeficientes de reflexão e transmissão do potencial. Se tivéssemos agora uma rede 1D, com um número arbitrário de interações pontuais, poderíamos usar o método de perturbação descrito na Seção A.2.1,

para obter a função de Green do sistema. A seguir descrevemos de forma bem sucinta como seria tal procedimento.

Suponha que podemos escrever o Hamiltoniano como  $H = H^{(0)} + V$ , onde  $H^{(0)}$  é o Hamiltoniano do sistema não perturbado e seja  $G^{(0)}$  a função de Green para  $H^{(0)}$ . Então  $G$  para o  $H$  total é dada pela Equação (A.42), que reescrevemos como

$$G(x_f, x_i; E) = G^{(0)}(x_f, x_i; E) + \int dx_1 G^{(0)}(x_f, x_1; E) V(x_1) G^{(0)}(x_1, x_i; E) \\ + \iint dx_2 dx_1 G^{(0)}(x_f, x_2; E) V(x_2) G^{(0)}(x_2, x_1; E) V(x_1) G^{(0)}(x_1, x_i; E) + \dots \quad (\text{A.43})$$

As interações pontuais individuais são adicionadas uma de cada vez no cálculo, ou seja, supomos  $H^{(1)} = H^{(0)} + V^{(1)}$  e obtem-se  $G^{(1)}$  de (A.43). Depois, faz-se  $H^{(2)} = H^{(1)} + V^{(2)}$ , com  $H^{(1)} = H^{(0)} + V^{(1)}$  (para o qual já se conhece  $G^{(1)}$ ) e de (A.43) obtem-se  $G^{(2)}$ . Isso é realizado até que todas as interações pontuais tenham sido inseridos no Hamiltoniano. Mais especificamente, consideramos primeiro o Hamiltoniano da partícula livre,  $H^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ , então  $G^{(0)}$  é a função de Green da partícula livre e  $V(x)$  uma única interação pontual  $V^{(1)}$ . Então de (A.43),  $G^{(1)}$  é dada como uma série de integrais sobre as ações clássicas ( $S_{c.e.}^{(1)} = kL_{c.e.}^{(1)}$ ) e sobre  $V^{(1)}$ . Nesta expansão de  $G^{(1)}$  podemos associar formalmente a  $V^{(1)}$  seus respectivos coeficientes de reflexão e transmissão  $r^{(1)}$  e  $t^{(1)}$ . Neste momento, tem-se em mãos a função de Green  $G^{(1)}$  para a interação pontual  $V = V^{(1)}$ . O próximo passo é adicionar a perturbação devido à interação pontual  $V^{(2)}$ , tendo a função de Green  $G^{(1)}$  como a função de Green do problema não perturbado. Então,  $H^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V^{(1)}$ ,  $V(x) = V^{(2)}$  e a Equação (A.43) leva a uma série envolvendo  $r^{(1)}$ ,  $t^{(1)}$ , ações clássicas ( $S_{c.e.}^{(2)} = kL_{c.e.}^{(2)}$ ) e  $V^{(2)}$ . Novamente podemos identificar na série expressões correspondendo ao  $r^{(2)}$  e  $t^{(2)}$  associados à interação pontual  $V^{(2)}$ . O processo é repetido recursivamente até que todas as  $N$  interações pontuais  $V^{(j)}$ 's sejam incluídas [39]. Todas as séries se reduzem a uma soma infinita composta de amplitudes quânticas, que podem ser somadas exatamente por serem séries geométricas. Desta forma encontramos que a função de Green exata fica na forma da função de Green semiclássica generalizada.

Como discutido no texto principal, grafos quânticos podem ser vistos como uma rede de topologia mais complexa do que a linha unidimensional onde os vértices são interações pontuais generalizadas. Desta forma, exatamente como no procedimento acima, a função de Green pode ser obtida pela soma da série perturbativa, onde agora a única complicação extra e termos mais integrais devido às diferentes direções unidimensionais que se cruzam nos vértices. Mas novamente a soma apropriada de todos os fatores resultam no  $G^{(\text{sgen})}$ .

## Funções de Green semiclássicas

Neste apêndice apresentamos as funções de Green semiclássicas.

### B.1 Descrevendo a mecânica quântica a partir de objetos clássicos

Os conceitos fundamentais da Mecânica Quântica (MQ) não podem ser obtidos da Mecânica Clássica (MC). No entanto, em alguns casos, muito do comportamento quântico pode ser entendido a partir da conexão com a dinâmica do sistema clássico análogo: estamos então no limite semiclássico da MQ. Em termos concretos, o limite semiclássico da MQ é dado quando a constante de Planck  $\hbar$  torna-se pequena ao ser comparada às grandezas características do sistema. Por abuso de linguagem escrevemos  $\hbar \rightarrow 0$ . Um método muito útil que segue tal linha é o método da aproximação WKB. Nesta aproximação, faz-se uma proposta para a função de onda do sistema como sendo  $\psi = A \exp[(i/\hbar)S]$ , onde  $S$  é a ação clássica e  $A$  a amplitude da função de onda. Aqui observamos a associação de um objeto clássico, a ação clássica, com a função de onda da MQ, exemplificando o uso de estruturas clássicas para calcular quantidades quânticas. Substituindo a função de onda  $\psi$  dada acima na equação de Schrödinger e expandindo a equação resultante em potências de  $\hbar$ , no limite semiclássico, ou seja, com  $\hbar \rightarrow 0$  obtemos, em ordem zero de  $\hbar$ , a equação de Hamilton-Jacobi da MC. Para sistemas ligados, os autoestados de energia podem ser obtidos semiclassicamente da aproximação EBK <sup>1</sup>, na qual os autoestados de energia são obtidos da equação de quantização  $\oint pdq = 2\pi\hbar(n + \beta/4)$ , onde  $n = 0, 1, 2, 3 \dots$ ,  $\beta$  é um número (chamado índice de Maslov) inteiro e a integral é realizada sobre uma órbita fechada do movimento da partícula. Além da função de onda, outros objetos matemáticos

<sup>1</sup>Devido à Einstein-Brillouin-Keller



em MQ também possuem uma descrição semiclássica muito interessante, em especial a função de Green, que fornece toda a informação sobre o sistema quântico (autoestados, autoenergias, evolução temporal do sistema após uma transformada de Fourier, etc). Essa função será o objeto de nosso maior interesse ao longo deste trabalho.

A seguir faremos uma breve discussão sobre o propagador e a função de Green e como ambos são calculados semiclassicamente.

## B.2 O propagador semiclássico

O limite semiclássico também pode ser aplicado ao propagador usual em MQ. O propagador fornece a evolução temporal do sistema quântico, ou seja, dado um estado quântico em um tempo  $t_i$ , podemos encontrar o estado quântico em  $t_f$  ( $t_f > t_i$ ) através da integral do produto do propagador  $K$  e da função de onda  $\psi$  do estado inicial,

$$\psi(x_f, t_f) = \int_{t_i}^{t_f} K(x_f, t_f; x_i, t_i) \psi(x_i, t_i) dx_i. \quad (\text{B.1})$$

Se uma partícula em um tempo inicial  $t_i$  encontra-se no ponto  $x_i$  e vai até um ponto final  $x_f$  no tempo  $t_f$ , diremos simplesmente que a partícula vai de  $x_i$  até  $x_f$ . Na abordagem de Feynman da MQ [179] o propagador é um funcional que inclui todos os possíveis caminhos para uma partícula sair de um ponto  $x_i$  e chegar em um ponto  $x_f$ , modulado pela respectiva ação clássica ( $C = (2\pi i \hbar \varepsilon / m)^{1/2}$ ,  $\dot{x} = dx/dt$ )

$$K(x_f, x_i) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{C} \iint \dots \int e^{(i/\hbar)S(f,i)} \frac{dx_1}{C} \frac{dx_2}{C} \dots \frac{dx_{N-1}}{C} \quad (\text{B.2})$$

onde

$$S(x_f, x_i) = \int_{t_i}^{t_f} L(\dot{x}, x, t) dt, \quad (\text{B.3})$$

e pode ser escrito numa notação mais compacta [179],

$$K(x_f, x_i) = \int_{x_i}^{x_f} e^{\frac{i}{\hbar}S(x_f, x_i)} \mathcal{D}x(t). \quad (\text{B.4})$$

No limite semiclássico ( $\hbar \rightarrow 0$ ), a exponencial da ação no propagador ( $e^{\frac{i}{\hbar}S(x_f, x_i)}$ ) varia muito rapidamente entre os vários caminhos possíveis de  $x_i$  até  $x_f$ , fazendo com que as amplitudes destes caminhos sofram interferência destrutiva cancelando-se mutuamente. Entretanto, a interferência destrutiva não acontece na vizinhança daqueles caminhos especiais  $\bar{x}$ 's, para os quais  $\Delta S$  se anula sob pequenas variações dos caminhos. De fato, da MC [191] estes  $\bar{x}$ 's são as trajetórias clássicas que unem os pontos  $x_i$  e  $x_f$  num intervalo

de tempo  $t_f - t_i$ . Então, no limite semiclássico as trajetórias que mais contribuem para o propagador (B.4) são justamente as trajetórias clássicas  $\bar{x}$ 's [32, 192].

Matematicamente, o processo correto para tomar o limite semiclássico do propagador é expandir a ação em (B.4) em torno da trajetória clássica até o termo de segunda ordem, negligenciando termos de ordem superior. O termo de ordem mais baixa é a própria ação da trajetória clássica, o termo de primeira ordem, que representa a derivada da ação clássica, é nulo [191]. O termo de segunda ordem foi analisado por Marston Morse [32]. Morse demonstrou que, para intervalos de tempo suficientemente pequenos, a variação de segunda ordem, considerada como uma forma quadrática dos deslocamentos  $\delta x$  de todos os possíveis caminhos ao redor de uma dada trajetória é positiva e, portanto, a trajetória clássica para intervalos de tempo suficientemente curtos é, de fato, um mínimo entre todos os possíveis caminhos. Neste termo de segunda ordem existe uma série de tempos distintos que são chamados de conjugados de  $t_i$  (tempo inicial), e à medida que o intervalo de tempo aumenta, a segunda variação adquire um autovalor negativo cada vez que  $t_f$  (tempo final) passa por um tempo conjugado.

Após feita a expansão até segunda ordem, a integração sobre  $dx$  pode ser efetuada, uma vez que este termo é quadrático. A solução final é (para detalhes ver [193])

$$K_{scl}(x_f, t_f; x_i, t_i) = \sum_{\substack{\text{trajetórias} \\ \text{clássicas}}} (2\pi\hbar)^{-n/2} \sqrt{M} \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(x_f, t_f; x_i, t_i) - \kappa\frac{\pi}{2}\right), \quad (\text{B.5})$$

onde

$$M = \det\left(-\frac{\partial^2 S}{\partial x_f \partial x_i}\right), \quad (\text{B.6})$$

provêm do termo de segunda ordem da aproximação.  $\kappa$  é chamado de índice de Morse e é o número de tempos conjugados no intervalo  $t_f - t_i$  (ou seja, o número de autovalores negativos do termo de segunda ordem) e  $n$  é a dimensão do espaço. Esta fórmula foi primeiramente escrita por Van Vleck em 1928 [194], logo depois do desenvolvimento da equação de Schrödinger.

## B.3 A função de Green semiclássica

A função de Green semiclássica de Van Vleck–Gutzwiller é obtida tomando-se a transformada de Fourier da fórmula de Van Vleck (B.5),

$$G_{scl}(x_f, x_i; E) = \int_0^\infty K_{scl}(x_f, t_f; x_i, t_i) e^{\frac{i}{\hbar}Et} dt. \quad (\text{B.7})$$

Calcular a integral em (B.7) não é uma tarefa fácil. Para tal, usamos o *método de fase estacionária*, onde precisamos calcular o ponto estacionário do expoente  $S(x_f, t_f; x_i, t_i) + Et$ , como função do tempo. Os cálculos são discutidos em [195] e fornecem a seguinte forma para a função de Green semiclássica de Van Vleck-Gutzwiller para um sistema  $n$ -dimensional

$$G_{scl}(x_f, x_i; E) = \frac{2\pi}{(2\pi i \hbar)^{\frac{n+1}{2}}} \sum_{\substack{\text{trajetórias} \\ \text{clássicas}}} \sqrt{(-1)^{n+1} D_{cl}} \exp[-i \frac{\pi}{2} \eta_{cl}] \exp[\frac{i}{\hbar} S_{cl}(x_f, x_i; E)]. \quad (\text{B.8})$$

Em (B.8),  $S(x_f, x_i; E)$  é a ação clássica

$$S(x_f, x_i; E) = \int_{x_i}^{x_f} p \, dx \quad (\text{B.9})$$

e a soma é realizada sobre todas as trajetórias com energia  $E$ , começando em  $x_i$  e alcançando  $x_f$ .  $D_{cl}$  é a densidade de caminhos dada por

$$D_{cl} = \frac{1}{|\dot{x}_f| |\dot{x}_i|} \det' \left( -\frac{\partial^2 S_{cl}}{\partial x_f \partial x_i} \right). \quad (\text{B.10})$$

Para cada caminho, o índice de Morse  $\eta_{cl}$  é o número de pontos conjugados entre  $x_i$  e  $x_f$ , com energia  $E$  constante. Pontos conjugados são os pontos da trajetória nos quais o determinante  $(-\partial^2 S / \partial x_f \partial x_i)$  torna-se singular. Os termos  $|\dot{x}_f|$  e  $|\dot{x}_i|$  em  $D_{cl}$  são as velocidades nos pontos  $x_f$  e  $x_i$ , respectivamente. A amplitude semiclássica é a raiz quadrada da densidade de caminhos  $D_{cl}$ , a qual para  $n = 1$  é dada por  $D_{cl} = (|\dot{x}_f| |\dot{x}_i|)^{-1}$ . A notação  $\det'$  em (B.10) indica a omissão da primeira linha e coluna da matriz  $(-\partial^2 S / \partial x_f \partial x_i)$ .

A expressão (B.8) e seu traço, a fórmula do traço de Gutzwiller [32], fornecem resultados muito bons na resolução semiclássica de sistemas quânticos, como a partícula livre em dimensões ímpares (onde na realidade fornecem os resultados exatos), o problema de Kepler anisotrópico [31, 196], o átomo de Hélio [32, 197–199], etc. De fato, esta expressão fornece resultados exatos para potenciais quadráticos em 1-D. Entretanto, alguns fenômenos, tais como tunelamento, não podem ser descritos por órbitas puramente clássicas, ou seja, considerando somente as trajetórias que são soluções reais da equação de Hamilton-Jacobi. Nestes casos, modificações na aproximação semiclássica são necessárias. Por exemplo, a necessidade de órbitas complexas no estudo de tunelamento [200] e a incorporação de trajetórias difratáveis [201–203] para levar em conta difração por objetos como paredes rígidas e interações pontuais.

## Conservação de fluxo numa interação pontual

Seja

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \psi(x) \\ \psi'(x) \end{pmatrix}, \quad (\text{C.1})$$

com  $\psi'(x) = d\psi(x)/dx$ . Vamos definir também

$$\Gamma = \omega \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad (\text{C.2})$$

para  $ad - bc = 1$  com  $a, b, c, d \in \mathbb{R}$  e  $|\omega| = 1$ . O fluxo (densidade de corrente de probabilidades) em mecânica quântica é definido como [\[204\]](#)

$$J(x) = \frac{1}{2i} [\psi^*(x)\psi'(x) - \psi(x)\psi'^*(x)]. \quad (\text{C.3})$$

Com estas definições, a Equação [\(2.17\)](#) pode ser escrita como

$$\Psi(0^+) = \Gamma\Psi(0^-), \quad (\text{C.4})$$

e o fluxo em [\(C.3\)](#) como

$$J(x) = \frac{1}{2i} \Psi^\dagger(x) S \Psi(x), \quad (\text{C.5})$$

onde

$$S = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.6})$$

Assim, o fluxo na Equação (C.5) está escrito em uma forma simplética [191]. Então, podemos escrever

$$J(0^+) = \frac{1}{2i} \Psi^\dagger(0^+) S \Psi(0^+) \quad (\text{C.7})$$

$$= \frac{1}{2i} [\Gamma \Psi(0^-)]^\dagger S [\Gamma \Psi(0^-)] \quad (\text{C.8})$$

$$= \frac{1}{2i} \Psi^\dagger(0^-) \Gamma^\dagger S \Gamma \Psi(0^-), \quad (\text{C.9})$$

onde usamos a relação em (C.4). Mas,

$$\begin{aligned} \Gamma^\dagger S \Gamma &= \omega^* \omega \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & ad - bc \\ -ad + bc & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = S.. \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

Assim,

$$J(0^+) = \frac{1}{2i} \Psi^\dagger(0^-) S \Psi(0^-) = J(0^-). \quad (\text{C.11})$$

De onde podemos concluir que se a Equação (C.4) é verdadeira, com  $a, b, c, d \in \mathbb{R}$  e  $|\omega| = 1$ , então  $J(0^+) = J(0^-)$  e há conservação de fluxo numa interação pontual.

## Demonstração de $\mathbf{U}_c \mathbf{E} = \mathbf{E} \mathbf{U}$

Neste apêndice queremos demonstrar a relação (4.52). Para isso, vamos usar a seguinte notação:  $a = \alpha^{(-)}$ ,  $b = \alpha^{(+)}$ ,  $c = \beta^{(-)}$  e  $d = \beta^{(+)}$ . Sendo

$$\mathbf{U}_c = (\mathbf{S} \otimes |+\rangle\langle +| + \mathbf{S}^\dagger \otimes |-\rangle\langle -|)(\mathbf{1}_p \otimes \mathbf{C}_c) \quad (\text{D.1})$$

onde  $\mathbf{C}_c \in U(2)$  é um operador moeda generalizado,

$$\mathbf{C}_c |\mp\rangle = \alpha^{(\mp)} |-\rangle + \beta^{(\mp)} |+\rangle \quad (\text{D.2})$$

Seja o operador unitário  $\mathbf{U}$  que avança as caminhadas quânticas nas ligações de um passo

$$\mathbf{U} |\mp 1, j\rangle = \alpha^{(\mp)} |-\ 1, j-1\rangle + \beta^{(\mp)} |+\ 1, j+1\rangle. \quad (\text{D.3})$$

Vamos definir o operador isomorfo  $\mathbf{E} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ , o qual mapeia os estados das caminhadas quânticas nas ligações nos estados das caminhadas quânticas com moeda

$$\mathbf{E} |\mp 1, j\rangle = |j\rangle \otimes |\mp\rangle \quad (\text{D.4})$$

Aplicando o operador  $\mathbf{U}_c$  na Equação (D.4) temos

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_c \mathbf{E} |\mp 1, j\rangle &= \mathbf{U}_c |j\rangle \otimes |\mp\rangle \\ &= (\mathbf{S} \otimes |+\rangle\langle +| + \mathbf{S}^\dagger \otimes |-\rangle\langle -|)(\mathbf{1}_p \otimes \mathbf{C}_c)(|j\rangle \otimes |\mp\rangle) \\ &= (\mathbf{S} \otimes |+\rangle\langle +| + \mathbf{S}^\dagger \otimes |-\rangle\langle -|) (|j\rangle \otimes (\alpha^{(\mp)} |-\rangle + \beta^{(\mp)} |+\rangle)) \\ &= \alpha^{(\mp)} |j-1\rangle \otimes |-\rangle + \beta^{(\mp)} |j+1\rangle \otimes |+\rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

---

Agora, aplicando o operador  $\mathbf{E}$  na Equação (D.3) temos

$$\begin{aligned}\mathbf{E}\mathbf{U}|\mp 1, j\rangle &= \mathbf{E}(\alpha^{(\mp)}|-1, j-1\rangle + \beta^{(\mp)}|+1, j+1\rangle) \\ &= \alpha^{(\mp)}|j-1\rangle \otimes |-\rangle + \beta^{(\mp)}|j+1\rangle \otimes |+\rangle\end{aligned}\quad (\text{D.6})$$

Como os operadores são todos independentes de  $j$  comparando as Equações (D.5) e (D.6), segue a que

$$\mathbf{U}_c\mathbf{E} = \mathbf{E}\mathbf{U}.\quad (\text{D.7})$$

## Referências Bibliográficas

- [1] L. Pauling. The Diamagnetic Anisotropy of Aromatic Molecules. *J. Chem. Phys.* **4**, 673 (1936). doi: [10.1063/1.1749766](https://doi.org/10.1063/1.1749766). 2
- [2] J. R. Platt. Classification of Spectra of Cata-Condensed Hydrocarbons. *J. Chem. Phys.* **17**, 484 (1949). doi: [10.1063/1.1747293](https://doi.org/10.1063/1.1747293). 2
- [3] K. Ruedenberg e C. W. Scherr. Free-Electron Network Model For Conjugated Systems. I. Theory. *J. Chem. Phys.* **21**, 1565 (1953). doi: [10.1063/1.1699299](https://doi.org/10.1063/1.1699299). 2
- [4] C. A. Coulson. Note on the Applicability of the Free-Electron Network Model to Metals. *Proc. Phys. Soc. A* **67**, 608 (1954). doi: [10.1088/0370-1298/67/7/305](https://doi.org/10.1088/0370-1298/67/7/305). 2
- [5] E. W. Montroll. Quantum Theory on a Network. I. A Solvable Model Whose Wavefunctions Are Elementary Functions. *J. Math. Phys.* **11**, 635 (1970). doi: [10.1063/1.1665178](https://doi.org/10.1063/1.1665178). 2
- [6] M. J. Richardson e N. L. Balazs. On the network model of molecules and solids. *Ann. Phys.* **73**, 308 (1972). doi: [10.1016/0003-4916\(72\)90285-0](https://doi.org/10.1016/0003-4916(72)90285-0). 2
- [7] D. N. Beratan, J. N. Betts e J. N. Onuchic. Protein electron transfer rates set by the bridging secondary and tertiary structure. *Science* **252**, 1285 (1991). doi: [10.1126/science.1656523](https://doi.org/10.1126/science.1656523). 2
- [8] L. Pogliani. From Molecular Connectivity Indices to Semiempirical Connectivity Terms: Recent Trends in Graph Theoretical Descriptors. *Chemical Reviews* **100**, 10, 3827 (2000). doi: [10.1021/cr0004456](https://doi.org/10.1021/cr0004456). 2
- [9] R. Garcia-Domenech, J. Galvez, J. V. de Julian-Ortiz e L. Pogliani. Some New Trends in Chemical Graph Theory. *Chemical Reviews* **108**, 3, 1127 (2008). doi: [10.1021/cr0780006](https://doi.org/10.1021/cr0780006). 2
- [10] K. C. Kao e W. Hwang. *Electrical Transport in Solids* (Oxford: Pergamon, Oxford, 1981). 2
- [11] M. N. Kobrak e E. R. Bittner. Quantum molecular dynamics study of polaron recombination in conjugate polymers. *Phys. Rev. B* **62**, 17, 11473 (2000). doi: [10.1103/PhysRevB.62.11473](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.62.11473). 2



- [12] J. A. Freire, M. G. E. da Luz, D. Ma e I. A. Hummelgen. The current–voltage dependence of nominally undoped thin conjugated polymer films. *Appl. Phys. Lett.* **77**, 693 (2000). doi: [10.1063/1.127088](https://doi.org/10.1063/1.127088). 2
- [13] S. Alexander. Superconductivity of networks. A percolation approach to the effects of disorder. *Phys. Rev. B* **27**, 3, 1541 (1983). doi: [10.1103/PhysRevB.27.1541](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.27.1541). 2, 8
- [14] P. W. Anderson. New method for scaling theory of localization. II. Multichannel theory of a "wire" and possible expansion to higher dimensionality. *Phys. Rev. B* **23**, 10, 4828 (1981). doi: [10.1103/PhysRevB.23.4828](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.23.4828). 2
- [15] B. Shapiro. Renormalization-Group Transformation for the Anderson Transition. *Phys. Rev. Lett.* **48**, 12, 823 (1982). doi: [10.1103/PhysRevLett.48.823](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.48.823). 2
- [16] R. Klesse e M. Metzler. Spectral Compressibility at the Metal-Insulator Transition of the Quantum Hall Effect. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4, 721 (1997). doi: [10.1103/PhysRevLett.79.721](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.79.721). 2
- [17] J. Vidal, G. Montambaux e B. Douçot. Transmission through quantum networks. *Phys. Rev. B* **62**, 24, R16294 (2000). doi: [10.1103/PhysRevB.62.R16294](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.62.R16294). 2
- [18] P. Exner. Contact interactions on graph superlattices. *J. Phys. A* **29**, 87 (1996). doi: [10.1088/0305-4470/29/1/011](https://doi.org/10.1088/0305-4470/29/1/011). 2
- [19] D. Kowal, U. Sivan, O. Entin-Wohlman e Y. Imry. Transmission through multiply-connected wire systems. *Phys. Rev. B* **42**, 14, 9009 (1990). doi: [10.1103/PhysRevB.42.9009](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.42.9009). 2
- [20] C. Texier e G. Montambaux. Weak Localization in Multiterminal Networks of Diffusive Wires. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 18, 186801 (2004). doi: [10.1103/PhysRevLett.92.186801](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.186801). 2
- [21] C. Texier e G. Montambaux. Dephasing due to electron-electron interaction in a diffusive ring. *Phys. Rev. B* **72**, 11, 115327 (2005). doi: [10.1103/PhysRevB.72.115327](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.115327). 2
- [22] C. Texier e G. Montambaux. Quantum oscillations in mesoscopic rings and anomalous diffusion. *J. Phys. A* **38**, 3455 (2005). doi: [10.1088/0305-4470/38/15/015](https://doi.org/10.1088/0305-4470/38/15/015). 2
- [23] O. Hul, S. Bauch, P. Pakoński, N. Savytskyy, K. Życzkowski e L. Sirko. Experimental simulation of quantum graphs by microwave networks. *Phys. Rev. E* **69**, 5, 056205 (2004). doi: [10.1103/PhysRevE.69.056205](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.69.056205). 2
- [24] A. Bondarenko e V. Dedok. Inverse scattering problem on quantum graphs in optical tomography technology. Em *Science and Technology, 2003. Proceedings KORUS 2003. The 7th Korea-Russia International Symposium on*, volume 3, página 105 (2003). 2
- [25] P. Exner. Lattice Kronig-Penney Models. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 18, 3503 (1995). doi: [10.1103/PhysRevLett.74.3503](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.74.3503). 2, 11, 31

- [26] H. Schanz e U. Smilansky. Periodic-Orbit Theory of Anderson Localization on Graphs. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 7, 1427 (2000). doi: [10.1103/PhysRevLett.84.1427](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.1427). 2
- [27] T. Kottos e U. Smilansky. Chaotic Scattering on Graphs. *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5, 968 (2000). doi: [10.1103/PhysRevLett.85.968](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.85.968). 2
- [28] F. Barra e P. Gaspard. Transport and dynamics on open quantum graphs. *Phys. Rev. E* **65**, 1, 016205 (2001). doi: [10.1103/PhysRevE.65.016205](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.65.016205). 2
- [29] T. Kottos e U. Smilansky. Quantum Chaos on Graphs. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4794 (1997). doi: [10.1103/PhysRevLett.79.4794](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.79.4794). 2
- [30] T. Kottos e U. Smilansky. Periodic Orbit Theory and Spectral Statistics for Quantum Graphs. *Ann. Phys.* **274**, 76 (1999). doi: [10.1006/aphy.1999.5904](https://doi.org/10.1006/aphy.1999.5904). 2
- [31] M. C. Gutzwiller. Periodic Orbits and Classical Quantization Conditions. *J. Math. Phys.* **12**, 343 (1971). doi: [10.1063/1.1665596](https://doi.org/10.1063/1.1665596). 2, 131
- [32] M. C. Gutzwiller. *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, New York, 1990). 2, 12, 130, 131
- [33] R. Blümel, Y. Dabaghian e R. V. Jensen. Explicitly Solvable Cases of One-Dimensional Quantum Chaos. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 4, 044101 (2002). doi: [10.1103/PhysRevLett.88.044101](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.044101). 2, 3, 9
- [34] R. Blümel, Y. Dabaghian e R. V. Jensen. Exact, convergent periodic-orbit expansions of individual energy eigenvalues of regular quantum graphs. *Phys. Rev. E* **65**, 4, 046222 (2002). doi: [10.1103/PhysRevE.65.046222](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.65.046222). 2, 3, 9
- [35] T. Kottos e H. Schanz. Quantum graphs: a model for quantum chaos. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **9**, 3, 523 (2001). doi: [10.1016/S1386-9477\(00\)00257-5](https://doi.org/10.1016/S1386-9477(00)00257-5). 2
- [36] L. Kaplan. Eigenstate structure in graphs and disordered lattices. *Phys. Rev. E* **64**, 3, 036225 (2001). doi: [10.1103/PhysRevE.64.036225](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.64.036225). 2
- [37] S. Gnutzmann e U. Smilansky. Quantum graphs: Applications to Quantum Chaos and Universal Spectral Statistics. *Advances in Physics* **55**, 527 (2006). doi: [10.1080/00018730600908042](https://doi.org/10.1080/00018730600908042). 2
- [38] Y. Dabaghian e R. Blümel. Explicit analytical solution for scaling quantum graphs. *Phys. Rev. E* **68**, 5, 055201 (2003). doi: [10.1103/PhysRevE.68.055201](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.68.055201). 3, 9
- [39] M. G. E. da Luz, E. J. Heller e B. K. Cheng. Exact form of Green functions for segmented potentials. *J. Phys. A* **31**, 2975 (1998). doi: [10.1088/0305-4470/31/13/007](https://doi.org/10.1088/0305-4470/31/13/007). 3, 12, 13, 15, 17, 19, 98, 127
- [40] M. G. E. da Luz, B. K. Cheng e M. W. Beims. Asymptotic Green functions: a generalized semiclassical approach for scattering by multiple barrier potentials. *J. Phys. A* **34**, 5041 (2001). doi: [10.1088/0305-4470/34/24/303](https://doi.org/10.1088/0305-4470/34/24/303). 3, 12, 15, 17, 98
- [41] F. M. Andrade, B. K. Cheng, M. W. Beims e M. G. E. da Luz. A generalized semiclassical expression for the eigenvalues of multiple well potentials. *J. Phys. A* **36**, 227 (2003). doi: [10.1088/0305-4470/36/1/315](https://doi.org/10.1088/0305-4470/36/1/315). 3, 12, 17, 55, 98

- [42] A. G. M. Schmidt, B. K. Cheng e M. G. E. da Luz. Green function approach for general quantum graphs. *J. Phys. A* **36**, L545 (2003). doi: [10.1088/0305-4470/36/42/L01](https://doi.org/10.1088/0305-4470/36/42/L01). **3, 9, 15, 17, 19, 58**
- [43] A. G. M. Schmidt, B. K. Cheng e M. G. E. da Luz. Green functions for generalized point interactions in one dimension: A scattering approach. *Phys. Rev. A* **66**, 062712 (2002). doi: [10.1103/PhysRevA.66.062712](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.66.062712). **3, 11, 18, 98**
- [44] D. U. Matrasulov, J. R. Yusupov, P. K. Khabibullaev e A. A. Saidov. Casimir Effect for Quantum Graphs (2007). [arXiv:0707.3710](https://arxiv.org/abs/0707.3710). **3**
- [45] A. M. Childs. Universal computation by quantum walk (2008). [arXiv:0806.1972](https://arxiv.org/abs/0806.1972). **3, 92, 113**
- [46] A. M. Childs. Universal Computation by Quantum Walk. *Phys. Rev. Lett.* **102**, 18, 180501 (2009). doi: [10.1088/1751-8113/41/7/075303](https://doi.org/10.1088/1751-8113/41/7/075303). **3**
- [47] J. E. Avron, P. Exner e Y. Last. Periodic Schrödinger operators with large gaps and Wannier-Stark ladders. *Phys. Rev. Lett.* **72**, 6, 896 (1994). doi: [10.1103/PhysRevLett.72.896](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.72.896). **8**
- [48] G. Teschl. *Mathematical Methods in Quantum Mechanics: With Applications to Schrödinger Operators* (American Mathematical Society, 2009). URL <http://www.mat.univie.ac.at/~gerald/ftp/book-schroe/>. **9**
- [49] M. Sieber, H. Primack, U. Smilansky, I. Ussishkin e H. Schanz. Semiclassical quantization of billiards with mixed boundary conditions. *J. Phys. A* **28**, 17, 5041 (1995). doi: [10.1088/0305-4470/28/17/032](https://doi.org/10.1088/0305-4470/28/17/032). **10**
- [50] P. Exner e P. Seba. Quantum-mechanical splitters: How should one understand them? *Physics Letters A* **128**, 9, 493 (1988). doi: [10.1016/0375-9601\(88\)90882-1](https://doi.org/10.1016/0375-9601(88)90882-1). **11**
- [51] P. Exner e P. Seba. Free quantum motion on a branching graph. *Reports on Mathematical Physics* **28**, 1, 7 (1989). doi: [10.1016/0034-4877\(89\)90023-2](https://doi.org/10.1016/0034-4877(89)90023-2). **11**
- [52] V. Kostrykin e R. Schrader. Kirchhoff's rule for quantum wires. *J. Phys. A* **32**, 4, 595 (1999). doi: [10.1088/0305-4470/32/4/006](https://doi.org/10.1088/0305-4470/32/4/006). **11**
- [53] V. Kostrykin e R. Schrader. The generalized star product and the factorization of scattering matrices on graphs. *J. Math. Phys.* **42**, 4, 1563 (2001). doi: [10.1063/1.1354641](https://doi.org/10.1063/1.1354641). **11**
- [54] R. de L. Kronig e W. G. Penney. Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices. *Proc. R. Soc. Lond. A* **130**, 499 (1931). doi: [10.1098/rspa.1931.0019](https://doi.org/10.1098/rspa.1931.0019). **11, 93**
- [55] E. N. Economou. *Green's Functions In Quantum Physics* (Springer-Verlag, German, 2006), third edition. **11, 121**
- [56] C. Pisani e B. H. J. McKellar. Semiclassical propagators and Wigner-Kirkwood expansions for hard-core potentials. *Phys. Rev. A* **44**, 1061 (1991). doi: [10.1103/PhysRevA.44.1061](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.44.1061). **12**

- [57] K. Takatsuka e A. Inoue. Global Representation of Maslov-Type Semiclassical Wave Function and Its Spectrum in a Small Number of Classical Trajectories. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 8, 1404 (1997). doi: [10.1103/PhysRevLett.78.1404](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.78.1404). 12
- [58] M. G. E. da Luz, B. K. Cheng, E. Vicentini, E. R. Raposo e E. J. Heller. Green's functions for segmented potentials: a sum over classical and quantum paths. Em R. C. et al, editor, *Path Integrals from peV to TeV*, página 185 (World Scientific, 1999). Singapore. 12
- [59] F. M. Andrade. *Funções de Green Semiclássicas Generalizadas e Aplicações a Sistemas Ligados*. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Paraná, Curitiba (2001). 12, 55, 98
- [60] M. Carreau. Four-parameter point-interaction in 1D quantum systems. *J. Phys. A* **26**, 2, 427 (1993). doi: [10.1088/0305-4470/30/11/021](https://doi.org/10.1088/0305-4470/30/11/021). 13
- [61] F. A. B. Coutinho, Y. Nogami e J. F. Perez. Generalized point interactions in one-dimensional quantum mechanics. *J. Phys. A* **30**, 11, 3937 (1997). doi: [10.1088/0305-4470/30/11/021](https://doi.org/10.1088/0305-4470/30/11/021). 13, 32
- [62] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Høegh-Krohn e H. Holden. *Solvable Models in Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, 1988). 14
- [63] G. Bonneau, J. Faraut e G. Valent. Self-adjoint extensions of operators and the teaching of quantum mechanics. *Am. J. Phys.* **69**, 3, 322 (2001). doi: [10.1119/1.1328351](https://doi.org/10.1119/1.1328351). 14
- [64] T. Cheon e T. Shigehara. Realizing discontinuous wave functions with renormalized short-range potentials. *Phys. Lett. A* **243**, 111 (1998). doi: [10.1016/S0375-9601\(98\)00188-1](https://doi.org/10.1016/S0375-9601(98)00188-1). 14
- [65] T. Shigehara, H. Mizoguchi, T. Mishima e T. Cheon. Realization of a Four Parameter Family of Generalized One-Dimensional Contact Interactions by Three Nearby Delta Potentials with Renormalized Strengths. *IEICE Trans.Fund.Elec.Comm.Comp.Sci. E* **82-A**, 1708 (1999). [arXiv:quant-ph/9812006](https://arxiv.org/abs/quant-ph/9812006). 14
- [66] T. Cheon, T. Shigehara e K. Takayanagi. Equivalence of Local and Separable Realizations of Discontinuity-Inducing Contact Interaction. *Journal of the Physical Society of Japan* **69**, 2, 345 (2000). doi: [10.1143/JPSJ.69.345](https://doi.org/10.1143/JPSJ.69.345). 14
- [67] K. Chadam e P. C. Sabatier. *Inverse Problems in Quantum Scattering Theory* (Springer, New York, 1989), second edition. 14, 15, 17, 18, 32, 113
- [68] L. I. Schiff. *Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York, 1955), second edition. 15
- [69] H.-J. Stöckmann e J. Stein. "Quantum" chaos in billiards studied by microwave absorption. *Phys. Rev. Lett.* **64**, 19, 2215 (1990). doi: [10.1103/PhysRevLett.64.2215](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.64.2215). 15

- [70] H. Schanze, E. R. P. Alves, C. H. Lewenkopf e H.-J. Stöckmann. Transmission fluctuations in chaotic microwave billiards with and without time-reversal symmetry. *Phys. Rev. E* **64**, 6, 065201 (2001). doi: [10.1103/PhysRevE.64.065201](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.64.065201). 15
- [71] J. Kuhn, F. M. Zanetti, A. L. Azevedo, A. G. M. Schmidt, B. K. Cheng e M. G. E. d. Luz. Time-dependent point interactions and infinite walls: some results for wavepacket scattering. *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics* **7**, 3, S77 (2005). doi: [10.1088/1464-4266/7/3/011](https://doi.org/10.1088/1464-4266/7/3/011). 15
- [72] V. Caudrelier, M. Mintchev e E. Ragoucy. The quantum nonlinear Schrödinger model with point-like defect. *J. Phys. A* **37**, 30, L367 (2004). doi: [10.1088/0305-4470/37/30/L02](https://doi.org/10.1088/0305-4470/37/30/L02). 15
- [73] T. Cheon, P. Exner e P. Seba. Wave function shredding by sparse quantum barriers. *Physics Letters A* **277**, 1, 1 (2000). doi: [10.1016/S0375-9601\(00\)00690-3](https://doi.org/10.1016/S0375-9601(00)00690-3). 15
- [74] L. Hostler. Coulomb Green's Functions and the Furry Approximation. *J. Math. Phys.* **5**, 591 (1964). doi: [10.1063/1.1704153](https://doi.org/10.1063/1.1704153). 18
- [75] S. M. Blinder. Nonrelativistic Coulomb Green's function in parabolic coordinates. *J. Math. Phys.* **22**, 306 (1981). doi: [10.1063/1.524879](https://doi.org/10.1063/1.524879). 18
- [76] S. M. Blinder. Green's function and propagator for the one-dimensional  $\delta$ -function potential. *Phys. Rev. A* **37**, 973 (1988). doi: [10.1103/PhysRevA.37.973](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.37.973). 18, 32
- [77] F. M. Zanetti, J. Khun, G. J. Delben, B. K. Cheng e M. G. E. da Luz. Classifying the general family of 1D point interactions: a scattering approach. *J. Phys. A* **39**, 2493 (2006). doi: [10.1088/0305-4470/39/10/016](https://doi.org/10.1088/0305-4470/39/10/016). 18, 113, 114, 116, 117
- [78] A. Bondarenko e V. Dedok. Surgery of quantum graphs. Em *Science and Technology, 2004. KORUS 2004. Proceedings. The 8th Russian-Korean International Symposium on*, página 108 (2004). doi: [10.1109/KORUS.2004.1555559](https://doi.org/10.1109/KORUS.2004.1555559). 44
- [79] A. Bondarenko e V. Dedok. Anderson localization in 1-D quantum random walk. Em *Science and Technology, 2005. KORUS 2005. Proceedings. The 9th Russian-Korean International Symposium on*, página 27 (2005). doi: [10.1109/KORUS.2005.1507636](https://doi.org/10.1109/KORUS.2005.1507636). 44, 92
- [80] L. Barriere, F. Comellas e C. Dalfo. Fractality and the small-world effect in Sierpinski graphs. *Journal of Physics A* **39**, 38, 11739 (2006). doi: [10.1088/0305-4470/39/38/003](https://doi.org/10.1088/0305-4470/39/38/003). 44
- [81] E. Merzbacher. *Quantum Mechanics* (Wiley, New York, 1998), third edition. 49, 50
- [82] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, USA, 1994), revised edition. 49, 71
- [83] L. S. Schulman. *Techniques and Applications of Path Integrals* (Wiley, New York, 1981). 54
- [84] S. Godoy e S. Fujita. A quantum random-walk model for tunneling diffusion in a 1D lattice. A quantum correction to Fick's law. *J. Chem. Phys.* **97**, 7, 5148 (1992). doi: [10.1063/1.463812](https://doi.org/10.1063/1.463812). 61

- [85] N. Konno. Limit theorems and absorption problems for quantum random walks in one dimension. *Quantum Inform. Comput.* **2**, 578–595 (2002). [arXiv:quant-ph/0210011](#). 61
- [86] R. P. Feynman. Quantum mechanical computers. *Foundations of Physics* **16**, 507 (1986). doi: [10.1007/BF01886518](#). 61, 68
- [87] B. A. Chase e A. J. Landahl. Universal quantum walks and adiabatic algorithms by 1D Hamiltonians (2008). [arXiv:0802.1207](#). 61
- [88] Y. Aharonov, I. Davidovich e N. Zagury. Quantum random walks. *Phys. Rev. A* **48**, 2, 1687 (1993). doi: [10.1103/PhysRevA.48.1687](#). 61, 62, 63
- [89] R. Motwani e P. P. Raghavan. *Randomized Algorithms* (Cambridge University Press, 1995). 61
- [90] P. W. Shor. Polynomial-Time Algorithms for Prime Factorization and Discrete Logarithms on a Quantum Computer. *SIAM Journal on Computing* **26**, 5, 1484 (1997). doi: [10.1137/S0097539795293172](#). 61
- [91] L. K. Grover. Quantum Mechanics Helps in Searching for a Needle in a Haystack. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2, 325 (1997). doi: [10.1103/PhysRevLett.79.325](#). 61
- [92] I. L. Chuang, N. Gershenfeld e M. Kubinec. Experimental Implementation of Fast Quantum Searching. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 15, 3408 (1998). doi: [10.1103/PhysRevLett.80.3408](#). 61
- [93] J. A. Jones, M. Mosca e R. H. Hansen. Implementation of a quantum search algorithm on a quantum computer. *nature* **393**, 6683, 344 (1998). doi: [10.1038/30687](#). 61
- [94] M. Anwar, D. Blazina, H. Carteret, S. Duckett e J. Jones. Implementing Grover’s quantum search on a para-hydrogen based pure state NMR quantum computer. *Chemical Physics Letters* **400**, 1-3, 94 (2004). doi: [10.1016/j.cplett.2004.10.078](#). 61
- [95] P. G. Kwiat, J. R. Mitchell, P. D. D. Schwindt e A. G. White. Grover’s search algorithm: An optical approach. *Journal of Modern Optics* **47**, 257 (2000). doi: [10.1080/09500340008244040](#). 61
- [96] P. Walther, K. J. Resch, T. Rudolph, E. Schenck, H. Weinfurter, V. Vedral, M. Aspelmeyer e A. Zeilinger. Experimental one-way quantum computing. *nature* **434**, 7030, 169 (2005). doi: [10.1038/nature03347](#). 61
- [97] K.-A. Brickman, P. C. Haljan, P. J. Lee, M. Acton, L. Deslauriers e C. Monroe. Implementation of Grover’s quantum search algorithm in a scalable system. *Phys. Rev. A* **72**, 5, 050306 (2005). doi: [10.1103/PhysRevA.72.050306](#). 61
- [98] J. Ahn, T. C. Weinacht e P. H. Bucksbaum. Information Storage and Retrieval Through Quantum Phase. *Science* **287**, 5452, 463 (2000). doi: [10.1126/science.287.5452.463](#). 61

- [99] N. Bhattacharya, H. B. van Linden van den Heuvell e R. J. C. Spreeuw. Implementation of Quantum Search Algorithm using Classical Fourier Optics. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 13, 137901 (2002). doi: [10.1103/PhysRevLett.88.137901](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.137901). 61
- [100] I. E. Linington, P. A. Ivanov e N. V. Vitanov. Quantum search in a nonclassical database of trapped ions. *Phys. Rev. A* **79**, 1, 012322 (2009). doi: [10.1103/PhysRevA.79.012322](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.79.012322). 61
- [101] N. Shenvi, J. Kempe e K. B. Whaley. Quantum random-walk search algorithm. *Phys. Rev. A* **67**, 5, 052307 (2003). doi: [10.1103/PhysRevA.67.052307](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.67.052307). 62, 76
- [102] S. E. Venegas-Andraca. Quantum Walks for Computer Scientists. *Synthesis Lectures on Quantum Computing* **1**, 1, 1 (2008). doi: [10.2200/S00144ED1V01Y200808QMC001](https://doi.org/10.2200/S00144ED1V01Y200808QMC001). 62
- [103] A. M. Childs, R. Cleve, E. Deotto, E. Farhi, S. Gutmann e D. A. Spielman. Exponential algorithmic speedup by a quantum walk. Em *STOC '03: Proceedings of the thirty-fifth annual ACM symposium on Theory of computing*, página 59 (ACM, New York, NY, USA, 2003). doi: <http://doi.acm.org/10.1145/780542.780552>. 62
- [104] A. Ambainis. Quantum walk algorithm for element distinctness. *Foundations of Computer Science, 2004. Proceedings. 45th Annual IEEE Symposium on* página 22 (2004). doi: [10.1109/FOCS.2004.54](https://doi.org/10.1109/FOCS.2004.54). arXiv:quant-ph/0311001. 62
- [105] A. Ambainis. Quantum Walk Algorithm for Element Distinctness. *SIAM Journal on Computing* **37**, 1, 210 (2007). doi: [10.1137/S0097539705447311](https://doi.org/10.1137/S0097539705447311). 62
- [106] E. Farhi e S. Gutmann. Quantum computation and decision trees. *Phys. Rev. A* **58**, 2, 915 (1998). doi: [10.1103/PhysRevA.58.915](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.58.915). 62, 92
- [107] A. M. Childs, E. Farhi e S. Gutmann. An Example of the Difference Between Quantum and Classical Random Walks. *Quantum Information Processing* **1**, 35 (2002). doi: [10.1023/A:1019609420309](https://doi.org/10.1023/A:1019609420309). arXiv:quant-ph/0103020. 62, 63
- [108] A. Ambainis, E. Bach, A. Nayak, A. Vishwanath e J. Watrous. One-dimensional quantum walks. Em *STOC '01: Proceedings of the thirty-third annual ACM symposium on Theory of computing*, página 37 (ACM, New York, NY, USA, 2001). doi: [10.1145/380752.380757](https://doi.org/10.1145/380752.380757). 62, 75, 76
- [109] A. Nayak e A. Vishwanath. Quantum Walk on the Line (2007). arXiv:quant-ph/0010117. 62
- [110] J. Du, H. Li, X. Xu, M. Shi, J. Wu, X. Zhou e R. Han. Experimental implementation of the quantum random-walk algorithm. *Phys. Rev. A* **67**, 4, 042316 (2003). doi: [10.1103/PhysRevA.67.042316](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.67.042316). 62
- [111] C. A. Ryan, M. Laforest, J. C. Boileau e R. Laflamme. Experimental implementation of a discrete-time quantum random walk on an NMR quantum-information processor. *Phys. Rev. A* **72**, 6, 062317 (2005). doi: [10.1103/PhysRevA.72.062317](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.72.062317). 62

- [112] B. C. Sanders, S. D. Bartlett, B. Tregenna e P. L. Knight. Quantum quincunx in cavity quantum electrodynamics. *Phys. Rev. A* **67**, 4, 042305 (2003). doi: [10.1103/PhysRevA.67.042305](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.67.042305). 62
- [113] T. Di, M. Hillery e M. S. Zubairy. Cavity QED-based quantum walk. *Phys. Rev. A* **70**, 3, 032304 (2004). doi: [10.1103/PhysRevA.70.032304](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.70.032304). 62
- [114] G. S. Agarwal e P. K. Pathak. Quantum random walk of the field in an externally driven cavity. *Phys. Rev. A* **72**, 3, 033815 (2005). doi: [10.1103/PhysRevA.72.033815](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.72.033815). 62
- [115] B. C. Travaglione e G. J. Milburn. Implementing the quantum random walk. *Phys. Rev. A* **65**, 3, 032310 (2002). doi: [10.1103/PhysRevA.65.032310](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.65.032310). 62
- [116] Z. Zhao, J. Du, H. Li, T. Yang, Z.-B. Chen e J.-W. Pan. Implement Quantum Random Walks with Linear Optics Elements (2007). [arXiv:quant-ph/0212149](https://arxiv.org/abs/quant-ph/0212149). 62
- [117] P. L. Knight, E. Roldán e J. E. Sipe. Optical cavity implementations of the quantum walk. *Optics Communications* **227**, 1-3, 147 (2003). doi: [DOI:10.1016/j.optcom.2003.09.024](https://doi.org/10.1016/j.optcom.2003.09.024). 62
- [118] P. L. Knight, E. Roldán e J. E. Sipe. Quantum walk on the line as an interference phenomenon. *Phys. Rev. A* **68**, 2, 020301 (2003). doi: [10.1103/PhysRevA.68.020301](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.68.020301). 62
- [119] H. Jeong, M. Paternostro e M. S. Kim. Simulation of quantum random walks using the interference of a classical field. *Phys. Rev. A* **69**, 1, 012310 (2004). doi: [10.1103/PhysRevA.69.012310](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.69.012310). 62
- [120] B. Do, M. L. Stohler, S. Balasubramanian, D. S. Elliott, C. Eash, E. Fischbach, M. A. Fischbach, A. Mills e B. Zwickl. Experimental realization of a quantum quincunx by use of linear optical elements. *J. Opt. Soc. Am. B* **22**, 2, 499 (2005). doi: [10.1364/JOSAB.22.000499](https://doi.org/10.1364/JOSAB.22.000499). 62
- [121] M. C. Banuls, C. Navarrete, A. Perez, E. Roldan e J. C. Soriano. Quantum walk with a time-dependent coin. *Phys. Rev. A* **73**, 6, 062304 (páginas 9) (2006). doi: [10.1103/PhysRevA.73.062304](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.73.062304). 62, 87
- [122] D. Francisco, C. Iemmi, J. P. Paz e S. Ledesma. Simulating a quantum walk with classical optics. *Phys. Rev. A* **74**, 5, 052327 (páginas 6) (2006). doi: [10.1103/PhysRevA.74.052327](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.74.052327). 62
- [123] P. H. S. Ribeiro, S. P. Walborn, J. C. Raitz, L. Davidovich e N. Zagury. Quantum random walks and wave-packet reshaping at the single-photon level. *Phys. Rev. A* **78**, 1, 012326 (páginas 5) (2008). doi: [10.1103/PhysRevA.78.012326](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.78.012326). 62
- [124] X. Zou, Y. Dong e G. Guo. Optical implementation of one-dimensional quantum random walks using orbital angular momentum of a single photon. *New Journal of Physics* **8**, 5, 81 (2006). doi: [10.1088/1367-2630/8/5/081](https://doi.org/10.1088/1367-2630/8/5/081). 62



- [125] P. Zhang, X.-F. Ren, X.-B. Zou, B.-H. Liu, Y.-F. Huang e G.-C. Guo. Demonstration of one-dimensional quantum random walks using orbital angular momentum of photons. *Phys. Rev. A* **75**, 5, 052310 (páginas 4) (2007). doi: [10.1103/PhysRevA.75.052310](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.75.052310). 62
- [126] M. Hillery, J. Bergou e E. Feldman. Quantum walks based on an interferometric analogy. *Phys. Rev. A* **68**, 3, 032314 (2003). doi: [10.1103/PhysRevA.68.032314](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.68.032314). 62, 63, 83, 84, 85, 88
- [127] E. Feldman e M. Hillery. Scattering theory and discrete-time quantum walks. *Phys. Lett. A* **324**, 277 (2004). doi: [10.1016/j.physleta.2004.03.005](https://doi.org/10.1016/j.physleta.2004.03.005). 62, 63, 92, 101, 102, 103
- [128] E. Feldman e M. Hillery. Quantum walks on graphs and quantum scattering theory. Em D. Evans, J. Holt, C. Jones, K. Klintworth, B. Parshall, O. Pfister e H. Ward, editores, *Coding Theory and Quantum Computing*, volume 381 de *Contemporary Mathematics*, página 71 (2005). arXiv:quant-ph/0403066. 62, 63, 92, 103, 113
- [129] J. Košík e V. Bužek. Scattering model for quantum random walks on a hypercube. *Phys. Rev. A* **71**, 012306 (2005). doi: [10.1103/PhysRevA.71.012306](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.71.012306). 62, 83, 92, 102
- [130] E. Feldman e M. Hillery. Modifying quantum walks: a scattering theory approach. *J. Phys. A* **40**, 37, 11343 (2007). doi: [10.1088/1751-8113/40/37/011](https://doi.org/10.1088/1751-8113/40/37/011). 62, 92
- [131] W. Dür, R. Raussendorf, V. M. Kendon e H.-J. Briegel. Quantum walks in optical lattices. *Phys. Rev. A* **66**, 5, 052319 (2002). doi: [10.1103/PhysRevA.66.052319](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.66.052319). 62
- [132] K. Eckert, J. Mompart, G. Birkel e M. Lewenstein. One- and two-dimensional quantum walks in arrays of optical traps. *Phys. Rev. A* **72**, 1, 012327 (2005). doi: [10.1103/PhysRevA.72.012327](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.72.012327). 62
- [133] C. M. Chandrashekar. Implementing the one-dimensional quantum (Hadamard) walk using a Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. A* **74**, 3, 032307 (páginas 7) (2006). doi: [10.1103/PhysRevA.74.032307](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.74.032307). 62
- [134] J. Joo, P. L. Knight e J. K. Pachos. Single atom quantum walk with 1D optical superlattices (2007). arXiv:quant-ph/0606087. 62
- [135] R. Cote, A. Russell, E. E. Eyler e P. L. Gould. Quantum random walk with Rydberg atoms in an optical lattice. *New Journal of Physics* **8**, 8, 156 (2006). doi: [10.1088/1367-2630/8/8/156](https://doi.org/10.1088/1367-2630/8/8/156). 62
- [136] D. Solenov e L. Fedichkin. Continuous-time quantum walks on a cycle graph. *Phys. Rev. A* **73**, 1, 012313 (páginas 5) (2006). doi: [10.1103/PhysRevA.73.012313](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.73.012313). 62
- [137] K. Manouchehri e J. B. Wang. Quantum walks in an array of quantum dots. *Journal of Physics A* **41**, 6, 065304 (2008). doi: [10.1088/1751-8113/41/6/065304](https://doi.org/10.1088/1751-8113/41/6/065304). 62
- [138] K. A. van Hoogdalem e M. Blaauuboer. Implementation of the quantum walk step operator in lateral quantum dots (2009). arXiv:0903.1236. 62

- [139] H. B. Perets, Y. Lahini, F. Pozzi, M. Sorel, R. Morandotti e Y. Silberberg. Realization of Quantum Walks with Negligible Decoherence in Waveguide Lattices. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 17, 170506 (páginas 4) (2008). doi: [10.1103/PhysRevLett.100.170506](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.170506). 62
- [140] S. Fujiwara, H. Osaki, I. M. Buluta e S. Hasegawa. Scalable networks for discrete quantum random walks. *Phys. Rev. A* **72**, 3, 032329 (2005). doi: [10.1103/PhysRevA.72.032329](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.72.032329). 62
- [141] A. P. Hines e P. C. E. Stamp. Quantum walks, quantum gates, and quantum computers. *Phys. Rev. A* **75**, 6, 062321 (páginas 13) (2007). doi: [10.1103/PhysRevA.75.062321](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.75.062321). 62
- [142] K. Manouchehri e J. B. Wang. Quantum random walks without walking (2009). Submetido à *Phys. Rev. Lett.*, [arXiv:0809.0034](https://arxiv.org/abs/0809.0034). 62
- [143] J. Watrous. Quantum algorithms for solvable groups. Em *STOC '01: Proceedings of the thirty-third annual ACM symposium on Theory of computing*, página 60 (ACM, New York, NY, USA, 2001). doi: [10.1145/380752.380759](https://doi.org/10.1145/380752.380759). 63, 69
- [144] M. C. Santos. *Busca Markoviana Super Difusiva: Origens e Relevância das Leis de Potência*. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Paraná (2008). 63
- [145] J. Kempe. Quantum random walks: an introductory overview. *Contemporary Physics* **44**, 307 (2003). doi: [10.1080/00107151031000110776](https://doi.org/10.1080/00107151031000110776). [arXiv:quant-ph/0303081](https://arxiv.org/abs/quant-ph/0303081). 65, 75
- [146] B. Tregenna, W. Flanagan, R. Maile e V. Kendon. Controlling discrete quantum walks: coins and initial states. *New Journal of Physics* **5**, 83 (2003). doi: [10.1088/1367-2630/5/1/383](https://doi.org/10.1088/1367-2630/5/1/383). 65, 71
- [147] A. Ambainis. Quantum walks and their algorithmic applications. *International Journal of Quantum Information* **1**, 507 (2003). doi: [10.1142/S0219749903000383](https://doi.org/10.1142/S0219749903000383). [arXiv:quant-ph/0403120](https://arxiv.org/abs/quant-ph/0403120). 65, 68
- [148] V. Kendon. Decoherence in quantum walks - a review. *Mathematical Structures in Computer Science* **17**, 06, 1169 (2007). doi: [10.1017/S0960129507006354](https://doi.org/10.1017/S0960129507006354). 65, 87
- [149] N. Konno. *Quantum Potential Theory*, volume 1954/2008, capítulo Quantum Walks, página 309 (Springer Berlin / Heidelberg, 2008). doi: [10.1007/978-3-540-69365-9](https://doi.org/10.1007/978-3-540-69365-9). 66
- [150] V. M. Kendon. A random walk approach to quantum algorithms. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **364**, 3407 (2006). doi: [10.1098/rsta.2006.1901](https://doi.org/10.1098/rsta.2006.1901). 66
- [151] D. Deutsch. Quantum Theory, the Church-Turing Principle and the Universal Quantum Computer. *Proc. R. Soc. A* **400**, 97 (1985). doi: [10.1098/rspa.1985.0070](https://doi.org/10.1098/rspa.1985.0070). 68
- [152] D. A. Meyer. From quantum cellular automata to quantum lattice gases. *J. Stat. Phys.* **85**, 551 (1996). doi: [10.1007/BF02199356](https://doi.org/10.1007/BF02199356). [arXiv:quant-ph/9604003v2](https://arxiv.org/abs/quant-ph/9604003v2). 68

- [153] N. Konno. A Path Integral Approach for Disordered Quantum Walks in One Dimension. *Fluctuation and Noise Letters* **5**, 529 (2005). doi: [10.1142/S0219477505002987](https://doi.org/10.1142/S0219477505002987). [arXiv:quant-ph/0406233v4](https://arxiv.org/abs/quant-ph/0406233v4). 70
- [154] P. M. P. Ribeiro e R. Mosseri. Aperiodic Quantum Random Walks. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 190503 (2004). doi: [10.1103/PhysRevLett.93.190503](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.190503). 70, 87
- [155] C. M. Chandrashekar, R. Srikanth e R. Laflamme. Optimizing the discrete time quantum walk using a SU(2) coin. *Phys. Rev. A* **77**, 3, 032326 (páginas 5) (2008). doi: [10.1103/PhysRevA.77.032326](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.77.032326). 70, 89, 90
- [156] M. A. Nielsen e I. I. Chuang. *Quantum computation and quantum information* (Cambridge Univ. Press, 2000). 71
- [157] T. A. Brun, H. A. Carteret e A. Ambainis. Quantum walks driven by many coins. *Phys. Rev. A* **67**, 5, 052317 (2003). doi: [10.1103/PhysRevA.67.052317](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.67.052317). 73, 87, 109
- [158] C. Moore e A. Russell. Quantum Walks on the Hypercube. Em *RANDOM*, página 164 (2002). doi: [10.1007/3-540-45726-7](https://doi.org/10.1007/3-540-45726-7). [arXiv:quant-ph/0104137](https://arxiv.org/abs/quant-ph/0104137). 76, 80
- [159] T. D. Mackay, S. D. Bartlett, L. T. Stephenson e B. C. Sanders. Quantum walks in higher dimensions. *J. Phys. A* **35**, 12, 2745 (2002). doi: [10.1088/0305-4470/35/12/304](https://doi.org/10.1088/0305-4470/35/12/304). 76
- [160] J. Kempe. Discrete Quantum Walks Hit Exponentially Faster. *Probab. Theory Relat. Fields* **133**, 215 (2005). doi: [10.1007/s00440-004-0423-2](https://doi.org/10.1007/s00440-004-0423-2). 76, 105
- [161] J. Watrous. Quantum Simulations of Classical Random Walks and Undirected Graph Connectivity. *J. Comput. Syst. Sci.* **62**, 376 (2001). doi: [10.1006/jcss.2000.1732](https://doi.org/10.1006/jcss.2000.1732). 76
- [162] L. K. Grover. A fast quantum mechanical algorithm for database search. Em *STOC '96: Proceedings of the twenty-eighth annual ACM symposium on Theory of computing*, página 212 (ACM, New York, NY, USA, 1996). doi: <http://doi.acm.org/10.1145/237814.237866>. 80
- [163] S. Severini. On the Digraph of a Unitary Matrix. *SIAM. J. Matrix Anal. & Appl.* **25**, 1, 295 (2003). doi: [10.1137/S0895479802410293](https://doi.org/10.1137/S0895479802410293). 81
- [164] A. Montanaro. Quantum walks on directed graphs. *Quantum Information and Computation* **7**, 93 (2007). [arXiv:quant-ph/0504116](https://arxiv.org/abs/quant-ph/0504116). 81
- [165] S. Hoyer e D. A. Meyer. Faster transport with a directed quantum walk. *Phys. Rev. A* **79**, 2, 024307 (2009). doi: [10.1103/PhysRevA.79.024307](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.79.024307). 82
- [166] S. Hoyer. *Quantum random walk search on satisfiability problems*. Tese de Doutorado, University of California San Diego (2008). 82
- [167] P. Törmä e I. Jex. Properties of Ising-type linear networks. *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics* **1**, 1, 8 (1999). doi: [10.1088/1464-4266/1/1/002](https://doi.org/10.1088/1464-4266/1/1/002). 83

- [168] A. Gabris, T. Kiss e I. Jex. Scattering quantum random-walk search with errors. *Phys. Rev. A* **76**, 6, 062315 (páginas 10) (2007). doi: [10.1103/PhysRevA.76.062315](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.76.062315). 83
- [169] D. Reitzner, M. Hillery, E. Feldman e V. Buzek. Quantum searches on highly symmetric graphs. *Phys. Rev. A* **79**, 1, 012323 (páginas 10) (2009). doi: [10.1103/PhysRevA.79.012323](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.79.012323). 83, 92
- [170] A. Romanelli, R. Siri e V. Micenmacher. Sub-ballistic behavior in quantum systems with L[e-acute]vy noise. *Phys. Rev. E* **76**, 3, 037202 (2007). doi: [10.1103/PhysRevE.76.037202](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.76.037202). 87
- [171] G. Abal, R. Donangelo, F. Severo e R. Siri. Decoherent quantum walks driven by a generic coin operation. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **387**, 1, 335 (2008). doi: [10.1016/j.physa.2007.08.058](https://doi.org/10.1016/j.physa.2007.08.058). 87
- [172] A. Wójcik, T. Łuczak, P. Kurzyński, A. Grudka e M. Bednarska. Quasiperiodic Dynamics of a Quantum Walk on the Line. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 18, 180601 (2004). doi: [10.1103/PhysRevLett.93.180601](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.180601). 87
- [173] J. Košík. Scattering quantum random walk. *Optics and Spectroscopy* **99**, 2, 224 (2005). doi: [10.1134/1.2034608](https://doi.org/10.1134/1.2034608). 92, 101, 105, 106
- [174] R. L. Liboff. *Introductory Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, 1997), third edition. 93
- [175] N. L. Balazs e A. Voros. The Quantized Baker's Transformation. *EPL (Europhysics Letters)* **4**, 10, 1089 (1987). doi: [10.1209/0295-5075/4/10/001](https://doi.org/10.1209/0295-5075/4/10/001). 93
- [176] N. L. Balazs e A. Voros. The quantized Baker's transformation. *Ann. Phys.* **190**, 1, 1 (1989). doi: [10.1016/0003-4916\(89\)90259-5](https://doi.org/10.1016/0003-4916(89)90259-5). 93
- [177] J. Rudnick e G. Gaspari. *Elements of the Random Walk* (Cambridge University Press, 2004). doi: [10.2277/0521828910](https://doi.org/10.2277/0521828910). 98
- [178] F. J. Dyson. The Dynamics of a Disordered Linear Chain. *Phys. Rev* **92**, 1331 (1953). doi: [10.1103/PhysRev.92.1331](https://doi.org/10.1103/PhysRev.92.1331). 99
- [179] R. P. Feynman e A. R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill Book Company, 1965). 108, 129
- [180] S. Severini e G. Tanner. Regular quantum graphs. *J. Phys. A* **37**, 26, 6675 (2004). doi: [10.1088/0305-4470/37/26/005](https://doi.org/10.1088/0305-4470/37/26/005). 113
- [181] G. K. Tanner. *Non-Linear Dynamics and Fundamental Interactions*, volume 213, capítulo From quantum graphs to quantum random walks, página 69 (Springer Netherlands, 2006). doi: [10.1007/1-4020-3949-2](https://doi.org/10.1007/1-4020-3949-2). 113
- [182] A. G. M. Schmidt e M. G. E. da Luz. Wave-packet dynamics for general contact interactions on a circular setup: Revivals, bouncing, and trapping. *Phys. Rev. A* **69**, 5, 052708 (2004). doi: [10.1103/PhysRevA.69.052708](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.69.052708). 115

- [183] D. J. W. . S. H. Strogatz. Collective dynamics of ‘small-world’ networks. *nature* **393**, 440 (1998). doi: [10.1038/30918](https://doi.org/10.1038/30918). 119
- [184] O. Mulken e A. Blumen. Efficiency of quantum and classical transport on graphs. *Phys. Rev. E* **73**, 6, 066117 (2006). doi: [10.1103/PhysRevE.73.066117](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.73.066117). 119
- [185] O. Mulken e A. Blumen. Slow transport by continuous time quantum walks. *Phys. Rev. E* **71**, 1, 016101 (2005). doi: [10.1103/PhysRevE.71.016101](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.71.016101). 119
- [186] O. Mulken, V. Pernice e A. Blumen. Quantum transport on small-world networks: A continuous-time quantum walk approach. *Phys. Rev. E* **76**, 5, 051125 (2007). doi: [10.1103/PhysRevE.76.051125](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.76.051125). 119
- [187] X.-P. Xu. Continuous-time quantum walks on one-dimensional regular networks. *Phys. Rev. E* **77**, 6, 061127 (2008). doi: [10.1103/PhysRevE.77.061127](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.77.061127). 119
- [188] F. W. Strauch. Connecting the discrete- and continuous-time quantum walks. *Phys. Rev. A* **74**, 3, 030301 (2006). doi: [10.1103/PhysRevA.74.030301](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.74.030301). 119
- [189] A. M. Childs. On the relationship between continuous- and discrete-time quantum walk (2008). [arXiv:0810.0312](https://arxiv.org/abs/0810.0312). 119
- [190] P. A. M. Dirac. *Quantum Mechanics* (Oxford Univ. Press, London, 1958), 4th edition. 122
- [191] H. Goldstein. *Classical Mechanics* (Addison-Wesley, New York, 1980), second edition. 129, 130, 133
- [192] M. J. Giannoni, A. Voros e J. Zinn-Justin, editores. *Chaos & Quantum Physics: Proceedings of the Les Houches Summer School* (1989). 130
- [193] H. Kleinert. *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets* (World Scientific Publishing Company, Singapore, 2006), fourth edition. 130
- [194] J. H. V. Vleck. The Correspondence Principle in the Statistical Interpretation of Quantum Mechanics. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* **14**, 2, 178 (1928). 130
- [195] M. C. Gutzwiller. Bernoulli sequences and trajectories in the anisotropic Kepler problem. *J. Math. Phys.* **18**, 806 (1977). doi: [10.1063/1.523310](https://doi.org/10.1063/1.523310). 131
- [196] M. C. Gutzwiller. From classical to quantum mechanics with hard chaos. *J. Phys. Chem.* **92**, 3154 (1988). doi: [10.1021/j100322a026](https://doi.org/10.1021/j100322a026). 131
- [197] D. Wintgen, K. Richter e G. Tanner. The semiclassical helium atom. *Chaos* **2**, 19 (1992). doi: [10.1063/1.165920](https://doi.org/10.1063/1.165920). 131
- [198] W. T. Strunz. Semiclassical path representation of the Green function in one-dimensional multiple-well potentials. *J. Phys. A* **25**, 3855 (1992). doi: [10.1088/0305-4470/25/13/030](https://doi.org/10.1088/0305-4470/25/13/030). 131
- [199] G. Tanner e D. Wintgen. Semiclassical Quantization of Intermittency in Helium. *Phys. Rev. Lett.* **75**, 16, 2928 (1995). doi: [10.1103/PhysRevLett.75.2928](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.75.2928). 131

- 
- [200] N. T. Maitra e E. J. Heller. Barrier Tunneling and Reflection in the Time and Energy Domains: The Battle of the Exponentials. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 16, 3035 (1997). doi: [10.1103/PhysRevLett.78.3035](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.78.3035). 131
- [201] G. Vattay, A. Wirzba e P. E. Rosenqvist. Periodic Orbit Theory of Diffraction. *Phys. Rev. Lett.* **73**, 17, 2304 (1994). doi: [10.1103/PhysRevLett.73.2304](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.73.2304). 131
- [202] H. Primack, H. Schanz, U. Smilansky e I. Ussishkin. Penumbra Diffraction in the Quantization of Dispersing Billiards. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 10, 1615 (1996). doi: [10.1103/PhysRevLett.76.1615](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.76.1615). 131
- [203] N. D. Whelan. Semiclassical Quantization Using Diffractive Orbits. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 15, 2605 (1996). doi: [10.1103/PhysRevLett.76.2605](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.76.2605). 131
- [204] R. Shankar. *Principles of Quantum Mechanics* (Springer, 1994). 132