ESTUDO DO GRAFO CÚBICO QUÂNTICO

Alison A. Silva (PIBIC/PIBIC/UEPG), Fabiano M. Andrade (Orientador),
e-mail: alison9774@gmail.com, fmandrade@uepg.br.

Universidade Estadual de Ponta Grossa/ Departamento de Matemática e Estatística

Física/Física Clássica e Física Quântica; Mecânica e Campos

Palavras-chave: Grafos discretos, grafos quânticos, espectro, função de Green.

Resumo

Neste trabalho, visando o estudo de grafos discretos e grafos quânticos, utilizamos os grafos cúbicos com n vértices, Q_n. Foi possível obter o espectro para ambos os tipos de grafos e estudar exemplos de condição de contorno para vértices com grau d_v, permitindo obter coeficientes de transmissão e reflexão globais para os grafos cúbicos. Através de um método onde utilizamos famílias de caminhos que vão de um vértice ao outro, obtemos a função de Green para os grafos quânticos, permitindo analisar seu espectro e a probabilidade de transmissão através desses grafos.

Introdução

Um grafo discreto $X(V,E)$ consiste em um conjunto de vértices e um conjunto de arestas conectando os vértices. Neste trabalho estudaremos apenas grafos simples [1]. A matriz adjacência A para um grafo simples com n vértices, é uma matriz simétrica de ordem n, com A_{ij} igual a 1 se os vértices i e j são adjacentes e 0 caso contrário [2]. Um grafo quântico é um grafo métrico, equipado com um operador diferencial, como o operador Hamiltoniano, e com condições de contornos nos vértices. Para o estudo dos grafos cúbicos quânticos, será utilizado o método de função de Green. A função de Green exata para grafos pode ser obtida através de somas de caminhos, gerando sistemas de equações das famílias de caminhos, que ao serrem resolvidas, fornecem a função de Green exata de uma forma fechada. Nessa técnica há a vantagem de se obter, de uma forma relativamente simples, funções de Green e os resultados obtidos são exatos para os grafos quânticos [3, 4].

Revisão de literatura

Os grafos cúbicos com n vértices (Q_n) são grafos com um total de 2^n vértices, cada um possuindo o mesmo grau d_v e $n2^{n-1}$ arestas. Definindo as funções de onda nas arestas do grafo, essas devem ser funções bem-comportadas e de quadrado integráveis em cada aresta. As funções devem satisfazer as condições de contorno nos vértices. As condições de contorno nos vértices do grafo devem envolver as funções de onda e a sua derivada. Pode-se mostrar que a condição de condição de contorno mais geral que é consistente com conservação de fluxo nos vértices e dada por [5]

$$A_v F(v) + B_v F'(v) = 0.$$

Introduzindo as matrizes A_v e B_v, de ordem $d_v \times d_v$ e associadas à condição de vértice [6]. Essas matrizes devem existir para cada vértice do grafo, tal que a matriz

(A_v B_v) de ordem $d_v \times 2d_v$ deve ter rank d_v, e a matriz A_v B_v* deve ser auto adjunta. Exemplos de condições de contorno para os grafos são condições do tipo δ e do tipo δ'. A condição de contorno do tipo δ é análoga àquela obtida através equação de Schrödinger em uma linha com um potencial do tipo δ. No caso de grafos ela é dada por

$$Condição\ tipo\ \delta \begin{cases} f(x)\ contínua\ em\ v \\ \sum_{e \in E_v} f_e(v) = \alpha_v f(v), \end{cases}$$

onde α_v é a intensidade da δ e E_v representa o conjunto de todas as arestas conectadas ao vértice v. No método utilizado para obter a função de Green, os vértices do grafo são rotulados conforme a ordem utilizada para construir a matriz adjacência. São definidos os vértices de entrada e de saída, nesses vértices deve haver amplitudes de transmissão que permitam a entrada e saída no grafo. Uma família de caminhos entre os vértices i e j percorrendo uma aresta de tamanho l_{ij} é chamada de p_{ij}. Um exemplo de como essas famílias são construídas é mostrado na Figura 1 para o grafo caminho com 3 vértices. Devemos considerar os coeficientes de reflexão r_j e transmissão t_j em cada vértice do grafo. Sendo $E_{j\setminus\{i\}}$, todos os vértices vizinhos a j, exceto o vértice i, as famílias de caminho são definidas por:

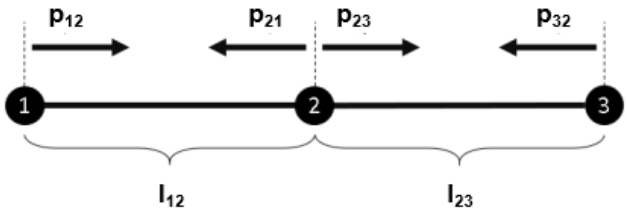


Figura 1 – Grafo P_3 com as famílias de caminhos.

$$p_{ij} = \left[r_j p_{ji} + \sum_{p \epsilon E_{j\setminus\{i\},}} t_j p_{jp} \right] e^{ikl_{i,j}}.$$

Ao escrever as famílias de caminhos de um grafo, formamos um sistema de equações. Resolvendo esse sistema de equações, obtemos a função de Green. De forma geral, o resultado e visto ser [4]

$$G_\Gamma(x_f,\ x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} T_\Gamma e^{ik(x_i + x_f)}$$

Resultados e Discussão

O espectro para um grafo discreto é definido como sendo os autovalores da matriz adjacência. Assim, os espectros para dos grafos Q_n discretos são respectivamente dados por

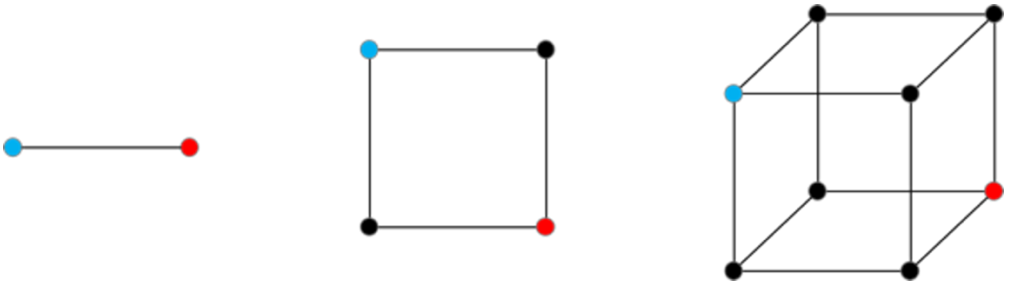


Figura 2 – Grafos Q_1, Q_2 e Q_3 com os vértices de entrada (azul) e saída (vermelho).

$$\mathrm{Spec}(Q_1) = \{-1, 1\}$$
$$\mathrm{Spec}(Q_2) = \{-2, 0, 0, 2\}$$
$$\mathrm{Spec}(Q_3) = \{-3, -1, -1, -1, 1, 1, 1, 3\}$$

Usando a soma de família de caminhos e resolvendo o sistema de equações de caminhos para os grafos da Figura 1, foram encontradas as equações para a amplitude transmissão através desses respectivos grafos. Os resultados são:

$$T_{Q_1} = \frac{t_1 t_2 e^{ikl}}{1 - r_1 r_2 e^{2ikl}}$$

$$T_{Q_2} = \frac{2\, t\, t_1 t_4 e^{2\, ikl}}{1 - r(r_1 + r_4 + t_1 + t_4)e^{2ikl} + (r - t)(r + t)(r_1 + t_1)(r_4 + t_4)e^{4ikl}}$$

$$T_{Q_3} = \frac{6\, t^2 t_1 t_8 e^{3\, ikl}}{Den_{T_{Q_3}}}$$

$$\begin{aligned} Den_{T_{Q_3}} = 1 &- \left(r^2 + t^2 + (2t + r_1 + r_8 + 2t_1 + 2t_8)\right)e^{2\, ikl} \\ &+ \{(r_1 + r_8 + 2t_1 + 2t_8)r^3 \\ &+ [(2r_1 + 2r_8 + 4t_1 + 4t_8)t + (r_8 + 2t_8)(r_1 + 2t_1)]r^2 \\ &- (r_1 + r_8 + 2t_1 + 2t_8)(t^2 r + 2t^3)\}e^{4\, ikl} \\ &- (r + 2t)^2 (r - t)^2 (r_1 + 2t_1)(r_8 + 2t_8)e^{6\, ikl} \end{aligned}$$

Para os grafos quânticos, os seus autovalores são definidos pelos polos em $k = k_n$ da função de Green, com as energias associadas aos autovalores, encontradas através de [5]

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}.$$

Utilizando os grafos cúbicos quânticos Q_n, representados na figura 2, e aplicando a condição do tipo δ em todos os seus vértices, com o termo $\alpha = 1.0$ e sendo adicionados vértices de entrada e saída neles, foi obtida a transmissão T_Γ de cada grafo. Obtemos a probabilidade de transmissão através do grafo por $|T_\Gamma|^2$. Assim, para os grafos cúbicos estudados, foi possível fazer os gráficos da probabilidade de transmissão em função do número de onda k, como mostrado na Figura 3.

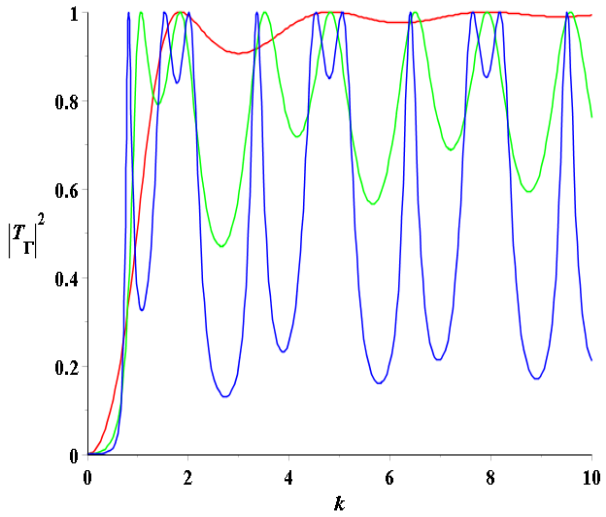


Figura 3 – Probabilidade de transmissão através dos grafos Q_1 (vermelho), Q_2 (verde) e Q_3 (azul).

Conclusões

Com o estudo da teoria de grafos, compreendendo suas características, matrizes e operações, foi possível obter as matrizes para os grafos cúbicos Q_1, Q_2 e Q_3 e verificar o seu espectro. O método utilizado permite obter a função de Green de maneira mais simples. Com as funções de Green obtidas e a parte que descreve a transmissão no grafo, é possível encontrar o espectro do grafo quântico pelos polos da função de Green e analisar e comparar com os dados para a probabilidade de transmissão dos grafos com os encontrados na bibliografia, verificando assim a eficiência do método utilizado.

Agradecimentos

Ao orientador Prof. Dr. Fabiano Manoel de Andrade e ao grupo FIQIQ pelas discussões e à Fundação Araucária pelo apoio financeiro com a bolsa de iniciação científica.

Referências

[1] WEST, D. B. Introduction to Graph Theory. Nova Iorque, EUA: Prentice Hall, 2000.
[2] BROUWER, A. E., HAEMERS, W. H., Spectra of Graphs. Nova Iorque: Springer, 2012.
[3] ANDRADE, F. M. Métodos de Função de Green na Análise de Grafos Quânticos e Caminhadas Quânticas. Tese (Doutorado em Física) – Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2009.
[4] ANDRADE, F. M. et al. Green's function approach for quantum graphs: an overview, Physics Reports. v. 647, n. 1, p. 1-46, ago. 2016.
[5] BERKOLAIKO, G.; KUCHMENT, P. Introduction to quantum graphs. Providence: American Mathematical Society, 2012.