

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

CÁSSIO MACÊDO MACIEL

**TRANSPORTE QUÂNTICO SOBRE REDES DO TIPO
DENDRÍMERO E REDES LIVRES DE ESCALA**

Manaus - AM
2022

Suporte:



CÁSSIO MACÊDO MACIEL

**TRANSPORTE QUÂNTICO SOBRE REDES DO TIPO
DENDRÍMERO E REDES LIVRES DE ESCALA**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação
em Física da Universidade Federal do Amazonas
(UFAM) como quesito necessário para a obtenção
do título de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Mircea Daniel Galiceanu

Manaus - AM
Maio, 2022

© *Todos os direitos autorais reservados.*

Ficha Catalográfica

Ficha catalográfica elaborada automaticamente de acordo com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

M152t Maciel, Cássio Macêdo
Transporte quântico sobre redes do tipo dendrímero e redes livres
de escala / Cássio Macêdo Maciel . 2022
122 f.: il. color; 31 cm.

Orientador: Mircea Daniel Galiceanu
Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal do
Amazonas.

1. Caminhadas quânticas de tempo contínuo. 2. Caminhadas
aleatórias de tempo contínuo. 3. Transporte quântico. 4. Redes
multicamadas. 5. Redes livres de escala. I. Galiceanu, Mircea
Daniel. II. Universidade Federal do Amazonas III. Título

Aos meus dois grandes amores: Rosângela e Jorge.

AGRADECIMENTOS

À Deus Pai, que possibilitou a realização deste trabalho e a saúde para chegar até este momento.

Ao Professor Dr. Mircea Galiceanu, pela valiosa orientação e paciência, por toda atenção e compartilhamento de conhecimentos. Aqui, também, expresso meus agradecimentos a todos os demais professores do Departamento de Física da Universidade Federal do Amazonas.

Aos meus pais: **Carlos Jorge F. Maciel** e **Rosângela M. Maciel**, por todo Amor, carinho, confiança e ajuda incondicional em momentos decisivos. Aos meus irmãos: **Carlos César M. Maciel** e **Kelly M. Maciel**, pelo Amor, companhia e por todas as gargalhadas mais sinceras e verdadeiras. Aos meus tios e prima, respectivamente: **Eudes Maciel**, **Marcele Sousa** e **Lohanna Maciel** por todo Amor, toda confiança e acolhimento. Minha Graduação, Mestrado e este Doutorado em Física estão diretamente ligados a vocês.

Meus sinceros agradecimentos aos amigos da Pós: Adriano “Carol”, Joziano Miranda (“O Chefe”), Cleverton Dias, Henrique Pecinatto, Douglas Gonçalves, Cláudio Natálio, Adriane Reis, Leandro Biase, Luã Catique, Salomão Costa, Ozeias Picanço, Jhenifer Fofano e à todos os demais que também escolheram esse caminho.

Em especial, quero agradecer a Rosilene Reis (“Luh”), por continuar acreditando que posso alcançar objetivos maiores. Pelas conversas distraídas e, em alguns momentos, nem tão distraídas assim. Por toda amizade e carinho. Muito Obrigado!

Agradeço a FAPEAM, pelo auxílio financeiro e a Instituição pela infra estrutura na qual foi de grande importância no desenvolver dessa pesquisa.

RESUMO

Estudamos o transporte quântico, via caminhadas quânticas de tempo contínuo (CTQWs), sobre diferentes redes complexas. Neste modelo, o transporte quântico pode ser completamente resolvido após determinados seus autovalores e autovetores associados à matriz de conectividade da rede. Para fins de comparação, também investigamos o transporte clássico através das caminhadas aleatórias de tempo contínuo (CTRWs). A técnica das caminhadas quânticas (QWs) é uma ferramenta poderosa na análise de fenômenos de transporte. Uma maneira de monitorar a eficiência do transporte quântico é através das probabilidades médias e exatas de retorno. Inicialmente, empregamos o modelo CTQW sobre estruturas multicamadas do tipo dendrímero (RMTDs). Para contornar efeitos de localização, decidimos empilhar várias redes dendrímero, umas sobre as outras, conectando-as através de ligações entre vértices vizinhos. Através do parâmetro de probabilidade p , adicionamos novas ligações (*intra*ligações) entre vértices de mesma geração. Com probabilidade $1 - q$, retiramos ligações (*inter*ligações) entre vértices de camadas vizinhas. O transporte quântico então é investigado através das combinações numéricas desses dois parâmetros. Para essas redes, uma escolha apropriada desses parâmetros fornece, em várias ordens de grandeza, uma eficiência maior. Encontramos algo interessante: a melhor eficiência do transporte é obtida para os seguintes valores: $q \approx 0.9$ e $p \approx 0.9$. Ou seja, o melhor transporte é obtido quando há a ausência de uma intra- e interligação. Na sequência, utilizamos o modelo CTQW sobre redes livres de escala generalizadas (GSFNs). Tais estruturas são uma mistura não trivial entre segmentos lineares e redes do tipo estrela. Enquanto ao transporte quântico sobre GSFNs, observamos uma alternância entre fortes efeitos de localização, devido aos segmentos de estrelas, e um bom espalhamento, devido aos segmentos lineares. Mostramos que o transporte quântico sobre GSFNs pode ser melhorado através da variação de dois parâmetros de modularidade: o grau máximo e o grau mínimo permitidos a todos os nós da rede. Identificamos a mesma eficiência quântica para diferentes combinações dos parâmetros de construção das redes, que estão relacionados à diferentes topologias.

Palavras-chave: Caminhadas Quânticas de Tempo Contínuo. Caminhadas Aleatórias de Tempo Contínuo. Transporte Quântico. Redes Multicamadas. Redes Livres de Escala. Probabilidades de retorno.

ABSTRACT

We study quantum transport on different complex networks by using continuous-time quantum walks (CTQWs). In this model the quantum transport is completely solved by determining all eigenvalues and eigenvectors of the connectivity matrix. For comparison reasons we have also investigated the classical transport through continuous-time random walks (CTRWs) model. The quantum walks (QWs) technique is a powerful tool in the analysis of transport phenomena. One method to monitor the efficiency of quantum transport is through the exact and the average return probabilities. First, we have implemented the CTQW model to transport on multilayer dendrimer networks (RMTDs). In order to overcome the localization effects, we have chosen to stack many dendrimer networks on top of each and connecting them by links between nodes from the neighboring layers. We have added new links (*intraconnections*) between vertices from the same generation with the probability parameter p . We have removed links (*interconnections*) between vertices from the neighboring layers with probability $1 - q$. The quantum transport is investigated by numerical combinations of these two parameters. For these networks a proper choice of these parameters provides a greater efficiency by several orders of magnitude. We have found something peculiar: the highest efficiency is reached for the following values: $q \approx 0.9$ and $p \approx 0.9$. Thus, the best transport is obtained when is missing a single intra- and interconnection. Then, we have used the CTQW model on generalized scale-free networks (GSFNs). Such networks are a non-trivial mixture between linear segments and starlike networks. Regarding the quantum transport on GSFNs, we have noticed a interplay between strong localization effects, due to the the starlike segments, and a good spreading, due to the linear segments. We have shown that the quantum transport on GSFNs can be improved by varying two modularity parameters: the maximum and the minimum degree allowed for all nodes of the network. We have identified the same quantum efficiency for different combinations of the network's construction parameters, which correspond to different topologies.

Keywords: Continuous-Time Quantum Walks. Continuous-Time Random Walks. Quantum Transport. Multilayer Networks. Scale-free Networks. Return Probabilities.

LISTA DE PUBLICAÇÕES

Durante a realização desta pesquisa de Doutorado, algumas publicações científicas em revistas internacionais foram feitas. Abaixo, destaco os artigos científicos publicados:

- Maciel, C. M., Galiceanu, M., Strunz, W., *Quantum transport on modified multi-layered spiderwebs*, J. Phys. A: Math. Theor. **51**, 495301 (2018)
- Maciel, C. M., Mendes, C. F. O., Strunz, W., Galiceanu, M., *Quantum transport on generalized scale-free networks*, Phys. Rev. A **102**, 032219 (2020)
- Galiceanu, M., Mendes, C. F. O., Maciel, C. M., Beims, M., *Mechanisms to decrease the diseases spreading on generalized scale-free networks*, Chaos **31**, 033131 (2021)

LISTA DE FIGURAS

1.1	Esquema ilustrativo comparando uma RW e uma QW. O caminhante quântico, devido seu comportamento ondulatório, pode estar em mais de um vértice simultaneamente.	2
1.2	Ilustração de rede contendo $N = 5$ vértices. Em (a) temos uma rede do tipo árvore, não direcionada, sem <i>loops</i> , sem autoligação e sem peso. Por outro lado, em (b), temos a mesma estrutura, todavia, contrária às características de (a).	3
2.1	Representação de uma rede não direcionada contendo um total de cinco vértices (nós). Em (a) mostramos a matriz de adjacência, $\mathbf{A}_{adj}$, associada a esta estrutura. Já em (b) temos a matriz de grau, $\mathbf{D}$, também associada à mesma rede. A diferença entre essas duas matrizes dará como resultado uma nova matriz chamada de matriz de conectividade, $\mathbf{A}$ (Eq. 2.2).	8
2.2	Esquema representativo de uma matriz de guia de onda para realização de CTQWs entre fótons correlacionados. Em (A) estão as 21 guias de onda. Em (B) é apresentado o resultado de uma simulação. Já em (C) está o padrão de saída da propagação da luz laser através das guias.	14
2.3	Esquema experimental para a realização das CTQWs em duas dimensões via guias de onda. Em (A) temos a gravação a laser das guias de onda; (B) representa um corte transversal da disposição das guias; (C) indica o comprimento de separação dentre cada uma das guias; (D) a relação entre o coeficiente de acoplamento das ondas e o espaçamento entre as ondas; (E) todos os equipamentos técnicos utilizados para a realização da experiência.	15
2.4	Intensidade de probabilidade para diferentes comprimentos de propagação da CTQW em duas dimensões. As Figs de (A)-(E) são resultados experimentais, enquanto que as Figs de (F)-(J) mostram simulações teóricas.	16
3.1	Representação de um triângulo de Sierpinski com número de geração igual a $G = 4$. A cada centro de um triângulo equilátero removido, associamos um vértice. Ao ligarmos os vértices, uns aos outros, a estrutura interna resultante é um dendrímero.	19

- 3.2 A representação do crescimento, até geração $G = 7$, da poliamidoamina (PAMAN). Trata-se de um exemplo marcante da característica ramificada de estruturas do tipo dendrímero. Enquanto o diâmetro aumenta de maneira linear, os componentes periféricos crescem de forma exponencial. 20
- 3.3 Passos da construção de uma única camada de dendrímero com funcionalidade $f_D = 3$. Em (a) temos a representação até geração $G = 2$. Observe que iniciamos com um nó central ($G = 0$) e a cada passo da construção todos os vértices internos possuem três ligações. Este processo pode ser iterado até a geração G desejada. Nós periféricos possuem apenas uma única ligação e não há ligações entre vértices de mesma geração ($p = 0.0$). Em (b) alteramos o valor da probabilidade p ($p \neq 0.0$) e novas ligações, apenas entre nós de mesma geração, são adicionadas (I, II, III e IV, neste exemplo). 22
- 3.4 Exemplo de duas redes multicamadas do tipo dendrímero (RMTDs) com $G = 2$ gerações e $L = 3$ camadas. Cada camada é construída a partir de uma rede dendrímero com $f_D = 3$. Em (a) temos uma RMTD *completa*, isto é, todas as ligações entre camadas estão presentes ($q = 1.0$); observe que cada camada é constituída por uma rede dendrímero puro ($p = 0.0$). Em (b) temos uma RMTD *incompleta*, isto é, algumas ligações entre camadas foram removidas com probabilidade $1 - q$; observe que o valor da probabilidade p para cada camada é mantido constante e igual a $p = 0.3$; e fizemos $q = 0.2$. As interligações entre as camadas internas estão representadas pelas linhas sólidas em vermelho. 24
- 3.5 Espectro de autovalores para RMTDs completas, com $G = 5$ gerações e número de camadas L variável. Em (a) cada camada é formada por dendrímeros puros ($p = 0.0$). Já em (b) cada camada é formada por dendrímeros modificados completos, isto é, $p = 1.0$. Em destaque, tanto em (a) quanto em (b), mostramos regiões de autovalores pequenos, onde fica evidente o espectro discreto. 26
- 3.6 Espectro de autovalores para RMTD completa, com $G = 5$ gerações e número de camadas fixo em $L = 10$. Aqui, investigamos a influência do parâmetro p , variando-o de 0.0 até 1.0, em passos de 0.1. Mesmo para valores pequenos de p o espectro discreto é rapidamente substituído pelo espectro contínuo. Este fato terá grande influência sobre a eficiência do transporte quântico. 27
- 3.7 Probabilidades de transição $\pi_{j,k}(t)$ para $t = 10$ sobre RMTDs completas. Em (a) para a estrutura contida na Fig. 3.8 (a). Já em (b) para a estrutura contida na Fig. 3.8 (b). Por fim, em (c) para a estrutura na Fig. 3.8 (c). A intensidade das cores representa as probabilidades do caminhante quântico ao espalhar-se sobre a rede. 28
- 3.8 Representação de três estruturas RMTDs completas. Em (a) temos uma rede larga correspondendo a $G = 3$ e $L = 2$. Já em (b) temos uma rede compacta para a qual definimos $G = 2$ e $L = 4$. Por fim, em (c) temos uma rede longa contendo $G = 1$ e $L = 10$. Nos três casos deixamos fixos $p = 1.0$ e $q = 1.0$. Temos $(N_{\text{camada}}, \text{Fig.}) = (44, \text{a}), (40, \text{b}), (40, \text{c})$ 29

3.9	Probabilidades de transição $\pi_{j,k}(t)$ para $t = 60$ sobre RMTDs completas. Em (a) para a estrutura contida na Fig. 3.8 (a). Já em (b) para a estrutura contida na Fig. 3.8 (b). Por fim, em (c) para a estrutura na Fig. 3.8 (c). A intensidade das cores representa as probabilidades do caminhante quântico ao espalhar-se sobre a rede.	30
3.10	Probabilidades médias de retorno clássica e quântica, $\bar{p}(t)$ e $\bar{\pi}(t)$, respectivamente. Avaliamos seu comportamento sobre RMTDs completas, com número de geração fixo em $G = 5$. Em (a) deixamos o parâmetro de probabilidade p fixo em 1.0 e variamos o número L de camadas. Em (b) variamos o parâmetro p e deixamos fixo o número de camadas $L = 10$	32
3.11	Espectro de autovalores para RMTDs incompletas, com $G = 6$ gerações e número de camadas $L = 6$. Em (a) mantemos fixo o parâmetro $p = 0.0$ e variamos q , que representa a probabilidade de ligações entre vértices de camadas distintas. Em (b) mantemos fixo o parâmetro $p = 1.0$ e variamos q	34
3.12	Espectro de autovalores para RMTD incompleta, com $G = 6$ gerações e número de camadas $L = 6$. Alteramos o parâmetro p e deixamos fixo $q = 0.5$, que representa a probabilidade de ligações entre vértices de camadas distintas.	35
3.13	Limite de longo tempo, χ , sobre RMTDs incompletas, com $G = 6$ gerações e $L = 6$ camadas, sendo $S = 12$ realizações. Investigamos a influência dos parâmetros p e q . Em (a) apresentamos os valores exatos de χ , enquanto que em (b) mostramos o seu valor aproximado χ^* . Para $\chi = 0$ temos o máximo de eficiência e para $\chi = 1$ temos o máximo de ineficiência.	36
3.14	Limite de longo tempo, χ , sobre RMTDs incompletas, com $G = 18$ gerações e $L = 6$ camadas, sendo $S = 4$ realizações. Investigamos a influência dos parâmetros p e q . Para $\chi = 0$ temos o máximo de eficiência e para $\chi = 1$ temos o máximo de ineficiência.	38
4.1	Um exemplo da aplicação das GSFNs como estrutura subjacente para representar um modelo epidemiológico. Em (a) temos a representação da rede com $N = 50$ vértices, $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 49$ (estes parâmetros serão definidos na próxima seção). Em (b) temos a representação de um passo em que os caminhantes infectados (vermelho) contaminam dois indivíduos suscetíveis (preto). Após a infecção, os indivíduos são considerados removidos da rede (azul).	41
4.2	Comparação entre uma GSFN e seus dois extremos de construção: uma rede estrela e uma cadeia linear. Nossas estruturas GSFNs são uma combinação entre vértices com grande quantidade de ligações (estrelas) e segmentos lineares (cadeia linear).	43

- 4.3 Passos da construção de uma GSFN. Utilizamos $N = 100$ vértices, com $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 99$. Em (a) adicionamos 15 novos vértices ao nó 1, através da probabilidade dada em Eq. 4.3. Na sequência, novos vértices são escolhidos aleatoriamente para receberem novas ligações. O processo é iterado até o número N desejado. Observe que nós fechados recebem novas conexões, enquanto nós abertos não foram escolhidos para tal. Vértices com 6 ligações ou mais possuem diâmetro maior. A linha sólida em vermelho indica o maior caminho linear. Em (f) temos a rede final. 44
- 4.4 Distribuição de grau p_k para GSFNs com número fixo de vértices $N = 1000$ e $S = 10000$ realizações. Utilizamos diferentes valores do parâmetro γ , bem como dos parâmetros de modularidade $K_{\min}$ e $K_{\max}$. Por razões de comparação, apresentamos também a distribuição de grau para o modelo de Barabási-Albert. Observamos o decaimento do tipo lei de potência e o comportamento de *fat tail*, características marcantes de SFNs. 45
- 4.5 Espectro de autovalores para GSFNs com número fixo de vértices $N = 1000$ e $S = 1000$ realizações. Investigamos a influência do parâmetro γ sobre o espectro e deixamos fixos $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 999$. Por razões de comparação, apresentamos também o espectro de autovalores para uma rede estrela e uma cadeia linear. 47
- 4.6 Espectro de autovalores para GSFNs com número fixo de vértices $N = 1000$ e $S = 1000$ realizações. Em (a) investigamos a influência do grau mínimo permitido, $K_{\min}$, sobre o espectro e deixamos fixos $\gamma = 2.5$ e $K_{\max} = 999$. Já em (b) investigamos a influência do grau máximo permitido, $K_{\max}$, sobre o espectro e deixamos fixos $\gamma = 2.5$ e $K_{\min} = 2$ 48
- 4.7 Espectro de autovalores para GSFNs com número variável de N vértices e S realizações. Deixamos fixos: $\gamma = 2.6$, $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = N - 1$. Por razões de comparação, apresentamos também o espectro de autovalores para redes construídas a partir do modelo B.-A.. Para melhor apresentação, normalizamos o eixo x ao tamanho N das redes. 49
- 4.8 Probabilidade média de retorno clássica, $\bar{p}(t)$, sobre GSFNs com $N = 1000$ vértices e $S = 1000$ realizações. Investigamos a influência do parâmetro γ sobre a probabilidade clássica, mantendo fixos $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 999$. Por razões de comparação, apresentamos também o comportamento de $\bar{p}(t)$ sobre uma rede estrela e uma cadeia linear, ambas com mesmo tamanho das redes GSFNs. 50
- 4.9 Probabilidade média de retorno clássica, $\bar{p}(t)$, sobre GSFNs com $N = 1000$ vértices e $S = 1000$ realizações. Em (a) investigamos a influência do grau mínimo permitido, $K_{\min}$, sobre a probabilidade clássica, mantendo fixos $\gamma = 2.5$ e $K_{\max} = 999$. Em (b) investigamos a influência do grau máximo permitido, $K_{\max}$, sobre a probabilidade clássica, mantendo fixos $\gamma = 2.5$ e $K_{\min} = 2$ 51

- 4.10 Probabilidade média de retorno clássica, $\bar{p}(t)$, sobre GSFNs com número N de vértices variável e $S = 1000$ realizações. Deixamos fixos: $\gamma = 2.6$, $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = N - 1$. Por razões de comparação, apresentamos também o comportamento de $\bar{p}(t)$ sobre uma rede construída a partir do modelo B.-A. (com $N = 1000$). 53
- 4.11 Probabilidade média de retorno quântica, $\bar{\pi}(t)$, sobre GSFNs com $N = 1000$ vértices e $S = 1000$ realizações. Investigamos a influência do parâmetro γ sobre a probabilidade quântica, mantendo fixos $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 999$. Por razões de comparação, apresentamos também o comportamento de $\bar{\pi}(t)$ sobre uma rede estrela e uma cadeia linear, ambas com mesmo tamanho das redes GSFNs, assim como para uma rede construída a partir do modelo B.-A.. 54
- 4.12 Comparação entre a probabilidade média de retorno clássica, $\bar{p}(t)$, probabilidade média de retorno quântica, $\bar{\pi}(t)$, e o limite inferior quântico, $|\bar{\alpha}(t)|^2$, sobre GSFNs com $N = 1000$ vértices e $S = 1000$ realizações. Investigamos a influência do parâmetro γ , para o qual foram escolhidos dois valores: 1.0 e 4.0. Ou seja, estruturas com grandes estrelas e redes com maior quantidade de segmentos lineares, respectivamente. São mantidos fixos $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 999$ 55
- 4.13 Probabilidade média de retorno quântica, $\bar{\pi}(t)$, sobre GSFNs com $N = 1000$ vértices e $S = 1000$ realizações. Em (a) investigamos a influência do grau mínimo permitido, $K_{\min}$, sobre a probabilidade quântica, mantendo fixos $\gamma = 2.5$ e $K_{\max} = 999$. Em (b) investigamos a influência do grau máximo permitido, $K_{\max}$, sobre a probabilidade quântica, mantendo fixos $\gamma = 2.5$ e $K_{\min} = 2$ 57
- 4.14 Contornos da probabilidade de transição quântica, $\pi_{k,j}(t)$, sobre GSFN com $N = 100$ vértices. Para esta análise, mantivemos fixos os parâmetros de construção em: $\gamma = 1.0$, $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 99$. Em (a) avaliamos o comportamento da probabilidade $\pi_{k,\text{centro}}(t)$, ou seja, quando o caminhante quântico inicia seu movimento no centro da rede (quadrado vermelho). Em (b) avaliamos o comportamento da probabilidade $\pi_{k,\text{periférico}}(t)$, ou seja, quando o caminhante quântico inicia seu movimento em um vértice periférico da rede. Em (c) avaliamos o comportamento da probabilidade $\pi_{k,j}(10)$. 59
- 4.15 Contornos da probabilidade de transição quântica, $\pi_{k,j}(t)$, sobre GSFN com $N = 100$ vértices. Para esta análise, mantivemos fixos os parâmetros de construção em: $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 99$. Em (a) avaliamos o comportamento da probabilidade $\pi_{k,\text{centro}}(t)$, ou seja, quando o caminhante quântico inicia seu movimento no centro da rede (quadrado vermelho). Em (b) avaliamos o comportamento da probabilidade $\pi_{k,\text{periférico}}(t)$, ou seja, quando o caminhante quântico inicia seu movimento em um vértice periférico da rede. Em (c) avaliamos o comportamento da probabilidade $\pi_{k,j}(10)$. 61

- 4.16 Contornos da probabilidade de transição quântica, $\pi_{k,j}(t)$, sobre GSFN com $N = 100$ vértices. Para esta análise, mantivemos fixos os parâmetros de construção em: $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 6$ e $K_{\max} = 99$. Em (a) avaliamos o comportamento da probabilidade $\pi_{k,\text{centro}}(t)$, ou seja, quando o caminhante quântico inicia seu movimento no centro da rede (quadrado vermelho). Em (b) avaliamos o comportamento da probabilidade $\pi_{k,\text{periférico}}(t)$, ou seja, quando o caminhante quântico inicia seu movimento em um vértice periférico da rede. Em (c) avaliamos o comportamento da probabilidade $\pi_{k,j}(10)$. 63
- 4.17 Limite de longo tempo, χ , sobre GSFNs com $N = 1000$ vértices e $S = 1000$ realizações. Mantivemos $K_{\max} = 999$ e variamos o conjunto de parâmetros $(\gamma, K_{\min})$. Em (a) apresentamos os valores exatos de χ , enquanto que em (b) mostramos a diferença relativa $\frac{(\chi - \chi^*)}{\chi}$. Para $\chi = 0$ temos o máximo de eficiência e para $\chi = 1$ temos o máximo de ineficiência. 65
- 5.1 Esquema de uma rede multicamada livre de escala generalizada (MGSFN) com número total de vértices $N = 30$. Os parâmetros de construção são: $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 9$. Cada camada é formada por estruturas GSFNs. As camadas estão conectadas através das linhas sólidas em vermelho; linhas tracejadas indicam a ausência de uma ligação. 70
- A.1 Rede dendrímero puro ($p = 0.0$) com apenas uma geração ($G = 1$) e $N = 4$ vértices. 82
- A.2 Rede dendrímero modificado ($p \neq 0.0$) com apenas uma geração ($G = 1$) e $N = 4$ vértices. Uma nova ligação (I) é adicionada entre vértices de mesma geração através da ativação do parâmetro p 90
- A.3 Rede dendrímero modificado ($p \neq 0.0$) com apenas uma geração ($G = 1$) e $N = 4$ vértices. Uma nova ligação (II) é adicionada entre vértices de mesma geração através da ativação do parâmetro p 97
- A.4 Rede dendrímero modificado completo ($p = 1.0$) com apenas uma geração ($G = 1$) e $N = 4$ vértices. Todas as ligações possíveis são adicionadas entre vértices de mesma geração através da ativação do parâmetro p 105
- B.1 Capa da publicação impressa do Volume 51, de Dezembro de 2018, da Revista Científica Internacional *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. A figura presente na capa é a nossa Fig. 3.7 (c), contida no Capítulo 3 desta Tese. 115
- C.1 GSFN contendo $N = 100$ vértices. Sua construção foi realizada a partir dos parâmetros: $\gamma = 1.0$, $K_{\min} = 3$ e $K_{\max} = 99$ 117
- C.2 GSFN contendo $N = 100$ vértices. Sua construção foi realizada a partir dos parâmetros: $\gamma = 1.0$, $K_{\min} = 6$ e $K_{\max} = 99$ 118
- C.3 GSFN contendo $N = 100$ vértices. Sua construção foi realizada a partir dos parâmetros: $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 3$ e $K_{\max} = 99$ 119

C.4	GSFN contendo $N = 100$ vértices. Sua construção foi realizada a partir dos parâmetros: $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 10$	120
C.5	GSFN contendo $N = 100$ vértices. Sua construção foi realizada a partir dos parâmetros: $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 3$ e $K_{\max} = 10$	121
C.6	GSFN contendo $N = 100$ vértices. Sua construção foi realizada a partir dos parâmetros: $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 6$ e $K_{\max} = 10$	122
D.1	Recorte de tela referente ao resultado final da Chamada CNPq nº 22/2018 contendo os aprovados para a realização de Doutorado Sanduíche no Exterior (SWE).	123

LISTA DE ABREVEATURAS

RW - Caminhada aleatória

QW - Caminhada quântica

DTQW - Caminhada quântica de tempo discreto

CTQW - Caminhada quântica de tempo contínuo

CTRW - Caminhada aleatória de tempo contínuo

RMTD - Rede multicamada do tipo dendrímero

SFN - Rede livre de escala

GSFN - Rede livre de escala generalizada

B.-A. - Modelo de Barabási-Albert

SUMÁRIO

1	Introdução	1
2	Caminhadas quânticas de tempo contínuo sobre redes	7
2.1	Considerações gerais	7
2.2	Probabilidades clássica e quântica	10
2.3	Implementações físicas das CTQWs	13
3	Transporte quântico sobre redes multicamadas do tipo dendrímero	18
3.1	Introdução	18
3.2	Rede multicamada do tipo dendrímero (RMTD)	21
3.3	Espectro de autovalores para RMTDs completas	25
3.4	Probabilidades de transição sobre RMTDs completas	28
3.5	Transportes clássico e quântico sobre RMTDs completas	31
3.6	Espectro de autovalores para RMTDs incompletas	33
3.7	Limite de longo tempo para RMTDs incompletas	35
4	Transporte quântico sobre redes livres de escala	39
4.1	Introdução	39
4.2	Rede livre de escala generalizada (GSFN)	42
4.3	Espectro de autovalores para GSFNs	46
4.4	Transportes clássico e quântico sobre GSFNs	49
4.4.1	Transporte clássico	49
4.4.2	Transporte quântico	53
4.5	Probabilidades de transição sobre GSFNs	58
4.6	Limite de longo tempo para GSFNs	64

5	Conclusões e Perspectivas	67
	REFERÊNCIAS	71
A	Problema de autovalor e resultados exatos para dendrímeros modifica-	81
	dos	
A.1	Caso 1: dendrímero puro ($p = 0.0$)	81
A.2	Caso 2: dendrímero modificado ($p \neq 0.0$)	90
A.3	Caso 3: dendrímero modificado ($p \neq 0.0$)	97
A.4	Caso 4: dendrímero modificado completo ($p = 1.0$)	105
B	Capa da J. Phys. A: Math. Theor, Volume 51, 2018	115
C	Estruturas GSFNs com diferentes conjuntos de $(\gamma, K_{\min}, K_{\max})$	116
D	Doutorado Sanduíche Aprovado - Chamada CNPq nº 22/2018	123

Introdução

A natureza possui uma rica diversidade de sistemas nos quais os mecanismos de transporte exercem funções determinantes para sua compreensão. Atualmente, o transporte quântico é extremamente importante devido às suas aplicações diretas em estruturas como agregados moleculares [1–5], ciência dos polímeros [6], em grafos e algoritmos quânticos [7–9], além da computação e informação quânticas [10–12]. Nos últimos anos, algumas implementações experimentais foram desenvolvidas, entre elas destacamos experimentos realizados em cavidades de micro-ondas [13, 14], com átomos de Rydberg [15], além de fótons em guias de onda [16, 17], bem como circuitos ópticos [18] e redes de fibras ópticas [19].

Os mecanismos de transporte podem ser modelados através de diferentes técnicas. Uma abordagem pioneira em décadas passadas, porém ainda muito utilizada para descrever os mais variados sistemas, é a técnica das Caminhadas Aleatórias (RWs, sigla do inglês) [20–26]. Através dela, podemos investigar inúmeros conjuntos de sistemas complexos, dos quais citamos apenas alguns: reações de química cinética [21, 27], difusão de partículas [28], propagação epidêmica de doenças ou vírus [29, 30], entre outros. Para quantificarmos a eficiência de espalhamento do caminhante sobre as mais variadas estruturas, definimos algumas quantidades responsáveis por esta medida, as quais chamamos de medidas de eficiência. Essas últimas, são representadas por probabilidades e serão comentadas com mais detalhes no próximo Capítulo. Uma maneira de determinar a eficácia de propagação das RWs pode ser feita através da seguinte medida [21]: a probabilidade média de retorno, que considera o espalhamento do caminhante, a partir de um ponto (vértice) inicial da rede, e monitora seu retorno ao ponto de partida. A dinâmica das RWs pode ser resolvida utilizando dois modelos distintos: o modelo de tempo discreto e o modelo de tempo contínuo [20, 21].

Por outro lado, é possível a criação de um análogo quântico para as RWs: as caminhadas quânticas (QWs, sigla do inglês). Isto foi feito, primeiramente, por Aharonov *et al.* em 1993 [31]. Esta proposta inicial, trata as caminhadas como uma operação entre dois espaços (“moeda” e posição) que governam a dinâmica do sistema em passos de tempo discretos. Como alternativa, em 1998, Farhi e Gutmann propuseram uma nova abordagem para as QWs, a qual baseia-se nas cadeias de Markov de tempo contínuo [32].

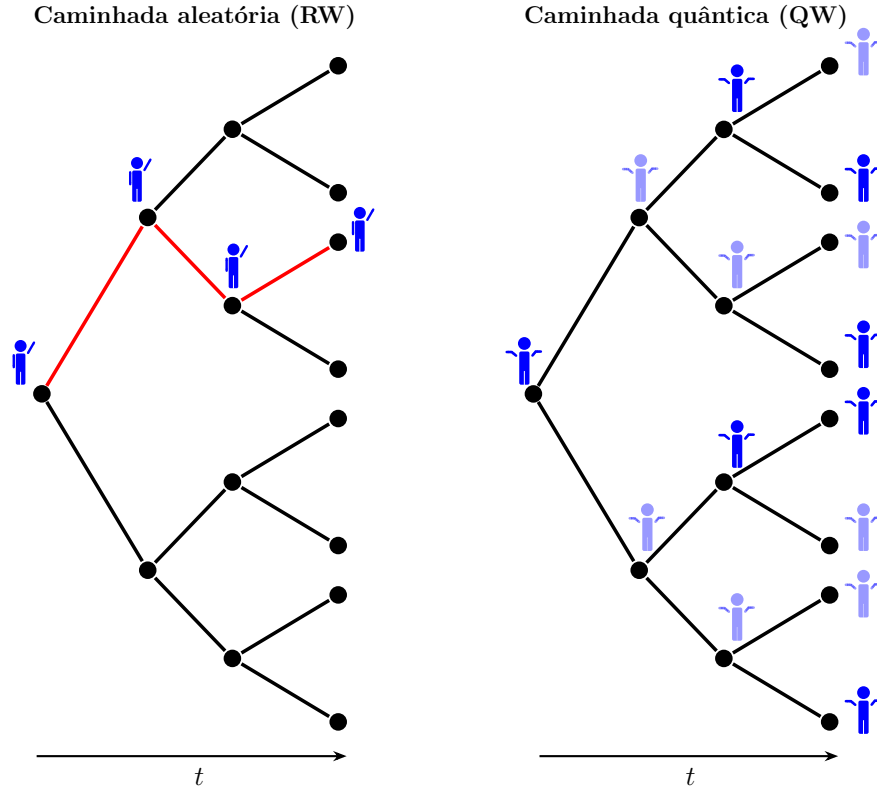


Figura 1.1 - Esquema ilustrativo comparando uma RW e uma QW. O caminhante quântico, devido seu comportamento ondulatório, pode estar em mais de um vértice simultaneamente.

Desta maneira, as QWs possuem dois modelos precursores: a caminhada quântica de tempo discreto (DTQW, sigla do inglês) e a caminhada quântica de tempo contínuo (CTQW, sigla do inglês). Não obstante, esses dois modelos não são completamente independentes; eles podem ser relacionados entre si, como mostrado em [33]. Vale a pena ressaltar a existência, na literatura, de outras alternativas de modelos para caminhadas quânticas [34,35]. Aqui, focamos no modelo CTQW, que resolve a dinâmica da caminhada quântica identificando o Hamiltoniano quântico com a matriz de transferência clássica, referente à caminhada aleatória de tempo contínuo (CTRW, sigla do inglês). Semelhante ao caso clássico, no modelo CTQW a matriz de transferência de qualquer rede não direcionada está associada à matriz de conectividade $\mathbf{A}$ [20]. Através desta abordagem, o transporte quântico é praticamente resolvido ao conhecermos o espectro completo de autovalores da matriz de conectividade. A Fig. 1.1 apresenta um esquema ilustrativo da diferença entre as RWs e QWs. Observamos que, para o caso clássico, a trajetória do caminhante é bem definida e sua localização pode ser determinada, com precisão, em qualquer instante de tempo. No entanto, para o caso quântico, notamos que há uma presença do caminhante em vários vértices da rede em um mesmo instante de tempo, tornando sua localização incerta. Esse comportamento é decorrente de sua natureza ondulatória, que produz o fenômeno de interferência.

Modelar a dinâmica quântica coerente de excitações, em sistemas complexos,

pode ser feito através das QWs [1–3, 36–42]. As QWs estão relacionadas, entre muitas outras áreas de pesquisa, aos grafos quânticos [43–48]. Na teoria dos grafos quânticos, adicionalmente, cada ligação possui propriedades que devem ser levadas em conta, como por exemplo: cada ligação deve ser direcionada, ter diferentes valores para a força de acoplamento ou possuir diferentes comprimentos. Outra área rica em aplicações das QWs é a da computação quântica, com a criação dos algoritmos quânticos [10, 49–55]. Os dois trabalhos seminais nesta área são os referentes ao algoritmo de busca de Grover [56] e o algoritmo de Shor [57]. Quando comparados com os algoritmos clássicos, os algoritmos quânticos fornecem uma busca em banco de dados, por exemplo, polinomial, ou até mesmo, exponencialmente melhor com o tempo. Aplicações destes algoritmos têm sido realizadas sobre estruturas complexas, tais como uma rede quadrada d -dimensional [58] e redes do tipo grafeno [59].

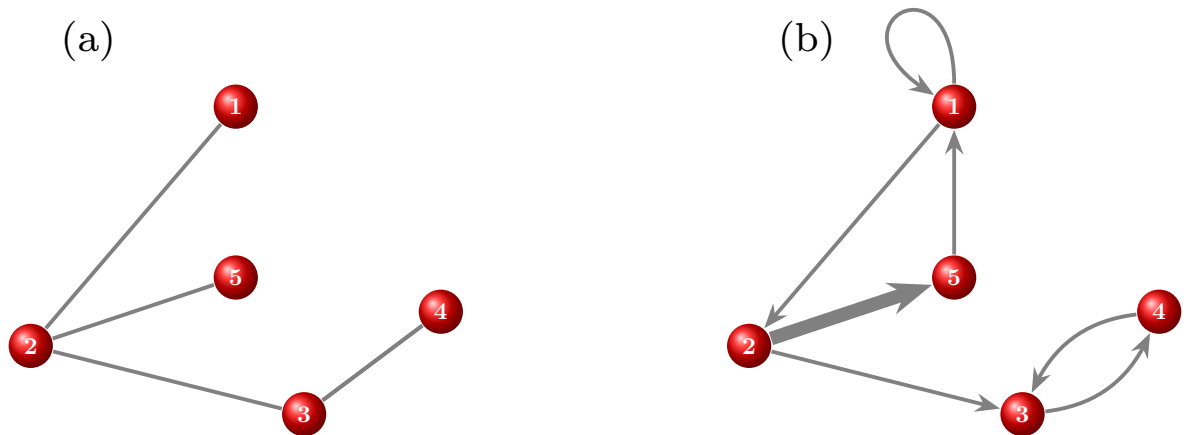


Figura 1.2 - Ilustração de rede contendo $N = 5$ vértices. Em (a) temos uma rede do tipo árvore, não direcionada, sem *loops*, sem autoligação e sem peso. Por outro lado, em (b), temos a mesma estrutura, todavia, contrária às características de (a).

No cenário atual de sistemas complexos, o conceito de redes complexas é aplicado em diversas áreas de pesquisas, como na física, química, sociologia, ecologia entre muitos outros; ver [60, 61] e referências internas. A maioria dessas aplicações pode ser estudada através de três modelos teóricos bem estabelecidos, a saber: as redes aleatórias, redes mundo-pequeno e redes livres de escala. Uma rede é uma coleção de N vértices (nós) conectados entre si através de E ligações (conexões). Neste trabalho, ao falarmos sobre redes complexas, estaremos nos referindo às redes do tipo árvore, ou seja, aquelas que possuem grandes ramificações. Além disso, nossas estruturas iniciais serão não direcionadas, sem laços fechados (*loops*), sem autoligações e não daremos pesos às conexões entre vértices [60, 61]. A Fig. 1.2 (a) mostra um esquema ilustrativo de como nossas redes serão construídas. No caso de redes do tipo dendrímico, *loops* surgirão devido à adição

de novas ligações. Ao lado, em (b), temos o exemplo de uma rede com características que são opostas em tudo ao que mencionamos acima.

Na primeira parte dos resultados desta Tese, estaremos concentrados em redes do tipo árvore conhecidas como dendrímeros [62–65]. Nosso objetivo será reduzir os efeitos de localização [62] das QWs sobre tais estruturas. Para isso, faremos uso da adição aleatória de novas ligações entre vértices de mesma geração, assim como da construção de redes chamadas de multicamadas [64–67]. Desta forma, aumentaremos a quantidade de segmentos lineares. Essa é uma alternativa possível de contornar a baixa eficiência do transporte quântico sobre redes [62, 68].

Identificadas em inúmeras redes reais, as redes livres de escala (SFNs, sigla do inglês), serão um dos nossos focos, sobre as quais avaliaremos o transporte quântico, presentes na segunda parte dos resultados desta Tese. Por conseguinte, somos levados a uma distribuição de grau do tipo lei de potência [69, 70]. Em nosso modelo de SFNs adicionamos algumas restrições à distribuição de grau, ao implementarmos os parâmetros de grau máximo e mínimo permitidos [71, 72]. Estamos interessados, principalmente, em monitorar a influência dos parâmetros acima mencionados sobre o transporte quântico. O expoente da lei de potência, γ , possibilita-nos a alteração na topologia de nossas redes. Entre os valores mais elevados e mais baixos de γ , teremos, respectivamente, predominância de segmentos lineares e *famílias* de redes do tipo estrelas.

O transporte quântico sobre redes que contêm segmentos com muitos ramos, como estrelas ou árvores de Cayley [62, 73], exibem fortes efeitos de localização, isto é, alta probabilidade de permanecer no nó inicial. Para contornar este problema, mecanismos que aumentem os segmentos lineares devem ser implementados, uma vez que estes elevam o transporte quântico, como mostrado na literatura [62]. Um destes mecanismos é o de empilhar cópias idênticas das redes umas sobre as outras [64], criando uma rede multicamada. Outro, é o aumento de segmentos lineares internos, adicionando ligações entre vértices de mesmo número de geração [65]. Nosso mecanismo, desenvolvido para SFNs, é o de restringir os graus máximo e mínimo permitidos para cada vértice de nossas estruturas.

Estrutura da Tese

No **Capítulo 2** introduzimos o leitor aos conceitos físicos e matemáticos das CTQWs e das CTRWs sobre redes. A partir da identificação do Hamiltoniano quântico com a matriz de conectividade da rede, encontramos algumas representações probabilísticas que irão formar a base das quantidades que serão calculadas nos resultados deste trabalho. Por momento, citamos as probabilidades de transição, as probabilidades médias de retorno, bem com o limite de longo tempo. Cada uma dessas medidas nos informa

as características do transporte quântico sobre diferentes topologias de redes complexas. Aproveitamos, ao final, para mostrar algumas implementação físicas das CTQWs.

No **Capítulo 3** iniciamos a apresentação dos nossos resultados. Esse Capítulo é uma versão expandida da segunda parte do nosso artigo científico publicado sob o título “*Quantum transport on modified multilayered spiderwebs*” [65]. Devo ressaltar que, a primeira parte deste artigo trata do transporte quântico, via CTQWs, apenas sobre uma única camada de rede do tipo dendrímero. Por estarem presentes em minha Dissertação de Mestrado [74], estes resultados foram omitidos nesta Tese de Doutorado. Desta forma, o Capítulo 3 tratará apenas do transporte quântico sobre estruturas multicamadas do tipo dendrímero. Para fins de comparação, também investigamos o transporte clássico. Essa abordagem, de empilhar uma camada sobre a outra, consiste em uma maneira de contornar os efeitos de localização da caminhada quântica. Como elementos adicionais, através de dois parâmetros de probabilidades, p e q , adicionamos ou retiramos ligações entre vértices de mesma geração e vértices vizinhos entre camadas. Descobrimos que a ausência de apenas uma *intra-* ou *interligação* torna o transporte quântico mais eficiente. Ou seja, quanto mais segmentos lineares abertos, melhor o caminhante quântico espalha-se sobre a rede.

No **Capítulo 4** apresentamos nossos resultados da análise do transporte quântico, via CTQWs, sobre uma nova topologia, as redes livres de escala generalizadas (GSFNs, sigla do inglês). Esse Capítulo é uma versão expandida do nosso artigo científico publicado sob o título “*Quantum transport on generalized scale-free networks*” [72]. Através de três parâmetros, $(\gamma, K_{\min}, K_{\max})$, controlamos o crescimento da rede. As diferentes combinações desses parâmetros resultam em estruturas que estão entre dois casos limites: uma rede estrela e uma cadeia linear. Nossa investigação estará concentrada em avaliar o transporte quântico após alterações realizadas nos valores de γ , $K_{\min}$ e $K_{\max}$, determinando, assim, aquelas em que há maior eficiência das caminhadas quânticas. Para fins de comparação, também investigamos o transporte clássico, via CTRWs. Utilizamos as GSFNs como estrutura subjacente para o estudo de um modelo epidemiológico. Através de indivíduos infectados, suscetíveis e removidos, analisamos o espalhamento de um vírus entre estes componentes da rede. Os resultados desta análise foram reunidos e publicados em artigo científico sob o título “*Mechanisms to decrease the diseases spreading on generalized scale-free networks*” [30]. Não apresentamos a discussão e nem os detalhes desses resultados nesta Tese.

No **Capítulo 5** estão presentes nossas Conclusões e Perspectivas. Não são conclusões finais pois ainda há pontos a serem investigados, relativos ao transporte quântico sobre as estruturas presentes nesta Tese. Alguns comentários relativos o transporte quântico sobre GSFNs multicamadas são feitos. Por fim, destacamos algumas **Referências**

utilizadas na preparação deste trabalho científico. Nos **Apêndices**, estão presentes alguns resultados exatos e analíticos para o limite de longo tempo sobre uma única camada de rede dendrímero modificado; estruturas do tipo GSFN construídas a partir de diferentes parâmetros; e algumas outras informações que destacam aspectos considerados relevantes desta pesquisa de Doutorado.

Caminhadas quânticas de tempo contínuo sobre redes

Neste trabalho, a dinâmica do transporte quântico será modelada através das CTQWs. Esta última, baseia-se na teoria das cadeias clássicas de Markov de tempo contínuo e está diretamente relacionada à matriz de conectividade das redes. Na busca pelo comportamento das caminhadas quânticas sobre redes, iremos investigar, também, a fim de comparação, o transporte clássico sobre nossas estruturas; este último, referente às CTRWs. O estudo do transporte quântico, sobre redes complexas, leva em consideração propriedades topológicas das estruturas para a determinação das medidas que quantificam a eficiência. Desta forma, devemos reservar uma atenção especial à conectividade de nossas estruturas.

2.1 Considerações gerais

Considere uma rede contendo N vértices (ou nós). Podemos especificar a forma como esses nós se conectam através de uma matriz quadrada, de $N \times N$ elementos, que chamaremos de matriz de conectividade $\mathbf{A}$. Essa matriz é resultado da diferença entre outras duas matrizes, chamadas de matriz de grau ($\mathbf{D}$) e matriz de adjacência ($\mathbf{A}_{adj}$). Ou seja:

$$\mathbf{A} = \mathbf{D} - \mathbf{A}_{adj}. \quad (2.1)$$

A matriz de adjacência representa a existência ou não de ligação entre os vértices da rede. Caso tenhamos uma ligação direta entre os vértices i e j , então $a_{ij} = 1$; caso contrário será igual a 0. Por outro lado, a matriz de grau nos indica a quantidade de ligações emergentes de um nó. Os elementos da diagonal principal representarão quantas conexões cada vértice faz com os outros (ou seja, seu *grau*). Já os elementos fora da diagonal principal serão todos iguais a 0. Em essência, a matriz de conectividade nos fornece informações sobre a topologia da rede, isto é, a forma de como estão dispostas as ligações entre os nós que compõe a estrutura. Na Fig. 2.1 (a) e (b), mostramos a representação das matrizes $\mathbf{A}_{adj}$ e $\mathbf{D}$, respectivamente, para uma rede não direcionada contendo cinco vértices. As ligações em azul estão diretamente relacionadas aos valores dentro de cada círculo azul presentes

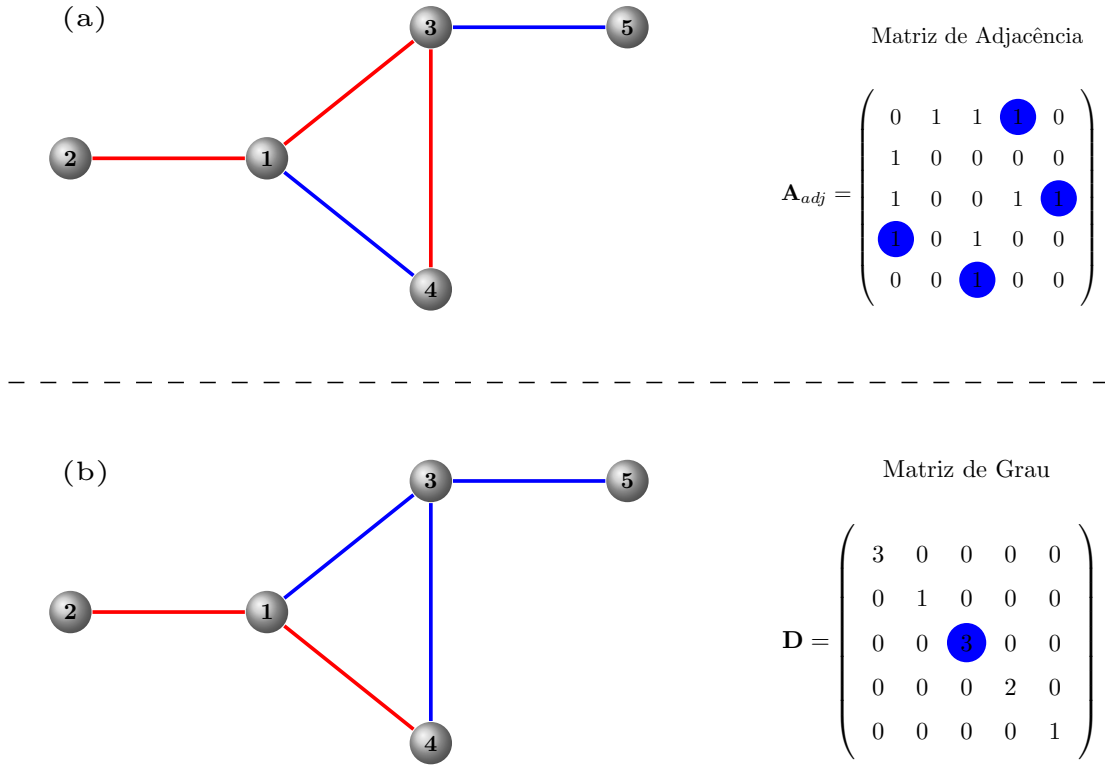


Figura 2.1 - Representação de uma rede não direcionada contendo um total de cinco vértices (nós). Em (a) mostramos a matriz de adjacência, $\mathbf{A}_{adj}$, associada a esta estrutura. Já em (b) temos a matriz de grau, $\mathbf{D}$, também associada à mesma rede. A diferença entre essas duas matrizes dará como resultado uma nova matriz chamada de matriz de conectividade, $\mathbf{A}$ (Eq. 2.2).

nas matrizes. Para a rede em questão, podemos escrever os elementos da matriz de conectividade como sendo:

$$A_{ij} = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 3 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

De maneira geral, seus elementos são definidos da seguinte forma:

$$\mathbf{A} = (A_{ij}) = \begin{cases} -1, & \text{se } i \neq j \text{ e há uma ligação direta entre } i \text{ e } j; \\ 0, & \text{se } i \neq j \text{ e não há ligação direta entre } i \text{ e } j; \\ f_i, & \text{se } i = j, \end{cases} \quad (2.3)$$

onde f_i corresponde ao grau do vértice i , ou seja, representa a quantidade de ligações emergentes de i . A matriz de conectividade possui as seguintes propriedades:

- a. $\mathbf{A}$ é real e simétrica;
- b. seus autovalores λ_n são todos reais e $\lambda_n \geq 0$;
- c. $\mathbf{A}$ possui um único autovalor nulo ($\lambda_{\min} = 0$).

A cada vértice k , pertencente à rede, está associado um estado físico denotado por $|k\rangle$. Uma vez que, a rede é uma coleção de N vértices, esses estados formam uma base $\{|k\rangle\}$ (com $k = 1, \dots, N$) que é ortonormal e completa, isto é, $\langle k|j\rangle = \delta_{j,k}$, sendo $\delta_{j,k} = 1$ para $j = k$ e 0 caso contrário, e $\sum_k |k\rangle\langle k| = \mathbf{1}$. De maneira geral, podemos representar cada estado como um vetor que, por exemplo, são dados através de:

$$|1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, |2\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \dots, |N\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (2.4)$$

A dinâmica incoerente do processo de transporte do caminhante sobre a rede é dada pela CTRW. Trata-se de um processo de transferência governado por uma matriz de transferência $\mathbf{T}$, constituída por taxas de transição por unidade de tempo. Tais taxas podem ser representadas por ϵ e, no caso mais simples, em que todas elas são iguais para todas as ligações da rede, assumimos que $\epsilon \equiv 1$. Desta forma, associamos a matriz de transferência $\mathbf{T}$ com a matriz de conectividade $\mathbf{A}$ através da relação $\mathbf{T} = -\mathbf{A}$. Ao assumirmos que uma CTRW corresponde a um processo Markoviano de tempo contínuo, para que um caminhante desloque-se do vértice k ao vértice j , dado um tempo t , sua dinâmica obedecerá a seguinte equação mestra [20, 21, 62]

$$\frac{d}{dt}p_{j,k}(t) = \sum_l T_{j,l}p_{l,k}(t), \quad (2.5)$$

onde $T_{j,l}$ representa a taxa de transição entre os vértices l e j , e $p_{j,k}(t)$ denota a probabilidade de transição para o caminhante ir do estado $|k\rangle$ ao estado $|j\rangle$ no tempo t . Em nosso modelo de caminhadas, como relatado anteriormente, relacionamos a matriz de transferência clássica à matriz de conectividade da seguinte maneira $\mathbf{T} = -\mathbf{A}$. Ou seja, ao resolvermos a Eq. 2.5, encontramos o seguinte resultado [20, 21]

$$p_{j,k}(t) = \langle j|e^{\mathbf{T}t}|k\rangle = \sum_{n=1}^N e^{-\lambda_n t} \langle j|\Phi_n\rangle \langle \Phi_n|k\rangle, \quad (2.6)$$

onde λ_n e $|\Phi_n\rangle$ (com $n = 1, \dots, N$) representam os autovalores e autoestados, respectivamente, da matriz de conectividade. Na Eq. 2.6 podemos notar claramente que a probabilidade de transição, para um caminhante clássico, depende da conectividade da

rede, isto é, podemos associar a eficiência do transporte clássico à topologia da rede. Não obstante, a forma como os vértices estão ligados, a sua quantidade na composição das estruturas, bem como o número de ligações, afetam diretamente a maneira como o caminhante irá se propagar através da rede.

Para avaliarmos o transporte quântico, levamos em conta a ideia desenvolvida por Fahri e Gutmann [32] que propuseram a identificação da matriz de transferência $\mathbf{T}$ como sendo o análogo clássico do Hamiltoniano quântico $\mathbf{H}$. Como mostrado em Ref. [62], podemos relacionar estes dois últimos elementos da seguinte maneira: $\mathbf{H} = -\mathbf{T}$. Feito isto, concluímos que a relação da matriz de conectividade com o Hamiltoniano quântico, será dada por $\mathbf{H} = \mathbf{A}$. A dinâmica quântica é formulada no espaço de Hilbert N -dimensional, para o qual assumimos que todos os estados $|j\rangle$ são ortonormais e completos. Ela será determinada por um Hamiltoniano quântico e deverá obedecer a equação de Schrödinger. Desta forma, o caminhante quântico terá amplitudes de transição [62], $\alpha_{j,k}(t)$, dadas por:

$$\frac{d}{dt}\alpha_{j,k}(t) = -i \sum_l H_{j,l} \alpha_{l,k}(t). \quad (2.7)$$

De maneira similar ao caso clássico, as CTQWs terão uma probabilidade quântica de transição dada por $\pi_{j,k}(t)$. A correspondência entre $\pi_{j,k}(t)$ e $\alpha_{j,k}(t)$ é representada por $\pi_{j,k}(t) = |\alpha_{j,k}(t)|^2$. Ao resolvermos a Eq. 2.7, de forma análoga ao que foi desenvolvido para a Eq. 2.5, encontramos:

$$\alpha_{j,k}(t) = \langle j | e^{-i\mathbf{H}t} | k \rangle, \quad (2.8)$$

de onde podemos concluir a seguinte expressão para a probabilidade de transição quântica:

$$\pi_{j,k}(t) = \left| \sum_{n=1}^N e^{-i\lambda_n t} \langle j | \Phi_n \rangle \langle \Phi_n | k \rangle \right|^2. \quad (2.9)$$

Novamente, notamos que a eficiência do transporte, neste caso, para o caminhante quântico, está diretamente relacionada à conectividade da rede, uma vez que $\pi_{j,k}(t)$ depende dos autovalores e autoestados da matriz $\mathbf{A}$. Na sequência, iremos definir algumas quantidades que serão importantes em nosso trabalho, pois irão determinar a eficiência ou a ineficiência dos transportes clássico e quântico.

2.2 Probabilidades clássica e quântica

Na seção anterior apresentamos a maneira pela qual podemos determinar a probabilidade para que um caminhante, seja ele clássico ou quântico, se desloque de um vértice a outro de uma rede, em determinado tempo t . Agora, estamos interessados em definir quantidades que possam medir a eficiência da caminhada. Consideramos eficiente a rede que, sobre ela contendo uma excitação, esta última espalha-se rapidamente por

todos os seus vértices, de maneira que a excitação visita, em tempos relativamente curtos, cada um dos vértices da rede [65, 74]. As probabilidades apresentadas abaixo serão nossas quantidades que irão indicar a eficiência ou não das caminhadas de tempo contínuo sobre nossas estruturas. Desta forma, iremos focar na análise do comportamento das probabilidades de transição, clássicas e quânticas, das probabilidades médias de retorno, clássicas e quânticas, assim como na análise do limite quântico de longo tempo. Uma vez que estas quantidades, abaixo apresentadas, são calculadas diretamente dos autovalores da matriz $\mathbf{A}$, também faremos uma análise do espectro de autovalores.

Uma forma de quantificar a eficiência de uma excitação, que desloca-se sobre os vértices de uma rede, é feita através da probabilidade média de retorno. Esta probabilidade nos indica a permanência ou o retorno de uma excitação ao seu vértice de origem k , transcorrido um certo intervalo de tempo t , tomada como média sobre todos os nós [65]. Assim, podemos definir a probabilidade média de retorno para uma CTRW, da seguinte maneira:

$$\bar{p}(t) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N p_{k,k}(t). \quad (2.10)$$

E, de maneira similar, para uma CTQW, teremos:

$$\bar{\pi}(t) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \pi_{k,k}(t). \quad (2.11)$$

Ao utilizarmos o resultado obtido para a probabilidade de transição clássica, Eq. 2.6, podemos reescrever a Eq. 2.10, como:

$$\bar{p}(t) = \frac{1}{N} \sum_n e^{-\lambda_n t} \langle \Phi_n | \left\{ \sum_{k=1}^N |k\rangle \langle k| \right\} | \Phi_n \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{-\lambda_n t}, \quad (2.12)$$

onde notamos que a probabilidade média de retorno clássica depende apenas dos autovalores λ_n da matriz de conectividade $\mathbf{A}$. No entanto, para o caso quântico não obtemos uma dependência da probabilidade média de retorno apenas com os autovalores da matriz $\mathbf{A}$, mas também com os autoestados $|\Phi_n\rangle$. Neste trabalho, ao avaliarmos a eficiência do transporte quântico sobre nossas estruturas, o algoritmo desenvolvido calculará $\bar{\pi}(t)$ presente em Eq. 2.11 e Eq. 2.9. Conquanto, através da desigualdade de Cauchy-Schwarz é possível obtermos um limite inferior para $\bar{\pi}(t)$, o qual dependerá apenas dos autovalores da matriz de conectividade, isto é, independente dos autoestados [62, 64, 65]. Isto posto,

teremos:

$$\begin{aligned}\bar{\pi}(t) &= \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N |\alpha_{k,k}(t)|^2 \geq \left| \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \alpha_{k,k}(t) \right|^2 = |\bar{\alpha}(t)|^2 \\ &= \left| \frac{1}{N} \sum_n e^{-i\lambda_n t} \right|^2.\end{aligned}\quad (2.13)$$

Tanto $\bar{p}(t)$ quanto $\bar{\pi}(t)$ nos fornecem a maneira como o caminhante, seja ele clássico ou quântico, irá se propagar sobre uma rede qualquer. Para um rápido decaimento de $\bar{p}(t)$ ou $\bar{\pi}(t)$ isto nos indicará uma rápida propagação entre os vértices da estrutura. Por outro lado, um lento decaimento destas duas quantidades, fornecerá indícios de lento espalhamento da excitação.

A investigação para limites de longo tempo, relativa a $\bar{p}(t)$ e $\bar{\pi}(t)$, mostram que para o transporte clássico, a Eq. 2.12 tende ao valor de equipartição dado por $\frac{1}{N}$. Porém, em contraste com o caso clássico, para o transporte quântico, $\bar{\pi}(t)$ e $|\bar{\alpha}(t)|^2$ não decaem para um valor constante, ao contrário, estas probabilidades oscilam em torno de um valor médio. Ou seja, a análise do comportamento do valor médio, do limite de longo tempo, consistirá em uma nova forma de quantificar a eficiência do transporte quântico sobre nossas estruturas. Podemos definir esta média de longo tempo, tanto para o valor exato da probabilidade média de retorno, quanto para seu limite inferior, da seguinte maneira:

$$\chi \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t |\bar{\alpha}(t')|^2 dt' \leq \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \bar{\pi}(t') dt' \equiv \bar{\chi}.\quad (2.14)$$

As médias presentes na Eq. 2.14 podem ser reescritas em termos da densidade de autovalores $\rho(\lambda)$ (ou densidade espectral). Esta última, contém informações relacionadas à topologia da rede, isto é, nos dão características gerais da forma como estão dispostas as ligações entre os vértices de uma estrutura. Ao conhecermos $\rho(\lambda)$, escrevemos [74]

$$\chi = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \left| \frac{1}{N} \sum_n e^{-i\lambda_n t} \right|^2 dt' = \sum_{\lambda} \rho^2(\lambda),\quad (2.15)$$

onde $\rho(\lambda) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \delta(\lambda - \lambda_n)$. Além disso, ao considerarmos λ^* , o autovalor mais degenerado, podemos aproximar χ ; desta forma, teremos [75]:

$$\chi = \sum_{\lambda} \rho^2(\lambda) \geq \rho^2(\lambda^*) + \frac{1}{N} [1 - \rho(\lambda^*)] \equiv \chi^*.\quad (2.16)$$

O transporte quântico possuirá máxima eficiência quando $\chi = 0$, e será completamente ineficiente quando $\chi = 1$. No que diz respeito à sua aproximação, χ^* produz bons resultados para redes do tipo estrela ou cadeias lineares. Por exemplo, para estrelas com $N - 1$

braços (ligações), temos a presença de um único autovalor altamente degenerado, dado por $\lambda^* = 1$, que nos permite estabelecer o seguinte resultado $\chi = \chi^* = \frac{[2+(N-2)^2]}{N^2}$. Além do mais, podemos encontrar, para cadeias lineares, que $\chi = \chi^* = \frac{1}{N}$, uma vez que todos os autovalores são não degenerados. Em relação aos dois resultados anteriores, podemos então constatar que: $\chi_{N \rightarrow \infty} = 1$ para estrelas e $\chi_{N \rightarrow \infty} = 0$ para longas cadeias lineares. Isto posto, concluímos que o transporte quântico será mais eficiente quanto mais segmentos lineares existirem, sendo os exemplos precedentes casos limites desta eficiência. No mais, ressaltamos que o valor de χ^* não fornece uma boa aproximação para outros tipos diferentes de estruturas, como mostramos em [65].

Devemos ressaltar que, além das probabilidades explicadas acima, existem outras maneiras de investigar do transporte quântico sobre redes. Neste trabalho, não focaremos nessas alternativas, apenas deixaremos para o leitor como fonte de possíveis novos trabalhos e estudos. Inicialmente, podemos citar o tempo médio de batida (“*average hitting time*”) [76], que é o tempo esperado para um caminhante alcançar um determinado vértice, previamente identificado, pela primeira vez. Uma outra quantidade é a probabilidade de retorno como uma função da primeira probabilidade de chegada (“*first arrival probability*”) da caminhada [77]. Neste artigo, os autores mostraram que para caminhadas quânticas de tempo discreto, o tempo de espera para a primeira detecção do caminhante, pode ser tanto um múltiplo inteiro do tempo de amostragem quanto um número infinito. Eles concluíram que esses números inteiros estavam relacionados com a função Schur da medida subjacente. Lembramos que, as noções acima de recorrência (ou primeira detecção) representam uma extensão do conceito do número de Pólya de uma caminhada aleatória clássica às caminhadas quânticas [78], estando dentro dessas caminhadas o nosso próprio modelo de estudo, ou seja, a CTQW [79]. Por fim, uma outra maneira de estudar a eficiência do transporte quântico pode ser realizada através da probabilidade de sobrevivência (“*survival probability*”). Utilizando um modelo de caminhada via ligação forte (*tight-binding*), esta última quantidade pode ser considerada [80].

2.3 Implementações físicas das CTQWs

Numerosas propostas têm sido apresentadas para a implementação física das caminhadas quânticas. Seja na física do estado sólido, ou dentro da óptica física, esquemas experimentais têm sido criados para verificação de suas características e propriedades. Esses trabalhos possibilitam uma interação, via interferência quântica, que pode ser utilizada na compreensão de sistemas químicos, biológicos e no desenvolvimento da computação quântica [51]. Nesta seção, nos restringimos à exposição de apenas duas implementações físicas da caminhada quântica de tempo contínuo. Muito têm sido feito para implementar a física quântica nos mais diferentes sistemas físicos. Um dos mais proeminentes sistemas

para análise está relacionado à caminhada quântica com fótons. Inicialmente, foi estudada a caminhada com apenas um único fóton, todavia, atualmente existem sistemas que trabalham com vários fótons correlacionados [81–84]. Para tais sistemas, o maior desafio consiste em trabalhar com baixas decoerências, afim de preservar os efeitos não clássicos.

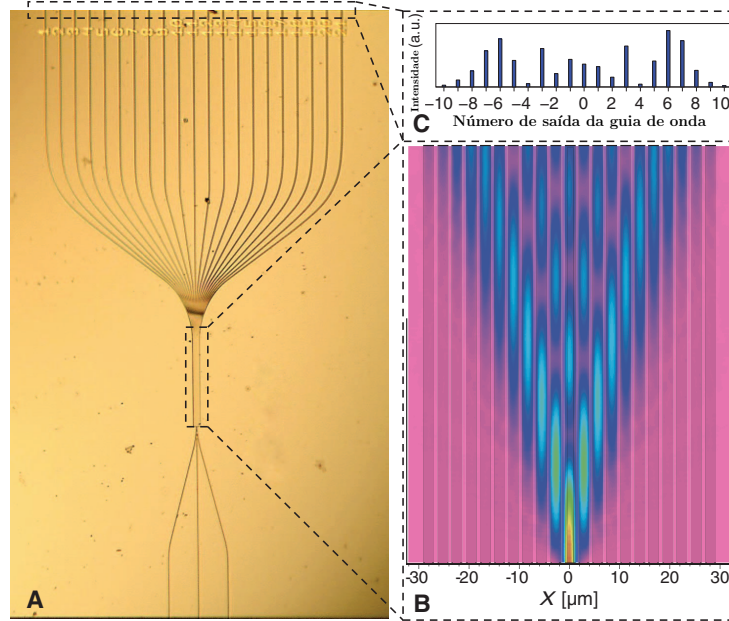


Figura 2.2 - Esquema representativo de uma matriz de guia de onda para realização de CTQWs entre fótons correlacionados. Em (A) estão as 21 guias de onda. Em (B) é apresentado o resultado de uma simulação. Já em (C) está o padrão de saída da propagação da luz laser através das guias.

Fonte: Adaptado de Peruzzo *et al.* (2010).

Na Fig. 2.2 apresentamos um esquema experimental, em uma dimensão, de guias de onda utilizado para a implementação de CTQWs entre fótons correlacionados [85]. A Fig. 2.2 (A) mostra a estrutura (“chip”) em que são construídas 21 guias de onda. Trata-se do oxinitreto de silício, que permite uma refração muito maior do que materiais do tipo sílica sobre silício. Com esse tipo de material, há então, um meio prático para a realização de guias de onda acopladas que podem ser conectadas a fribas ópticas. Na Fig. 2.2 (B) há uma simulação computacional que reproduz a propagação da luz laser pelas guias de onda. Claramente, podemos observar a interferência entre fótons presentes nas guias, e o padrão da caminhada quântica ao se espalhar por várias guias no mesmo instante de tempo. Por fim, na Fig. 2.2 (C) estão representadas as intensidades de interferências dos fótons correlacionados nas saídas das 21 guias de onda. Como sugere a simulação, maiores intensidades de probabilidades ocorrem para guias mais afastadas do centro da estrutura. Para mais detalhes técnicos e informações experimentais, veja a Ref. [85] e suas referências internas.

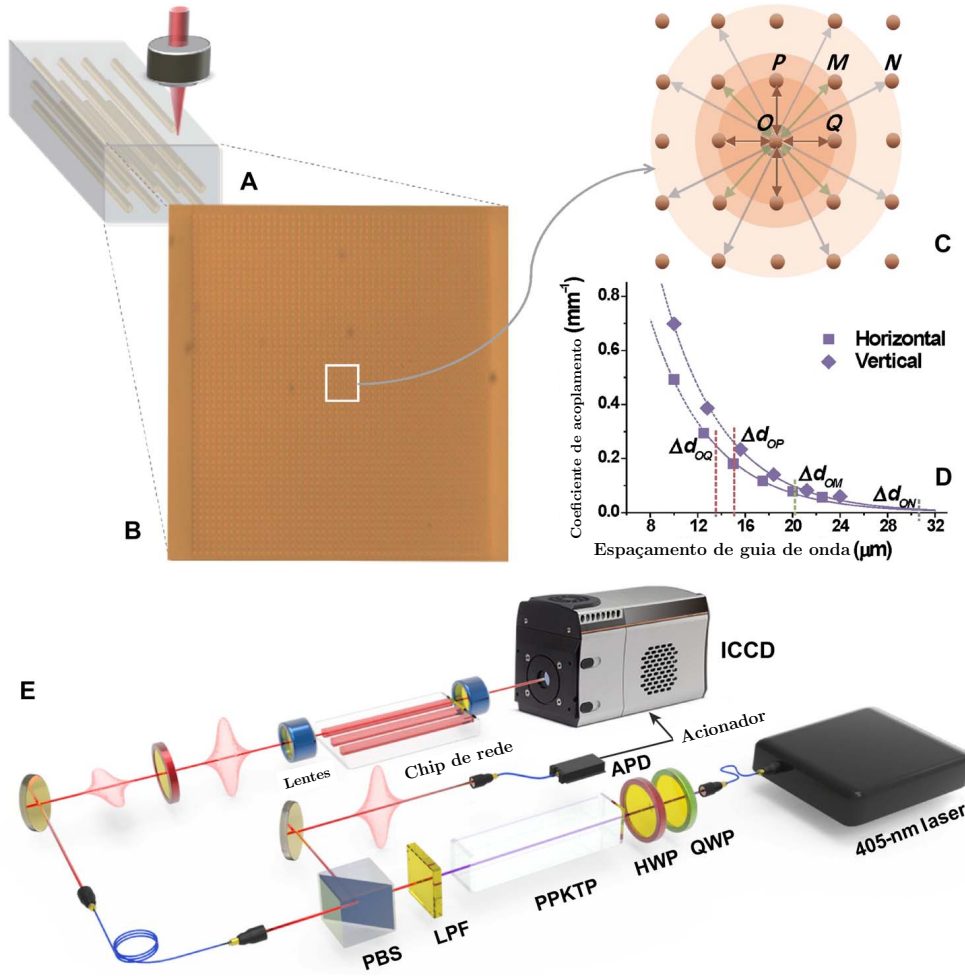


Figura 2.3 - Esquema experimental para a realização das CTQWs em duas dimensões via guias de onda. Em (A) temos a gravação a laser das guias de onda; (B) representa um corte transversal da disposição das guias; (C) indica o comprimento de separação dentre cada uma das guias; (D) a relação entre o coeficiente de acoplamento das ondas e o espaçamento entre as ondas; (E) todos os equipamentos técnicos utilizados para a realização da experiência.

Fonte: Adaptado de Tang *et al.* (2018).

Atualmente, um dos maiores desafios da implementação física das caminhadas quânticas refere-se à dimensão em que são realizadas. Novamente, através das guias de ondas, Tang *et al.* [86] demonstraram a realização das CTQWs em duas dimensões. A propagação da caminhada quântica através das guias de onda, envolvem funções de onda que satisfazem

$$|\Psi(z)\rangle = e^{-iHz}|\Psi(0)\rangle, \quad (2.17)$$

onde $|\Psi(z)\rangle = \sum_j a_j(z)|j\rangle$ e $|a_j(z)|^2 = |\langle j|\Psi(z)|j\rangle|^2 = P_j(z)$. Na Fig. 2.3 temos um esquema experimental utilizado para a realização da caminhada quântica contínua em duas dimensões. Três letras importantes são a (A), (B) e (C) da Fig. 2.3. Em (A) é mostrado a maneira como as guias de onda são criadas dentro de uma estrutura de vidro de borossilicato. Este processo é chamado de gravação direta a laser (“*direct laser-*

writing”).

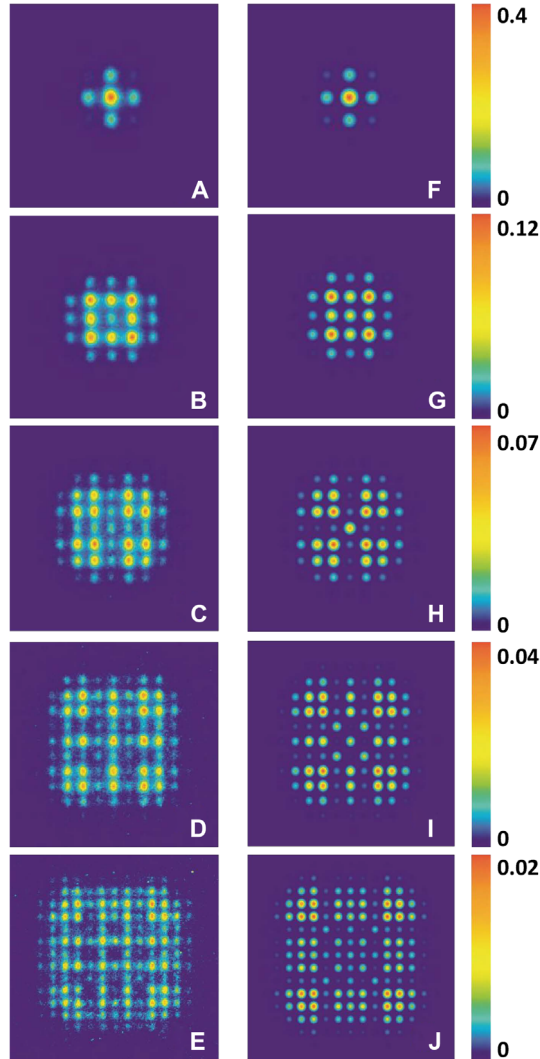


Figura 2.4 - Intensidade de probabilidade para diferentes comprimentos de propagação da CTQW em duas dimensões. As Figs de (A)-(E) são resultados experimentais, enquanto que as Figs de (F)-(J) mostram simulações teóricas.

Fonte: Adaptado de Tang *et al.* (2018).

Em (B) temos um corte transversal de como são dispostas cada uma das guias de onda. A influência que cada guia de onda terá, umas nas outras, está retratada em (C), onde são apresentados os espaçamentos entre guias na vertical e horizontal. Quanto mais distante, menor a interação. As figuras (D) e (E) mostram, respectivamente, os diferentes coeficientes de acoplamento entre as guias de onda e todo o aparato experimental para a realização da implementação física. Assim, é possível observar, na Fig. 2.4 as intensidades de probabilidades da caminhada quântica sobre guias de ondas em duas dimensões. Nas Figs. de (A)-(E) são mostrados resultados experimentais, enquanto que nas Figs. de (F)-(J) são mostradas simulações teóricas. Notamos que, o caminhante quântico encontra-se

com maior probabilidade na guia inicial, e dado os coeficientes de acoplamentos, ele se espalha por outras guias. Temos aqui, uma boa confirmação entre resultados experimentais e teóricos. Para mais detalhes técnicos e informações experimentais, veja a Ref. [86] e suas referências internas.

Transporte quântico sobre redes multicamadas do tipo dendrímero

Em linhas gerais, neste capítulo serão apresentados os resultados da investigação do transporte quântico, via CTQWs, sobre redes multicamadas do tipo dendrímero (RMTDs) [65]. O processo de construção, de tais estruturas, consiste em colocar várias redes dendrímero, de funcionalidade $f_D = 3$, umas sobre as outras, conectando-as através de ligações entre vértices de camadas vizinhas. A partir de um parâmetro de probabilidade p , adicionamos, entre vértices de mesma geração da rede dendrímero, novas ligações (*intraconexões*). Consideramos dois casos extremos: $p = 0.0$, representando um dendrímero puro (árvore de Cayley pura) e $p = 1.0$, consistindo em um dendrímero modificado *completo*. Por outro lado, as ligações entre camadas (*interconexões*) serão removidas através da probabilidade $1 - q$. Nossos resultados indicam um melhor transporte quântico sobre RMTDs quando temos $p \approx 0.9$ e $q \approx 0.9$, ou seja, para redes com ausência de uma *intra-* ou *interconexão*.

3.1 Introdução

O termo dendrímero tem origem na junção de duas palavras gregas: “*dendron*”, que significa *árvore* e “*meros*” cujo significado nos remete à *parte* [63, 87, 88]. Portanto, ao investigarmos o transporte quântico sobre estruturas do tipo dendrímero, estamos nos referindo a tipos de redes ramificadas. Inicialmente, esta nomenclatura foi feita por Vögtle *et al.* [89], em 1978, substituindo assim os termos “*arborols*” e “*cascade molecules*”, na época utilizados para a descrição de moléculas que possuem grandes ramificações em sua composição. Atualmente, os termos anteriormente citados, ainda são válidos, todavia o nome dendrímero é mais comum. A natureza possui uma infinidade de estruturas que apresentam esse caráter de ramificação. Em diversos sistemas notamos o crescimento de uma estrutura subjacente que, a partir de uma origem, desenvolve-se de maneira regular e hiper-ramificada. Por exemplo, em tecnologia, arte, crescimento de uma árvore, criação de uma teia de aranha, vasos sanguíneos, para citar apenas alguns, todos possuem uma característica dendrítica [63]. Dendrímeros também podem ser utilizados como alternativa na representação de uma estrutura fractal. Na Fig. 3.1 temos um triângulo de Sierpinski

que representa uma estrutura fractal. A partir dos pontos médios dos lados do triângulo equilátero inicial ($G = 1$), construímos um novo triângulo equilátero, menor que o original, representado pelas linhas em verde. Retiramos esse novo triângulo e então temos a geração $G = 2$. Esse processo pode ser iterado até a geração desejada. Observe que, a cada nova retirada de um triângulo podemos associar ao centro do triângulo removido um vértice. E a partir daí, podemos ligar cada um desses centros. A figura, interna ao triângulo de Sierpinski, presente em $G = 4$, é uma estrutura do tipo dendrímero. Seu crescimento segue juntamente com o aumento das gerações do fractal de Sierpinski.

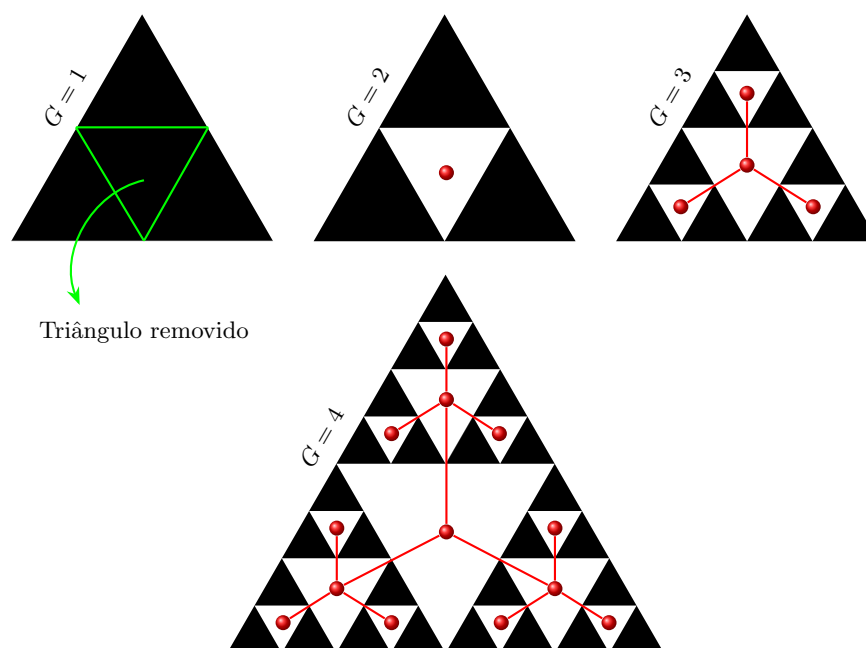


Figura 3.1 - Representação de um triângulo de Sierpinski com número de geração igual a $G = 4$. A cada centro de um triângulo equilátero removido, associamos um vértice. Ao ligarmos os vértices, uns aos outros, a estrutura interna resultante é um dendrímero.

Fonte: Adaptado de Vögtle *et al.* (2009).

Estruturas constituídas por dendrímeros possuem uma ampla aplicabilidade. Como exemplo, citamos as suas diversas aplicações dentro da biomedicina. Através da forma, do tamanho e de sua longa ramificação, os dendrímeros são estruturas ideais para a entrega de drogas dentro do corpo humano, assim como, para a transfecção genética, ou seja, a modificação genética das células [90–92]. A construção de um dendrímero pode iniciar a partir de um centro (“core”) ou através das periferias da estrutura. Um polímero acessível comercialmente e de fácil sintetização é a poliamidoamina (PAMAN), construída a partir de um centro. Na Fig. 4.1 temos a imagem do processo de construção de uma arquitetura PAMAN. O crescimento ocorre a partir de um centro e, como podemos observar, o diâmetro da estrutura cresce de maneira linear, em contraste com os componentes periféricos (“surface groups”) que crescem de maneira exponencial. Dentre os diversos trabalhos

relacionados à dendrímeros, há também estudos teóricos e experimentais que investigam fenômenos de transporte em suas estruturas [93]. Alguns destes sistemas apresentam características que podem ser modeladas através de transportes incoerentes (clássico), enquanto outros através de transportes coerentes (quântico); ver Ref. [93] e referências internas. Desta forma, modelar o transporte sobre dendrímeros é assumir seus componentes como estados em que há uma excitação, com ligações conectando-os. Neste capítulo, fazemos exatamente essa representação para estruturas do tipo dendrímero.

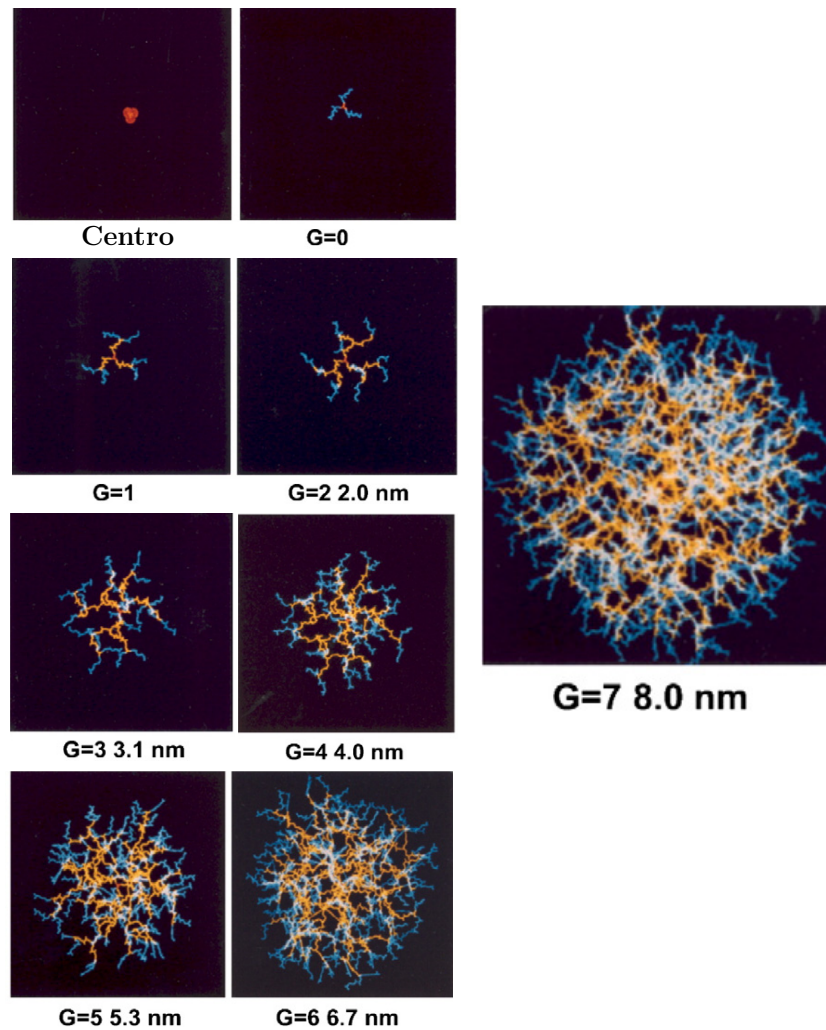


Figura 3.2 - A representação do crescimento, até geração $G = 7$, da poliamidoamina (PAMAN). Trata-se de um exemplo marcante da característica ramificada de estruturas do tipo dendrímero. Enquanto o diâmetro aumenta de maneira linear, os componentes periféricos crescem de forma exponencial.

Fonte: Adaptado de Svenson & Tomalia (2012).

Nos últimos anos, a teoria de redes complexas tem sido uma ferramenta importante na descrição dos mais diferentes sistemas físicos, sociais, biológicos ou financeiros. Todavia, recentemente essa teoria vem sendo ampliada para sistemas que apresentam diferentes formas de conexão e interação, estando mais próxima de uma descrição real dos

fenômenos. Esse novo modelo de redes complexas recebeu o nome de *redes multicamadas*, o que deu início a uma quantidade enorme de trabalhos científicos [94–100]. Essas novas estruturas de redes complexas são compostas por camadas colocadas umas sobre as outras. Para uma análise mais clara, porém não trivial, assumi-se que cada camada contém o mesmo número de nós. Agora, devemos fazer a identificação de dois tipos de ligações entre os vértices da rede: as *intraconexões*, que são ligações entre vértices de mesma camada, e as *interconexões*, que são ligações entre vértices de diferentes camadas [66, 67]. Através dessa nova forma de representação das redes complexas, tentamos melhorar o transporte quântico sobre redes do tipo dendrímero. Sabemos que para árvores ramificadas, como por exemplo, árvores de Cayley ou estrelas [62], o transporte quântico apresenta baixa eficiência. Ou seja, a caminhada quântica tende a permanecer em apenas algumas regiões da rede, o que caracteriza fortes efeitos de localização. Com a finalidade de contornar este problema, utilizamos redes multicamadas, construídas a partir de dendrímeros, para melhorar a eficiência do caminhante quântico ao se deslocar sobre os vértices da rede.

Para melhorar a eficiência do transporte quântico, adicionamos, entre vértices de mesma geração da rede dendrímero, uma nova ligação através da probabilidade p . Os casos limites correspondentes são os seguintes: para $p = 0.0$ temos um dendrímero *puro*, enquanto que para $p = 1.0$ temos um dendrímero modificado *completo*. Além disso, investigamos o caso em que retiramos, aleatoriamente, através da probabilidade $1 - q$, ligações que conectam vértices de camadas distintas. Nosso trabalho, teórico e numérico, fornece um estudo minucioso do transporte quântico produzido pelas diferentes escolhas dos parâmetros p e q . Na próxima seção, fornecemos a explicação completa e detalhada do processo de construção das nossas RMTDs.

3.2 Rede multicamada do tipo dendrímero (RMTD)

Nesta seção apresentaremos os passos para construção da rede multicamada do tipo dendrímero (RMTD). Este processo de construção pode ser dividido em duas partes distintas. Primeiramente, definimos como topologia inicial a rede dendrímero (ou árvore de Cayley) com funcionalidade $f_D = 3$ e número de geração G . Por funcionalidade estamos nos referindo à quantidade de ligações emergentes de cada vértice (ou *grau* do vértice). Em seguida, após a criação de cada rede dendrímero, empilharemos umas sobre as outras de maneira a construir uma rede com múltiplas camadas, ou seja, uma *rede multicamada do tipo dendrímero*. Uma rede multicamada é uma sequência de L camadas, construídas umas sobre as outras, com seus vértices interconectados através de ligações, nó para nó, entre camadas vizinhas mais próximas.

Na Fig. 3.3 temos o processo de construção de uma rede dendrímero: em (a) para $p = 0.0$ e $G = 2$ e em (b) para $p \neq 0.0$ e $G = 2$. Iniciamos com os passos apresentados e-

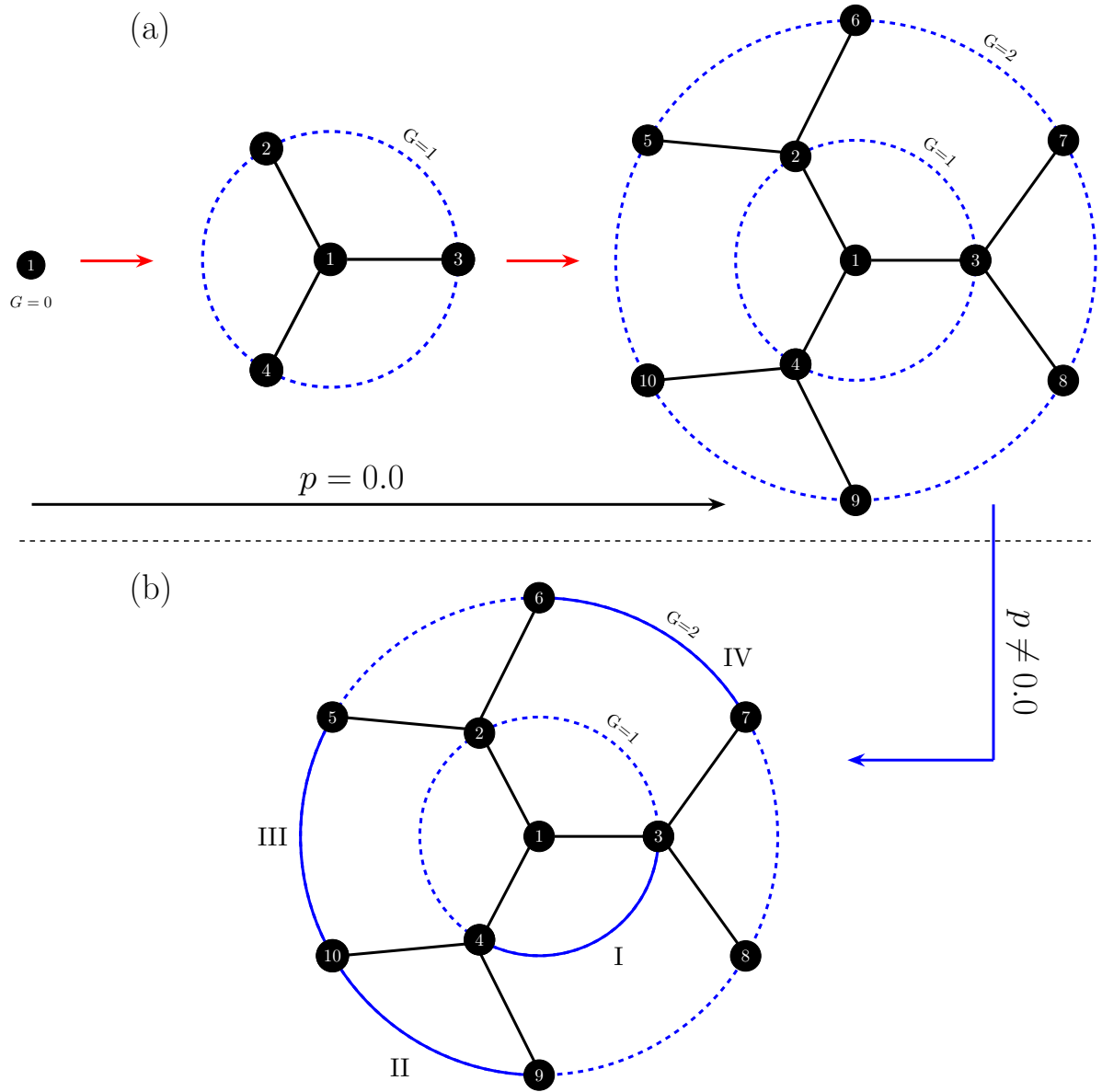


Figura 3.3 - Passos da construção de uma única camada de dendrímero com funcionalidade $f_D = 3$. Em (a) temos a representação até geração $G = 2$. Observe que iniciamos com um nó central ($G = 0$) e a cada passo da construção todos os vértices internos possuem três ligações. Este processo pode ser iterado até a geração G desejada. Nós periféricos possuem apenas uma única ligação e não há ligações entre vértices de mesma geração ($p = 0.0$). Em (b) alteramos o valor da probabilidade p ($p \neq 0.0$) e novas ligações, apenas entre nós de mesma geração, são adicionadas (I, II, III e IV, neste exemplo).

m Fig. 3.3 (a). O processo de construção inicia com a criação do vértice central, denotado por 1, que representa o número de geração $G = 0$. Em seguida, conectamos ao nó central, a partir de três ligações, três novos vértices, representados por 2, 3 e 4, que irão formar a primeira geração $G = 1$. Uma vez que os vértices da primeira geração já possuem uma ligação, à eles são conectados, a partir de duas novas ligações, dois novos vértices. Esses últimos representados pelos nós 5, 6, 7, 8, 9 e 10; esta será a segunda geração $G = 2$. Seguindo o mesmo processo, mais gerações podem ser construídas até o número G desejado, com os nós internos mantendo o mesmo número de conexões das gerações

anteriores. Com facilidade, podemos observar que, nós internos terão $f_D = 3$, enquanto nós periféricos, isto é, nós da última geração ($G = 2$, neste exemplo) terão $f_D - 2 = 1$ conexão. O número total de vértices de uma rede dendrímero com número de geração G e funcionalidade $f_D = 3$ é dado por

$$N_D = 3(2^G - 1) + 1. \quad (3.1)$$

Agora, iremos alterar a probabilidade p , isto é, avaliaremos o que ocorre na Fig. 3.3 (b). Uma vez construída a rede dendrímero, faremos algumas modificações. Estamos nos referindo à adição de novas ligação entre vértices de mesmo número de geração mediante probabilidade p . Todas as novas ligações possíveis recebem a chance de serem conectadas entre os vértices, caso a escolha de um número aleatório seja menor que p . Aqui, temos dois casos limites: (i) para $p = 0.0$ temos o que denominamos de dendrímero *puro* (ou árvore de Cayley *pura*) e (ii) para $p = 1.0$ temos um dendrímero modificado *completo* (ou, como adotamos para publicação, uma *spiderweb completa*, devido sua semelhança com redes ramificadas criadas por aranhas). Para valores de p no intervalo $0.0 < p < 1.0$ obtemos redes do tipo dendrímero *modificadas* (ou *spiderwebs modificadas*). Para a Fig. 3.3 (b) adicionamos, com probabilidade $p = 0.4$, novas ligações entre os nós pertencentes à mesma geração. Observe que, temos um total de 9 possíveis ligações adicionais: três entre os nós da geração $G = 1$ e seis entre os nós da geração $G = 2$. As linhas pontilhadas em azul representam todas as novas possíveis ligações; todas elas só serão adicionadas quando $p = 1.0$. As linhas sólidas em azul representam as conexões que foram escolhidas, de maneira aleatória, pelo nosso algoritmo. Por exemplo, foram escolhidas quatro novas conexões representadas por I, II, III e IV, que referem-se aos pares (3,4), (9,10), (5,10) e (6,7), respectivamente. Importante ressaltar que, apesar da criação de novas ligações, o número total de vértices N_D da rede dendrímero permanece constante.

Apresentados os passos necessários para a construção de uma única camada de rede dendrímero, agora iremos apresentar a segunda parte da construção da RMTD. Temos a representação de uma RMTD na Fig. 3.4. A partir da criação de cada camada, agora elas serão empilhadas umas sobre as outras. Importante ressaltar que, para termos uma melhor estatística em relação à probabilidade p , não empilharemos camadas iguais. Ao contrário, diferentes novas camadas são criadas a partir do passo inicial (mostrado em Fig. 3.3), permanecendo o valor de p constante. Devido à adição de novas ligações entre vértices de mesma geração, de uma única camada, podemos nomear estas estruturas como RMTDs *modificadas*. Cada camada será interconectada à sua camada vizinha mais próxima através das ligações esquematicamente apresentadas em vermelho. Neste momento, criamos um novo parâmetro de probabilidade representado por q . Este novo parâmetro estabelece se haverá ou não a criação de novas interconexões entre os vértices de camadas vizinhas mais próximas. Note que, a função do parâmetro q é a mesma realizada pelo pa-

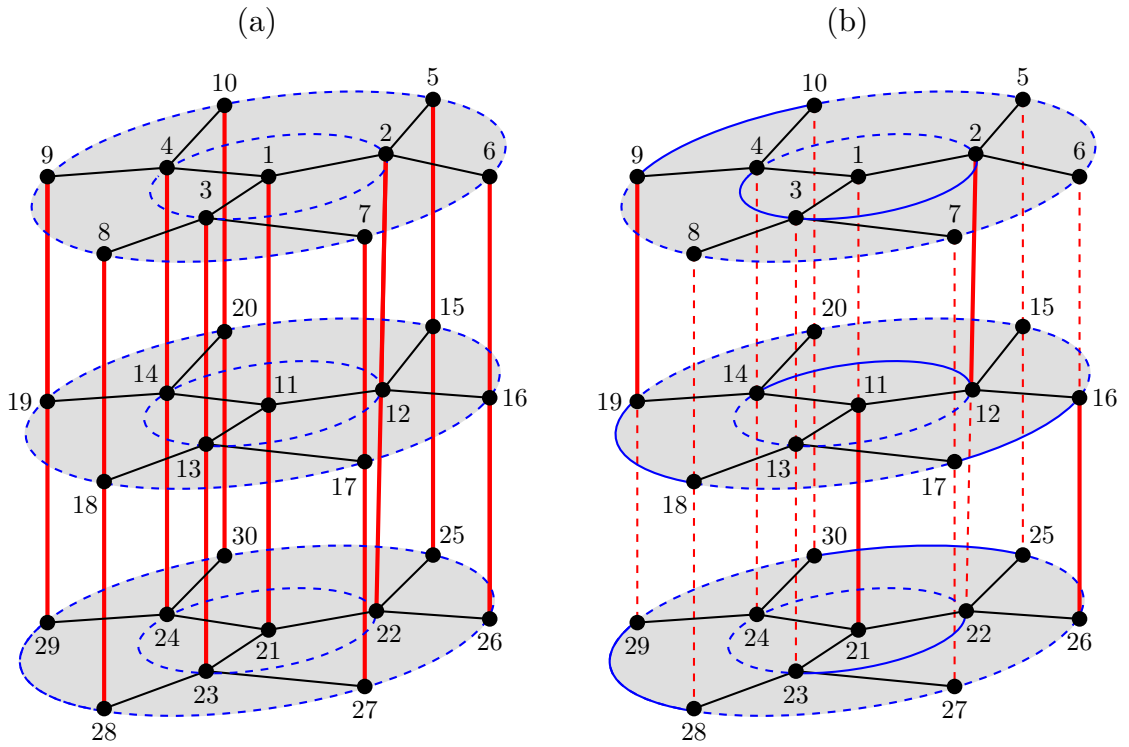


Figura 3.4 - Exemplo de duas redes multicamadas do tipo dendrímero (RMTDs) com $G = 2$ gerações e $L = 3$ camadas. Cada camada é construída a partir de uma rede dendrímero com $f_D = 3$. Em (a) temos uma RMTD *completa*, isto é, todas as ligações entre camadas estão presentes ($q = 1.0$); observe que cada camada é constituída por uma rede dendrímero puro ($p = 0.0$). Em (b) temos uma RMTD *incompleta*, isto é, algumas ligações entre camadas foram removidas com probabilidade $1 - q$; observe que o valor da probabilidade p para cada camada é mantido constante e igual a $p = 0.3$; e fizemos $q = 0.2$. As interligações entre as camadas internas estão representadas pelas linhas sólidas em vermelho.

râmetro p . Todavia, este último adiciona novas ligações entre vértices de mesma geração em uma única camada (intraconexões), enquanto o primeiro adiciona novas ligações entre vértices de camadas vizinhas (interconexões). Esquemáticamente, apresentamos na Fig. 3.4 a realização de duas RMTDs com três camadas ($L = 3$), na qual há um exemplo para RMTD *completa* e RMTD *incompleta*. Em (a), todas as ligações entre vértices de camadas distintas estão presentes, daí o termo *completa*. Por outro lado, em (b), as linhas pontilhadas representam a ausência de ligação entre os vértices vizinhos; já as linhas sólidas em vermelho mostram as ligações escolhidas por nosso algoritmo. Para este exemplo, temos $q = 0.2$, desta forma, quatro ligações são criadas entre as camadas, a partir de um total de 20 possíveis conexões. Os pares de vértices (2,12), (9,19), (11,21) e (16,26) correspondem às quatro ligações criadas. Devido à ausência de algumas ligações entre as camadas, podemos chamar estas estruturas de RMTDs *incompletas*. Observe que, camadas periféricas conectam-se apenas a uma única camada vizinha, enquanto camadas internas possuem duas camadas mais próximas. Em geral, para uma RMTD com L camadas, compostas por dendrímeros (puros ou modificados) de geração G , o número total de vértices é dado por $N_{RMTD} = LN_D$. Enquanto que, o número de possíveis ligações adicionais para cada camada é dado por $3(2^G - 1)$. Já para conexões entre

camadas vizinhas, o número de possíveis conexões adicionais é $(L - 1)N_D$.

Na próxima seção, apresentaremos os resultados obtidos para o espectro de autovalores de RMTDs completas. Nossa investigação levará em conta a alteração no número de camadas, assim como a mudança nos valores do parâmetro de probabilidade p . Conhecer o espectro de autovalores, no modelo CTQW, é importante para a análise do transporte quântico sobre redes.

3.3 Espectro de autovalores para RMTDs completas

Na Fig. 3.5 apresentamos o espectro de autovalores para as RMTDs completas. Nesta análise, deixamos fixo o número de geração de cada camada em $G = 5$, o que equivale a $N_{\text{camada}} = 94$ nós por camada. A construção das estruturas segue o seguinte conjunto de parâmetros: em Fig. 3.5 (a) $(p, q) = (0.0, 1.0)$ e em (b) $(p, q) = (1.0, 1.0)$. Uma vez que, desejamos avaliar o impacto da quantidade de camadas sobre o transporte quântico, de maneira progressiva aumentamos o número L . Iniciamos com $L = 1$ e aumentamos até o valor máximo de 50 camadas. Observe que, ao escolhermos os parâmetros (p, q) acima, estamos realizando a transição de uma rede dendrímero puro ($p = 0.0$) e rede dendrímero modificado completo ($p = 1.0$) à uma rede multicamada ($L > 1$). Ao compararmos os espectros dos dois conjuntos de parâmetros, fica evidente o espectro discreto para redes com apenas uma única camada. Esse último é notável para a rede dendrímero puro ($p = 0.0$) em Fig. 3.5 (a). Note que, este comportamento é alterado quando camadas são adicionadas. O espectro discreto, então, é alterado, dando lugar a um espectro contínuo, o que é característica notável do espectro de autovalores de uma cadeia linear. Uma vez que, cadeias lineares possuem melhor eficiência no transporte quântico, o espectro contínuo irá impactar na eficiência do transporte quântico em nossas estruturas RMTD. Para regiões com valores de autovalores pequenos, dois destaques (*inset*) foram feitos, tanto em Fig. 3.5 (a) quanto em (b). Fica evidente a quebra na característica discreta do espectro para redes com uma única camada. Ao criarmos novas camadas, outra característica observada é o aumento no valor do autovalor mais elevado, λ_{max} . Por outro lado, há diminuição no autovalor mais baixo, λ_{min} . Observe que, na Fig. 3.5 (b), há uma rapidez na mudança do espectro discreto para contínuo. Isto ocorre devido à adição de novas ligações entre vértices de mesma camada, isto é, $p > 0.0$.

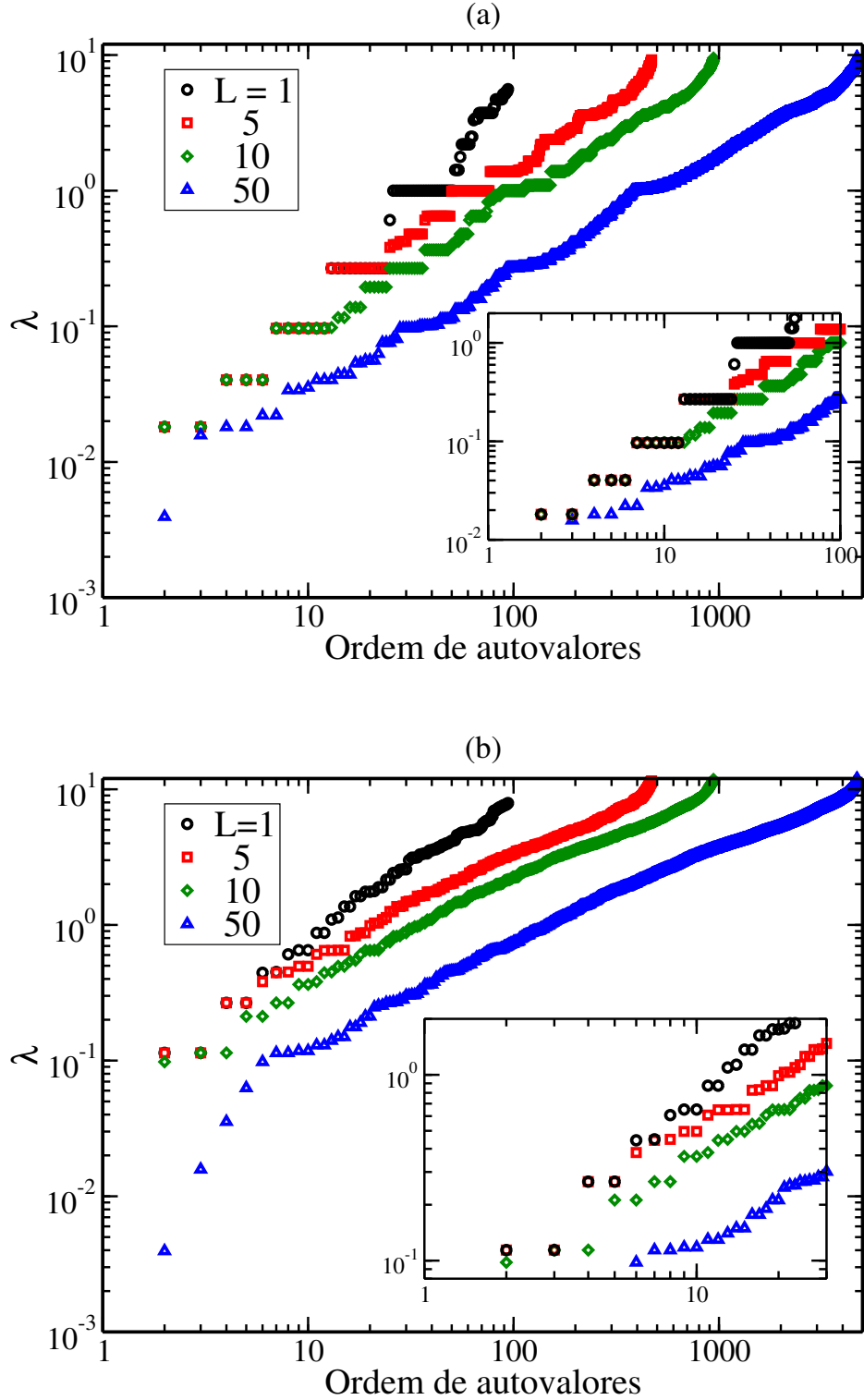


Figura 3.5 - Espectro de autovalores para RMTDs completas, com $G = 5$ gerações e número de camadas L variável. Em (a) cada camada é formada por dendrímeros puros ($p = 0.0$). Já em (b) cada camada é formada por dendrímeros modificados completos, isto é, $p = 1.0$. Em destaque, tanto em (a) quanto em (b), mostramos regiões de autovalores pequenos, onde fica evidente o espectro discreto.

Ainda sobre o espectro de autovalores, agora, na Fig. 3.6, nos concentramos em avaliar a influência da probabilidade p . Variamos este parâmetro de 0.0 até 1.0 em passos

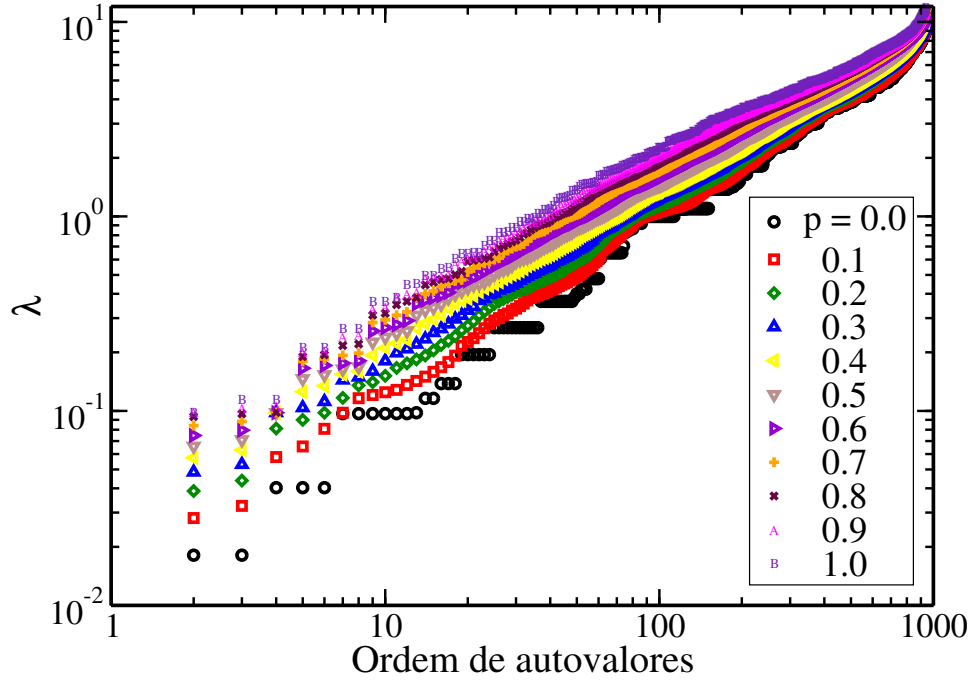


Figura 3.6 - Espectro de autovalores para RMTD completa, com $G = 5$ gerações e número de camadas fixo em $L = 10$. Aqui, investigamos a influência do parâmetro p , variando-o de 0.0 até 1.0, em passos de 0.1. Mesmo para valores pequenos de p o espectro discreto é rapidamente substituído pelo espectro contínuo. Este fato terá grande influência sobre a eficiência do transporte quântico.

de 0.1. Nossas estruturas RMTD, para este caso, possuem os seguintes valores fixos: $G = 5$ gerações e $L = 10$ camadas. Para termos uma melhor estatística, utilizamos uma média sobre $S = 10$ realizações. Novamente, para uma RMTD com dendrímeros puros ($p = 0.0$), notamos um espectro de autovalores discreto. Todavia, este último é rapidamente substituído por um espectro contínuo - isto pode ser observado mesmo para pequenos valores de p . Este é um ponto fundamental do nosso trabalho: a adição de novas ligações (modificação na topologia da rede). Por consequência direta, observamos um aumento na magnitude dos autovalores. E o surgimento de um espectro de autovalores contínuo será responsável pelo crescimento na eficiência do transporte quântico. O espectro de autovalores, também pode ser determinado de maneira analítica. Neste trabalho, fazemos apenas uma análise numérica desses valores. No caso especial, onde todas as camadas que compõe uma rede multicamada são iguais, os autovalores são dados por:

$$\Lambda_j = 2 - 2 \cos \left(\frac{j\pi}{L} \right) + \lambda_i, \quad (3.2)$$

onde $j = 0, 1, \dots, L-1$ representa o número de camadas, λ_i ($i = 1, \dots, N$) são os N_{camada} autovalores da matriz de conectividade $\mathbf{A}_{\text{camada}}$ de uma única camada.

Na seção seguinte, nos concentramos nos resultados do transporte quântico sobre RMTDs completas encontrados a partir da probabilidade de transição $\pi_{j,k}(t)$, Eq. 2.9.

Nossos resultados são apresentados através de mapas bidimensionais (*spacetime structures*), em que a intensidade de probabilidade está diretamente relacionada à coloração estabelecida nas barras de probabilidades.

3.4 Probabilidades de transição sobre RMTDs completas

Para avaliarmos o transporte quântico sobre RMTDs completas iniciamos com a probabilidade quântica de transição $\pi_{j,k}(t)$, Eq. 2.9. Para uma CTQW ela representa a probabilidade de um caminhante iniciar sua dinâmica em k e alcançar, após um tempo t , o vértice j . Escolhemos apresentar nossos resultados através de um contorno de probabilidades fornecido pela representação em duas dimensões nas Figs. 3.7 e 3.9. Afim de compararmos o comportamento de $\pi_{j,k}(t)$ sobre estruturas distintas, construímos três diferentes RMTDs. A Fig. 3.8 contém as três diferentes RMTDs. Em (a), temos uma rede com apenas duas camadas ($L = 2$), porém com um número elevado de geração, $G = 3$. Já em (b), temos uma rede compacta com quatro camadas ($L = 4$) e número de geração $G = 2$. Por fim, em (c), temos uma rede longa composta por dez camadas ($L = 10$) e com $G = 1$. Para todos os três casos citados anteriormente, mantemos fixos os parâmetros p e q em 1.0 e 1.0, respectivamente.

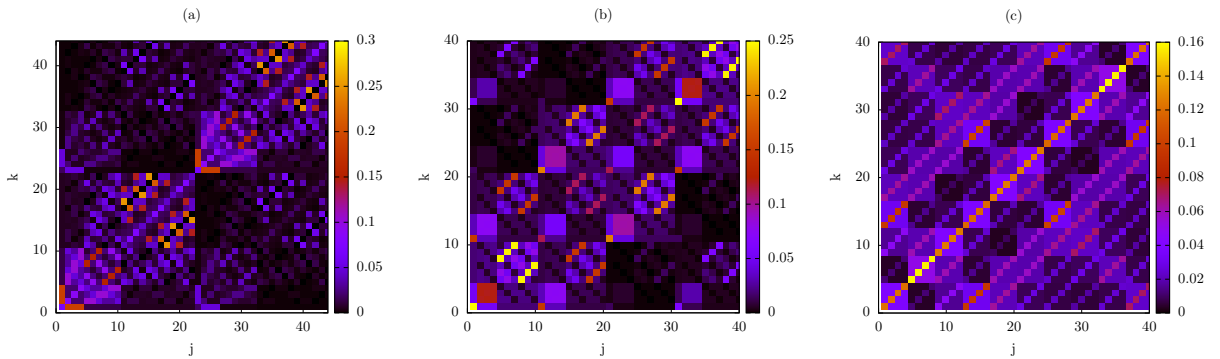


Figura 3.7 - Probabilidades de transição $\pi_{j,k}(t)$ para $t = 10$ sobre RMTDs completas. Em (a) para a estrutura contida na Fig. 3.8 (a). Já em (b) para a estrutura contida na Fig. 3.8 (b). Por fim, em (c) para a estrutura na Fig. 3.8 (c). A intensidade das cores representa as probabilidades do caminhante quântico ao espalhar-se sobre a rede.

Nas Figs. 3.7 (a)-(c), avaliamos a probabilidade de transição $\pi_{j,k}(10)$ para um intervalo de tempo relativamente curto, $t = 10$. Para o primeiro tipo de estrutura [Fig. 3.8 (a)], a Fig. 3.7 (a) nos mostra que o caminhante quântico encontra-se no seu vértice de partida ou estará localizado nos vértices vizinhos mais próximos. Nossos resultados indicam o maior valor de probabilidade como sendo igual a 0.25, e este valor foi encontrado para os seguintes pares de vértices, por exemplo: (11,18), (14,19), (15,22), (33,40), (36,41) e (37,44). Note que, todos esses vértices pertencem à última geração (nós periféricos) de

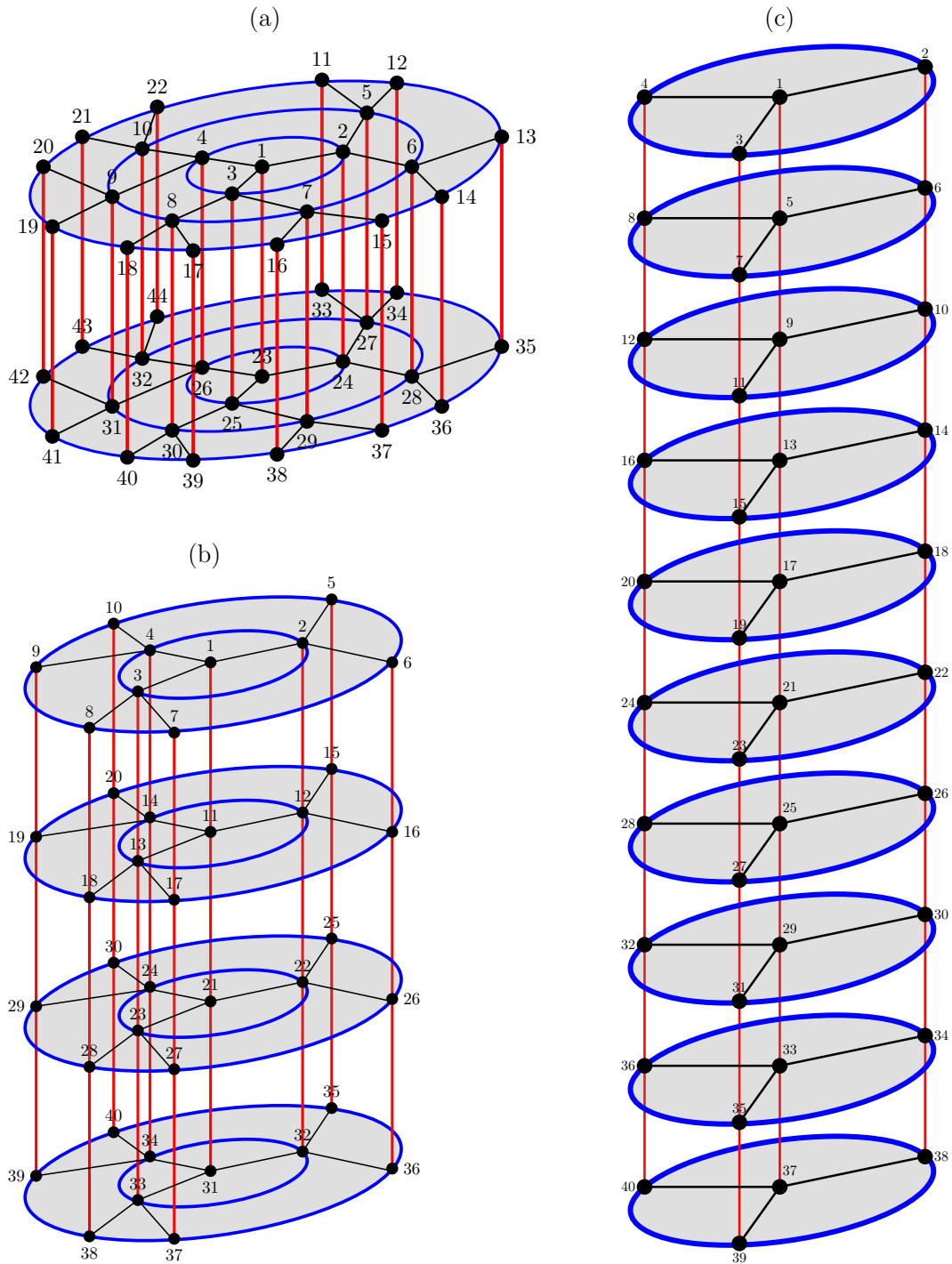


Figura 3.8 - Representação de três estruturas RMTDs completas. Em (a) temos uma rede larga correspondendo a $G = 3$ e $L = 2$. Já em (b) temos uma rede compacta para a qual definimos $G = 2$ e $L = 4$. Por fim, em (c) temos uma rede longa contendo $G = 1$ e $L = 10$. Nos três casos deixamos fixos $p = 1.0$ e $q = 1.0$. Temos $(N_{\text{camada}}, \text{Fig.}) = (44, \text{a}), (40, \text{b}), (40, \text{c})$.

cada camada. Ao compararmos estes resultados com os da Fig. 3.8 (b), observamos uma melhor distribuição das probabilidades. Todavia, o valor da probabilidade mais elevada torna-se um pouco menor: 0.24. Encontramos este valor para vértices que estão na periferia das camadas mais externas [Fig. 3.8 (b)]. Nominalmente, temos: (5,8), (6,9),

(7,10), (35,38), (36,39) e (37,40). Também encontramos uma igualdade nos valores de probabilidade $\pi_{1,1}(10)$ e $\pi_{31,31}(10)$. Estes dois últimos valores significam o retorno do caminhante ao vértice de partida (centros das camadas periféricas). Por fim, na Fig. 3.7 (c) avaliamos o comportamento de $\pi_{j,k}(10)$ para redes com maior quantidade de segmentos lineares [Fig. 3.8 (c)]. Observe que, a presença desses segmentos torna o espalhamento do caminhante quântico sobre a rede mais acentuado. Nossos resultados indicam uma quantidade maior de nós com probabilidade acima de 0.1. Para os vértices pertencentes à segunda e nona camadas, $\{5, 6, 7, 8\}$ e $\{33, 34, 35, 36\}$, respectivamente, encontramos uma probabilidade máxima igual a 0.15.

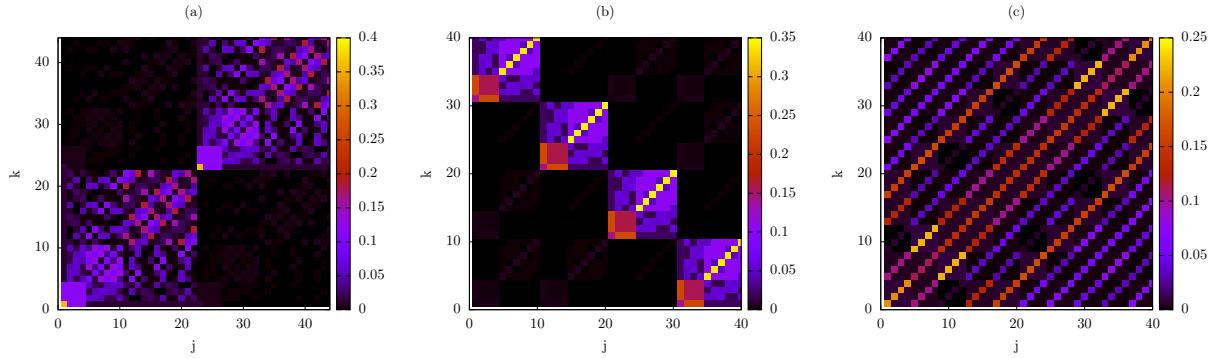


Figura 3.9 - Probabilidades de transição $\pi_{j,k}(t)$ para $t = 60$ sobre RMTDs completas. Em (a) para a estrutura contida na Fig. 3.8 (a). Já em (b) para a estrutura contida na Fig. 3.8 (b). Por fim, em (c) para a estrutura na Fig. 3.8 (c). A intensidade das cores representa as probabilidades do caminhante quântico ao espalhar-se sobre a rede.

Nas Figs. 3.9 (a)-(c), avaliamos a probabilidade de transição $\pi_{j,k}(60)$ para um intervalo de tempo mais estendido, $t = 60$. Para o primeiro tipo de estrutura [Fig. 3.8 (a)], a Fig. 3.9 (a) nos fornece que o caminhante quântico possui alta probabilidade de permanecer em sua camada de origem. De fato, encontramos os maiores valores de $\pi_{j,k}$ - neste caso, 0.35 - para os vértices localizados no centro das camadas, isto é, para $\pi_{1,1}$ e $\pi_{31,31}$. Observe que, isto nos indica que o caminhante retorna com maior frequência ao centro de sua camada. Já para o segundo tipo de estrutura [Fig. 3.8 (b)], a Fig. 3.9 (b) nos informa que a caminhada quântica espalha-se sobre toda a rede com preferência a estar localizada em camadas que podemos considerar simetricamente opostas. Por exemplo, o caminhante localizado na primeira camada opõe-se à quarta camada, ocorrendo o mesmo para as camadas dois e três. De fato, encontramos o maior valor de probabilidade como sendo igual a 0.34, o que ocorre para 24 pares de nós (j, k) . Ao avaliarmos as probabilidades, percebemos que estes pares de nós correspondem à vértices periféricos, desta forma, podemos concluir que a caminhada quântica espalha-se mais acentuadamente sobre os segmentos lineares que unem as camadas. Por fim, na Fig. 3.9 (c) nossos resultados confirmam a evidência citada anteriormente: a caminhada quântica espalha-se com maior probabilidade sobre as interligações. A maior probabilidade tem uma leve diminuição, com seu valor sendo igual a 0.22, encontrada para 16 pares de nós (j, k) . No

entanto, esta diminuição não indica um transporte ineficiente. Pelo contrário, a caminhada quântica tende a espalhar-se ainda mais sobre a rede, tendo preferência, novamente, pelas interligações. E de fato, o que a análise das duas últimas figuras evidenciam torna-se um padrão, ou seja, para outros valores de tempo t o caminhante quântico tende a propagar-se sobre ligações entre as camadas da RMTD.

Na próxima seção, fazemos uma análise de comparação entre os transportes clássico e quântico sobre RMTDs completas. Apresentaremos os comportamentos das probabilidades médias de retorno clássica e quântica, $\bar{p}(t)$ e $\bar{\pi}(t)$, respectivamente. A rapidez de seus decaimentos, nos indicam uma eficiência ou não da caminhada quântica sobre a rede.

3.5 Transportes clássico e quântico sobre RMTDs completas

Nossa análise do transporte quântico também investigou as probabilidades médias de retorno clássica $\bar{p}(t)$, Eq. 2.12, e quântica $\bar{\pi}(t)$, Eq. 2.13. O resultado desta análise está apresentado na Fig. 3.10, para o qual mantivemos fixos $G = 5$ ($N_{\text{camada}} = 94$ vértices por camada) e $q = 1.0$. Na Fig. 3.10 (a), avaliamos o caso para quando temos uma RMTD completa e formada por dendrímeros completos, isto é, $p = 1.0$. Note que, variamos o número L de camadas. De imediato, podemos ver que a probabilidade clássica, $\bar{p}(t)$, tende para o seu valor de equilíbrio (equipartição): $\bar{p}(t) \propto \frac{1}{N}$, na região de tempo longo. Isto ocorre para qualquer que seja a topologia estudada. Nas duas outras regiões, de tempo curto e tempo intermediário, observamos outros comportamentos. Para tempos curtos, devido à presença de segmentos ramificados, não há um comportamento de escala, isto é, a caminhada clássica não segue um padrão de difusão. No entanto, para regiões intermediárias notamos um decaimento do tipo lei de potência para $\bar{p}(t)$. Isto indica que o caminhante clássico propaga-se sobre toda a rede através dos segmentos mais lineares. Como mostrado no gráfico, encontramos os valores do expoente de lei de potência igual a -0.87 para RMTD com $L = 1$, e -1.3 para RMTD com $L = 10$. Note que, para RMTD contendo uma grande quantidade de camadas, $L = 100$, observamos a existência de duas regiões com comportamento de escala. Para cada uma determinamos um valor de expoente igual a -1.35 e -0.38 , respectivamente. Embora a quantidade de vértices seja maior para $L = 10$ comparado com $L = 1$, o valor de equipartição é alcançado ao mesmo tempo para as duas estruturas. Para as RMTDs analisadas nesta seção, os vértices que possuem grau igual a 4 estão em maior quantidade. Desta forma, os expoentes de escala encontrados acima possuem valor diferente para o encontrado em uma cadeia linear. Esta última possui expoente do tipo lei de potência igual a 0.5. Agora, estamos interessados em analisar o comportamento quântico do caminhante, $\bar{\pi}(t)$, sobre as RMTDs completas.

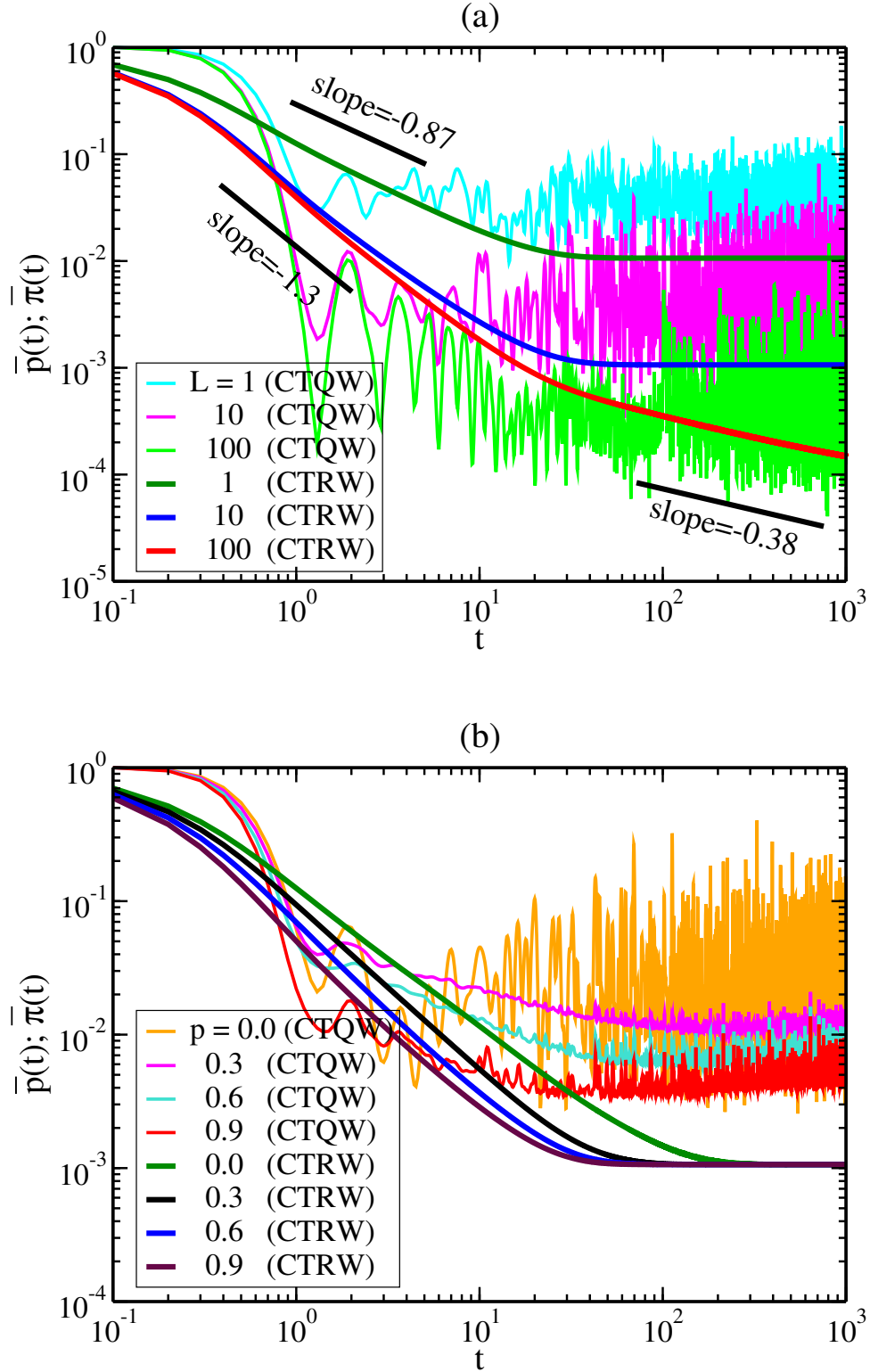


Figura 3.10 - Probabilidades médias de retorno clássica e quântica, $\bar{p}(t)$ e $\bar{\pi}(t)$, respectivamente. Avaliamos seu comportamento sobre RMTDs completas, com número de geração fixo em $G = 5$. Em (a) deixamos o parâmetro de probabilidade p fixo em 1.0 e variamos o número L de camadas. Em (b) variamos o parâmetro p e deixamos fixo o número de camadas $L = 10$.

Para o caso em que $L = 1$, observamos um efeito de localização da caminhada quântica. Ou seja, o caminhante permanece próximo aos vértices vizinhos, indicando, desta forma,

ineficiência do transporte quântico. Todavia, ao aumentarmos o número de camadas é possível notar um maior espalhamento do caminhante. Assim, contornamos o efeito de localização através do empilhamento de camadas; trata-se de um dos objetivos deste trabalho. Além disso, nossos resultados indicam uma melhora em mais de duas ordens de grandeza para o transporte quântico sobre RMTD com $L = 100$. Importante lembrar que, estas últimas estruturas possuem maior quantidade de segmentos lineares, responsáveis por essa melhora no transporte quântico.

Ainda sobre o transporte clássico e quântico sobre RMTDs completas, a Fig. 3.10 (b) mostra a influência do parâmetro p sobre o comportamento das probabilidades médias de retorno. Para este caso, deixamos fixos $L = 10$ e $q = 1.0$; e para termos uma melhor estatística, consideramos $S = 10$ realizações. Observe que os valores de p são os seguintes: 0.0, 0.3, 0.6 e 0.9. Novamente, podemos verificar que a probabilidade clássica alcança o valor de equipartição $\frac{1}{N}$. No entanto, este valor é alcançado mais rapidamente para valores elevados do parâmetro p . Isto nos indica rapidez na difusão do caminhante clássico sobre a rede. Podemos observar que, na região de tempos intermediários, novamente temos um comportamento de escala. Do ponto de vista quântico, temos que $\bar{\pi}(t)$ torna-se menor para valores elevados de p . Nossos resultados indicam diminuição de até uma ordem de grandeza para RMTDs com p entre 0.0 e 0.9. Ao compararmos as Figs. 3.10 (a) e (b), notamos que para valores extremos de p (0.0 e 1.0), $\bar{\pi}(t)$ possui acentuado comportamento oscilatório, quando comparado com valores intermediários. Isto nos indica um transporte quântico com baixa eficiência. Porém, é importante destacarmos que há um aumento no transporte quântico para o aumento simultâneo de L e p .

Na seção seguinte, modificamos nossas estruturas. A partir de agora, analisaremos o transporte quântico sobre RMTDs *incompletas*. De início, avaliaremos o espectro de autovalores, com alterações nos parâmetros de probabilidade p e q .

3.6 Espectro de autovalores para RMTDs incompletas

Na Fig. 3.11 apresentamos o espectro de autovalores para RMTDs incompletas. Ou seja, nossas estruturas serão construídas com a remoção de interligações, mediante probabilidade $1 - q$. Um exemplo deste tipo de rede está representado na Fig. 3.4 (b). Nesta análise, nossos resultados foram obtidos de RMTDs incompletas com os seguintes valores fixos: $G = 6$ gerações ($N_{\text{camada}} = 190$ vértices por camada) e $L = 6$ camadas. Para uma melhor estatística, consideramos $S = 12$ realizações. Em (a), investigamos a influência do parâmetro q sobre o espectro de RMTDs incompletas que são formadas por dendrímeros puros ($p = 0.0$). Incrementamos o valor de q a partir de 0.1, com passos de

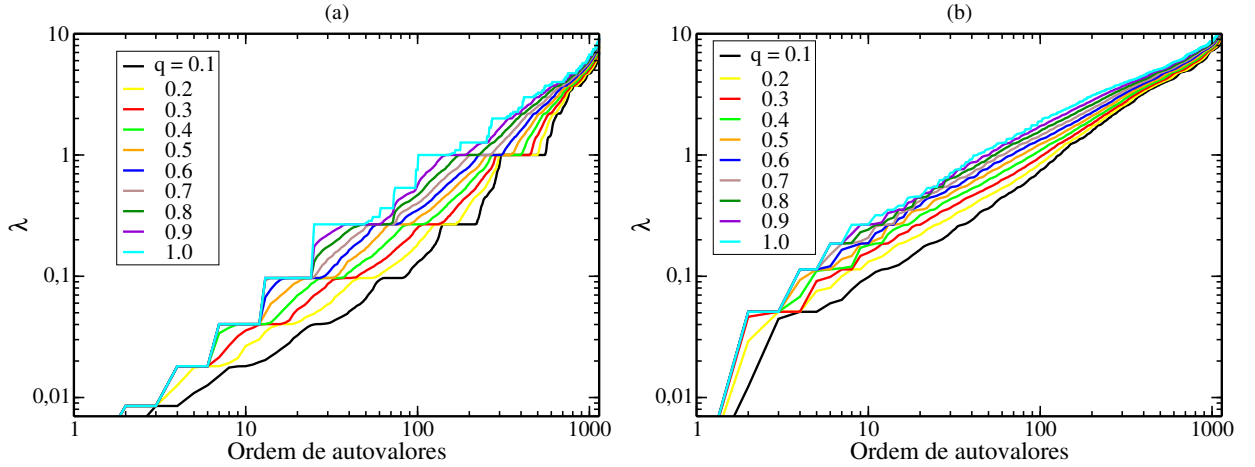


Figura 3.11 - Espectro de autovalores para RMTDs incompletas, com $G = 6$ gerações e número de camadas $L = 6$. Em (a) mantemos fixo o parâmetro $p = 0.0$ e variamos q , que representa a probabilidade de ligações entre vértices de camadas distintas. Em (b) mantemos fixo o parâmetro $p = 1.0$ e variamos q .

de 0.1, até o valor 1.0. Observamos que, ao elevarmos o valor de q , há um aumento na magnitude dos autovalores. Este comportamento já era esperado, pois para valores elevados de q há uma predominância de segmentos lineares (interconexões). Apesar deste aumento na magnitude, o autovalor mais elevado e o mais baixo, apresentam uma pequena diferença com o aumento de q . De fato, nossos resultados apontam para os seguintes valores: $\lambda_{\min} \approx 0.004$ e $\lambda_{\max} \approx 7.095$ para RMTDs incompletas quando $q = 0.1$; $\lambda_{\min} \approx 0.008$ e $\lambda_{\max} \approx 9.380$ para RMTDs incompletas quando $q = 1.0$. Notamos, também, que para valores pequenos de q o espectro apresenta dois padrões: um para cadeias lineares (espectro contínuo) e outro para dendrímeros puros (espectro discreto). Nossos resultados apontam para o autovalor $\lambda = 1$ como sendo o mais degenerado. Observe que, para o caso limite, $q = 1.0$, o espectro torna-se completamente discreto. Já em (b), investigamos a influência do parâmetro q sobre o espectro de RMTDs incompletas que são formadas por dendrímeros completos ($p = 1.0$). Nossos resultados deixam evidente um aumento na magnitude do maior autovalor, quando comparado à figura anterior. De fato, temos os seguintes resultados: $\lambda_{\min} \approx 0.012$ torna-se $\lambda_{\min} \approx 0.008$ (para $q \rightarrow 1.0$) e $\lambda_{\max} \approx 9.471$ torna-se $\lambda_{\max} \approx 11.675$ (para $q \rightarrow 1.0$). Note que, para pequenos valores de q , o espectro apresenta-se contínuo com alguns autovalores duplamente degenerados. Isto ocorre devido à topologia de cada camada. Para valores crescentes de q temos o mesmo comportamento. Desta forma, para RMTDs completas, o espectro discreto pode ser transformado em um espectro contínuo após a remoção de interconexões.

Na Fig. 3.12 novamente apresentamos o espectro de autovalores para RMTDs incompletas, porém, fixamos $q = 0.5$ e alteramos, com passos de 0.1, o parâmetro p . Observe que, para uma RMTD incompleta formada por dendrímeros puros, o perfil do espectro é composto de duas características: é discreto para valores pequenos de λ e contínuo para valores elevados. Este fato ocorre devido aos segmentos lineares entre as c-

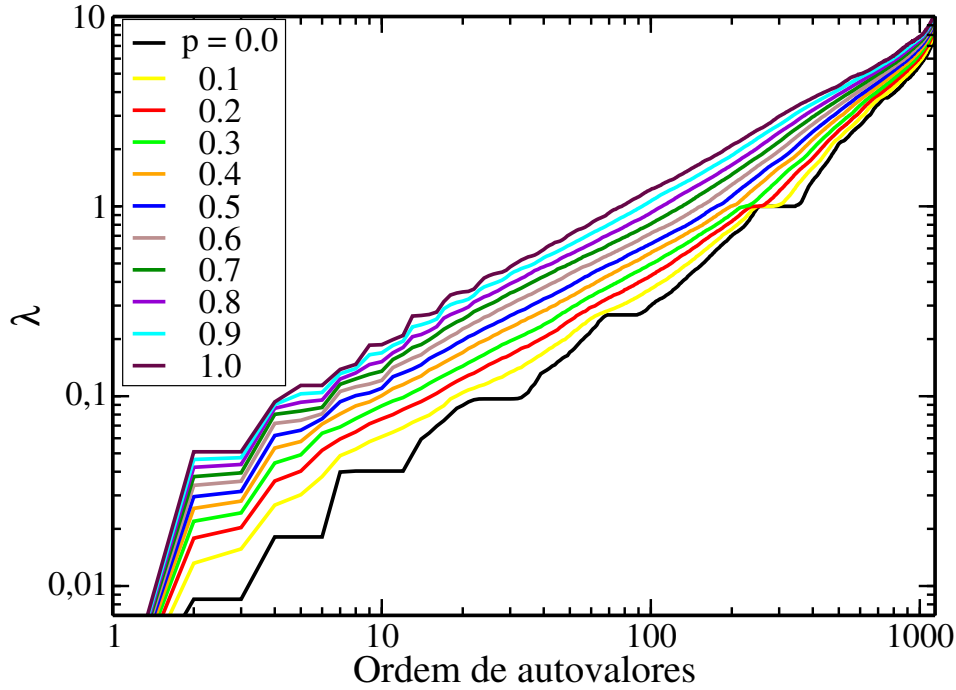


Figura 3.12 - Espectro de autovalores para RMTD incompleta, com $G = 6$ gerações e número de camadas $L = 6$. Alteramos o parâmetro p e deixamos fixo $q = 0.5$, que representa a probabilidade de ligações entre vértices de camadas distintas.

amadas e a presença de dendrímeros puros em cada uma delas. Ao elevarmos o valor de p , o perfil do espectro torna-se contínuo, mesmo para valores pequenos. Isto terá grande impacto sobre a eficiência do transporte quântico. Nossos resultados indicam a presença de autovalores duplamente degenerados, na região de λ pequeno, para RMTDs incompletas com $p > 4$. Ao avaliarmos a região intermediária e para valores pequenos de λ , quando as RMTDs incompletas são formadas por dendrímeros completos ($p = 1.0$), obtemos uma grande quantidade de autovalores duplamente degenerados. Novamente, notamos uma alteração nos valores dos autovalores mais elevado e mais baixo. Ao mudarmos os valores para p , de 0.0 até 1.0, temos o seguinte aumento: $\lambda_{\min} \approx 0.008$ torna-se $\lambda_{\min} \approx 0.050$ e $\lambda_{\max} \approx 8.357$ torna-se $\lambda_{\max} \approx 10.819$.

Por fim, para encerrarmos nossa análise do transporte quântico sobre redes do tipo dendrímero, avaliaremos, na próxima seção, o limite de longo tempo, χ , e seu valor aproximado, χ^* , sobre RMTDs incompletas. Nossos resultados são apresentados através de mapas bidimensionais, em que a eficiência do transporte quântico está diretamente relacionada à coloração.

3.7 Limite de longo tempo para RMTDs incompletas

Sabemos que a probabilidade média quântica de retorno, $\bar{\pi}(t)$, não converge para um único valor, no limite de longo tempo. Ao contrário, seu valor oscila em torno de um valor médio. Podemos fazer uma média temporal desses valores e então associá-los à

eficiência da caminhada quântica. Essa média está representada na Eq. 2.16, em função da densidade espectral de autovalores, a qual chamamos de limite de longo tempo, χ . Quando escrita em termos do autovalor mais degenerado, λ^* , temos o valor aproximado χ^* (onde $\chi \geq \chi^*$).

Na Fig. 3.13 representamos, através de um mapa bidimensional, o limite de longo tempo sobre RMTDs incompletas, como função dos parâmetros de probabilidade p e q . Variamos o parâmetro q a partir de 0.1 até 1.0 e p de 0.0 até 1.0. Para ambos os parâmetros, escolhemos os passos como sendo de 0.1. Em (a) mostramos o comportamento de χ para uma rede com número de camadas igual a $L = 6$ e contendo $G = 6$ gerações. Desta forma, temos um total de $N_{\text{camadas}} = 190$ vértices por camada, o que resulta em $N = LN_{\text{camadas}} = 1140$ vértices em toda estrutura. Para uma melhor estatística, fizemos $S = 12$ realizações. Já em (b), temos os mesmos valores definidos anteriormente, no entanto, trata-se do valor aproximado χ^* . É importante lembrarmos que, os valores de χ estão compreendidos dentro de um intervalo que vai de 0 até 1. Onde, $\chi = 0$ representa o máximo de eficiência quântica, enquanto que $\chi = 1$ representa o máximo de ineficiência do transporte quântico.

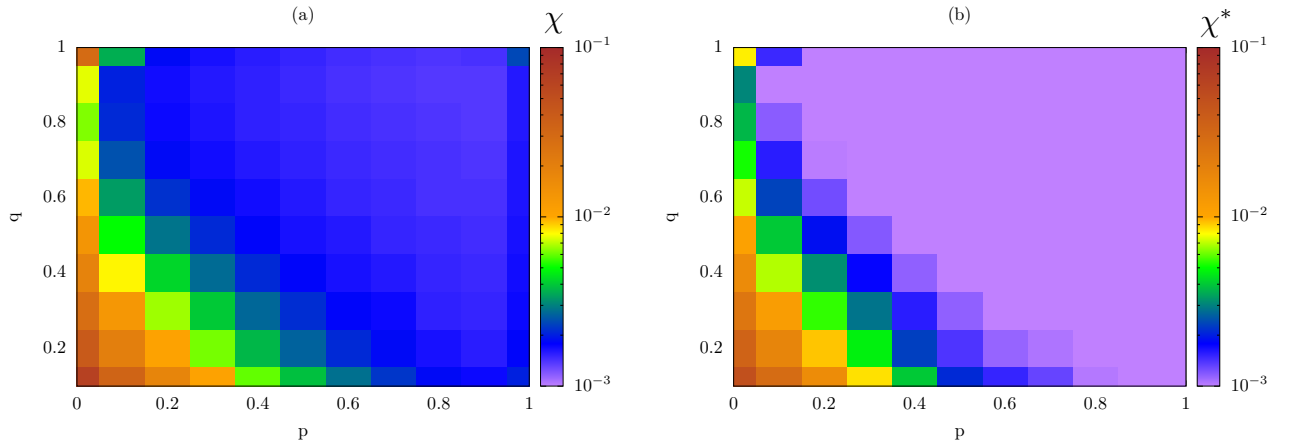


Figura 3.13 - Limite de longo tempo, χ , sobre RMTDs incompletas, com $G = 6$ gerações e $L = 6$ camadas, sendo $S = 12$ realizações. Investigamos a influência dos parâmetros p e q . Em (a) apresentamos os valores exatos de χ , enquanto que em (b) mostramos o seu valor aproximado χ^* . Para $\chi = 0$ temos o máximo de eficiência e para $\chi = 1$ temos o máximo de ineficiência.

Na Fig. 3.13 (a) podemos notar um aumento na eficiência quântica quando aumentamos os valores de p . Essa verificação pode ser realizada, em geral, para todos os valores do parâmetro q , exceto para quando $p = 1.0$. Neste caso, observamos uma diminuição na eficiência, ou seja, um aumento no valor de χ . Observe que, para RMTDs incompletas, com o mesmo valor de p e alterando os valores para q , notamos que o transporte quântico é melhor para quando $q = 0.8$. Ressaltamos que, esta descoberta é válida para todos os valores de p , todavia, com diferentes magnitudes de probabilidade. Uma melhor observação da eficiência do transporte quântico, pode ser feita através da

mudança simultânea dos parâmetros p e q . Veja este caso: ao mantermos q fixo e alterando o valor de p , encontramos um melhor aumento da eficiência, sobre RMTDs incompletas, com o valor mínimo de $q = 0.1$. Nossos resultados indicam um aumento, para χ , de quase 40 vezes, ao alterarmos os valores de p de 0.0 até 0.9. Neste caso, o menor aumento de χ é encontrado para RMTDs incompletas com $q = 0.9$, e isto será quase sete vezes maior entre seu menor valor, neste caso para $p = 0.0$, e seu maior valor, ou seja, para $p = 0.9$. Em contrapartida, também podemos avaliar o comportamento de χ através da fixação do parâmetro p e da alteração de q . Para este caso, ao deixarmos o número de ligações intracamadas fixo, notamos que a alteração de q não torna χ mais elevado. Ou seja, em comparação com o caso acima, sua influência sobre χ o deixa apenas dez vezes maior. Esse aumento é encontrado para o valor fixo de $p = 0.0$. Os resultados encontrados para o limite de longo tempo, nos indicam que o melhor transporte quântico ocorre para $\chi_{\min} \approx 0.0014$, correspondente a RMTDs incompletas com $q = 0.8$ e $p = 0.9$. No entanto, resultados similares foram encontrados para χ a partir de outras combinações. Isto é, também possuem o valor de χ acima, os pares de parâmetros: $(q, p) = (0.9, 0.9)$ e $(0.9, 0.8)$. Estes últimos valores de parâmetros nos fornecem, então, uma descoberta interessante: a eficiência do transporte quântico sobre RMTDs incompletas ocorre quando temos a falta, em média, de uma única ligação entre vértices de mesma camada (intra ligação) ou entre vértices de camadas adjacentes (interligação). Para a mesma RMTD incompleta, apresentamos, na Fig. 3.13 (b), os resultados para o valor aproximado de χ , ou seja, χ^* . Nossos resultados mostram que muitos dos valores para χ^* são até mais de três vezes menores que o valores exatos, χ . Por exemplo, o aumento do limite de longo de tempo quando os parâmetros p e q saltam de 0.9 para 1.0, não são evidentes como para o que ocorre na análise de χ .

Na Fig. 3.14, para verificarmos o que foi concluído ao final da análise da Fig. 3.13 (a), consideramos RMTDs incompletas com um número maior de camadas, neste caso, $L = 18$, porém com mesmo valor de gerações do caso anterior, $G = 6$. Temos, assim, um total de $N = 3420$ vértices, e optamos por $S = 4$ realizações. O comportamento obtido para χ é similar ao apresentado para o caso com $L = 6$ camadas. Todavia, a diferença encontra-se na magnitude dos valores. Para RMTDs incompletas com $L = 18$, o valor exato χ mostra diminuição significativa devido à maior presença da quantidade de segmentos lineares [64]. Nossos resultados mostram, agora, que o menor valor do limite de longo tempo corresponde a $\chi_{\min} \approx 0.00107$, que foi encontrado para RMTDs incompletas com $q = 0.9$ e $p = 0.9$. Esses resultados, novamente, dão força à afirmativa de que o melhor transporte quântico é encontrado para estruturas que possuem apenas um única ligação ausente entre vértices de mesma camada ou entre vértices de camadas adjacentes. Podemos obter, de maneira explícita, a condição para p e q que expressam a última afirmação. Teremos:

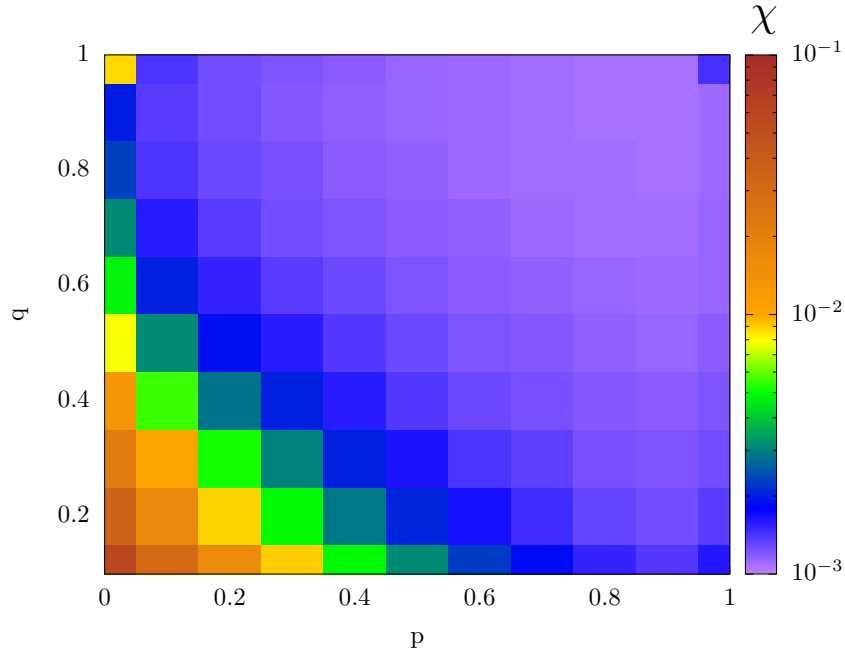


Figura 3.14 - Limite de longo tempo, χ , sobre RMTDs incompletas, com $G = 18$ gerações e $L = 6$ camadas, sendo $S = 4$ realizações. Investigamos a influência dos parâmetros p e q . Para $\chi = 0$ temos o máximo de eficiência e para $\chi = 1$ temos o máximo de ineficiência.

$$p \approx 1 - \frac{G}{(N_{\text{camada}} - 1)} \quad \text{e} \quad q \approx 1 - \frac{1}{N_{\text{camada}}}, \quad (3.3)$$

onde G é o número de geração e N_{camada} é o número de nós contidos em uma única camada. Desta forma, podemos afirmar que o melhor transporte quântico é obtido através de RMTDs incompletas para quando temos redes compostas de longos segmentos lineares *abertos*. Este resultado está diretamente relacionado ao fato de que, a caminhada quântica sobre redes do tipo anel (linhas *fechadas*) é menos eficiente do que sobre uma cadeia linear. No Apêndice A calculamos, de maneira analítica e exata, o limite de longo tempo χ para pequenas redes do tipo dendrímico puro e modificados com apenas uma única camada e geração $G = 1$. Nossos cálculos reforçam a afirmação de que a ausência de uma única ligação na rede, entre vértices de mesma geração, possui o melhor valor do limite de longo tempo.

Transporte quântico sobre redes livres de escala

Neste capítulo, continuaremos a investigação do transporte quântico, via CTQWs, agora sobre redes livres de escala [72]. Nossas redes serão construídas a partir da definição de três parâmetros: γ , o expoente da lei de potência que governa a distribuição de grau das nossas estruturas e que está relacionado à densidade de conexões da rede; e dois parâmetros de modularidade, $K_{\min}$, que é o grau mínimo permitido a cada vértice e $K_{\max}$, que é o grau máximo permitido. Mostraremos que a escolha adequada dos dois parâmetros de modularidade pode aumentar a eficiência do transporte quântico. Além disso, o aumento do número de segmentos lineares, através da mudança de γ , também terá fortes influências sobre as caminhadas quânticas. Por razões que serão apresentadas no decorrer deste capítulo, nossas estruturas serão chamadas de *redes livres de escala generalizadas* (GSFNs, sigla do inglês). Nossos resultados indicam melhor eficiência do transporte quântico para valores elevados de γ , diminuição de $K_{\min}$ ou aumento de $K_{\max}$. Para fins de comparação, apresentamos resultados das caminhadas quânticas sobre redes do tipo Barabási-Albert (B.-A.).

4.1 Introdução

O conceito de redes é uma ferramenta poderosa para a análise e estudo de sistemas complexos. Nas mais diferentes áreas como física, química, biologia, sociologia, ecologia, economia e ciência da computação, é possível fazer uso dos conceitos e fundamentos das redes complexas [60, 61, 101]. Inúmeras tentativas de descrever sistemas reais através de redes complexas já foram desenvolvidas. O primeiro modelo com excelentes previsões teóricas foi proposto por Erdős e Rényi em 1959 [102]. Através da fixação de N componentes (vértices) da rede, ligações eram adicionadas de maneira aleatória entre eles. Esse modelo de rede complexa ficou conhecido como *rede aleatória* (*random network*). Apesar de prever bons resultados dentro da sociologia, esse modelo encontrou dificuldades ao explicar outros diferentes sistemas. Assim, em 1998, Watts e Strogatz [103] propuseram uma nova maneira de representar sistemas que possuíam uma rede como estrutura subjacente. Mantendo fixo o número N de vértices, eles resolveram reconectar, de

maneira aleatória, as ligações das redes. Possuindo semelhança com o fenômeno conhecido como “*seis graus de separação*” [104], esse modelo recebeu o nome de *rede mundo-pequeno* (*small-world network*). Todavia, estes modelos continuavam sem respostas para algumas perguntas fundamentais. Por exemplo, seriam as redes do mundo real aleatórias?

Em 1999, porém, Barabási e Albert [69] mostraram, através de regras de ligação e novo mecanismo de crescimento das redes, que alguns sistemas reais possuem características do tipo livre de escala. Desde então, uma avalanche de trabalhos científicos foi identificada, confirmando inúmeros comportamentos com caráter livre de escala [60, 61, 105–107]. A definição clássica de uma rede livre de escala consiste na dependência da sua distribuição de grau, p_k , ao ser caracterizada por uma lei de potência da forma $k^{-\gamma}$. Uma lei de potência consiste em uma função $f(k)$ – que pode representar o grau dos vértices da rede, por exemplo – que é invariante sob uma re-escala, ou seja, $f(ck) = g(c)f(k)$, para qualquer valor da constante c [105]. Desta maneira, o modelo proposto por Barabási e Albert ficou conhecido como *rede livre de escala* (*scale-free network*). A principal característica destas redes consiste na existência de vértices concentradores de ligações, os chamados *hubs*. Ou seja, nós com elevado número de conexões e que tendem a atrair novas ligações adicionadas ao sistema. Devemos salientar, entretanto, que ainda persiste o debate em torno do conceito e definição do que realmente são as redes livres de escala e sua universalidade. Recentemente, este debate foi trazido novamente à tona, desta vez por Anna D. Broido e Aaron Clauset [108], que estabeleceram um novo critério de classificação das redes livres de escala (ler o artigo para mais detalhes). Não obstante, P. Holme [109] imediatamente, em comentário, publicou suas perspectivas sobre as redes livres de escala, em resposta à Broido e Clauset, apresentando as indefinições e incertezas acerca da área.

Em nossa análise do transporte quântico sobre redes livres de escala, adicionamos algumas restrições à distribuição de grau das redes [71]. Através de dois parâmetros de modularidade que restringem o grau máximo ($K_{\max}$) e mínimo ($K_{\min}$) permitidos a cada vértice, investigamos o comportamento das CTQWs. Justificamos o uso dessas restrições através das limitações espaciais em torno de cada nó, bem como pela existência mais fraca ou forte, das interações entre eles. Por outro lado, a mudança no expoente da lei de potência γ , resulta na modificação topológica das nossas GSFNs. Estamos, desta forma, interessados no monitoramento do transporte quântico sob influência dos parâmetros acima mencionados. O transporte quântico sobre estruturas altamente ramificadas, como árvores de Cayley ou redes estrelas [62, 73], apresentam fortes efeitos de localização. Por outro lado, a eficiência do transporte é maior sobre estruturas mais lineares [62]. Nossas GSFNs, no entanto, representam uma mistura não trivial entre segmentos ramificados e lineares, com sua topologia controlada através de γ , $K_{\min}$ e $K_{\max}$. Portanto, o nosso foco principal é contornar os efeitos de localização, presentes em estruturas do tipo estrela, através de redes mais lineares, desta forma, melhorando o transporte quântico.

Na Fig. 4.1 mostramos uma aplicação das nossas GSFNs como rede para o estudo de um modelo epidemiológico [30]. Neste trabalho, Galiceanu *et al.* utilizaram as GSFNs com estruturas subjacentes para a modelagem de um estudo epidemiológico baseado no problema alvo (*target problem*). Através de um modelo para reações químicas sobre redes, do tipo $A + B \rightarrow B$, é possível modificar o modelo SIR [110, 111], onde os vértices da rede representam indivíduos Suscetíveis, Infectados e Removidos (SIR). É importante salientarmos que, os parâmetros de modularidade, $K_{\min}$ e $K_{\max}$, neste caso, representam, por exemplo, medidas de restrição, como distanciamento ou isolamento social.

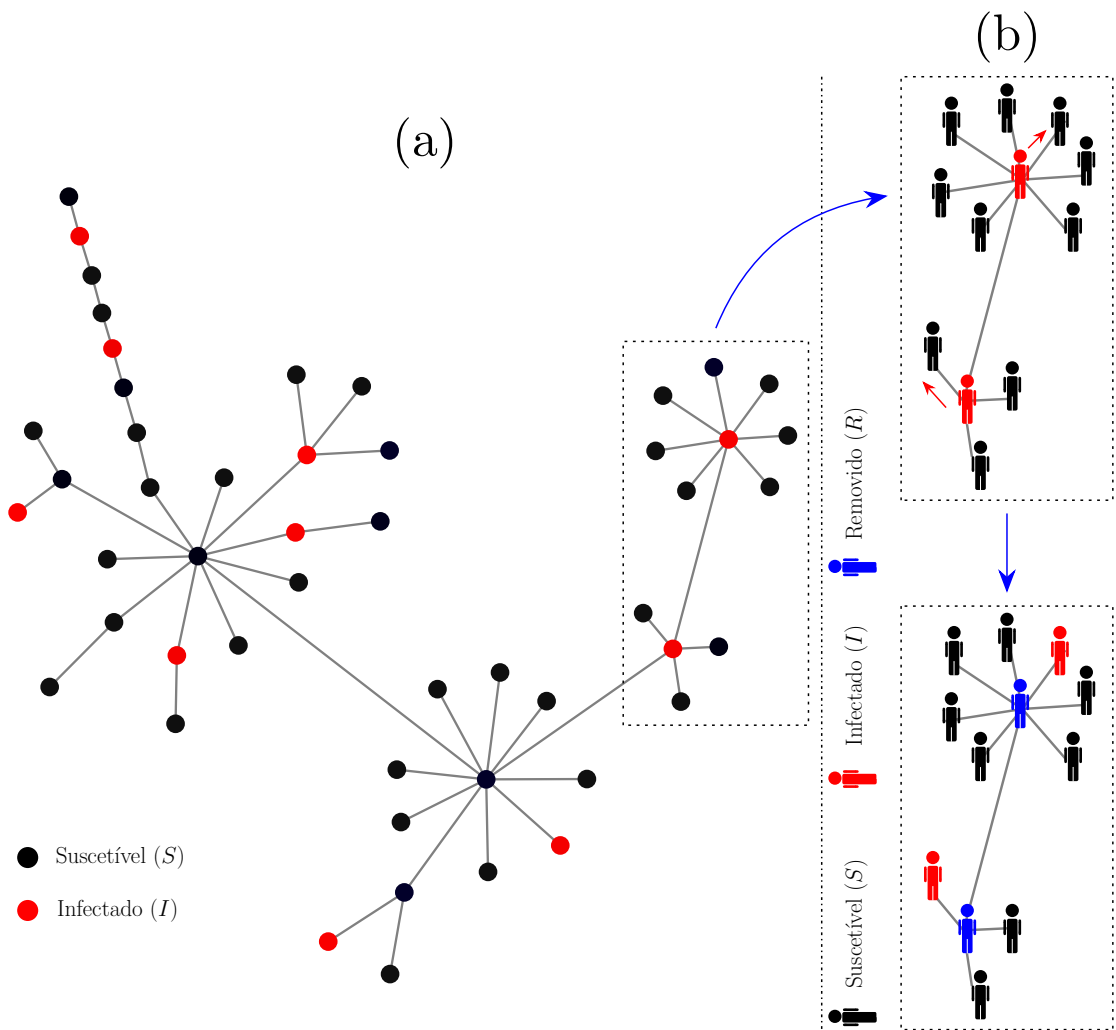


Figura 4.1 - Um exemplo da aplicação das GSFNs como estrutura subjacente para representar um modelo epidemiológico. Em (a) temos a representação da rede com $N = 50$ vértices, $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 49$ (estes parâmetros serão definidos na próxima seção). Em (b) temos a representação de um passo em que os caminhantes infectados (vermelho) contaminam dois indivíduos suscetíveis (preto). Após a infecção, os indivíduos são considerados removidos da rede (azul).

Fonte: Adaptado de Galiceanu *et al.* (2021).

4.2 Rede livre de escala generalizada (GSFN)

Representamos uma rede com sendo um conjunto de vértices (nós) conectados entre si através de ligações. Uma enorme quantidade de sistemas físicos, biológicos, químicos e sociais, para citar apenas alguns, podem ser representados desta maneira. Durante muitos anos três principais modelos dominaram o cenário de aplicações e entendimento de redes complexas. São eles: o modelo de rede aleatória, o modelo de tipo mundo pequeno e as redes livres de escala, como visto na seção anterior. Para qualquer um destes modelos, a ideia chave encontra-se na forma pela qual vértices e ligações são distribuídos. Emerge desta distribuição uma quantidade que chamamos de grau do vértice, representado por k , que significa o número de ligações existentes em um nó qualquer da rede. Para todas as SFNs, há uma propriedade básica, relativa à distribuição de grau, conhecida como decaimento do tipo lei de potência. Ou seja, a probabilidade para que exista um vértice com grau k é dada por:

$$\bar{p} \propto k^{-\gamma}, \quad (4.1)$$

onde γ é um parâmetro de escala positivo e está relacionado à densidade de conexões da rede. Isto é, um aumento ou diminuição deste parâmetro altera a forma como vértices conectam-se uns aos outros. Por este motivo, notamos como característica marcante de uma SFN a presença de vértices com elevado valor de k ; acima da média do número de graus da rede (“*hubs*”).

Podemos estabelecer maneiras de escrever uma distribuição de grau que satisfaça a relação da Eq. 4.1. M. Galiceanu propôs [112], ao estudar o problema alvo (*target problem*), uma nova forma de representar uma rede livre de escala. Supondo iniciar o grau k de um vértice qualquer da rede a partir de 2, ele obteve a seguinte representação para $\bar{p}$:

$$p_k = \frac{k^{-\gamma}}{\sum_{j=2}^{\infty} j^{-\gamma}}. \quad (4.2)$$

Note que na Eq. 4.2 a soma presente no denominador está restrita ao intervalo $[2, \infty]$. Todavia, há uma maneira de controlar o valor superior e estabelecer um limite inferior e superior para o somatório. De fato, isto foi feito por A. Jurjiu *et al.* em [71] ao estudarem a dinâmica de relaxação em redes poliméricas. Utilizaremos as ideias contidas neste estudo para a criação das redes utilizadas neste trabalho. Assim, a construção das nossas redes livres de escala obedecerá a seguinte probabilidade p_k para a distribuição de grau:

$$p_k = \begin{cases} \frac{k^{-\gamma}}{\sum_{j=K_{\min}}^{K_{\max}} j^{-\gamma}}, & \text{se } K_{\min} \leq k \leq K_{\max}; \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (4.3)$$

onde $K_{\min}$ e $K_{\max}$ representam os graus mínimo e máximo permitidos ao nó k , respectivamente. A presença do somatório no denominador garante que a soma de todas as probabilidades seja igual a 1. Através do controle dos três parâmetros (γ , $K_{\min}$ e $K_{\max}$) a topologia de nossas redes livres de escala pode ser estabelecida. Uma vez que podemos definir livremente a fixação do limites do somatório, as estruturas criadas são mais gerais que as presentes em [112]. Por este motivo, nossas redes são chamadas de *redes livres de escala generalizadas* (GSFNs). Isto posto, o processo de construção é iniciado com a fixação dos parâmetros γ , $K_{\min}$ e $K_{\max}$, e determinamos as probabilidades p_k através da implementação da Eq. 4.3. O crescimento das redes, portanto, é consequência direta da distribuição contida em Eq. 4.3, de onde os nós internos das estruturas em árvore possuirão graus modulados pelos parâmetros $K_{\min}$ e $K_{\max}$, exceto os nós periféricos. A Fig. 4.2 mostra os dois extremos da construção de redes do tipo GSFN. Ao realizarmos $K_{\min} = K_{\max} = N - 1$ teremos uma estrutura do tipo estrela. Por outro lado, ao fazermos $K_{\min} = K_{\max} = 2$ teremos uma cadeia linear. Isso deixa claro que o diferencial das nossas GSFNs consiste no trânsito livre entre estruturas mais lineares às estruturas com vértices contendo maior número de ligações.

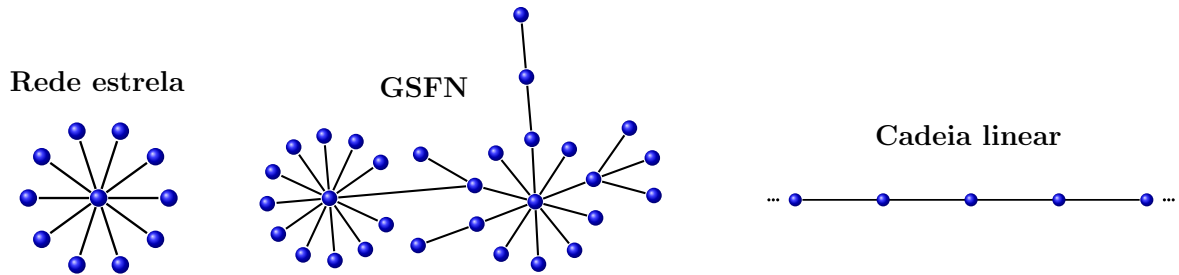


Figura 4.2 - Comparação entre uma GSFN e seus dois extremos de construção: uma rede estrela e uma cadeia linear. Nossas estruturas GSFNs são uma combinação entre vértices com grande quantidade de ligações (estrelas) e segmentos lineares (cadeia linear).

Para compreendermos o algoritmo de crescimento das GSFNs, vamos considerar, como exemplo, a estrutura presente na Fig. 4.3; de início, fixamos os seguintes valores: $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 99$. De imediato, adicionamos o vértice 1 e na sequência escolhemos, de maneira aleatória, o seu grau, através da distribuição Eq. 4.3. Para esta realização, em particular, foi escolhido o grau 15, ou seja, devemos conectar, ao vértice 1, quinze novos vértices [Fig. 4.3 (a)]. Após esta etapa, devemos escolher, aleatoriamente, entre os vértices abertos, o seu grau, novamente obedecendo à distribuição Eq. 4.3. Na Fig. 4.3 (b) podemos observar que um dos vértices escolhidos foi o de número 12 e o grau determinado foi igual a 3, desta forma, a ele devem ser adicionados três novos nós, porém este já possui uma conexão com o vértice 1, logo, foram adicionados apenas dois novos v-

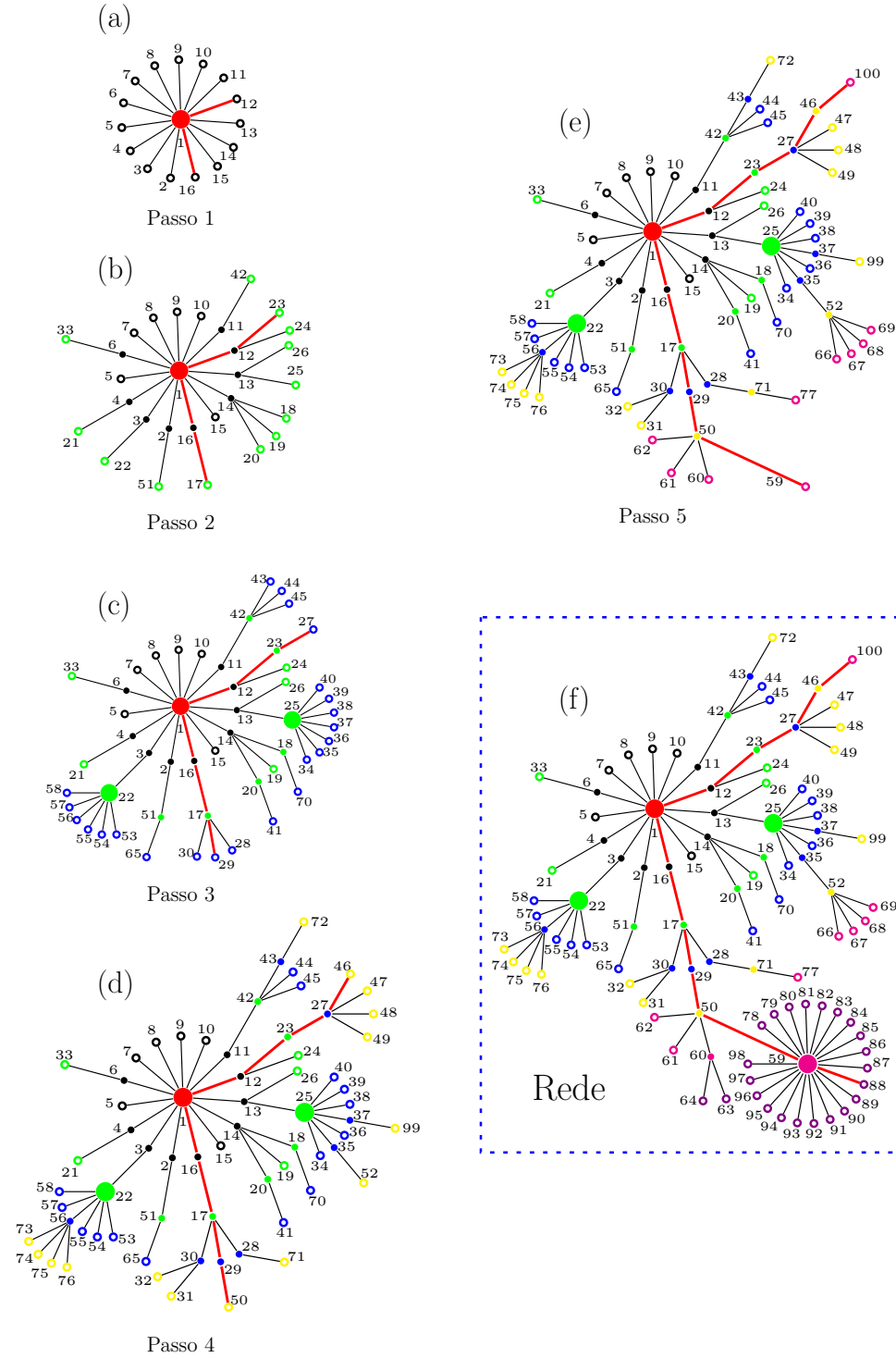


Figura 4.3 - Passos da construção de uma GSFN. Utilizamos $N = 100$ vértices, com $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 99$. Em (a) adicionamos 15 novos vértices ao nó 1, através da probabilidade dada em Eq. 4.3. Na sequência, novos vértices são escolhidos aleatoriamente para receberem novas ligações. O processo é iterado até o número N desejado. Observe que nós fechados recebem novas conexões, enquanto nós abertos não foram escolhidos para tal. Vértices com 6 ligações ou mais possuem diâmetro maior. A linha sólida em vermelho indica o maior caminho linear. Em (f) temos a rede final.

vértices (nominalmente, 23 e 24). Estes passos podem ser iterados até atingirmos o número N de nós. A Fig. 4.3 (f) apresenta o resultado final para a rede com os parâmetros fixados

acima. Observe que destacamos alguns aspectos estruturais relevantes: o caminho linear mais longo e vértices que possuem grau acima de seis. O primeiro está destacado através da linha sólida em vermelho e o segundo através de círculos com maior diâmetro. A coloração de cada nó é apenas para representar a ordem cronológica de criação ou a distância que possuem do centro da rede. Nós que foram escolhidos para receber uma nova ligação estão fechados, enquanto os que não foram estão abertos.

No Apêndice C outras estruturas GSFNs são apresentadas para outros valores do conjunto de parâmetros $(\gamma, K_{\min}, K_{\max})$. Em essência, o que temos é: quanto maior o valor do parâmetro γ , maior será a presença de segmentos lineares. No entanto, isto ocorre apenas para quando deixamos fixos os parâmetros de modularidade. Outra conclusão é a diminuição no número de *hubs* (vértices com alto número de conexões). Também observamos que, por exemplo, fixar γ e $K_{\max}$, variando o valor de $K_{\min}$, nos leva a GSFNs que possuem vértices com grau elevado. Por outro lado, fixar γ e $K_{\min}$, variando $K_{\max}$, nos leva a GSFNs que contém segmentos lineares mais longos.

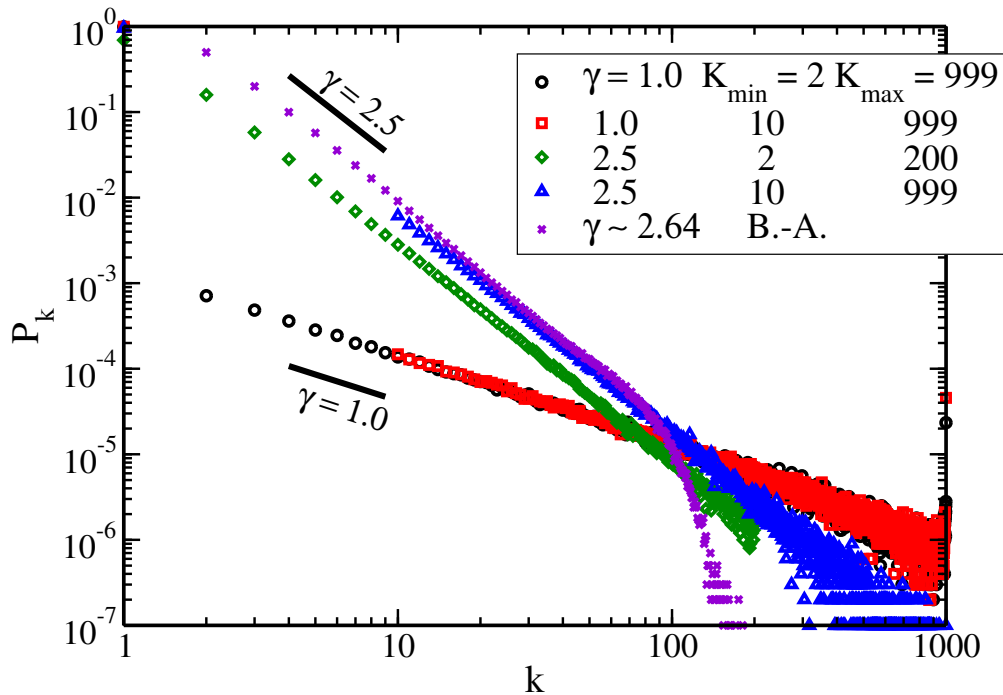


Figura 4.4 - Distribuição de grau p_k para GSFNs com número fixo de vértices $N = 1000$ e $S = 10000$ realizações. Utilizamos diferentes valores do parâmetro γ , bem como dos parâmetros de modularidade $K_{\min}$ e $K_{\max}$. Por razões de comparação, apresentamos também a distribuição de grau para o modelo de Barabási-Albert. Observamos o decaimento do tipo lei de potência e o comportamento de *fat tail*, características marcantes de SFNs.

Na Fig. 4.4 apresentamos a distribuição de grau p_k obtida a partir das nossas GSFNs. Com estes resultados podemos comparar o comportamento do tipo lei de potência com o que é previsto pela Eq. 4.3. Utilizamos os seguintes valores para os parâmetros $(\gamma, K_{\min}, K_{\max})$: $(1.0, 2, 999)$, $(2.5, 10, 200)$. Para uma melhor estatística, fizemos $S =$

10000 realizações para redes com a mesma quantidade de vértices, $N = 1000$. Com intuito de comparação, também apresentamos a distribuição de grau para uma rede complexa criada a partir do modelo de Barabási-Albert [69]. Neste último, mantemos os mesmos valores de S e N e deixamos fixo o expoente de lei de potência em $\gamma \approx 2.64$. Observe que, para valores pequenos e intermediários de k , recuperamos os expoentes previstos teoricamente, ou seja, 1.0 e 2.5. Outro aspecto notável, que ocorre para valores elevados do grau k , é o comportamento *fat tail*. Isto é, há uma pequena quantidade de vértices com grau elevado em contraste com uma quantidade maior de vértices com grau baixo. O controle dessas conexões é feito através do expoente da lei de potência. Uma vez que o modelo CTQW utiliza dos autovalores da matriz Laplaciano, todos os fatos acima terão grande influência no espectro de autovalores e nos resultados dos transportes clássico e quântico.

Na próxima seção, apresentaremos os espectros de autovalores para diferentes estruturas GSFNs. A análise desses valores nos permite inferir sobre as características da topologia da rede.

4.3 Espectro de autovalores para GSFNs

Todos os resultados apresentados nas Figs. 4.5 e 4.6 (a)-(b) possuem os seguintes valores: $N = 1000$ vértices e $S = 1000$ realizações do nosso algoritmo.

Na Fig. 4.5 mostramos o espectro de autovalores para GSFNs construídas a partir dos seguintes parâmetros: fixamos $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 999$ e variamos γ . Com estas escolhas, estamos aptos a investigar a influência da topologia das redes sobre o espectro de autovalores. Notamos, rapidamente, a alta degenerescência do autovalor 1, que é uma indicação clara da existência de estruturas do tipo estrela. A distribuição apresentada em Eq. 4.3 está confinada entre dois limites: redes com predominância de estrelas (γ baixo) e cadeias lineares (γ elevado). Desta forma, para fins de comparação, os espectros de autovalores para uma rede do tipo estrela, com $N - 1$ braços, e uma cadeia linear são apresentados. Importante lembrarmos que, uma rede estrela possui apenas três autovalores, são eles $\lambda_1 = 0$, $\lambda_N = N$ e $\lambda_2 = \dots = \lambda_{N-1} = 1$. Por outro lado, os N autovalores de uma cadeia linear são todos não degenerados, com valores entre 0 e 4. Assim, ao avaliarmos o espectro de autovalores para nossas GSFNs, notamos uma elevada degenerescência do autovalor 1 para redes com baixo valor de γ . Isto nos leva a concluir que, há predominância de segmentos semelhantes às estruturas do tipo estrela. Em contrapartida, para valores elevados de γ observamos uma diminuição na multiplicidade do autovalor 1. Isto nos indica que, para estas estruturas GSFNs, há predominância de segmentos lineares. Nossos resultados também indicam que, para valores elevados de γ , há uma diminuição no menor e maior autovalor.

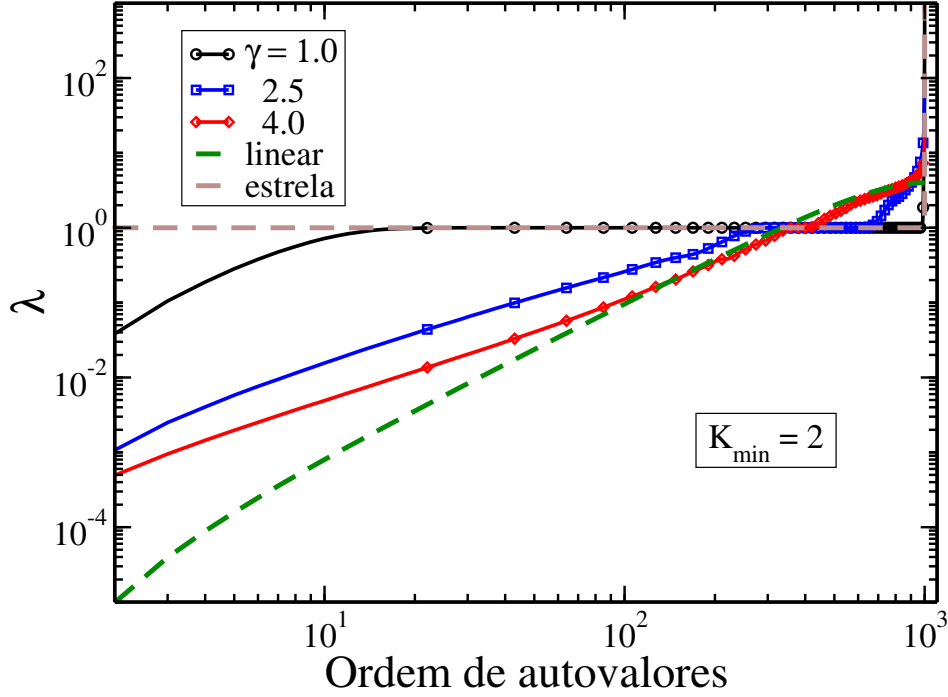


Figura 4.5 - Espectro de autovalores para GSFNs com número fixo de vértices $N = 1000$ e $S = 1000$ realizações. Investigamos a influência do parâmetro γ sobre o espectro e deixamos fixos $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 999$. Por razões de comparação, apresentamos também o espectro de autovalores para uma rede estrela e uma cadeia linear.

Na Fig. 4.6 focamos na influência dos parâmetros $K_{\min}$ e $K_{\max}$ sobre o espectro de autovalores. Em Fig. 4.6 (a) variamos o valor do grau mínimo permitido, $K_{\min}$, e fixamos os parâmetros γ e $K_{\max}$. Note que escolhemos $\gamma = 2.5$ e $K_{\max} = 999$, todavia resultados semelhantes foram encontrados para outros valores destes parâmetros. Para valores elevados de $K_{\min}$ notamos o surgimento de alta degenerescência do autovalor 1. Isto ocorre devido ao fato de termos poucos vértices com grau elevado. De fato, estruturas assim representam uma *família* de redes do tipo estrela. Por outro lado, a multiplicidade do autovalor 1 diminui para valores pequenos de $K_{\min}$. Implicando, assim, no surgimento de segmentos lineares. O fato de famílias de estrelas surgirem, faz com que o maior e o menor autovalor aumentem. Já na Fig. 4.6 (b), variamos o valor do grau máximo permitido, $K_{\max}$, e fixamos os parâmetros $\gamma = 2.5$ e $K_{\min} = 2$. Observe que, apesar de uma mudança drástica no valor de $K_{\max}$, o espectro de autovalores apresenta uma pequena alteração. Redes com valor intermediário ou elevado de γ , por exemplo $\gamma > 1$, possuem em sua constituição maior quantidade de vértices com menor grau k (isto pode ser visto na Fig. 4.4). Desta forma, poucos vértices irão sentir qualquer alteração ao mudarmos o valor de $K_{\max}$. De fato, a dependência da topologia da rede é mais pronunciada quando tomamos valores menores de γ . De maneira geral, ao diminuirmos o valor de $K_{\max}$ observamos uma diminuição na magnitude do maior e do menor autovalor. Esta diminuição nos indica o surgimento de GSFNs com mais segmentos lineares e estruturas com poucas ramificações. Podemos confirmar a última afirmação através da observação da degeneres-

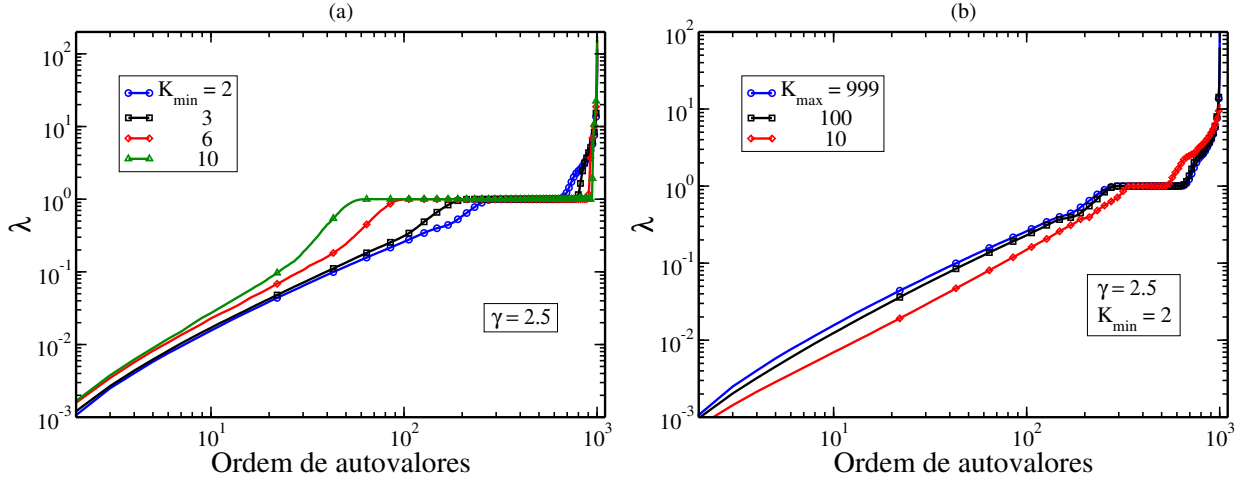


Figura 4.6 - Espectro de autovalores para GSFNs com número fixo de vértices $N = 1000$ e $S = 1000$ realizações. Em (a) investigamos a influência do grau mínimo permitido, $K_{\min}$, sobre o espectro e deixamos fixos $\gamma = 2.5$ e $K_{\max} = 999$. Já em (b) investigamos a influência do grau máximo permitido, $K_{\max}$, sobre o espectro e deixamos fixos $\gamma = 2.5$ e $K_{\min} = 2$.

cência do autovalor $\lambda = 1$, que é menor para valores pequenos de $K_{\max}$.

Uma vez que nossas estruturas GSFNs possuem distribuição de grau do tipo lei de potência, apresentamos, na Fig. 4.7, uma comparação entre o espectro de autovalores entre GSFNs e redes construídas a partir do modelo de Barabási-Albert (B.-A.) [69]. Em descrição rápida, o modelo B.-A. consiste em: dado m_0 vértices iniciais, a estes serão conectados m ($\leq m_0$) novos vértices (crescimento). Cada novo vértice adicionado seguirá uma regra de anexação preferencial (*preferential attachment rule*) dada por $p(k_i) = \frac{k_i}{\sum_j k_j}$. Utilizamos, neste trabalho, $m_0 = 3$. O processo de construção termina ao alcançarmos o número total N de vértices. A análise desta construção nos mostra que, estas redes possuem uma distribuição de grau do tipo lei de potência, onde $\gamma \approx 2.6$. E mais, estas redes são compostas por *loops*, isto é, regiões onde encontramos um caminho fechado entre as ligações. Em contraste, nossas estruturas GSFNs não possuem *loops*; elas são redes do tipo árvore. A existência de *loops* altera o espectro de autovalores, o que resulta em mudanças significativas para os transportes clássico e quântico. Nossos resultados foram encontrados para estruturas GSFNs e B.-A. com a seguinte quantidade de nós: $N = 100, 500$ e 1000 . Para redes GSFNs utilizamos para a densidade de conexões $\gamma = 2.6$ e normalizamos, para melhor apresentação, o eixo x ao tamanho N das redes. Observamos que, na região de autovalores pequenos, há uma diferença significativa entre as redes construídas a partir dos modelos acima. No entanto, na região de autovalores maiores, os valores são comparáveis. Note que, a degenerescência de $\lambda = 1$ é mais acentuada para redes GSFNs, enquanto que, para redes do tipo B.-A., isto praticamente desaparece.

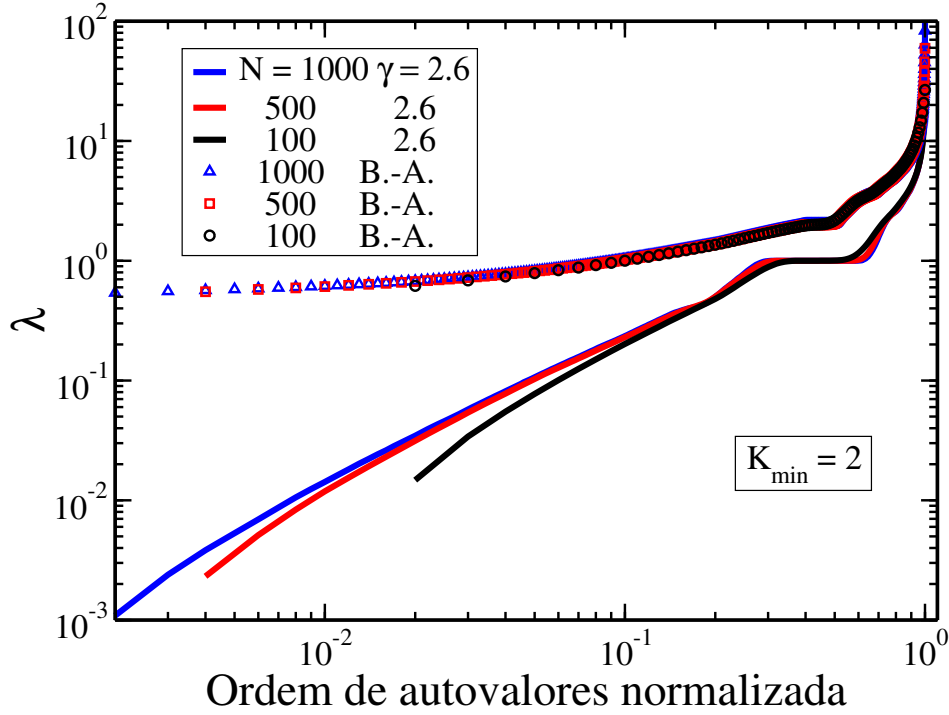


Figura 4.7 - Espectro de autovalores para GSFNs com número variável de N vértices e S realizações. Deixamos fixos: $\gamma = 2.6$, $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = N - 1$. Por razões de comparação, apresentamos também o espectro de autovalores para redes construídas a partir do modelo B.-A.. Para melhor apresentação, normalizamos o eixo x ao tamanho N das redes.

Na próxima seção, serão mostrados os comportamentos dos transportes clássico e quântico sobre nossas estruturas GSFNs. Avaliamos a influência do parâmetro γ e dos parâmetros de modularidade $K_{\min}$ e $K_{\max}$. Comparamos nossos resultados com os obtidos a partir do modelo B.-A..

4.4 Transportes clássico e quântico sobre GSFNs

Investigaremos, aqui, o comportamento dos transportes clássico (CTRW) e quântico (CTQW) sobre estruturas GSFNs. Inicialmente, analisamos as características do transporte clássico através da probabilidade $\bar{p}(t)$ Eq. 2.12. Em seguida, nos concentramos em avaliar os resultados para o transporte quântico obtidos através da probabilidade média $\bar{\pi}(t)$ Eqs. 2.9 e 2.11.

4.4.1 Transporte clássico

Todos os resultados apresentados nas Figs. 4.8 e 4.9 (a)-(b) possuem os seguintes valores: $N = 1000$ vértices e $S = 1000$ realizações.

Na Fig. 4.8 mostramos os resultados da influência do parâmetro γ sobre a probabilidade média de retorno, $\bar{p}(t)$, dada pela Eq. 2.12. Essa última representa a probabilidade de um caminhante clássico retornar ao seu nó inicial. Avaliar a influência

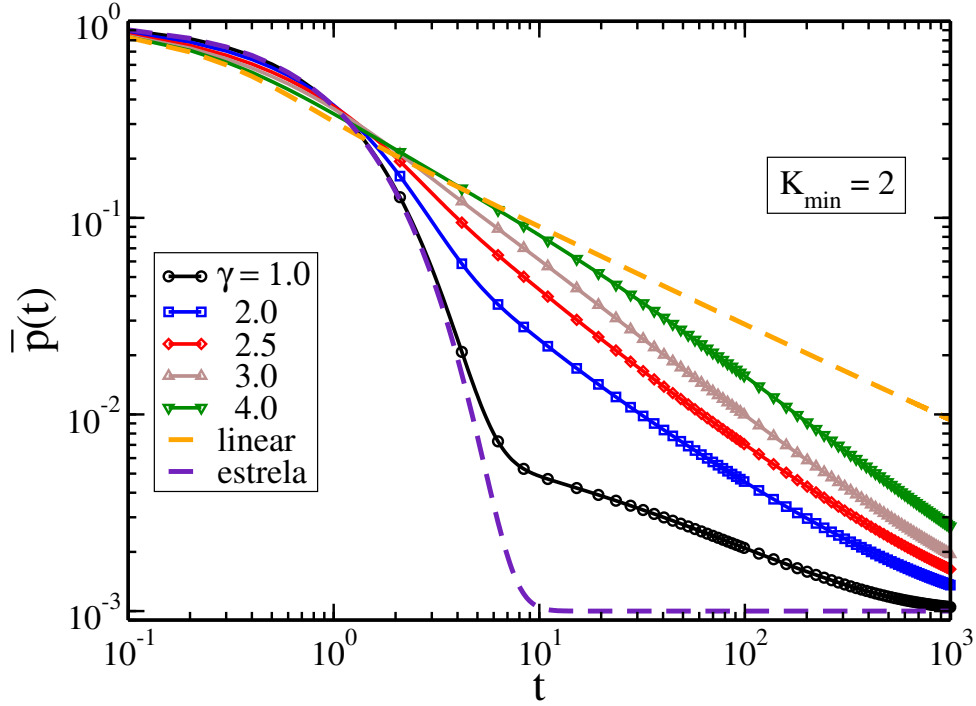


Figura 4.8 - Probabilidade média de retorno clássica, $\bar{p}(t)$, sobre GSFNs com $N = 1000$ vértices e $S = 1000$ realizações. Investigamos a influência do parâmetro γ sobre a probabilidade clássica, mantendo fixos $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 999$. Por razões de comparação, apresentamos também o comportamento de $\bar{p}(t)$ sobre uma rede estrela e uma cadeia linear, ambas com mesmo tamanho das redes GSFNs.

de γ significa entender como as conexões entre os vértices, ou seja, a topologia da rede, modifica o transporte do caminante. Deixamos fixo o valor do grau mínimo permitido em $K_{\min} = 2$ e o grau máximo permitido em $K_{\max} = 999$ e fazemos $\gamma = (1.0, 2.5, 4.0)$. Notamos que, o comportamento assintótico da probabilidade média de retorno clássica é alcançado para todas as redes GSFNs. De fato, para tempos longos, o valor de equipartição $\frac{1}{N}$ é atingido independentemente da topologia da rede, dependendo apenas do número N de nós. Por razões de comparação, também apresentamos o transporte clássico para a rede estrela e a cadeia linear. Nossos resultados indicam que para uma rede estrela, o tempo de equilíbrio t_{eq} , isto é, o tempo computacional para alcançar o valor de equipartição, foi de $t_{\text{eq}} \approx 11$. Por outro lado, para uma cadeia linear o tempo de equilíbrio foi atingido em $t_{\text{eq}} \approx 5 \times 10^5$. Por ser um valor elevado, não está presente na figura. Nossas estruturas GSFNs estão compreendidas entre esses dois limites, desta forma, observamos que o t_{eq} é menor para GSFNs com menor valor de γ . Ou seja, é um tempo de equilíbrio menor para redes com maior quantidade de estrelas. Todavia, para a região de tempos intermediários observamos que a probabilidade média de retorno clássica possui um decaimento do tipo lei de potência, isto é, $\bar{p}(t) \propto t^{-\alpha}$. Obtemos, para GSFNs com $\gamma = 1.0$, o expoente $\alpha = 0.38$, enquanto que para redes com $\gamma = 4.0$, temos $\alpha = 0.77$. Observe que, para uma rede estrela com $N - 1$ braços, a região de tempos intermediários apresenta um decaimento abrupto, em contraste com uma cadeia linear, a qual possui o expoente de lei de potência $\alpha = 0.5$. Agora, para regiões de tempos pequenos, compreendida em $t \leq 10^0$,

a probabilidade clássica apresenta um comportamento diferente para uma rede estrela, uma cadeia linear e GSFNs. Notamos que para uma rede estrela e GSFNs com $\gamma \leq 2.0$ o decaimento de $\bar{p}(t)$ é do tipo exponencial, isto é,

$$\bar{p}(t) \propto e^{-\beta t}. \quad (4.4)$$

Encontramos $\beta = 0.98$ para uma rede estrela e GSFNs com $\gamma = 1.0$. Por outro lado, temos $\beta = 0.92$ para GSFNs com $\gamma = 2.0$. Ainda para tempos $t \leq 10^0$, o decaimento da probabilidade média de retorno clássica, é melhor ajustada (*fit*) por um função inversa, para uma cadeia linear e GSFNs com $\gamma > 2.0$, isto é,

$$\bar{p}(t) \propto \frac{1}{1 + \epsilon t}. \quad (4.5)$$

Para uma cadeia linear temos $\epsilon = 2.27$, enquanto que para redes GSFNs obtemos $(\gamma, \epsilon) = (2.5, 1.71), (3.0, 1.77)$ e $(4.0, 1.96)$.

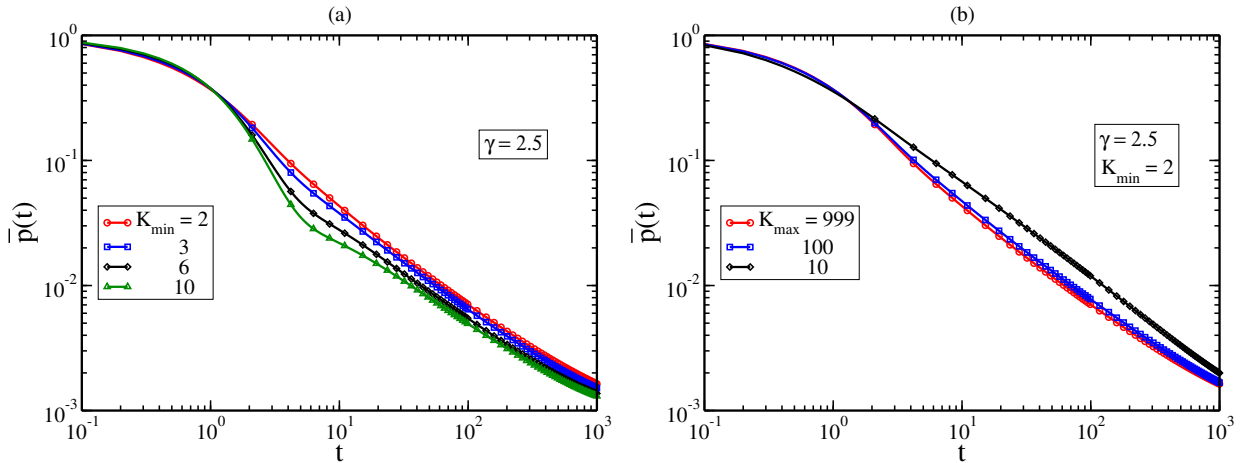


Figura 4.9 - Probabilidade média de retorno clássica, $\bar{p}(t)$, sobre GSFNs com $N = 1000$ vértices e $S = 1000$ realizações. Em (a) investigamos a influência do grau mínimo permitido, $K_{\min}$, sobre a probabilidade clássica, mantendo fixos $\gamma = 2.5$ e $K_{\max} = 999$. Em (b) investigamos a influência do grau máximo permitido, $K_{\max}$, sobre a probabilidade clássica, mantendo fixos $\gamma = 2.5$ e $K_{\min} = 2$.

Estamos, agora, interessados em investigar a influência dos parâmetros de modularidade, $K_{\min}$ e $K_{\max}$, sobre o transporte clássico. Para isso, na Fig. 4.9 (a) variamos o menor grau permitido, $K_{\min} = 2, 3, 6$ e 10 , e fixamos $\gamma = 2.5$ e $K_{\max} = 999$. Notamos que a probabilidade média de retorno clássica, $\bar{p}(t)$, é fortemente influenciada pelo espectro de autovalores apresentado na Fig. 4.6 (a). Identificamos que a convergência para o valor de equipartição, $\frac{1}{N}$, é caracterizada pelo menor autovalor diferente de zero, isto é, por λ_2 . Este comportamento é chamado de *gap spectral* Ref. [60]. De fato, para valores elevados do autovalor λ_2 teremos um decaimento de $\bar{p}(t)$ mais acentuado (rápido). Ao avaliarmos a Fig. 4.6 (a), encontramos $\lambda_2 = 0.0010$ para redes com $K_{\min} = 2$ e $\lambda_2 = 0.0016$ para redes com $K_{\min} = 10$. Ou seja, os valores de λ_2 são muito próximos, apesar do aumento

de $K_{\min}$. Isto explica o fato de que, em regiões de tempo intermediário, $\bar{p}(t)$ comporta-se de maneira semelhante, apesar da alteração do menor grau permitido. Ao aumentarmos o valor de $K_{\min}$, notamos que a probabilidade $\bar{p}(t)$ torna-se menor, indicando uma caminhada clássica mais acentuada. Isto ocorre devido ao surgimento de estruturas que formam famílias de estrelas. Outra característica que podemos observar é a quebra no comportamento do tipo de lei de potência na região de tempos intermediários. Conforme $K_{\min}$ torna-se maior, um pequeno pico surge no gráfico para $\bar{p}(t)$; e esse fato pode ser comparado ao apresentado para uma rede estrela na Fig. 4.8. Todavia, este comportamento não possui grande impacto sobre essa região de tempo. Notamos que, a quebra na lei de potência alcança apenas uma ordem de grandeza em relação à valores diferentes de $K_{\min}$. E de fato, isto pode ser explicado através da multiplicidade do autovalor $\lambda = 1$, bem como da largura do *gap* entre esse autovalor e o próximo diferente dele. Note que, esse *gap* torna-se mais pronunciado, quanto maior for o valor para o menor grau permitido [ver Fig. 4.6 (a)]. Enquanto variamos $K_{\min}$, nossos resultados apontam para o mesmo comportamento, embora tenhamos valores diferentes de γ e $K_{\max}$. Já na Fig. 4.9 (b), variamos o maior grau permitido, $K_{\max} = 10, 100$ e 999 , e fixamos $\gamma = 2.5$ e $K_{\min} = 2$. Para o caso limite, em que $K_{\min} = K_{\max}$, teríamos assim uma cadeia linear pura. Nossa análise, novamente, ficará restrita apenas à região de tempos intermediários; fazemos isto pois, é onde $\bar{p}(t)$ apresenta comportamento distinto. Pode-se observar que, a diminuição no valor de $K_{\max}$ implica no aumento da probabilidade média de retorno clássica. E na região de tempos intermediários, notamos que $\bar{p}(t)$ decai com uma lei de potência, apresentando um expoente $\alpha = 0.76$ igual para todos os valores apresentados de $K_{\max}$. Isto ocorre pois, ao baixarmos o valor do maior grau permitido, as estruturas GSFNs possuem maior quantidade de segmentos lineares. E se lembrarmos do caso limite mencionado acima, temos que nossa rede tende para uma cadeia linear pura, e o comportamento anterior pode ser comparado à Fig. 4.8 para o caso de uma cadeia linear. Podemos relacionar esse comportamento também com o espectro de autovalores da Fig. 4.6 (b). Observe que, a baixa degenerescência do autovalor $\lambda = 1$ implica em redes mais lineares.

Na Fig. 4.10 investigamos a influência da alteração do tamanho das nossas redes sobre o transporte clássico. Construímos redes GSFNs com tamanhos $N = 1000, 500$ e 100 ; para uma melhor estatística, fizemos $S = 1000$ realizações do nosso algoritmo. Mantivemos fixos os parâmetros γ , $K_{\min}$ e $K_{\max}$ em 2.6 , 2 e $N - 1$, respectivamente. Por questões de comparação, apresentamos os resultados de $\bar{p}(t)$ para uma rede livre de escala construída a partir do modelo B.-A. De imediato, podemos observar que para redes com *loops*, isto é, redes do tipo B.-A., o valor de equipartição, $\frac{1}{N}$, é alcançado mais rapidamente, em contraste com estruturas GSFNs de mesmo tamanho. Essa diferença, possui um tamanho maior em mais de três ordens de grandeza. Isto ocorre devido ao fato de possuírmos vértices com maior grau, ou seja, há mais ligações entre os nós. Desta for-

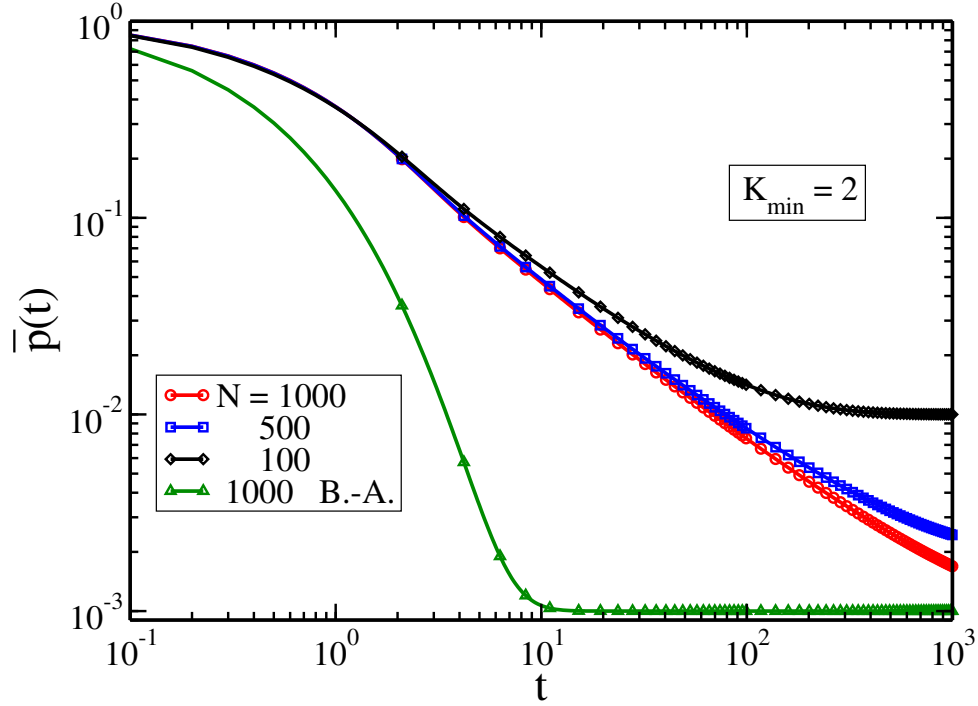


Figura 4.10 - Probabilidade média de retorno clássica, $\bar{p}(t)$, sobre GSFNs com número N de vértices variável e $S = 1000$ realizações. Deixamos fixos: $\gamma = 2.6$, $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = N - 1$. Por razões de comparação, apresentamos também o comportamento de $\bar{p}(t)$ sobre uma rede construída a partir do modelo B.-A. (com $N = 1000$).

ma, para o modelo B.-A., a probabilidade média de retorno clássica possui valores menores, o que significa maior eficiência no espalhamento do caminhante sobre a rede. Identificamos comportamento semelhante, para $\bar{p}(t)$, também sobre uma rede estrela ou sobre estruturas GSFNs com grau mínimo permitido, $K_{\min}$, elevado.

4.4.2 Transporte quântico

Todos os resultados apresentados nas Figs. 4.11, 4.12 e 4.13 possuem os seguintes valores: $N = 1000$ vértices e $S = 1000$ realizações.

Na Fig. 4.11 mostramos os resultados da influência do parâmetro γ , isto é, da topologia da rede, sobre a probabilidade média de retorno quântica, $\bar{\pi}(t)$, dada pela Eq. 2.11. Alteramos o valores de γ entre 1.0 e 4.0, mantendo fixos $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 999$. Observe que, também apresentamos os resultados para uma rede estrela com $N - 1$ braços e para uma cadeia linear. Por razões de comparação, também expomos os resultados de $\bar{\pi}(t)$ para redes construídas a partir do modelo B.-A. A primeira observação refere-se ao decaimento da probabilidade quântica: observamos que para todas as redes livres de escala (GSFNs e B.-A.), o decaimento encontra-se entre os dois casos extremos, isto é, entre uma rede estrela e uma cadeia linear. Temos fortes efeitos de localização, ou seja, menor eficiência no transporte quântico, para estruturas do tipo estrela, enquanto que pa-

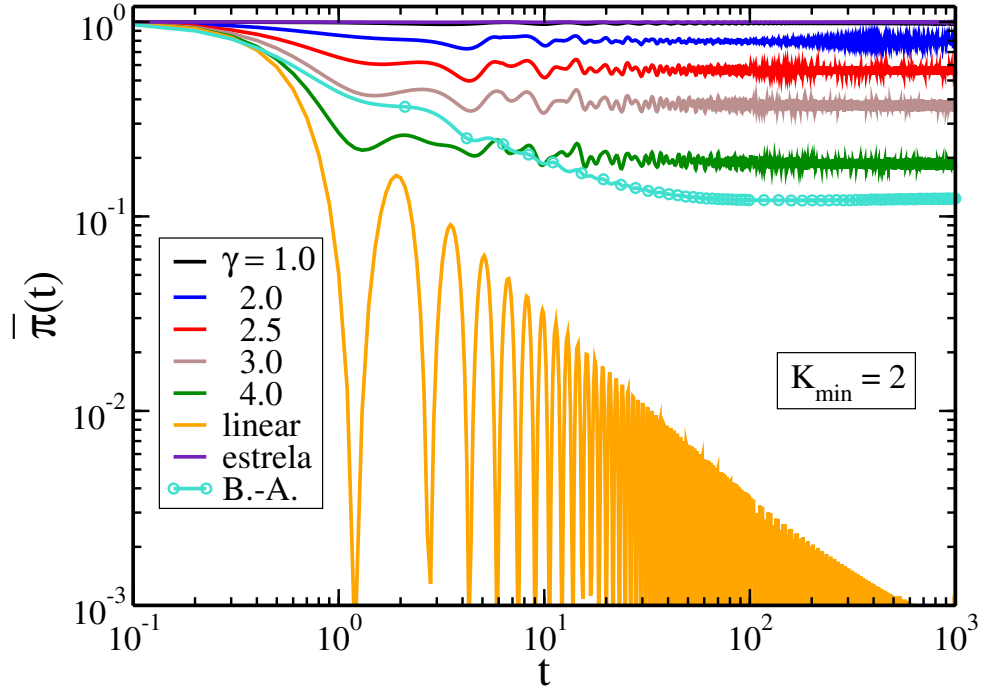


Figura 4.11 - Probabilidade média de retorno quântica, $\bar{\pi}(t)$, sobre GSFNs com $N = 1000$ vértices e $S = 1000$ realizações. Investigamos a influência do parâmetro γ sobre a probabilidade quântica, mantendo fixos $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 999$. Por razões de comparação, apresentamos também o comportamento de $\bar{\pi}(t)$ sobre uma rede estrela e uma cadeia linear, ambas com mesmo tamanho das redes GSFNs, assim como para uma rede construída a partir do modelo B.-A..

ra redes mais lineares, o transporte é mais eficaz. E essa última afirmação, pode ser observada, também, por meio do rápido decaimento da probabilidade quântica à um valor médio em torno do qual $\bar{\pi}(t)$ oscila. Ou seja, a flutuação média que ocorre ao redor do valor da probabilidade quântica. Notamos que, para estruturas GSFNs que possuem um parâmetro γ elevado, a amplitude de oscilação torna-se menor e o decaimento ao valor médio de oscilação ocorre mais rapidamente. Neste caso, ao aumentarmos γ acima dos valores utilizados na Fig. 4.11, esperamos que o comportamento da probabilidade média de retorno quântica se torne semelhante ao de uma cadeia linear. Assim, teríamos a presença de uma forte oscilação. Nossos resultados indicam que, um aumento no valor de γ não resulta, necessariamente, em um aumento na eficiência do transporte quântico. Por exemplo, para redes com $\gamma = 1.0$, o valor médio encontrado para a oscilação de $\bar{\pi}(t)$ é igual a 0.98, enquanto que para estruturas com $\gamma = 4.0$, encontramos 0.18. Este fato pode ser explicado através da presença de vértices com alto número de ligações, mesmo para valores elevados de γ . Agora, ao avaliarmos o comportamento para a probabilidade média quântica sobre redes construídas através do modelo B.-A., notamos um comportamento interessante. A probabilidade $\bar{\pi}(t)$ é menor que todas as outras encontradas para GSFNs, apesar de $\gamma = 2.64$. Para nossas estruturas GSFNs, que são redes do tipo árvore, mesmo com um expoente similar, $\gamma = 2.5$, a probabilidade média quântica possui valores elevados, significando fortes efeitos de localização. Um olhar atento à probabilidade quântica para

redes do tipo B.-A. nos indica que sua oscilação em torno de um valor médio é baixa. De fato, encontramos um valor de 0.12 em torno do qual $\bar{\pi}(t)$ oscila. Esse valor é menor, em quase duas ordens de grandeza, que o valor de equipartição clássico $\frac{1}{N}$. Podemos assim, notar que a oscilação para redes do tipo B.-A. é quase inexistente. No entanto, observe que, em comparação à nossas estruturas GSFNs, a probabilidade quântica para o modelo B.-A. alcança o valor médio de oscilação em um tempo relativamente maior. Todas essas propriedades podem ser explicadas devido à presença de *loops* em SFNs criadas a partir do modelo B.-A.. Esses últimos, aumentam o número de segmentos lineares e o número de ligações presentes na rede.

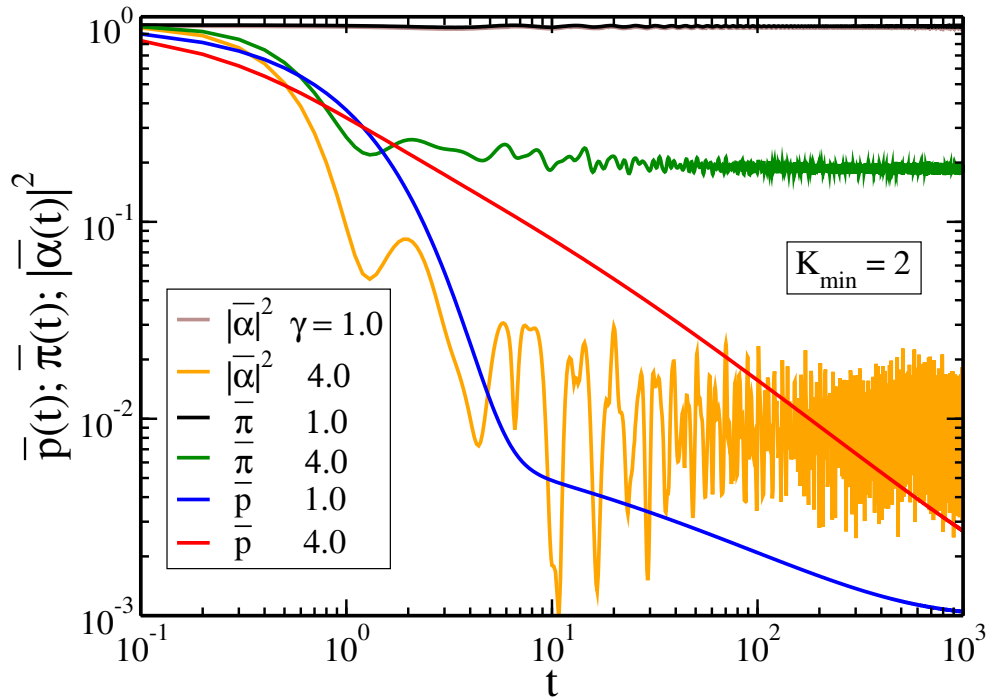


Figura 4.12 - Comparação entre a probabilidade média de retorno clássica, $\bar{p}(t)$, probabilidade média de retorno quântica, $\bar{\pi}(t)$, e o limite inferior quântico, $|\bar{\alpha}(t)|^2$, sobre GSFNs com $N = 1000$ vértices e $S = 1000$ realizações. Investigamos a influência do parâmetro γ , para o qual foram escolhidos dois valores: 1.0 e 4.0. Ou seja, estruturas com grandes estrelas e redes com maior quantidade de segmentos lineares, respectivamente. São mantidos fixos $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 999$.

Na Fig. 4.12 fazemos uma comparação entre os comportamentos das probabilidades médias clássica e quântica. Isto é, avaliamos em um mesmo gráfico as características de $\bar{p}(t)$, Eq. 2.12, $\bar{\pi}(t)$, Eq. 2.11, e seu limite inferior $\bar{\alpha}(t)$, Eq. 2.13. Optamos por manter fixos os valores dos graus mínimo e máximo permitidos em $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 999$, respectivamente. Além disso, nossas estruturas GSFNs foram construídas a partir de dois valores de densidade da rede, $\gamma = 1.0$ e $\gamma = 4.0$. Nossa análise inicia com as estruturas que possuem $\gamma = 1.0$, que como já foi comentado, são redes constituídas por estruturas do tipo estrela com um elevado número de braços. Observamos que, sobre essas estruturas o caminhante quântico experimenta um forte efeito de localização. Ao analisarmos o

comportamento tanto de $\bar{\pi}(t)$ quando de $\bar{\alpha}(t)$, temos probabilidades com valores elevados, indicando maior probabilidade de retorno ao vértice inicial. Com efeito, encontramos um valor de 0.98 para $\bar{\pi}(t)$ e 0.96 para $\bar{\alpha}(t)$ em torno do qual as duas oscilam, respectivamente. Ao compararmos o comportamento quântico com o clássico, notamos que a probabilidade média clássica, $\bar{p}(t)$, é quase três ordens de grandeza menor do que sua análoga quântica. Não obstante, seu tempo de decaimento também é diferente, sendo alcançado em cerca de duas ordens de grandeza após as probabilidades quânticas. Ressaltamos que, sobre redes com predominância de estruturas do tipo estrela, o caminhante quântico possui maior probabilidade, em relação ao clássico, de retornar ao vértice inicial. Isto ocorre devido à sua natureza ondulatória e aos efeitos de interferência. Novamente, para a probabilidade média clássica, o limite de longo tempo, $\frac{1}{N}$, é alcançado. Em contraste, no caso quântico a probabilidade média de retorno oscila em torno de um certo valor, que pode ser maior que o valor de equipartição clássico. Importante comentarmos que, não podemos concluir, da afirmação anterior, que a caminhada clássica é mais rápida do que a caminhada quântica. Na verdade, isto significa apenas que no limite de longo tempo a probabilidade é igualmente distribuída entre todos os vértices [68]. E isto está diretamente relacionado ao fato de que, para GSFNs com $\gamma = 1.0$, temos uma grande multiplicidade do autovalor $\lambda = 1$ (ver Fig. 4.5). Agora, nos voltamos para estruturas GSFNs que possuem $\gamma = 4.0$, ou seja, como já havíamos mencionado, estruturas com a presença de segmentos mais lineares. Notamos que, o transporte quântico aumenta significativamente, todavia os efeitos de localização continuam presentes. Observe que, permanece o comportamento oscilatório para as probabilidades quânticas, desta vez com uma amplitude de oscilação maior. Porém, ambas alcançam o valor médio de longo tempo mais rapidamente, quando comparadas ao caso clássico. Ao aumentarmos o valor do parâmetro γ , nossas estruturas GSFNs tornam-se mais lineares, e desta forma fortes efeitos de oscilação em torno de um valor médio são detectados, tanto para $\bar{\pi}(t)$ quanto para $\bar{\alpha}(t)$. Não obstante, no caso limite para γ elevado, obtemos uma cadeia linear, o que nos leva diretamente à compreensão de um rápido decaimento das probabilidades quânticas. Essa última afirmativa, é um indício de eficiência para caminhadas quânticas (CTQWs), em contraste com as caminhadas clássicas (CTRWs) [62]. Além disso, nas regiões de tempo intermediário, temos um comportamento de escala no decaimento de $\bar{p}(t)$, onde obtemos $\bar{p}(t) \propto t^{-1/2}$. Enquanto que as probabilidades quânticas possuem t^{-1} .

Estamos, agora, interessados em avaliar a influência dos graus mínimo e máximo permitidos, $K_{\min}$ e $K_{\max}$, respectivamente, sobre a probabilidade média de retorno quântica, Fig. 4.13. Iniciamos com a análise da influência de $K_{\min}$ apresentada na Fig. 4.13 (a), para o qual as estruturas GSFNs foram construídas a partir dos valores fixos de $\gamma = 2.5$ e $K_{\max} = 999$. Observe que, há um aumento nos valores da probabilidade quântica $\bar{\pi}(t)$ quando aumentados o valor do grau mínimo permitido. Isto nos indica que há fortes

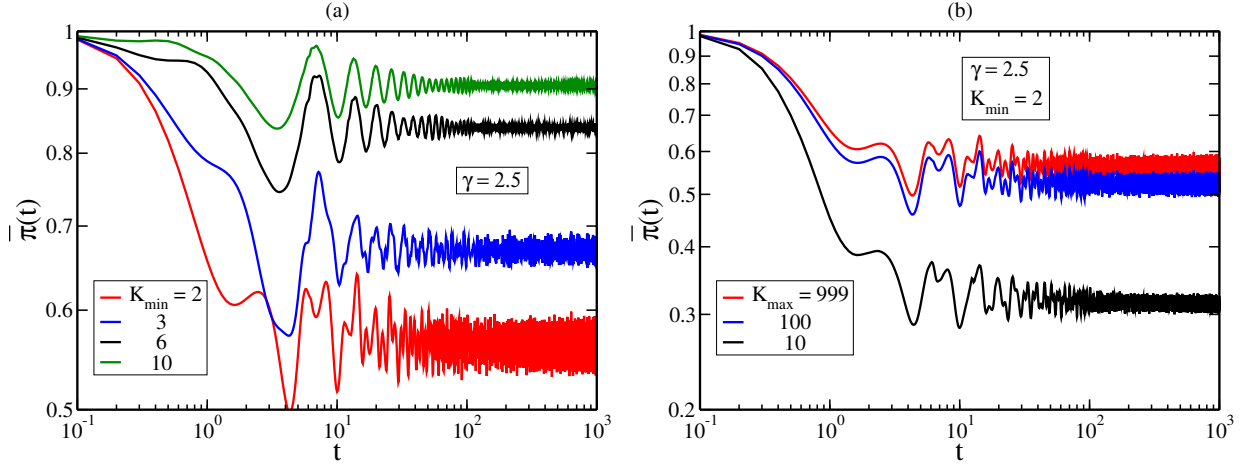


Figura 4.13 - Probabilidade média de retorno quântica, $\bar{\pi}(t)$, sobre GSFNs com $N = 1000$ vértices e $S = 1000$ realizações. Em (a) investigamos a influência do grau mínimo permitido, $K_{\min}$, sobre a probabilidade quântica, mantendo fixos $\gamma = 2.5$ e $K_{\max} = 999$. Em (b) investigamos a influência do grau máximo permitido, $K_{\max}$, sobre a probabilidade quântica, mantendo fixos $\gamma = 2.5$ e $K_{\min} = 2$.

efeitos de localização, ou seja, o caminhante quântico tende a retornar para seu vértice inicial. Vale a pena lembrarmos que, estruturas GSFNs com valor elevado de $K_{\min}$ são compostas por grandes estrelas, e como já mencionado, temos famílias de estrelas. Além disso, notamos que o tempo para alcançar o valor médio de longo tempo, isto é, o valor em torno do qual a probabilidade quântica oscila, é quase que o mesmo para os diferentes valores de $K_{\min}$ calculados. De fato, nossos resultados apontam para valores de $\bar{\pi}(t)$ que são quase o dobro um do outro. Ou seja, para $K_{\min} = 2$ temos $\bar{\pi}(t) \approx 0.55$, enquanto que, para $K_{\min} = 10$ temos $\bar{\pi}(t) \approx 0.90$. Além do mais, observe que a amplitude de oscilação em torno do valor médio de longo tempo é mais acentuada para valores menores do grau mínimo permitido. O contrário, isto é, para valores maiores de $K_{\min}$, observamos menor amplitude de oscilação. Com efeito, para esse último caso, nossas estruturas GSFNs possuem estrelas com tamanho maior. Esse comportamento pode ser inferido a partir dos resultados contidos na Fig. 4.11, no qual estão apresentados os resultados para os dois casos limites: uma rede estrela, com $N - 1$ braços, e uma cadeia linear. Encontramos elevadas amplitudes de oscilação para uma cadeia linear, enquanto que, para uma rede estrela, temos uma amplitude extremamente menor. Já na Fig. 4.13 (b) nossa análise volta-se para a influência de $K_{\max}$ sobre a probabilidade quântica. As estruturas GSFNs foram construídas a partir dos valores fixos de $\gamma = 2.5$ e $K_{\min} = 2$. Observe que, para valores pequenos do grau máximo permitido temos probabilidades menores. Isto nos indica que há a presença de redes GSFNs com maior quantidade de segmentos lineares. Desta forma, o caminhante quântico terá maior eficiência em sua caminhada sobre as redes GSFNs, possuindo menor probabilidade de retorno ao vértice inicial. Diferentemente da influência dos outros parâmetros sobre a probabilidade média quântica, a influência de $K_{\max}$ sobre esta última é menos acentuada. Por exemplo, observamos que o grau máximo permitido

exerce fraca influência sobre o valor médio de longo tempo, bem como sobre a amplitude de oscilação em torno deste valor médio. Esse comportamento é similar ao encontrado para a probabilidade clássica $\bar{p}(t)$ [ver Fig. 4.9 (b)]. Importante ressaltarmos que, a fraca influência de $K_{\max}$ sobre a probabilidade quântica não reside no fato de termos GSFNs com estrelas de um dado tamanho. Na verdade, a fraca influência está relacionada com o fato de termos GSFNs compostas por estrelas.

Adiante, avaliaremos o transporte quântico através das probabilidades de transição quântica, $\pi_{k,j}(t)$, Eq. 2.9, onde analisaremos a caminhada quântica a partir de vértices iniciais ($\pi_{k,\text{centro}}(t)$ e $\pi_{k,\text{periférico}}(t)$) e para o valor específico de tempo igual a $t = 10$. Alterar a estrutura das redes GSFNs, significa alterar o comportamento do transporte quântico, e isto ficará ainda mais evidente.

4.5 Probabilidades de transição sobre GSFNs

Nesta seção apresentaremos os resultados para a probabilidade de transição quântica, $\pi_{k,j}(t)$, Eq. 2.9. Escolhemos mostrar nossos resultados através de contornos de probabilidades (*spacetime structure*). Serão apresentadas as probabilidades para três diferentes estruturas GSFNs, todas contendo $N = 100$ vértices, que obedecem aos seguintes parâmetros de construção: em Fig. 4.14, $\gamma = 1.0$, $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 99$; em Fig. 4.15, $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 99$; em Fig. 4.16, $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 6$ e $K_{\max} = 99$. Optamos por adicionar a cada vértice sua numeração, conforme os passos de criação das redes (ver Fig. 4.3), com a finalidade de facilitar o entendimento dos resultados. Nossa abordagem consiste em calcular todas as probabilidades de transição para os três diferentes tipos de redes, efetuando, assim, uma comparação entre os comportamentos do caminhante quântico sobre as estruturas GSFNs.

Na Fig. 4.14 (a) investigamos o comportamento da probabilidade de transição quântica, $\pi_{k,\text{centro}}(t)$, para o caso em que o caminhante inicia seu movimento a partir do vértice central, neste caso, nominalmente representado por 2 (quadrado vermelho). Observe que, este é o nó que apresenta os maiores valores de probabilidade de transição para todos os tempos. De fato, ao olharmos para a estrutura GSFN, temos que o vértice 2 é o centro de uma estrela que possui vários braços (76 no total). Por este motivo, encontramos fortes efeitos de localização [62, 68, 73]. Esses braços, ou vértices vizinhos, conectados ao nó 2 (de 1 até 4-78) exibem altas probabilidades para diferentes intervalos de tempo. Podemos observar, no contorno de probabilidade, que a segunda região mais clara (com probabilidades entre 10^{-3} e 10^{-2}) está relacionada ao vértice de número 30. De fato, ao olharmos para a estrutura GSFN correspondente, notamos que o vértice 30 é o centro de outra grande estrela com 21 vizinhos. Nossos resultados mostram que a probabilidade $\pi_{30,2}$ é a segunda maior, em contraste com as probabilidades para o caminhante quântico

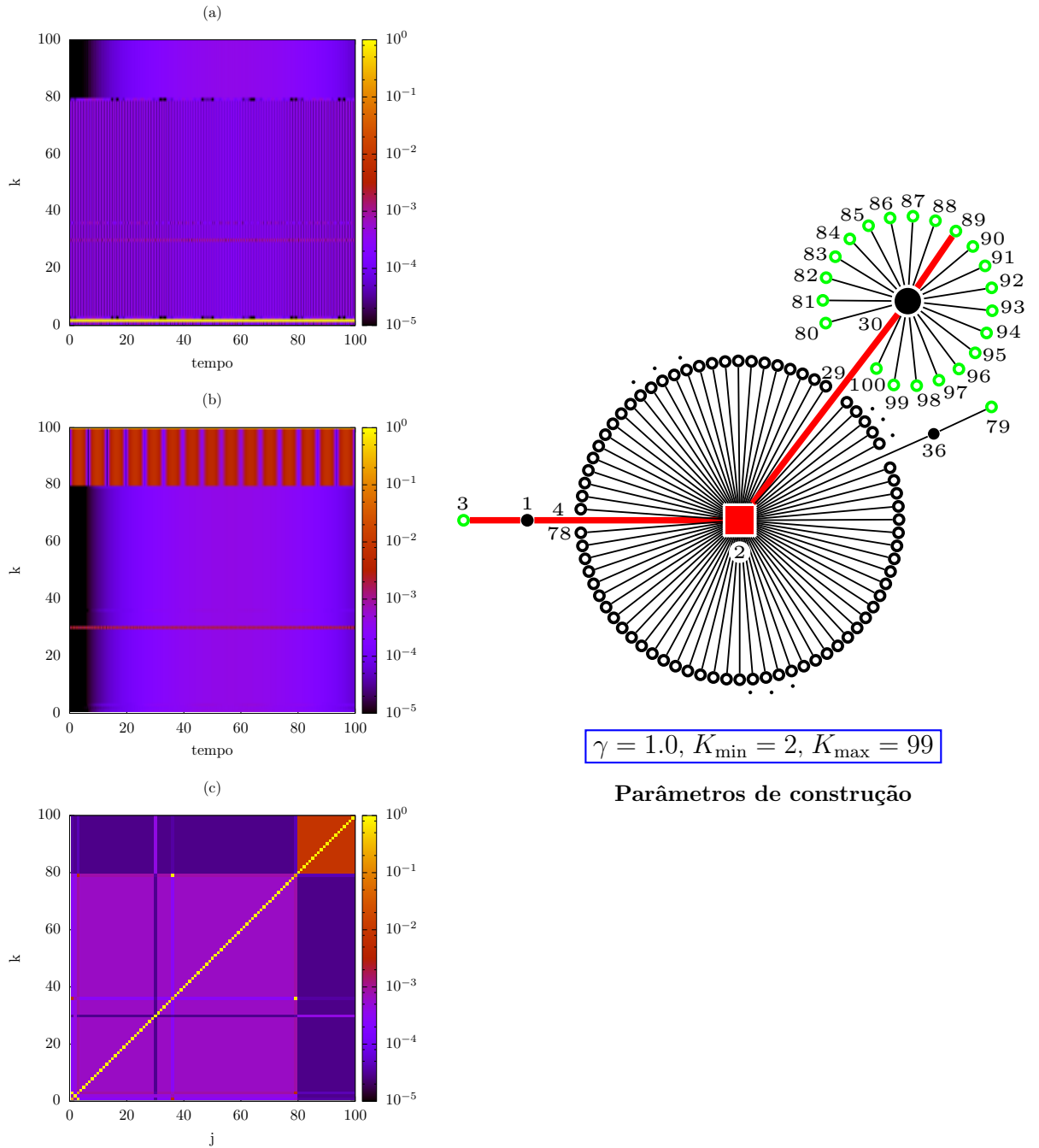


Figura 4.14 - Contornos da probabilidade de transição quântica, $\pi_{k,j}(t)$, sobre GSFN com $N = 100$ vértices. Para esta análise, mantivemos fixos os parâmetros de construção em: $\gamma = 1.0$, $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 99$. Em (a) avaliamos o comportamento da probabilidade $\pi_{k,\text{centro}}(t)$, ou seja, quando o caminhante quântico inicia seu movimento no centro da rede (quadrado vermelho). Em (b) avaliamos o comportamento da probabilidade $\pi_{k,\text{periférico}}(t)$, ou seja, quando o caminhante quântico inicia seu movimento em um vértice periférico da rede. Em (c) avaliamos o comportamento da probabilidade $\pi_{k,j}(10)$.

alcançar os vértices vizinhos de segunda ordem (círculos pretos). Na maior parte do tempo t essas probabilidades possuem valores pequenos. Ressaltamos que, para o caso de uma rede estrela pura, quando a caminhada inicia no centro, essa última pode ser mapeada utilizando apenas dois vértices [62, 113]. Todavia, caminhadas que iniciam em vértices periféricos, não apresentam um mapeamento simples. Agora, avaliamos o inverso do que

foi apresentado acima. Isto é, faremos o mapeamento da probabilidade de transição quântica, $\pi_{k,\text{periférico}}(t)$, que tem seu início em algum vértice periférico, ou seja, um vértice que se encontra mais distante do centro. No caso da Fig. 4.14 (b), escolhemos como vértice mais distante o nó 100. Claramente, temos o maior valor de probabilidade para $\pi_{100,100}$, seguido pela probabilidade de transição do vértice 100 ao seu vizinho mais próximo, o vértice 30. Nossos resultados indicam que este valor de probabilidade, $\pi_{30,100}$, é o segundo maior. Na sequência, em valores menores, temos as probabilidades de transição para os vértices vizinhos representados pelos círculos verdes abertos (80-99), e também para o vértice 29. Esses resultados estão perfeitamente de acordo com a topologia GSFN que temos, isto é, duas grandes estrelas conectadas através da ligação (2,30). Em comparação com o caso $\pi_{k,\text{centro}}(t)$, as probabilidades $\pi_{k,\text{periférico}}(t)$ apresentam maiores efeitos de localização, resultando em uma caminhada quântica ineficiente. Na Fig. 4.14 (c) analisamos a probabilidade de transição, $\pi_{k,j}(10)$, para o tempo fixo de $t = 10$. Ou seja, calculamos todas as probabilidades entre todos os pares de vértices (k, j) . Ressaltamos que, qualitativamente, temos um comportamento similar para todos os valores de tempo. Para o caso da caminhada quântica sobre a estrutura GSFN considerada, observamos fortes efeitos de localização, onde nossos resultados indicam probabilidade acima de 10^{-4} apenas para transições entre vértices de mesma estrela. A coloração mais amarelada, na diagonal presente no contorno de probabilidade, nos indica que o caminhante tende a retornar para o vértice inicial. Uma consequência direta do modelo utilizado neste trabalho é a simetria presente no contorno de probabilidade. Ou seja, consideramos iguais as probabilidades $\pi_{k,j} = \pi_{j,k}$ (ver Eq. 2.9). Além disso, uma visão em perspectiva do contorno de probabilidade nos indica a quantidade de estrelas que formam a estrutura GSFN.

Na Fig. 4.15 (a) novamente avaliamos a probabilidade de transição, $\pi_{k,\text{centro}}(t)$, para o caso em que o caminhante quântico inicia seu movimento a partir do vértice central da rede, neste caso, nominalmente representado pelo nó 1 (quadrado vermelho). Ao alterarmos os parâmetros de construção (presentes na figura), nossa nova topologia GSFN corresponde a uma rede com pequenas estrelas e maiores caminhos lineares. Inclusive, a linha sólida em vermelho representa o caminho linear mais longo, que quando comparado ao caso anterior, é quase três vezes maior. Encontramos a maior probabilidade, claramente, para $\pi_{1,1}$ devido à sua conectividade com outros 15 vértices vizinhos. Todavia, nesta nova situação observamos regiões que possuem valores maiores de probabilidade de transição (acima de 10^{-2}). Note que, vértices mais distantes do centro são alcançados com probabilidades relativamente maiores do que no caso anterior analisado. Esse fato pode ser explicado pelo aumento no número de segmentos lineares. No geral, podemos afirmar que a caminhada quântica sobre estas estruturas é mais eficiente, pois espalha-se por mais vértices da rede. Semelhante ao que avaliamos anteriormente, os vértices periféricos, ou seja, os mais distantes do centro (círculos de cor violeta), são os que possuem menor pro-

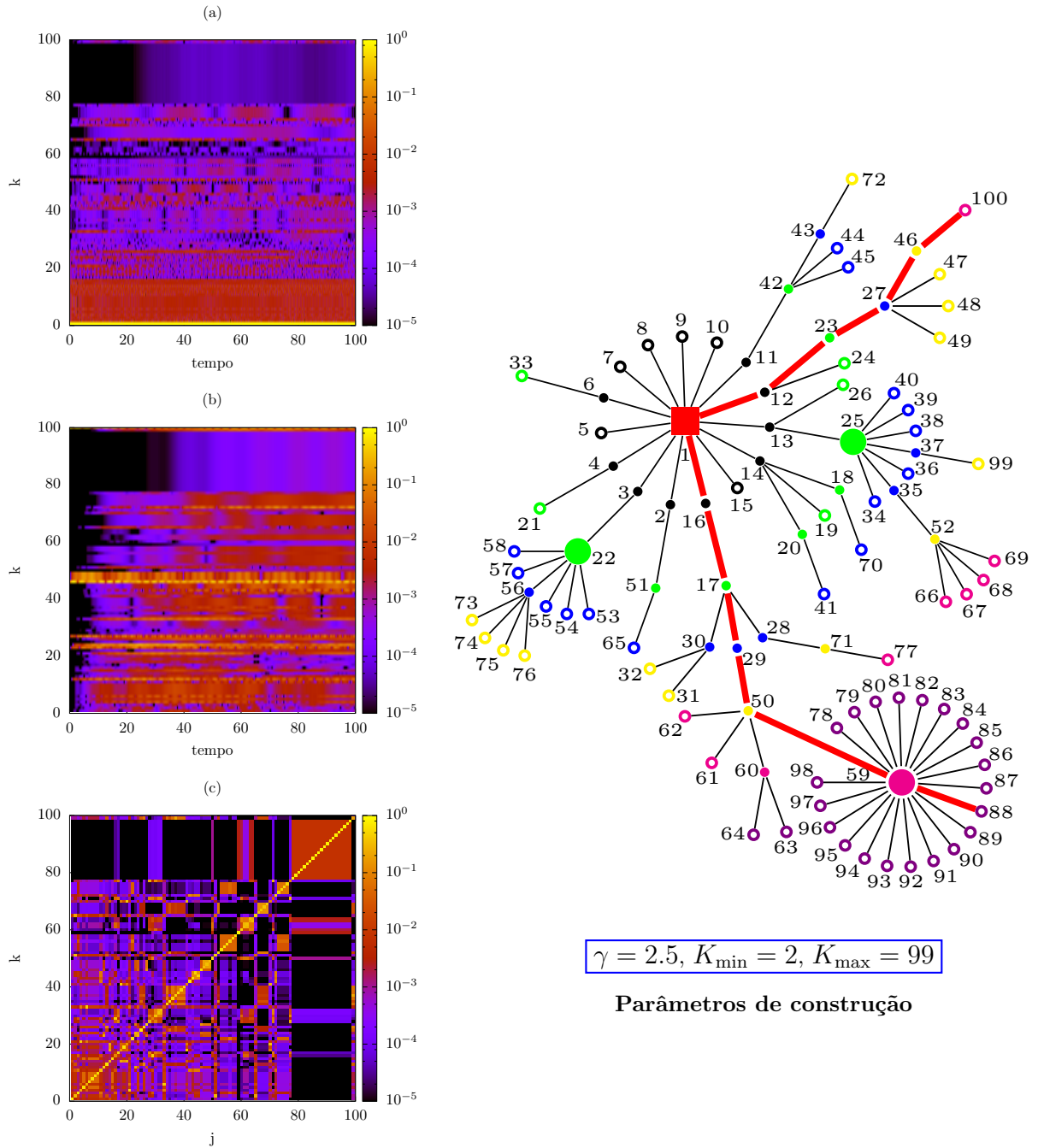


Figura 4.15 - Contornos da probabilidade de transição quântica, $\pi_{k,j}(t)$, sobre GSFN com $N = 100$ vértices. Para esta análise, mantivemos fixos os parâmetros de construção em: $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 99$. Em (a) avaliamos o comportamento da probabilidade $\pi_{k,\text{centro}}(t)$, ou seja, quando o caminhante quântico inicia seu movimento no centro da rede (quadrado vermelho). Em (b) avaliamos o comportamento da probabilidade $\pi_{k,\text{periférico}}(t)$, ou seja, quando o caminhante quântico inicia seu movimento em um vértice periférico da rede. Em (c) avaliamos o comportamento da probabilidade $\pi_{k,j}(10)$.

babilidade de transição. Na Fig. 4.15 (b) analisamos o caso para quando o caminhante quântico inicia seu movimento a partir de um vértice periférico. Neste caso, escolhemos o vértice de número 100. Embora este não seja o vértice mais distante do centro, nós o escolhemos pois ele está oposto à estrela com centro no vértice 59. Observe que, em contraste com o que foi encontrado para a rede GSFN anterior, agora a caminhada quântica

alcança vértices mais distantes. De fato, devido ao aumento no maior caminho linear o caminhante quântico transita por outras regiões da rede. Tomemos, por exemplo, o nó 72 que é um vizinho de nona ordem do vértice 100, nossos resultados mostram que a probabilidade de transição vale $\pi_{72,100} \approx 0.1$ para vários valores de tempo. Isto pode ser explicado pelo fato de que, ao sair do vértice 100, o caminhante quântico passa apenas uma única vez por uma grande estrela, sofrendo pouco com efeitos de localização. Encontramos resultados similares para vértices que estão próximos ao nó 100, porém, que estão conectados a ele através de segmentos lineares mais curtos, como por exemplo, os vértices 24 e 25, para citar apenas alguns. Nossos resultados continuam mostrando baixa probabilidade de transição para vértices opostos ao nó inicial da caminhada. Isto pode ser visto na região do contorno de probabilidade referente aos vértices 78-98, que são opostos ao nó 100 e que fazem parte de uma grande estrela. Essa análise nos leva à conclusão de que a caminhada quântica sobre estruturas GSFNs com as características presentes, é mais eficiente, mesmo iniciando de qualquer vértice da rede. Na Fig. 4.15 (c) analisamos a probabilidade de transição, $\pi_{k,j}(10)$, para o tempo fixo de $t = 10$. Ou seja, calculamos todas as probabilidades entre todos os pares de vértices (k, j) . Agora, podemos observar que há uma mistura entre regiões com altas e pequenas probabilidades de transição. Ou seja, há uma alternância entre efeitos de localização e bom espalhamento da caminhada quântica sobre toda rede. Nossos resultados indicam os maiores valores de probabilidade entre vértices presentes ao longo da mesma estrela, em contraste com valores baixos para vértices que fazem parte de estrelas distantes. De fato, isto pode ser visto entre os centros de duas grandes estrelas, são eles os vértices 1 e 59. Devido à presença maior de segmentos lineares, os vértices conectados ao centro 1 apresentam um melhor espalhamento. Novamente, um olhar em perspectiva do contorno de probabilidade, nos indica a quantidade de estrelas presentes na rede.

Para encerrarmos a análise das probabilidades de transição quântica, avaliaremos as mesmas quantidades dos dois casos anteriores, agora para a estrutura presente na Fig. 4.16. Observe que, para esta nova situação alteramos o valor do grau mínimo permitido, $K_{\min}$, mantendo fixos os parâmetros γ e $K_{\max}$ do caso anterior. Na Fig. 4.16 (a) o nó central é nominalmente o nó 1, além disso, esta nova estrutura GSFN é basicamente composta por pares de pequenas estrelas (família de estrelas). Observe que, o maior caminho linear, ou diâmetro da rede, é igual a 8. Esse último é menor que o diâmetro da situação anterior, no entanto, a quantidade de vértices com grau acima de 5 é superior – de fato, temos 12 vértices. Essa mistura entre segmentos lineares e vértices com grau elevado terá forte influência sobre o transporte quântico. O contorno de probabilidades nos indica uma relação não trivial entre efeitos de localização e regiões em que há um bom espalhamento do caminhante quântico. Notamos que os efeitos de localização são acentuados para regiões em que estão os vizinhos mais próximos do centro de cada estrela,

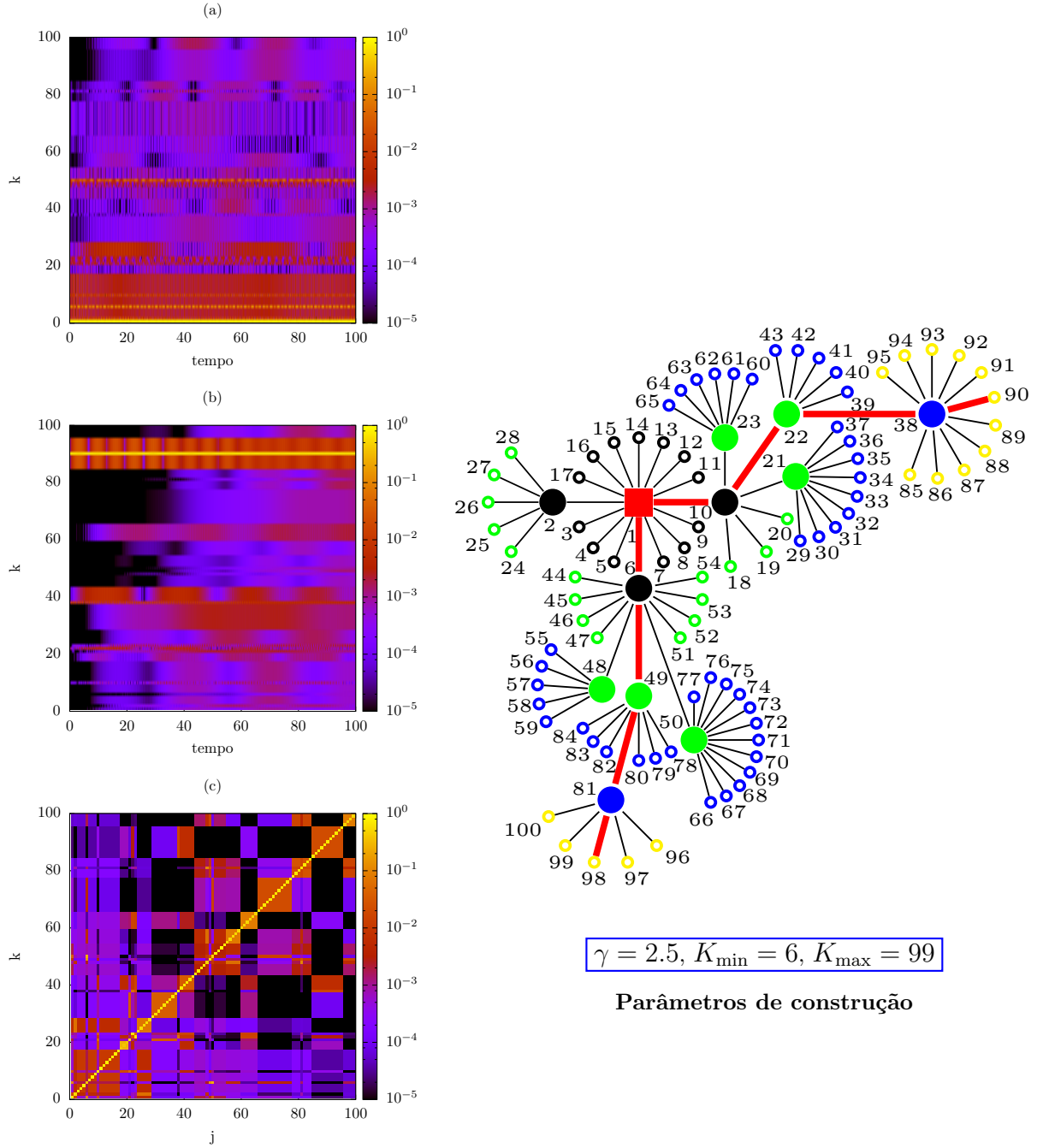


Figura 4.16 - Contornos da probabilidade de transição quântica, $\pi_{k,j}(t)$, sobre GSFN com $N = 100$ vértices. Para esta análise, mantivemos fixos os parâmetros de construção em: $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 6$ e $K_{\max} = 99$. Em (a) avaliamos o comportamento da probabilidade $\pi_{k,\text{centro}}(t)$, ou seja, quando o caminhante quântico inicia seu movimento no centro da rede (quadrado vermelho). Em (b) avaliamos o comportamento da probabilidade $\pi_{k,\text{periférico}}(t)$, ou seja, quando o caminhante quântico inicia seu movimento em um vértice periférico da rede. Em (c) avaliamos o comportamento da probabilidade $\pi_{k,j}(10)$.

e no próprio centro da estrela. Simultâneo aos efeitos de localização e bom espalhamento, temos que a caminhada quântica alcança vértices periféricos com probabilidades maiores que as encontradas nos dois casos anteriores – devido aos segmentos lineares. Na Fig. 4.16 (b) analisamos o comportamento da caminhada quântica que tem início em algum dos vértices periféricos. Nesse caso, escolhemos como início o vértice de número 90. Nossa

estrutura possui 12 estrelas, onde o maior segmento linear conecta quase todas elas. Esse fato será responsável pela mistura de efeitos de localização (estrelas) e bom espalhamento (segmentos lineares) da caminhada quântica sobre a rede. Nossos resultados indicam maior valor de probabilidade de transição para vértices próximos ao nó 90 – pertencentes à mesma estrela. Todavia, o contorno de probabilidades fornece, para tempos acima de 80, uma situação mais homogênea, onde quase todas as probabilidades alcançam valores acima de 10^{-4} . Para imaginarmos tal situação, podemos fazer o seguinte experimento mental: o caminhante quântico alcança uma estrutura do tipo estrela, fica então localizado nessa estrutura, e após um intervalo de tempo move-se para a próxima estrela. Repetindo-se tal processo, a caminhada alcança todas as outras estrelas. Já na Fig. 4.16 (c) observamos várias regiões onde a predominância de coloração vermelho-laranja é acentuada, nos indicando alguns efeitos de localização, bem como um bom espalhamento do caminhante quântico. Através da diagonal principal, temos uma ideia da quantidade e do tamanho das estruturas do tipo estrela. Lembrando que para esta situação, aumentamos o valor do grau mínimo permitido, obtendo, desta forma, vértices com grau elevado (maior quantidade de ligações). Notamos, por fim, uma mistura dos dois casos extremos: uma cadeia linear e uma rede estrela.

Na seção seguinte, continuaremos avaliando o transporte quântico sobre GSFNs. Faremos uma análise do limite de longo tempo, χ , Eq. 2.16. Para melhor apresentação destes resultados, apresentamos também a diferença relativa, calculada a partir do valor exato χ e do valor aproximado χ^* , dado pela Eq. 2.16.

4.6 Limite de longo tempo para GSFNs

Na Fig. 4.17 apresentamos os resultados em (a) para o limite de longo tempo χ e em (b) para a diferença relativa $\frac{(\chi-\chi^*)}{\chi}$. Em nossa análise, consideramos fixo $K_{\max} = 999$ e, para melhor estatística, fizemos $S = 1000$ realizações, com alteração dos parâmetros γ e $K_{\min}$. Importante lembrarmos que, o limite de longo tempo está compreendido entre dois valores extremos: 0 e 1. Consideramos o máximo de eficiência quando temos $\chi = 0$, e valores próximos a zero podem ser considerados eficientes. Por outro lado, o máximo de ineficiência ocorre para quando $\chi = 1$, e valores próximos a 1 podem ser considerados de baixa eficiência. Nesta seção, optamos por apresentar nossos resultados através de um mapa bidimensional, em que a coloração representa a intensidade da eficiência do transporte quântico. A Fig. 4.17 (a) nos indica que a eficiência é maior para quando temos valores maiores de γ e menores para $K_{\min}$. Essa propriedade é válida para todos os valores de $K_{\min}$ quando mantemos os outros parâmetros fixos. O exemplo mais claro para isso, ocorre quando mantemos fixo $K_{\min} = 2$. Nossos resultados indicam uma melhora, de quase duas ordens de grandeza na eficiência, quando aumentamos γ de 1.0 até 4.0. De fa-

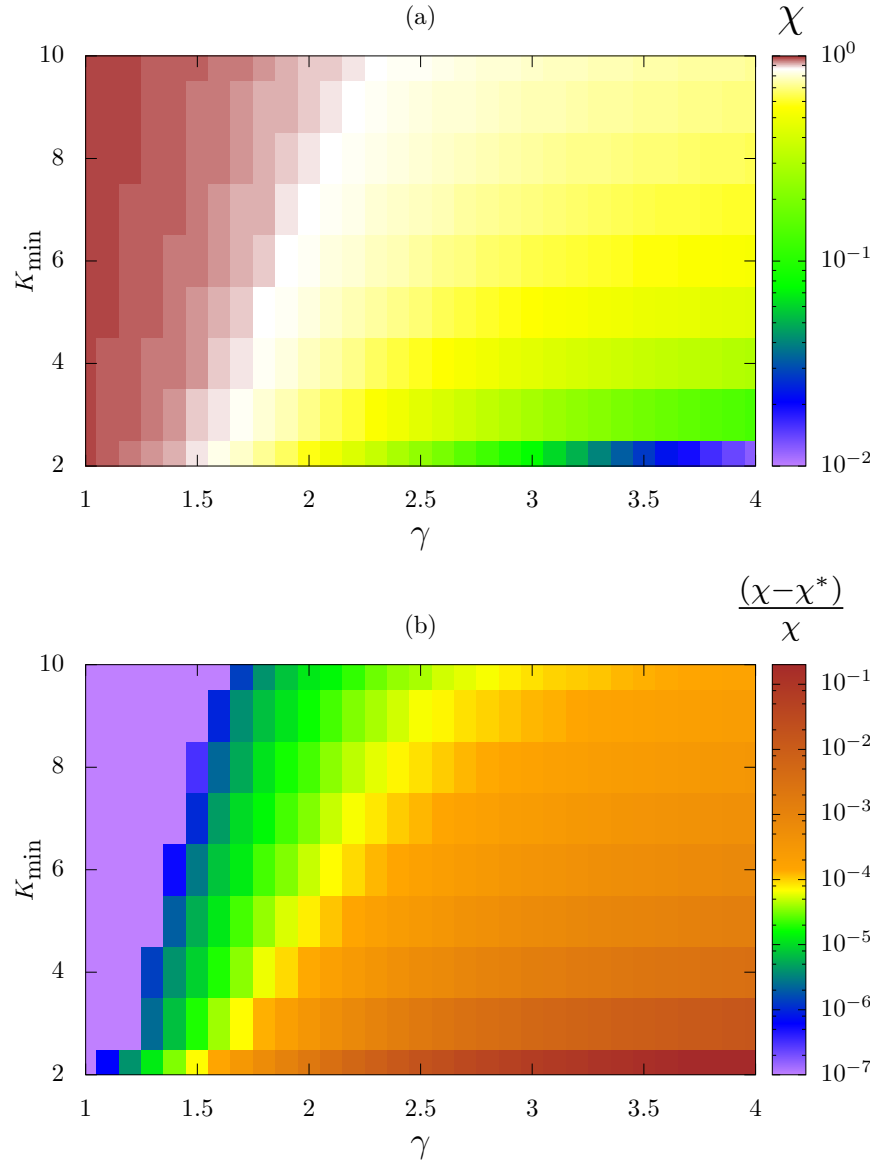


Figura 4.17 - Limite de longo tempo, χ , sobre GSFNs com $N = 1000$ vértices e $S = 1000$ realizações. Mantivemos $K_{\max} = 999$ e variamos o conjunto de parâmetros $(\gamma, K_{\min})$. Em (a) apresentamos os valores exatos de χ , enquanto que em (b) mostramos a diferença relativa $\frac{(\chi - \chi^*)}{\chi}$. Para $\chi = 0$ temos o máximo de eficiência e para $\chi = 1$ temos o máximo de ineficiência.

to, encontramos os seguintes valores: $\chi(\gamma = 1.0, K_{\min} = 2) = 0.96$ e $\chi(\gamma = 4.0, K_{\min} = 2) = 0.012$. Notamos, também, que para um valor fixo de γ e uma variação de $K_{\min}$ para valores maiores, torna o transporte menos eficiente. Todas essas mudanças no comportamento de χ estão diretamente relacionadas à existência de estruturas estrelas e maiores quantidades de segmentos lineares. Notadamente, obtemos valores iguais para a eficiência quântica para vários valores do mesmo conjunto de parâmetros $(\gamma, K_{\min})$, embora a topologia das redes GSFNs sejam muito diferentes. Essa última afirmação é melhor

compreendida quando observamos, no mapa bidimensional, a região na diagonal com coloração branca, que possui $\chi \approx 0.7$. Encontramos, por exemplo, a mesma eficiência quântica para os seguintes pares de parâmetros: (1.8,2), (2.0,3), (2.4,5) e (2.6,6), para citar apenas alguns. Para cada valor de γ encontra-se, praticamente, um valor apropriado de $K_{\min}$ que nos fornece o mesmo valor de χ . Resultados similares são encontrados para todos os valores de χ ; quando alteramos apenas os parâmetros de construção das GSFNs. Com relação ao valor aproximado, χ^* , optamos por não apresentá-lo neste trabalho, pois os valores estão muito próximos do valor exato. Ao construir um mapa bidimensional para χ^* , temos a impressão de tratar-se da mesma figura. Desta forma, mostramos, na Fig. 4.17 (b) a diferença relativa do limite de longo tempo, isto é, $\frac{\chi - \chi^*}{\chi}$. Com ela temos uma visão clara de que o valor aproximado da eficiência quântica está muito próximo do valor exato. A diferença, encontrada por nós, é de no máximo 20% e está em torno de 1%, em média. Portanto, para nossas estruturas GSFNs a aproximação de χ é válida [75,114], o que deve ser explicado através da natureza discreta do espectro de autovalores para estruturas GSFNs.

Conclusões e Perspectivas

Nesta pesquisa de Doutorado, investigamos e descrevemos os resultados do transporte quântico sobre diferentes tipos de redes e o fizemos através do modelo de caminhadas quânticas de tempo contínuo (CTQWs). Não obstante, realizamos uma investigação paralela, para fins de comparação, do transporte clássico, através das caminhadas aleatórias de tempo contínuo (CTRWs). O enfoque do nosso trabalho é de caráter teórico e numérico, apontando para redes onde a eficiência das QWs pode ser encontrada. Para identificarmos essa eficiência, focamos na determinação das seguintes quantidades: (i) a probabilidade de transição entre vértices (j, k) das redes; (ii) a probabilidade média de retorno, ou seja, a probabilidade de um caminhante retornar ao seu ponto de partida; (iii) o limite de longo tempo escrito como função dos autovalores da matriz de conectividade $\mathbf{A}$. Nossa pesquisa esteve concentrada em fazer alterações na topologia das estruturas escolhidas para análise. Ou seja, primeiramente, investigamos o transporte quântico sobre redes do tipo dendrímero quando, de maneira aleatória, adicionamos novas ligações entre vértices de mesma geração. Além disso, para contornar efeitos de localização das caminhadas, resolvemos construir uma rede multicamada do tipo dendrímero, isto é, uma rede em que cada camada de dendrímero está uma sobre a outra. Tornando o problema ainda mais desafiador, de maneira aleatória, retiramos algumas ligações entre vértices de camadas vizinhas. Em um segundo momento, nos voltamos para o transporte quântico sobre um dos modelos de redes complexas mais úteis na descrição de sistemas reais na natureza, as redes livres de escala. Nos concentramos em uma nova maneira de construção desse tipo de rede, agora restrita à utilização de dois parâmetros de modularidade. Essas redes receberam o nome de rede livres de escala generalizadas (GSFNs). Combinações entre os parâmetros de construção dessas estruturas, $(\gamma, K_{\min}, K_{\max})$, foram feitas e, através delas, pudemos analisar as características das CTQWs. Devido à pandemia do novo coronavírus, utilizamos as GSFNs como base para a modelagem de um problema epidemiológico. Os resultados deste último trabalho não encontram-se discutidos aqui, nesta Tese, todavia o artigo referente a ele pode ser encontrado na Ref. [30].

Sobre estruturas do tipo dendrímero, primeiramente iniciamos com a análise das caminhadas quânticas sobre RMTDs *completas*, e ao final, sobre RMTDs *incompletas*. Nossa investigação está diretamente ligada à alteração dos parâmetros de probabilidade p

e q , assim como dos números de geração G e camadas L . Ao investigarmos o transporte quântico sobre redes do tipo dendrímero, descobrimos que o espectro de autovalores, possui caráter discreto. Há grande degenerescência dos autovalores associados à matriz de conectividade $\mathbf{A}$. Todavia, ao acionarmos o parâmetro de probabilidade p , responsável pela adição de novas ligações entre vértices de mesma geração, mantendo q fixo, notamos que o espectro torna-se contínuo. A presença de grandes segmentos lineares, isto é, ao adicionarmos L novas camadas na estrutura, diminuiu a magnitude dos autovalores. Isso nos indica maior espalhamento do caminhante quântico sobre a rede, ou seja, mais vértices são visitados. Nossos resultados possuem aspectos interessantes. Para a situação na qual temos apenas uma única camada do tipo dendrímero, com $p = 0.0$, onde os efeitos de localização são predominantes, encontramos um limite de longo tempo médio, para grandes estruturas, igual a $\chi_D^\infty = \frac{1}{9}$. No entanto, ao acionarmos o parâmetro p , este valor é melhorado em mais de duas ordens de grandeza. Notavelmente, a melhor eficiência não é encontrada para $p = 1.0$, mas sim para $p = 0.9$, isto é, quando há a ausência de uma única ligação. A explicação para este achado, resulta do fato de que o transporte quântico é mais eficiente sobre uma linha do que sobre uma rede do tipo anel (linha fechada).

Fomos além e tornamos ainda melhor o transporte sobre estruturas do tipo dendrímero. Para isso, conectamos camadas do tipo dendrímero modificado umas sobre as outras, melhorando os resultados encontrados em [64]. Identificamos que a eficiência quântica aumenta várias ordens de grandeza quanto maior for o número de camadas adicionadas à estrutura e maior o número G de gerações. Para uma simples exemplificação, citamos o caso de RMTDs completas com $G = 5$ e $L = 100$. Nesta situação, temos uma melhora de mais de uma ordem de grandeza: $\chi_{1\text{camada}} \approx 0.12$ e $\chi_{100\text{camadas}} \approx 0.002$ para quando $p = 0.0$; $\chi_{1\text{camada}} \approx 0.010$ e $\chi_{100\text{camadas}} \approx 0.001$ para $p = 1.0$. Outra característica interessante presente em nossos resultados, refere-se à remoção, através da probabilidade $1 - q$, de ligações entre camadas vizinhas. Encontramos que a melhor eficiência quântica ocorre para $q \approx 0.9$, isto é, quando temos a ausência de uma única interligação. Novamente, lembramos que QWs propagam-se melhor sobre linhas, ao invés de redes do tipo anel. Portanto, nosso trabalho mostrou que o espalhamento da CTQW pode ser melhorado através de modificações na topologia da rede. Ou seja, com a adição de novas ligações e com o empilhamento de camadas, aumentamos a eficiência do transporte quântico sobre tais estruturas. Temos a expectativa de que essas descobertas possam ser úteis em diferentes áreas. Para citar algumas, destacamos a transferência quântica de excítons, o transporte quântico sobre grafos complexos, a computação quântica e algoritmos quânticos de busca.

Na segunda parte do nosso projeto de Doutorado, estivemos concentrados no transporte quântico sobre SFNs. Ao estabelecermos parâmetros de modularidade, que restringem o grau mínimo e máximo permitidos a cada vértice, demos às nossas estrutu-

ras o nome de *redes livres de escala generalizadas* (GSFNs). A construção das estruturas GSFNs segue um mecanismo de crescimento que obedece uma distribuição de grau do tipo lei de potência. O expoente da lei de potência, γ , é escolhido no início do processo, sendo responsável pela densidade de conexões da rede. Em seguida, consideramos dois parâmetros de modularidade: $K_{\min}$, que é o grau mínimo permitido, e $K_{\max}$, o grau máximo permitido. Além do transporte quântico, também investigamos o transporte clássico sobre tais redes, sempre concentrados na influência dos três parâmetros mencionados acima. Nossos resultados indicam, logo de início, uma forte dependência do espectro de autovalores com a alteração do expoente γ . Observamos que, para valores pequenos de γ , fixos os parâmetros de modularidade em $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = N - 1$, há uma grande degenerescência do autovalor 1. Todavia, isso diminui quando ainda para γ pequeno, diminuimos o valor de $K_{\max}$. De fato, estamos elevando a presença de maiores segmentos lineares, daí este comportamento. Ao mesmo tempo, a alteração de $K_{\min}$ exerce mais influência na topologia do que mudanças realizadas em $K_{\max}$, tornando-as com caráter de redes do tipo estrela.

Nossa análise indica que, o transporte clássico é mais eficiente sobre redes com topologia tendo a predominância de estrelas. No entanto, o transporte quântico mostrou ser mais eficiente sobre estruturas GSFNs com maior predominância de segmentos lineares. Em estruturas estrelas, os efeitos de localização são fortes, isto é, o caminhante quântico possui a tendência de permanecer no vértice de origem ou em vértices vizinhos. Todavia, o valor de equilíbrio do limite de longo tempo é alcançado mais rapidamente, com pequenas flutuações em torno de si. Essa mesma eficiência é encontrada para diferentes valores de parâmetros $(\gamma, K_{\min})$, ou seja, em diferentes topologias. Com mais detalhes, para todo valor de $K_{\min}$ temos um valor de γ que fornece o mesmo valor de χ . Contornamos esta situação com o aumento do valor de γ e mantendo os parâmetros de modularidade constantes. Identificamos que outra maneira de aumentarmos a eficiência quântica, é obtida através da diminuição do valor do grau máximo permitido $K_{\max}$. Por outro lado, o efeito contrário é obtido quando aumentamos o valor de $K_{\min}$. Portanto, podemos afirmar que a eficiência quântica é melhorada através do aumento de γ , diminuição de $K_{\min}$ ou aumento de $K_{\max}$, sendo uma cadeia linear o limite superior. Além disso, notamos que a rapidez no alcance do valor médio do limite de longo tempo não depende dos nossos parâmetros de construção. De fato, essa rapidez está principalmente relacionada ao número de ligações presentes na rede. Isto pode ser verificado através dos resultados obtidos para redes construídas a partir do modelo B.-A., que são redes com a presença de *loops*. Esperamos que as análises e características do transporte quântico obtidas sobre GSFNs possam ser úteis em aplicações e estudos em diferentes áreas.

No momento em que esta *Conclusão* é escrita, temos como primeira perspectiva a extensão da investigação do transporte quântico agora sobre Redes Multicamadas Livres

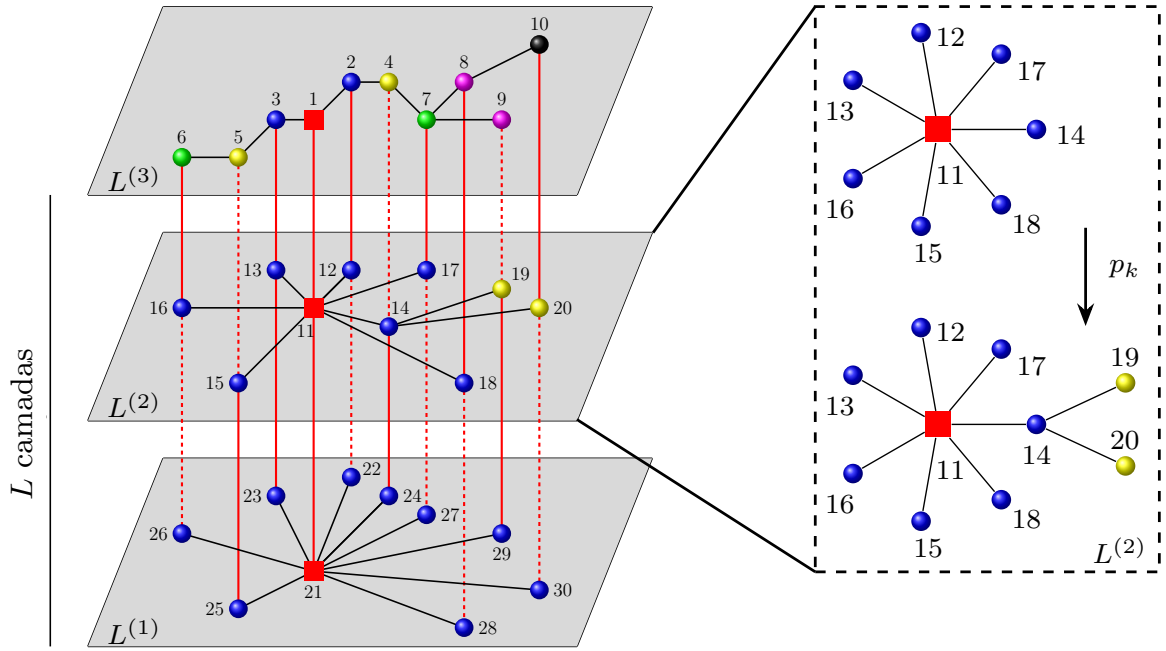


Figura 5.1 - Esquema de uma rede multicamada livre de escala generalizada (MGSFN) com número total de vértices $N = 30$. Os parâmetros de construção são: $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 9$. Cada camada é formada por estruturas GSFNs. As camadas estão conectadas através das linhas sólidas em vermelho; linhas tracejadas indicam a ausência de uma ligação.

de Escala Generalizadas (MGSFNs, sigla do inglês). Na Fig. 5.1 apresentamos um esquema de como estas novas estruturas são construídas. A partir da distribuição de grau p_k , Eq. 4.3, criamos GSFNs e colocamos umas sobre as outras criando assim uma rede multicamada. O número de vértices por camada é igual para todos os níveis. Uma vez que as ligações são feitas de maneira aleatória, cada camada terá uma topologia livre de escala diferentes umas das outras. Já iniciamos a investigação do transporte quântico sobre esse novo tipo de rede. No momento, contamos com os resultados do espectro de autovalores, das probabilidades de transição clássica e quântica e de alguns mapas bidimensionais relacionando, por exemplo, o número de camadas L com instantes t da evolução do caminhante quântico. Esperamos em breve, após uma análise mais rigorosa e detalhada, reuni-los em uma possível publicação em periódico científico. Adiantamos que a escrita do *paper* já teve início.

Kulvelis *et al.* [75] com o trabalho *Universality at Breakdown of Quantum Transport on Complex Networks*, mostraram que a mudança da eficiência/ineficiência do transporte quântico sobre uma rede complexa, pode ser caracterizada através de um expoente crítico universal σ_c . Uma investigação, que pode ser feita, é referente à determinação exata desse expoente para nossas estruturas. E, com mais riqueza de detalhes, estabelecer uma relação do expoente crítico σ_c com nossos parâmetros de construção. Além disso, outra perspectiva futura é a determinação analítica do espectro de autovalores para nossas redes.

Por outro lado, investigar outros modelos de caminhadas quânticas, como por exemplo as Caminhadas Quânticas Estocásticas (QSWs, sigla do inglês), sobre nossas redes seria outra forma de confirmar nossos resultados, ou talvez, encontrar novas características do transporte quântico. Por fim, acreditamos que a investigação de outras medidas de eficiência – mencionadas no Capítulo 2 – sobre nossas estruturas, podem trazer ainda mais riqueza de detalhes a respeito do transporte quântico.

Encerramos dando ênfase que, os resultados presentes nos Capítulos 3 e 4 foram reunidos, separadamente, e publicados em forma de artigos científicos. Respectivamente, o primeiro sob o título *Quantum transport on modified multilayered spiderwebs* [65]; e o segundo, sob o título *Quantum transport on generalized scale-free networks* [72]. Desta forma, a presente Tese de Doutorado espera ter contribuído com avanços nesta área de pesquisa.

REFERÊNCIAS

- [1] G. Ritschel, J. Roden, W. T. Strunz, A. Aspuru-Guzik, and A. Eisfeld. Absence of quantum oscillations and dependence on site energies in electronic excitation transfer in the fenna-matthews-olson trimer. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2(22):2912–2917, 2011.
- [2] G. Ritschel, J. Roden, W. T. Strunz, and A. Eisfeld. An efficient method to calculate excitation energy transfer in light-harvesting systems: application to the fenna-matthews-olson complex. *New Journal of Physics*, 13(11):113034, 2011.
- [3] P. Rivera, K. L. Seyler, H. Yu, J. R. Schaibley, J. Yan, D. G. Mandrus, W. Yao, and X. Xu. Valley-polarized exciton dynamics in a 2d semiconductor heterostructure. *Science*, 351(6274):688–691, 2016.
- [4] B.-X. Wang, M.-J. Tao, Q. Ai, T. Xin, N. Lambert, D. Ruan, Y.-C. Cheng, F. Nori, F.-G. Deng, and G.-L. Long. Efficient quantum simulation of photosynthetic light harvesting. *NPJ Quantum Information*, 4(1):1–6, 2018.
- [5] T. Brixner, R. Hildner, J. Köhler, C. Lambert, and F. Würthner. Exciton transport in molecular aggregates—from natural antennas to synthetic chromophore systems. *Advanced Energy Materials*, 7(16):1700236, 2017.
- [6] M. Doi and S. F. Edwards. *The theory of polymer dynamics*. Oxford University Press, 1988.
- [7] A. Drinko, F. M. Andrade, and D. Bazeia. Narrow peaks of full transmission in simple quantum graphs. *Physical Review A*, 100(6):062117, 2019.
- [8] A. A. Zhukov, S. V. Remizov, W. V. Pogosov, and Y. E. Lozovik. Algorithmic simulation of far-from-equilibrium dynamics using quantum computer. *Quantum Information Processing*, 17(9):223, 2018.
- [9] J. M. Harrison and E. Swindle. Spectral properties of quantum circulant graphs. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 52(28):285101, 2019.

-
- [10] A. M. Childs. Universal computation by quantum walk. *Physical Review Letters*, 102(18):180501, 2009.
 - [11] C. D. Bruzewicz, J. Chiaverini, R. McConnell, and J. M. Sage. Trapped-ion quantum computing: Progress and challenges. *Applied Physics Reviews*, 6(2):021314, 2019.
 - [12] I. M. Georgescu, S. Ashhab, and F. Nori. Quantum simulation. *Reviews of Modern Physics*, 86(1):153, 2014.
 - [13] B. C. Sanders, S. D. Bartlett, B. Tregenna, and P. L. Knight. Quantum quincunx in cavity quantum electrodynamics. *Physical Review A*, 67(4):042305, 2003.
 - [14] C. J. Axline, L. D. Burkhardt, W. Pfaff, M. Zhang, K. Chou, P. Campagne-Ibarcq, P. Reinhold, L. Frunzio, S. M. Girvin, L. Jiang, et al. On-demand quantum state transfer and entanglement between remote microwave cavity memories. *Nature Physics*, 14(7):705–710, 2018.
 - [15] C. S. Adams, J. D. Pritchard, and J. P. Shaffer. Rydberg atom quantum technologies. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 53(1):012002, 2019.
 - [16] K. Poulios, R. Keil, D. Fry, J. D. A. Meinecke, J. C. F. Matthews, A. Politi, M. Lobino, M. Gräfe, M. Heinrich, S. Nolte, et al. Quantum walks of correlated photon pairs in two-dimensional waveguide arrays. *Physical Review Letters*, 112(14):143604, 2014.
 - [17] H. Chalabi, S. Barik, S. Mittal, T. E. Murphy, M. Hafezi, and E. Waks. Synthetic gauge field for two-dimensional time-multiplexed quantum random walks. *Physical Review Letters*, 123(15):150503, 2019.
 - [18] M. A. Broome, A. Fedrizzi, S. Rahimi-Keshari, J. Dove, S. Aaronson, T. C. Ralph, and A. G. White. Photonic boson sampling in a tunable circuit. *Science*, 339(6121):794–798, 2013.
 - [19] A. Schreiber, A. Gábris, P. P. Rohde, K. Laiho, M. Štefaňák, V. Potoček, C. Hamilton, I. Jex, and C. Silberhorn. A 2d quantum walk simulation of two-particle dynamics. *Science*, 336(6077):55–58, 2012.
 - [20] G. H. Weiss. *Aspects and Applications of the Random Walk*. North-Holland, Amsterdam, 1994.
 - [21] N. G. van Kampen. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. North-Holland, Amsterdam, 1990.

-
- [22] J. Rudnick and G. Gaspari. *Elements of the random walk: an introduction for advanced students and researchers*. Cambridge University Press, 2004.
 - [23] G. Radons, I. M. Sokolov, and R. Klages. *Anomalous Transport: Foundations and Applications*. Wiley-VCH, 2008.
 - [24] J. Klafter and I. M. Sokolov. *First steps in random walks: from tools to applications*. OUP Oxford, 2011.
 - [25] A. Baronchelli, M. Catanzaro, and R. Pastor-Satorras. Random walks on complex trees. *Physical Review E*, 78(1):011114, 2008.
 - [26] J. D. Noh and H. Rieger. Random walks on complex networks. *Physical Review Letters*, 92(11):118701, 2004.
 - [27] T. Aquino and M. Dentz. Chemical continuous time random walks. *Physical Review Letters*, 119(23):230601, 2017.
 - [28] N. Masuda, M. A. Porter, and R. Lambiotte. Random walks and diffusion on networks. *Physics Reports*, 716:1–58, 2017.
 - [29] F. Iannelli, A. Koher, D. Brockmann, P. Hövel, and I. M. Sokolov. Effective distances for epidemics spreading on complex networks. *Physical Review E*, 95(1):012313, 2017.
 - [30] M. Galiceanu, C. F. O. Mendes, C. M. Maciel, and M. W. Beims. Mechanisms to decrease the diseases spreading on generalized scale-free networks. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 31(3):033131, 2021.
 - [31] Y. Aharonov, L. Davidovich, and N. Zagury. Quantum random walks. *Physics Review A*, 48(2), 1993.
 - [32] E. Farhi and S. Gutmann. Quantum computation and decision trees. *Physics Review A*, 58(2), 1998.
 - [33] F. W. Strauch. Connecting the discrete-and continuous-time quantum walks. *Physical Review A*, 74(3):030301, 2006.
 - [34] J. D. Whitfield, C. A. Rodríguez-Rosario, and A. Aspuru-Guzik. Quantum stochastic walks: A generalization of classical random walks and quantum walks. *Physical Review A*, 81(2):022323, 2010.
 - [35] F. M. Andrade, A. G. M. Schmidt, E. Vicentini, B. K. Cheng, and M. G. E. da Luz. Green’s function approach for quantum graphs: an overview. *Physics Reports*, 647:1–46, 2016.

-
- [36] V. M. Kenkre and P. Reineker. *Exciton dynamics in molecular crystals and aggregates*, volume 94. Springer, 1982.
- [37] W. M. Zhang, T. Meier, V. Chernyak, and S. Mukamel. Exciton-migration and three-pulse femtosecond optical spectroscopies of photosynthetic antenna complexes. *The Journal of Chemical Physics*, 108(18):7763–7774, 1998.
- [38] K. Hyeon-Deuk, Y. Tanimura, and M. Cho. Ultrafast exciton-exciton coherent transfer in molecular aggregates and its application to light-harvesting systems. *The Journal of Chemical Physics*, 127(7):08B607, 2007.
- [39] C. K. Lee, L. Shi, and A. P. Willard. A model of charge-transfer excitons: Diffusion, spin dynamics, and magnetic field effects. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 7(12):2246–2251, 2016.
- [40] B.-X. Wang, M.-J. Tao, Q. Ai, T. Xin, N. Lambert, D. Ruan, Y.-C. Cheng, F. Nori, F.-G. Deng, and G.-L. Long. Efficient quantum simulation of photosynthetic light harvesting. *NPJ Quantum Information*, 4(1):1–6, 2018.
- [41] F. Fassioli, R. Dinshaw, P. C. Arpin, and G. D. Scholes. Photosynthetic light harvesting: excitons and coherence. *Journal of The Royal Society Interface*, 11(92):20130901, 2014.
- [42] T. Brixner, R. Hildner, J. Köhler, C. Lambert, and F. Würthner. Exciton transport in molecular aggregates—from natural antennas to synthetic chromophore systems. *Advanced Energy Materials*, 7(16):1700236, 2017.
- [43] A. Drinko, F. M. Andrade, and D. Bazeia. Narrow peaks of full transmission in simple quantum graphs. *Physical Review A*, 100(6):062117, 2019.
- [44] G. Berkolaiko and P. Kuchment. *Introduction to quantum graphs*. Number 186. American Mathematical Soc., 2013.
- [45] A. A. Zhukov, S. V. Remizov, W. V. Pogosov, and Y. E. Lozovik. Algorithmic simulation of far-from-equilibrium dynamics using quantum computer. *Quantum Information Processing*, 17(9):1–26, 2018.
- [46] J. M. Harrison and E. Swindle. Spectral properties of quantum circulant graphs. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 52(28):285101, 2019.
- [47] S. Severini and G. Tanner. Regular quantum graphs. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 37(26):6675, 2004.
- [48] M. Mosca. *Quantum algorithms*. In: *Encyclopedia of Complexity and Systems Science*. Springer-Verlag 2009. Springer.

-
- [49] C. D. Bruzewicz, J. Chiaverini, R. McConnell, and J. M. Sage. Trapped-ion quantum computing: Progress and challenges. *Applied Physics Reviews*, 6(2):021314, 2019.
- [50] P. Schindler, D. Nigg, T. Monz, J. T. Barreiro, E. Martinez, S. X. Wang, S. Quint, M. F. Brandl, V. Nebendahl, C. F. Roos, et al. A quantum information processor with trapped ions. *New Journal of Physics*, 15(12):123012, 2013.
- [51] M. A. Nielsen and I. L. Chuang. *Quantum computation and quantum information*. Cambridge University Press, 2000.
- [52] I. M. Georgescu, S. Ashhab, and F. Nori. Quantum simulation. *Reviews of Modern Physics*, 86(1):153, 2014.
- [53] R. Portugal. *Quantum walks and search algorithms*, volume 19. Springer, 2013.
- [54] A. M. Childs and J. Goldstone. Spatial search by quantum walk. *Physical Review A*, 70(2):022314, 2004.
- [55] M. Cattaneo, M. A. C. Rossi, M. G. A. Paris, and S. Maniscalco. Quantum spatial search on graphs subject to dynamical noise. *Physical Review A*, 98(5):052347, 2018.
- [56] L. K. Grover. Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack. *Physical Review Letters*, 79(2):325, 1997.
- [57] P. W. Shor. Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring. In *Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, pages 124–134. IEEE, 1994.
- [58] B. Hein and G. Tanner. Quantum search algorithms on a regular lattice. *Physical Review A*, 82(1):012326, 2010.
- [59] I. Foulger, S. Gnutzmann, and G. Tanner. Quantum search on graphene lattices. *Physical Review Letters*, 112(7):070504, 2014.
- [60] M. E. J. Newman. *Networks: An Introduction*. Oxford University Press, Oxford, 2010.
- [61] E. Estrada. *The Structure of Complex Networks: Theory and Applications*. Oxford University Press, 2011.
- [62] O. Mülken and A. Blumen. Continuous-time quantum walks: Models for coherent transport on complex networks. *Physics Reports*, 502:37–87, 2011.
- [63] F. Vögtle, G. Richardt, and N. Werner. *Dendrimer Chemistry: Concepts, Syntheses, Properties, Applications*. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2009.

-
- [64] M. D. Galiceanu and W. T. Strunz. Continuous-time quantum walks on multilayer dendrimer networks. *Physical Review E*, 94(022307), 2016.
- [65] C. M. Maciel, W. T. Strunz, and M. Galiceanu. Quantum transport on modified multilayered spiderwebs. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 51(49):495301, 2018.
- [66] M. Kivelä, A. Arenas, M. Barthélemy, J. P. Gleeson, Y. Moreno, and M. A. Porter. Multilayer networks. *Journal of Complex Networks*, 2(3):203–271, 2014.
- [67] E. Cozzo, G. F. De Arruda, F. A. Rodrigues, and Y. Moreno. *Multiplex networks: basic formalism and structural properties*. Springer, 2018.
- [68] A. Anishchenko, A. Blumen, and O. Mülken. Enhancing the spreading of quantum walks on star graphs by additional bonds. *Quantum Information Processing*, 11(5):1273–1286, 2012.
- [69] A.-L. Barabási and R. Albert. Emergence of scaling in random networks. *Science*, 286(5439):509–512, 1999.
- [70] M. Galiceanu. Relaxation dynamics of scale-free polymer networks. *Physical Review E*, 86(4):041803, 2012.
- [71] A. Jurjiu, D. G. M. Júnior, and M. Galiceanu. Relaxation dynamics of generalized scale-free polymer networks. *Scientific Reports*, 8(1):1–15, 2018.
- [72] C. M. Maciel, C. F. O. Mendes, W. T. Strunz, and M. Galiceanu. Quantum transport on generalized scale-free networks. *Physical Review A*, 102(3):032219, 2020.
- [73] X.-P. Xu. Exact analytical results for quantum walks on star graphs. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 42(11):115205, 2009.
- [74] C. M. Maciel. Caminhadas quânticas de tempo contínuo: um tratamento na rede dendrímero modificado. Master’s thesis, Universidade Federal do Amazonas, Manaus, 2018.
- [75] N. Kulvelis, M. Dolgushev, and O. Mülken. Universality at breakdown of quantum transport on complex networks. *Physical Review Letters*, 115(120602), 2015.
- [76] H. Krovi and T. A. Brun. Hitting time for quantum walks on the hypercube. *Physical Review A*, 73(032341), 2006.
- [77] F. A. Grünbaum, L. Velázquez, A. H. Werner, and R. F. Werner. Recurrence for discrete time unitary evolutions. *Communications in Mathematical Physics*, 320:543–569, 2013.

-
- [78] M. Štefaňák, I. Jex, and T. Kiss. Recurrence and pólya number of quantum walks. *Physical Review Letters*, 100(020501), 2008.
- [79] Z. Darázs, A. Anishchenko, T. Kiss, A. Blumen, and O. Mülken. Transport properties of continuous-time quantum walks on Sierpinski fractals. *Physical Review E*, 90(032113), 2014.
- [80] H. Friedman, D. A. Kessler, and E. Barkai. Quantum walks: The first detected passage time problem. *Physical Review E*, 95(032141), 2017.
- [81] K. Poullos, R. Keil, D. Fry, J. D. A. Meinecke, J. C. F. Matthews, A. Politi, M. Lobino, M. Gräfe, M. Heinrich, S. Nolte, et al. Quantum walks of correlated photon pairs in two-dimensional waveguide arrays. *Physical Review Letters*, 112(14):143604, 2014.
- [82] H. B. Perets, Y. Lahini, F. Pozzi, M. Sorel, R. Morandotti, and Y. Silberberg. Realization of quantum walks with negligible decoherence in waveguide lattices. *Physical Review Letters*, 100(17):170506, 2008.
- [83] Z. Yan, Y.-R. Zhang, M. Gong, Y. Wu, Y. Zheng, S. Li, C. Wang, F. Liang, J. Lin, Y. Xu, et al. Strongly correlated quantum walks with a 12-qubit superconducting processor. *Science*, 364(6442):753–756, 2019.
- [84] H. Tang, C. Di Franco, Z.-Y. Shi, T.-S. He, Z. Feng, J. Gao, K. Sun, Z.-M. Li, Z.-Q. Jiao, T.-Y. Wang, et al. Experimental quantum fast hitting on hexagonal graphs. *Nature Photonics*, 12(12):754–758, 2018.
- [85] A. Peruzzo, M. Lobino, J. C. F. Matthews, N. Matsuda, A. Politi, K. Poullos, X.-Q. Zhou, Y. Lahini, N. Ismail, K. Wörhoff, Y. Bromberg, Y. Silberberg, M. G. Thompson, and J. L. O’Brien. Quantum walks of correlated photons. *Science*, 329, 2010.
- [86] H. Tang, X.-F. Lin, Z. Feng, J.-Y. Chen, J. Gao, K. Sun, C.-Y. Wang, P.-C. Lai, X.-Y. Xu, Y. Wang, L.-F. Qiao, A.-L. Yang, and X.-M. Jin. Experimental two-dimensional quantum walk on a photonic chip. *Science Advances*, 4(eaat3174), 2018.
- [87] A. K. Sharma and R. K. Keservani. *Dendrimers for drug delivery*. Apple Academic Press Inc., 2019.
- [88] Y. Cheng. *Dendrimer-based drug delivery systems*. John Wiley & Sons, Inc., 2019.
- [89] E. Buhleier, W. Wehner, and F. Vögtle. Cascade and nonskid-chain-like syntheses of molecular cavity topologies. *Chemischer Informationsdienst*, 9(25), 1978.

-
- [90] S. Svenson and D. A. Tomalia. Dendrimers in biomedical applications - reflections on the field. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 64:102–115, 2012.
- [91] C. C. Lee, J. A. MacKay, J. M. J. Fréchet, and F. C. Szoka. Designing dendrimers for biological applications. *Nature Biotechnology*, 23(12), 2005.
- [92] D. A. Tomalia. Birth of a new macromolecular architecture: Dendrimers as quantized building blocks for nanoscale synthetic organic chemistry. *Aldrichimica*, 37(2), 2004.
- [93] O. Mülken, V. Bierbaum, and A. Blumen. Coherent exciton transport in dendrimers and continuous-time quantum walks. *The Journal of Chemical Physics*, 124(124905), 2006.
- [94] A. Volta, M. Galiceanu, A. Jurjiu, T. Gallo, and L. Gualandri. Dynamics on multilayered hyperbranched fractals through continuous time random walks. *Modern Physics Letters B*, 26(09):1250055, 2012.
- [95] M. Kurant and P. Thiran. Layered complex networks. *Physical Review Letters*, 96(13):138701, 2006.
- [96] S. V. Buldyrev, R. Parshani, G. Paul, H. E. Stanley, and S. Havlin. Catastrophic cascade of failures in interdependent networks. *Nature*, 464(7291):1025–1028, 2010.
- [97] S. Gomez, A. Diaz-Guilera, J. Gomez-Gardenes, C. J. Perez-Vicente, Y. Moreno, and A. Arenas. Diffusion dynamics on multiplex networks. *Physical Review Letters*, 110(2):028701, 2013.
- [98] R. G. Morris and M. Barthélemy. Transport on coupled spatial networks. *Physical Review Letters*, 109(12):128703, 2012.
- [99] G. D’Agostino and A. Scala. *Networks of networks: the last frontier of complexity*, volume 340. Springer, 2014.
- [100] S. Boccaletti, G. Bianconi, R. Criado, C. I. Del Genio, J. Gómez-Gardenes, M. Romance, I. Sendina-Nadal, Z. Wang, and M. Zanin. The structure and dynamics of multilayer networks. *Physics Reports*, 544(1):1–122, 2014.
- [101] Marc Barthélemy. Spatial networks. *Physics Reports*, 499(1-3):1–101, 2011.
- [102] P. Erdős and A. Rényi. On random graphs. *Publicationes Mathematicae Debrecen*, 6(290), 1959.
- [103] D. J. Watts and S. H. Strogatz. Collective dynamics of “small-world” networks. *Nature*, 393(6684):440–442, 1998.

-
- [104] S. Milgram. The small world problem. *Psychology Today*, 2(1):60–67, 1967.
- [105] M. E. J. Newman. Power laws, pareto distributions and zipf’s law. *Contemporary Physics*, 46(5):323–351, 2005.
- [106] S. N. Dorogovtsev and J. F. F. Mendes. Evolution of networks. *Advances in Physics*, 51(4):1079–1187, 2002.
- [107] G. Caldarelli. *Scale-free networks: complex webs in nature and technology*. Oxford University Press, 2007.
- [108] A. D. Broido and A. Clauset. Scale-free networks are rare. *Nature Communications*, 10(1):1–10, 2019.
- [109] P. Holme. Rare and everywhere: Perspectives on scale-free networks. *Nature Communications*, 10(1):1–3, 2019.
- [110] R. M. Anderson. Discussion: the kermack-mckendrick epidemic threshold theorem. *Bulletin of Mathematical Biology*, 53(1):1–32, 1991.
- [111] C. Manchein, E. L. Brugnago, R. M. da Silva, C. F. O. Mendes, and M. W. Beims. Strong correlations between power-law growth of covid-19 in four continents and the inefficiency of soft quarantine strategies. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 30(4):041102, 2020.
- [112] M. Galiceanu and A. Blumen. Target decay on irregular networks. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 19(6):065122, 2007.
- [113] F. Jasch, C. von Ferber, and A. Blumen. Dynamics of randomly branched polymers: configuration averages and solvable models. *Physical Review E*, 68(5):051106, 2003.
- [114] O. Mülken, M. Dolgushev, and M. Galiceanu. Complex quantum networks: From universal breakdown to optimal transport. *Physical Review E*, 93(2):022304, 2016.

Problema de autovalor e resultados exatos para dendrímeros modificados

Neste apêndice, resolveremos, de maneira analítica e exata, o problema de autovalor para uma rede dendrímero puro e redes dendrímero modificados com número de geração $G = 1$. Cada caso analisado segue uma ordem de adição de nova ligação entre vértices de mesma geração. Iniciamos com o dendrímero puro ($p = 0.0$) e avançamos até o dendrímero modificado completo ($p = 1.0$). Para todos os casos resolvemos o seguinte problema de autovalor:

$$\mathbf{A}|q_k\rangle = \lambda_k|q_k\rangle, \quad (\text{A.1})$$

onde $\mathbf{A}$ é a matriz de conectividade, $|q_k\rangle$ ($k = 1, \dots, 4$) são os autovetores (autoestados) e λ_k são os autovalores da matriz $\mathbf{A}$.

Primeiramente, para cada caso calculamos os autovalores λ_k e encontramos seu autovetor associado q_k , e escrevemos este último como uma função de quatro estados de base $|i\rangle$ ($i = 1, \dots, 4$). Em seguida, uma vez conhecidos todos os autovalores e autovetores, podemos, então, determinar, a partir de cálculos exatos, os valores do limite de longo tempo $\chi_{j,k}(t)$, Eq. 2.14, que pode ser reescrito como:

$$\begin{aligned} \chi_{j,k} &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t dt' \pi_{j,k}(t') \\ &= \sum_{n,m} \delta_{\lambda_n, \lambda_m} \langle j|q_n\rangle \langle q_n|k\rangle \langle k|q_m\rangle \langle q_m|j\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Neste apêndice, nosso foco será determinar o valor do limite de longo tempo da probabilidade quântica de transição. Todavia, devemos ressaltar que outras quantidades como, por exemplo, $p_{j,k}(t)$ ou $\pi_{j,k}(t)$, podem ser calculadas a partir dos resultados obtidos ao longo deste apêndice.

A.1 Caso 1: dendrímero puro ($p = 0.0$)

Iniciamos nossos cálculos para o caso de um dendrímero puro (árvore de Cayley pura), Fig. A.1, onde o parâmetro de probabilidade, que adiciona ligações entre vértices

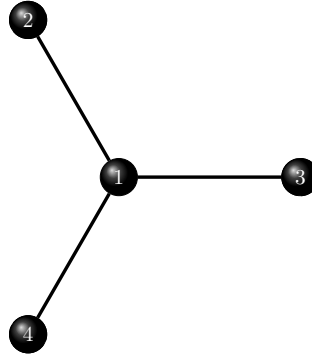


Figura A.1 - Rede dendrímero puro ($p = 0.0$) com apenas uma geração ($G = 1$) e $N = 4$ vértices.

de mesma geração, é tomado como sendo $p = 0.0$. A matriz de conectividade é escrita como:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.3})$$

Agora, vamos determinar os autovalores da matriz presente em Eq. (A.3). Para isso, resolvemos a seguinte equação:

$$\det(\mathbf{A} - I\lambda) = 0, \quad (\text{A.4})$$

onde I é a matriz identidade. Teremos:

$$\det \begin{vmatrix} 3 - \lambda & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 - \lambda & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 - \lambda & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Desta forma, calculamos $-1A_{41} + 0A_{42} + 0A_{43} + (1 - \lambda)A_{44} = 0$. A partir da qual obtemos:

$$\begin{aligned}
-(-1) \begin{vmatrix} -1 & -1 & -1 \\ 1-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 1-\lambda & 0 \end{vmatrix} + (1-\lambda) \begin{vmatrix} 3-\lambda & -1 & -1 \\ -1 & 1-\lambda & 0 \\ -1 & 0 & 1-\lambda \end{vmatrix} &= 0 \\
-(1-\lambda)^2 + (1-\lambda) [(3-\lambda)(1-\lambda)^2 - 2(1-\lambda)] &= 0 \\
-(1-\lambda)^2 + (3-\lambda)(1-\lambda)^3 - 2(1-\lambda)^2 &= 0 \\
(3-\lambda)(1-\lambda)^3 - 3(1-\lambda)^2 &= 0 \\
(1-\lambda)^2 [(3-\lambda)(1-\lambda) - 3] &= 0 \\
(1-\lambda)^2 (\lambda^2 - 4\lambda) &= 0 \\
\lambda(1-\lambda)(1-\lambda)(\lambda-4) &= 0. \tag{A.5}
\end{aligned}$$

Desta forma, temos os seguintes autovalores para um dendrímero puro:

$$\boxed{\lambda_1 = 0; \lambda_2 = \lambda_3 = 1; \lambda_4 = 4.} \tag{A.6}$$

Agora, vamos determinar os autovetores associados a cada autovalor. Para isso, resolvemos a seguinte equação:

$$(A - I\lambda)v = 0, \tag{A.7}$$

onde

$$v = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix}.$$

Primeiramente, resolveremos para $\lambda_1 = 0$. Teremos o seguinte:

$$\begin{bmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{A.8}$$

após efetuar a multiplicação, encontramos o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} 3a - b - c - d = 0 \\ -a + b = 0 \\ -a + c = 0 \\ -a + d = 0. \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

Assim:

$$v_1 = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \\ a \\ a \\ a \end{bmatrix} = a \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.10})$$

Com:

$$a = \frac{1}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2}} = \frac{1}{2}.$$

Portanto, o autovetor normalizado $v_1 \equiv |q_1\rangle$ associado a $\lambda_1 = 0$ é dado por

$$|q_1\rangle = a \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} [|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle + |4\rangle]. \quad (\text{A.11})$$

Onde:

$$|1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, |2\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, |3\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \text{ e } |4\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.12})$$

Agora, resolveremos para $\lambda_2 = \lambda_3 = 1$. Teremos o seguinte:

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.13})$$

após efetuar a multiplicação, encontramos o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} 2a - b - c - d = 0 \\ -a = 0 \\ -a = 0 \\ -a = 0. \end{cases} \quad (\text{A.14})$$

Agora, temos uma família de autovetores, assim:

$$\begin{bmatrix} 0 \\ b \\ c \\ -b - c \end{bmatrix} = b \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} + c \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.15})$$

desta forma,

$$v_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} \text{ e } v_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.16})$$

Utilizando o processo de ortogonalização de Gram-Schmidt, fazemos:

$$v'_1 = v_1 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right). \quad (\text{A.17})$$

Assim, para v_2 , teremos:

$$\begin{aligned} v'_2 &= v_2 - \frac{\langle v_2, v'_1 \rangle}{\langle v'_1, v'_1 \rangle} v'_1 \\ &= v_2 - \frac{0}{1} v'_1 = (0, 1, 0, -1). \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Já para v_3 , obtemos:

$$\begin{aligned} v'_3 &= v_3 - \frac{\langle v_3, v'_1 \rangle}{\langle v'_1, v'_1 \rangle} v'_1 - \frac{\langle v_3, v'_2 \rangle}{\langle v'_2, v'_2 \rangle} v'_2 \\ &= v_3 - \frac{0}{1} v'_1 - \frac{1}{2} v'_2 \\ &= v_3 - \frac{1}{2} v'_2 = (0, 0, 1, -1) - \left(0, \frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2} \right) \\ v'_3 &= \left(0, -\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Agora, v'_1 , v'_2 e v'_3 são vetores ortogonais. Podemos, então, normalizar v'_2 e v'_3 . Fazemos:

$$u_2 = \frac{v'_2}{|v'_2|} = \frac{v'_2}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (0, 1, 0, -1), \quad (\text{A.20})$$

e

$$u_3 = \frac{v'_3}{|v'_3|} = \frac{v'_3}{\sqrt{\frac{3}{2}}} = \frac{\sqrt{6}}{3} \left(0, -\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2} \right). \quad (\text{A.21})$$

Portanto, os autovetores ortonormalizados $u_2 \equiv |q_2\rangle$ e $u_3 \equiv |q_3\rangle$, associados a λ_2 e λ_3 , respectivamente, são dados por

$$|q_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} [|2\rangle - |4\rangle], \quad (\text{A.22})$$

e

$$|q_3\rangle = \frac{\sqrt{6}}{3} \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{1}{2} \\ 1 \\ -\frac{1}{2} \end{bmatrix} = \frac{\sqrt{6}}{3} \left[-\frac{1}{2}|2\rangle + |3\rangle - \frac{1}{2}|4\rangle \right]. \quad (\text{A.23})$$

Agora, resolveremos para $\lambda_4 = 4$. Teremos o seguinte:

$$\begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & -3 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -3 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & -3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.24})$$

após efetuar a multiplicação, encontramos o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} -a - b - c - d = 0 \\ -a - 3b = 0 \\ -a - 3c = 0 \\ -a - 3d = 0. \end{cases} \quad (\text{A.25})$$

Assim:

$$v_4 = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3d \\ d \\ d \\ d \end{bmatrix} = d \begin{bmatrix} -3 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.26})$$

Com:

$$d = \frac{1}{\sqrt{9+3}} = \frac{1}{2\sqrt{3}}.$$

Portanto, o autovetor normalizado $v_4 \equiv |q_4\rangle$ associado a $\lambda_4 = 4$ é dado por

$$|q_4\rangle = d \begin{bmatrix} -3 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \begin{bmatrix} -3 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{3}} [-3|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle + |4\rangle]. \quad (\text{A.27})$$

Todos os autoestados ortonormalizados obtidos para este primeiro caso, em que temos um dendrímero puro (uma rede estrela), podem ser confirmados através do resultado geral obtido por Xu em [73]; neste mesmo trabalho, os valores abaixo para $\chi_{j,k}$ também podem ser verificados.

A partir de agora, com todos os autovalores e autovetores determinados, podemos calcular o valor exato do limite de longo tempo $\chi_{j,k}(t)$ dado por A.2. Lembrando que $\delta_{\lambda_n, \lambda_m} = 1$ se $\lambda_n = \lambda_m$, e 0 caso contrário. Desta forma, teremos:

$$\begin{aligned} \chi_{1,1} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 1|q_1\rangle \langle q_1|1\rangle \langle 1|q_1\rangle \langle q_1|1\rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle + \\ &\quad \delta_{\lambda_2, \lambda_3} \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_2} \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle + \\ &\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle \\ &= \frac{1}{16} + \frac{81}{144} = \frac{5}{8}. \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

$$\begin{aligned} \chi_{1,2} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 1|q_1\rangle \langle q_1|2\rangle \langle 2|q_1\rangle \langle q_1|1\rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|2\rangle \langle 2|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle + \\ &\quad \delta_{\lambda_2, \lambda_3} \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|2\rangle \langle 2|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_2} \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|2\rangle \langle 2|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle + \\ &\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|2\rangle \langle 2|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|2\rangle \langle 2|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle \\ &= \frac{1}{16} + \frac{1}{16} = \frac{1}{8}. \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

$$\begin{aligned}
\chi_{1,3} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 1|q_1\rangle \langle q_1|3\rangle \langle 3|q_1\rangle \langle q_1|1\rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|3\rangle \langle 3|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle + \\
&\delta_{\lambda_2, \lambda_3} \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|3\rangle \langle 3|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_2} \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|3\rangle \langle 3|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle + \\
&\delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|3\rangle \langle 3|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|3\rangle \langle 3|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{9}{144} = \frac{1}{8}.
\end{aligned} \tag{A.30}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{1,4} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 1|q_1\rangle \langle q_1|4\rangle \langle 4|q_1\rangle \langle q_1|1\rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|4\rangle \langle 4|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle + \\
&\delta_{\lambda_2, \lambda_3} \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|4\rangle \langle 4|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_2} \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|4\rangle \langle 4|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle + \\
&\delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|4\rangle \langle 4|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|4\rangle \langle 4|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{9}{144} = \frac{1}{8}.
\end{aligned} \tag{A.31}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{2,1} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 2|q_1 \rangle \langle q_1|1 \rangle \langle 1|q_1 \rangle \langle q_1|2 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 2|q_2 \rangle \langle q_2|1 \rangle \langle 1|q_2 \rangle \langle q_2|2 \rangle + \\
&\delta_{\lambda_2, \lambda_3} \langle 2|q_2 \rangle \langle q_2|1 \rangle \langle 1|q_3 \rangle \langle q_3|2 \rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_2} \langle 2|q_3 \rangle \langle q_3|1 \rangle \langle 1|q_2 \rangle \langle q_2|2 \rangle + \\
&\delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 2|q_3 \rangle \langle q_3|1 \rangle \langle 1|q_3 \rangle \langle q_3|2 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 2|q_4 \rangle \langle q_4|1 \rangle \langle 1|q_4 \rangle \langle q_4|2 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{16} = \frac{1}{8}.
\end{aligned} \tag{A.32}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{2,2} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 2|q_1\rangle \langle q_1|2\rangle \langle 2|q_1\rangle \langle q_1|2\rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 2|q_2\rangle \langle q_2|2\rangle \langle 2|q_2\rangle \langle q_2|2\rangle + \\
&\delta_{\lambda_2, \lambda_3} \langle 2|q_2\rangle \langle q_2|2\rangle \langle 2|q_3\rangle \langle q_3|2\rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_2} \langle 2|q_3\rangle \langle q_3|2\rangle \langle 2|q_2\rangle \langle q_2|2\rangle + \\
&\delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 2|q_3\rangle \langle q_3|2\rangle \langle 2|q_3\rangle \langle q_3|2\rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 2|q_4\rangle \langle q_4|2\rangle \langle 2|q_4\rangle \langle q_4|2\rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{4} + \frac{1}{6} + \frac{36}{1296} + \frac{1}{144} = \frac{37}{72}.
\end{aligned} \tag{A.33}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{2,3} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 2|q_1 \rangle \langle q_1|3 \rangle \langle 3|q_1 \rangle \langle q_1|2 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 2|q_2 \rangle \langle q_2|3 \rangle \langle 3|q_2 \rangle \langle q_2|2 \rangle + \\
&\delta_{\lambda_2, \lambda_3} \langle 2|q_2 \rangle \langle q_2|3 \rangle \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|2 \rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_2} \langle 2|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle \langle 3|q_2 \rangle \langle q_2|2 \rangle + \\
&\delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 2|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|2 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 2|q_4 \rangle \langle q_4|3 \rangle \langle 3|q_4 \rangle \langle q_4|2 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{9} + \frac{1}{144} = \frac{13}{72}.
\end{aligned} \tag{A.34}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{2,4} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 2|q_1 \rangle \langle q_1|4 \rangle \langle 4|q_1 \rangle \langle q_1|2 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 2|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|2 \rangle + \\
&\delta_{\lambda_2, \lambda_3} \langle 2|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|2 \rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_2} \langle 2|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|2 \rangle + \\
&\delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 2|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|2 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 2|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|2 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{4} + \frac{1}{24} + \frac{1}{24} + \frac{1}{36} + \frac{1}{144} = \frac{31}{72}.
\end{aligned} \tag{A.35}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{4,3} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 4|q_1 \rangle \langle q_1|3 \rangle \langle 3|q_1 \rangle \langle q_1|4 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|3 \rangle \langle 3|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_2, \lambda_3} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|3 \rangle \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_2} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle \langle 3|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|3 \rangle \langle 3|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{9} + \frac{1}{9} + \frac{1}{144} = \frac{7}{24}.
\end{aligned} \tag{A.42}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{4,4} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 4|q_1 \rangle \langle q_1|4 \rangle \langle 4|q_1 \rangle \langle q_1|4 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_2, \lambda_3} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_2} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{4} + \frac{1}{6} + \frac{1}{36} + \frac{1}{144} = \frac{37}{72}.
\end{aligned} \tag{A.43}$$

Podemos, então, calcular, para o caso 1, o valor médio $\tilde{\chi}^{(1)}$ sobre todas as possibilidades de início da caminhada quântica. Obtemos:

$$\tilde{\chi}^{(1)} = \frac{\frac{5}{8} + \dots + \frac{37}{72}}{16} \approx 0.29. \tag{A.44}$$

A.2 Caso 2: dendrímero modificado ($p \neq 0.0$)

Agora, vamos considerar um dendrímero modificado, isto é, adicionamos uma nova ligação entre os vértices 2 e 3 da estrutura anterior (Fig. A.1). Teremos:

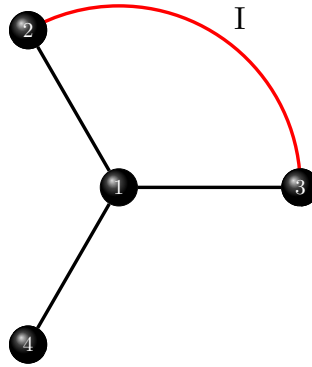


Figura A.2 - Rede dendrímero modificado ($p \neq 0.0$) com apenas uma geração ($G = 1$) e $N = 4$ vértices. Uma nova ligação (I) é adicionada entre vértices de mesma geração através da ativação do parâmetro p .

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.45})$$

Agora, vamos determinar os autovalores da Eq. (A.45). Teremos:

$$\det \begin{vmatrix} 3 - \lambda & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 2 - \lambda & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 2 - \lambda & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Desta forma, calculamos $-1A_{41} + 0A_{42} + 0A_{43} + (1 - \lambda)A_{44} = 0$. Teremos, assim:

$$\begin{aligned} -(-1) \begin{vmatrix} -1 & -1 & -1 \\ 2 - \lambda & -1 & 0 \\ -1 & 2 - \lambda & 0 \end{vmatrix} + (1 - \lambda) \begin{vmatrix} 3 - \lambda & -1 & -1 \\ -1 & 2 - \lambda & -1 \\ -1 & -1 & 2 - \lambda \end{vmatrix} &= 0 \\ -(2 - \lambda)^2 + 1 + (1 - \lambda) [(2 - \lambda)^2(3 - \lambda) - 1 - 1 - (2 - \lambda) - (3 - \lambda) - (2 - \lambda)] &= 0 \\ -(2 - \lambda)^2 + 1 + (1 - \lambda) [(2 - \lambda)^2(3 - \lambda) - 3(3 - \lambda)] &= 0 \\ -(1 - \lambda)(3 - \lambda) + (2 - \lambda)^2(1 - \lambda)(3 - \lambda) - 3(1 - \lambda)(3 - \lambda) &= 0 \\ (1 - \lambda)(3 - \lambda) [-1 - 3 + 4 - 4\lambda + \lambda^2] &= 0 \\ \lambda(1 - \lambda)(3 - \lambda)(4 - \lambda) &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.46})$$

Desta forma, temos os seguintes autovalores para um dendrímero modificado (ligação I adicionada):

$$\lambda_1 = 0; \lambda_2 = 1; \lambda_3 = 3; \lambda_4 = 4. \quad (\text{A.47})$$

Agora, vamos determinar os autovetores associados a cada autovalor. Primeiramente, resolveremos para $\lambda_1 = 0$. Teremos o seguinte:

$$\begin{bmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.48})$$

após efetuar a multiplicação, encontramos o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} 3a - b - c - d = 0 \\ -a + 2b - c = 0 \\ -a - b + 2c = 0 \\ -a + d = 0. \end{cases} \quad (\text{A.49})$$

Assim:

$$v_1 = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \\ a \\ a \\ a \end{bmatrix} = a \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.50})$$

Com:

$$a = \frac{1}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2}} = \frac{1}{2}.$$

Portanto, o autovetor normalizado $v_1 \equiv |q_1\rangle$ associado a $\lambda_1 = 0$ é dado por

$$|q_1\rangle = a \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} [|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle + |4\rangle]. \quad (\text{A.51})$$

Agora, resolveremos para $\lambda_2 = 1$. Teremos o seguinte:

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.52})$$

após efetuar a multiplicação, encontramos o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} 2a - b - c - d = 0 \\ -a + b - c = 0 \\ -a - b + c = 0 \\ -a = 0. \end{cases} \quad (\text{A.53})$$

Assim:

$$v_2 = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ b \\ b \\ -2b \end{bmatrix} = b \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ -2 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.54})$$

Com:

$$b = \frac{1}{\sqrt{1^2 + 1^2 + (-2)^2}} = \frac{1}{\sqrt{6}}.$$

Portanto, o autovetor normalizado $v_2 \equiv |q_2\rangle$ associado a $\lambda_2 = 1$ é dado por

$$|q_2\rangle = b \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ -2 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}} [|2\rangle + |3\rangle - 2|4\rangle]. \quad (\text{A.55})$$

Agora, resolveremos para $\lambda_3 = 3$. Teremos o seguinte:

$$\begin{bmatrix} 0 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.56})$$

após efetuar a multiplicação, encontramos o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} -b - c - d = 0 \\ -a - b - c = 0 \\ -a - b - c = 0 \\ -a - 2d = 0. \end{cases} \quad (\text{A.57})$$

Assim:

$$v_3 = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -c \\ c \\ 0 \end{bmatrix} = c \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.58})$$

Com:

$$c = \frac{1}{\sqrt{1^2 + (-1)^2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Portanto, o autovetor normalizado $v_3 \equiv |q_3\rangle$ associado a $\lambda_3 = 3$ é dado por

$$|q_3\rangle = c \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} [-|2\rangle + |3\rangle]. \quad (\text{A.59})$$

Agora, resolveremos para $\lambda_4 = 4$. Teremos o seguinte:

$$\begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & -2 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -2 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & -3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.60})$$

após efetuar a multiplicação, encontramos o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} -a - b - c - d = 0 \\ -a - 2b - c = 0 \\ -a - b - 2c = 0 \\ -a - 3d = 0. \end{cases} \quad (\text{A.61})$$

Assim:

$$v_4 = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3d \\ d \\ d \\ d \end{bmatrix} = d \begin{bmatrix} -3 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.62})$$

Com:

$$d = \frac{1}{\sqrt{9+3}} = \frac{1}{2\sqrt{3}}.$$

Portanto, o autovetor normalizado $v_4 \equiv |q_4\rangle$ associado a $\lambda_4 = 4$ é dado por

$$|q_4\rangle = d \begin{bmatrix} -3 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \begin{bmatrix} -3 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{3}} [-3|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle + |4\rangle]. \quad (\text{A.63})$$

A partir de agora, com todos os autovalores e autovetores determinados, podemos calcular o valor exato do limite de longo tempo $\chi_{j,k}(t)$ dado por A.2. Desta forma, teremos:

$$\begin{aligned} \chi_{1,1} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 1|q_1\rangle \langle q_1|1\rangle \langle 1|q_1\rangle \langle q_1|1\rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle \\ &\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle \\ &= \frac{1}{16} + \frac{9}{16} = \frac{5}{8}. \end{aligned} \quad (\text{A.64})$$

$$\begin{aligned} \chi_{1,2} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 1|q_1\rangle \langle q_1|2\rangle \langle 2|q_1\rangle \langle q_1|1\rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|2\rangle \langle 2|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle \\ &\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|2\rangle \langle 2|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|2\rangle \langle 2|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle \\ &= \frac{1}{16} + \frac{9}{144} = \frac{1}{8}. \end{aligned} \quad (\text{A.65})$$

$$\begin{aligned} \chi_{1,3} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 1|q_1\rangle \langle q_1|3\rangle \langle 3|q_1\rangle \langle q_1|1\rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|3\rangle \langle 3|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle \\ &\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|3\rangle \langle 3|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|3\rangle \langle 3|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle \\ &= \frac{1}{16} + \frac{9}{144} = \frac{1}{8}. \end{aligned} \quad (\text{A.66})$$

$$\begin{aligned} \chi_{1,4} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 1|q_1\rangle \langle q_1|4\rangle \langle 4|q_1\rangle \langle q_1|1\rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|4\rangle \langle 4|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle \\ &\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|4\rangle \langle 4|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|4\rangle \langle 4|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle \\ &= \frac{1}{16} + \frac{9}{144} = \frac{1}{8}. \end{aligned} \quad (\text{A.67})$$

$$\begin{aligned} \chi_{2,1} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 2|q_1\rangle \langle q_1|1\rangle \langle 1|q_1\rangle \langle q_1|2\rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 2|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|2\rangle \\ &\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 2|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|2\rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 2|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|2\rangle \\ &= \frac{1}{16} + \frac{9}{144} = \frac{1}{8}. \end{aligned} \quad (\text{A.68})$$

$$\begin{aligned} \chi_{2,2} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 2|q_1\rangle \langle q_1|2\rangle \langle 2|q_1\rangle \langle q_1|2\rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 2|q_2\rangle \langle q_2|2\rangle \langle 2|q_2\rangle \langle q_2|2\rangle \\ &\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 2|q_3\rangle \langle q_3|2\rangle \langle 2|q_3\rangle \langle q_3|2\rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 2|q_4\rangle \langle q_4|2\rangle \langle 2|q_4\rangle \langle q_4|2\rangle \\ &= \frac{1}{16} + \frac{1}{36} + \frac{1}{4} + \frac{9}{1296} = \frac{25}{72}. \end{aligned} \quad (\text{A.69})$$

$$\begin{aligned}
\chi_{2,3} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 2|q_1\rangle \langle q_1|3\rangle \langle 3|q_1\rangle \langle q_1|2\rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 2|q_2\rangle \langle q_2|3\rangle \langle 3|q_2\rangle \langle q_2|2\rangle \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 2|q_3\rangle \langle q_3|3\rangle \langle 3|q_3\rangle \langle q_3|2\rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 2|q_4\rangle \langle q_4|3\rangle \langle 3|q_4\rangle \langle q_4|2\rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{36} + \frac{1}{4} + \frac{1}{144} = \frac{25}{72}.
\end{aligned} \tag{A.70}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{2,4} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 2|q_1\rangle \langle q_1|4\rangle \langle 4|q_1\rangle \langle q_1|2\rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 2|q_2\rangle \langle q_2|4\rangle \langle 4|q_2\rangle \langle q_2|2\rangle \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 2|q_3\rangle \langle q_3|4\rangle \langle 4|q_3\rangle \langle q_3|2\rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 2|q_4\rangle \langle q_4|4\rangle \langle 4|q_4\rangle \langle q_4|2\rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{9} + \frac{1}{144} = \frac{13}{72}.
\end{aligned} \tag{A.71}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{3,1} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 3|q_1 \rangle \langle q_1|1 \rangle \langle 1|q_1 \rangle \langle q_1|3 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 3|q_2 \rangle \langle q_2|1 \rangle \langle 1|q_2 \rangle \langle q_2|3 \rangle \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|1 \rangle \langle 1|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 3|q_4 \rangle \langle q_4|1 \rangle \langle 1|q_4 \rangle \langle q_4|3 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{9}{144} = \frac{1}{8}.
\end{aligned} \tag{A.72}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{3,2} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 3|q_1 \rangle \langle q_1|2 \rangle \langle 2|q_1 \rangle \langle q_1|3 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 3|q_2 \rangle \langle q_2|2 \rangle \langle 2|q_2 \rangle \langle q_2|3 \rangle \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|2 \rangle \langle 2|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 3|q_4 \rangle \langle q_4|2 \rangle \langle 2|q_4 \rangle \langle q_4|3 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{36} + \frac{1}{4} + \frac{1}{144} = \frac{25}{72}.
\end{aligned} \tag{A.73}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{3,3} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 3|q_1 \rangle \langle q_1|3 \rangle \langle 3|q_1 \rangle \langle q_1|3 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 3|q_2 \rangle \langle q_2|3 \rangle \langle 3|q_2 \rangle \langle q_2|3 \rangle \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 3|q_4 \rangle \langle q_4|3 \rangle \langle 3|q_4 \rangle \langle q_4|3 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{36} + \frac{1}{4} + \frac{9}{1296} = \frac{25}{72}.
\end{aligned} \tag{A.74}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{3,4} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 3|q_1 \rangle \langle q_1|4 \rangle \langle 4|q_1 \rangle \langle q_1|3 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 3|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|3 \rangle \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 3|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|3 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{9} + \frac{1}{144} = \frac{13}{72}.
\end{aligned} \tag{A.75}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{4,1} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 4|q_1\rangle \langle q_1|1\rangle \langle 1|q_1\rangle \langle q_1|4\rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 4|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|4\rangle \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 4|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|4\rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 4|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|4\rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{9}{144} = \frac{1}{8}.
\end{aligned} \tag{A.76}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{4,2} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 4|q_1\rangle \langle q_1|2\rangle \langle 2|q_1\rangle \langle q_1|4\rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 4|q_2\rangle \langle q_2|2\rangle \langle 2|q_2\rangle \langle q_2|4\rangle \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 4|q_3\rangle \langle q_3|2\rangle \langle 2|q_3\rangle \langle q_3|4\rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 4|q_4\rangle \langle q_4|2\rangle \langle 2|q_4\rangle \langle q_4|4\rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{9} + \frac{1}{144} = \frac{13}{72}.
\end{aligned} \tag{A.77}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{4,3} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 4|q_1 \rangle \langle q_1|3 \rangle \langle 3|q_1 \rangle \langle q_1|4 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|3 \rangle \langle 3|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|3 \rangle \langle 3|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{9} + \frac{1}{144} = \frac{13}{72}.
\end{aligned} \tag{A.78}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{4,4} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 4|q_1 \rangle \langle q_1|4 \rangle \langle 4|q_1 \rangle \langle q_1|4 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{16}{36} + \frac{1}{144} = \frac{37}{72}.
\end{aligned} \tag{A.79}$$

Podemos, então, calcular, para o caso 2, o valor médio $\tilde{\chi}^{(2)}$ sobre todas as possibilidades de início da caminhada quântica. Obtemos:

$$\tilde{\chi}^{(2)} = \frac{\frac{5}{8} + \dots + \frac{37}{72}}{16} = 0.25. \tag{A.80}$$

A.3 Caso 3: dendrímero modificado ($p \neq 0.0$)

Agora, vamos fazer a mesma análise para o dendrímero modificado ao adicionarmos uma nova ligação à Fig. A.2 entre os vértices 3 e 4. Teremos:

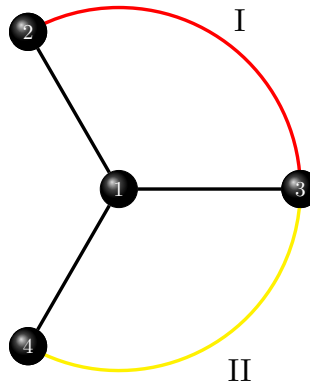


Figura A.3 - Rede dendrímero modificado ($p \neq 0.0$) com apenas uma geração ($G = 1$) e $N = 4$ vértices. Uma nova ligação (II) é adicionada entre vértices de mesma geração através da ativação do parâmetro p .

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}. \tag{A.81}$$

Agora, vamos determinar os autovalores da Eq. (A.81). Teremos:

$$\det \begin{vmatrix} 3-\lambda & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 2-\lambda & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 3-\lambda & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2-\lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Desta forma, calculamos $-1A_{41} + 0A_{42} - 1A_{43} + (2-\lambda)A_{44} = 0$. Teremos, assim:

$$\begin{aligned} -(-1) \begin{vmatrix} -1 & -1 & -1 \\ 2-\lambda & -1 & 0 \\ -1 & 3-\lambda & -1 \end{vmatrix} + 1 \begin{vmatrix} 3-\lambda & -1 & -1 \\ -1 & 2-\lambda & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{vmatrix} + (2-\lambda) \begin{vmatrix} 3-\lambda & -1 & -1 \\ -1 & 2-\lambda & -1 \\ -1 & -1 & 3-\lambda \end{vmatrix} &= 0 \\ -2(2-\lambda)(3-\lambda) - 2(2-\lambda) + (2-\lambda) [(3-\lambda)^2(2-\lambda) - 2 - (2-\lambda) - 2(3-\lambda)] &= 0 \\ (3-\lambda)^2(2-\lambda)^2 - (2-\lambda)^2 - 4(2-\lambda)(3-\lambda) - 4(2-\lambda) &= 0 \\ (2-\lambda) [(3-\lambda)^2(2-\lambda) - (2-\lambda) - 4(3-\lambda) - 4] &= 0 \\ \lambda(2-\lambda)(-\lambda^2 + 8\lambda - 16) &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.82})$$

Desta forma, temos os seguintes autovalores para um dendrímero modificado (ligação I e II adicionadas):

$$\lambda_1 = 0; \lambda_2 = 2; \lambda_3 = \lambda_4 = 4. \quad (\text{A.83})$$

Agora, vamos determinar os autovetores associados a cada autovalor. Primeiramente, resolveremos para $\lambda_1 = 0$. Teremos o seguinte:

$$\begin{bmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.84})$$

após efetuar a multiplicação, encontramos o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} 3a - b - c - d = 0 \\ -a + 2b - c = 0 \\ -a - b + 3c - d = 0 \\ -a - c + 2d = 0. \end{cases} \quad (\text{A.85})$$

Assim:

$$v_1 = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \\ a \\ a \\ a \end{bmatrix} = a \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.86})$$

Com:

$$a = \frac{1}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2}} = \frac{1}{2}.$$

Portanto, o autovetor normalizado $v_1 \equiv |q_1\rangle$ associado a $\lambda_1 = 0$ é dado por

$$|q_1\rangle = a \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} [|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle + |4\rangle]. \quad (\text{A.87})$$

Agora, resolveremos para $\lambda_2 = 2$. Teremos o seguinte:

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.88})$$

após efetuar a multiplicação, encontramos o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} a - b - c - d = 0 \\ -a - c = 0 \\ -a - b + c - d = 0 \\ -a - c = 0. \end{cases} \quad (\text{A.89})$$

Assim:

$$v_2 = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ b \\ 0 \\ -b \end{bmatrix} = b \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.90})$$

Com:

$$b = \frac{1}{\sqrt{1^2 + (-1)^2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Portanto, o autovetor normalizado $v_2 \equiv |q_2\rangle$ associado a $\lambda_2 = 2$ é dado por

$$|q_2\rangle = b \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} [|2\rangle - |4\rangle]. \quad (\text{A.91})$$

Agora, resolveremos para $\lambda_3 = \lambda_4 = 4$. Teremos o seguinte:

$$\begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & -2 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.92})$$

após efetuar a multiplicação, encontramos o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} -a - b - c - d = 0 \\ -a - 2b - c = 0 \\ -a - b - c - d = 0 \\ -a - c - 2d = 0. \end{cases} \quad (\text{A.93})$$

Assim, temos uma família de autovetores, logo:

$$\begin{bmatrix} -c - 2d \\ d \\ c \\ d \end{bmatrix} = c \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + d \begin{bmatrix} -2 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.94})$$

desta forma,

$$v_3 = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \text{ e } v_4 = \begin{bmatrix} -2 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.95})$$

Utilizando o processo de ortogonalização de Gram-Schmidt, fazemos:

$$v'_1 = v_1 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \text{ e } v'_2 = v_2 = \left(0, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0, -\frac{1}{\sqrt{2}}\right). \quad (\text{A.96})$$

Assim, para v_3 , teremos:

$$\begin{aligned} v'_3 &= v_3 - \frac{\langle v_3, v'_2 \rangle}{\langle v'_2, v'_2 \rangle} v'_2 - \frac{\langle v_3, v'_1 \rangle}{\langle v'_1, v'_1 \rangle} v'_1 \\ &= v_3 - \frac{0}{1} v'_2 - \frac{0}{1} v'_1 \\ &= v_3 = (-1, 0, 1, 0). \end{aligned} \quad (\text{A.97})$$

Já para v_4 , obtemos:

$$\begin{aligned} v'_4 &= v_4 - \frac{\langle v_4, v'_3 \rangle}{\langle v'_3, v'_3 \rangle} v'_3 - \frac{\langle v_4, v'_2 \rangle}{\langle v'_2, v'_2 \rangle} v'_2 - \frac{\langle v_4, v'_1 \rangle}{\langle v'_1, v'_1 \rangle} v'_1 \\ &= v_4 - \frac{2}{2} v'_3 - \frac{0}{1} v'_2 - \frac{0}{1} v'_1 \\ &= (-2, 1, 0, 1) - (-1, 0, 1, 0) \\ v'_4 &= (-1, 1, -1, 1). \end{aligned} \quad (\text{A.98})$$

Agora, v'_1 , v'_2 , v'_3 e v'_4 são vetores ortogonais. Podemos, então, normalizar v'_3 e v'_4 . Fazemos:

$$u_3 = \frac{v'_3}{|v'_3|} = \frac{v'_3}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (-1, 0, 1, 0), \quad (\text{A.99})$$

e

$$u_4 = \frac{v'_4}{|v'_4|} = \frac{v'_4}{\sqrt{4}} = \frac{1}{2} (-1, 1, -1, 1). \quad (\text{A.100})$$

Portanto, os autovetores ortonormalizados $u_3 \equiv |q_3\rangle$ e $u_4 \equiv |q_4\rangle$, associados a λ_3 e λ_4 , respectivamente, são dados por

$$|q_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} [-|1\rangle + |3\rangle], \quad (\text{A.101})$$

e

$$|q_4\rangle = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} [-|1\rangle + |2\rangle - |3\rangle + |4\rangle]. \quad (\text{A.102})$$

A partir de agora, com todos os autovalores e autovetores determinados, podemos calcular o valor exato do limite de longo tempo $\chi_{j,k}(t)$ dado por A.2. Desta forma, teremos:

$$\begin{aligned} \chi_{1,1} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 1|q_1\rangle \langle q_1|1\rangle \langle 1|q_1\rangle \langle q_1|1\rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle + \\ &\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_4} \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle + \\ &\quad \delta_{\lambda_4, \lambda_3} \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle \\ &= \frac{1}{16} + \frac{1}{4} + \frac{1}{8} + \frac{1}{8} + \frac{1}{16} = \frac{5}{8}. \end{aligned} \quad (\text{A.103})$$

$$\begin{aligned} \chi_{1,2} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 1|q_1\rangle \langle q_1|2\rangle \langle 2|q_1\rangle \langle q_1|1\rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|2\rangle \langle 2|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle + \\ &\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|2\rangle \langle 2|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_4} \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|2\rangle \langle 2|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle + \\ &\quad \delta_{\lambda_4, \lambda_3} \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|2\rangle \langle 2|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|2\rangle \langle 2|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle \\ &= \frac{1}{16} + \frac{1}{16} = \frac{1}{8}. \end{aligned} \quad (\text{A.104})$$

$$\begin{aligned} \chi_{1,3} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 1|q_1\rangle \langle q_1|3\rangle \langle 3|q_1\rangle \langle q_1|1\rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|3\rangle \langle 3|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle + \\ &\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|3\rangle \langle 3|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_4} \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|3\rangle \langle 3|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle + \\ &\quad \delta_{\lambda_4, \lambda_3} \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|3\rangle \langle 3|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|3\rangle \langle 3|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle \\ &= \frac{1}{16} + \frac{1}{4} + \frac{1}{8} + \frac{1}{8} + \frac{1}{16} = \frac{5}{8}. \end{aligned} \quad (\text{A.105})$$

$$\begin{aligned} \chi_{1,4} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 1|q_1\rangle \langle q_1|4\rangle \langle 4|q_1\rangle \langle q_1|1\rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 1|q_2\rangle \langle q_2|4\rangle \langle 4|q_2\rangle \langle q_2|1\rangle + \\ &\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|4\rangle \langle 4|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_4} \langle 1|q_3\rangle \langle q_3|4\rangle \langle 4|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle + \\ &\quad \delta_{\lambda_4, \lambda_3} \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|4\rangle \langle 4|q_3\rangle \langle q_3|1\rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 1|q_4\rangle \langle q_4|4\rangle \langle 4|q_4\rangle \langle q_4|1\rangle \\ &= \frac{1}{16} + \frac{1}{16} = \frac{1}{8}. \end{aligned} \quad (\text{A.106})$$

$$\begin{aligned}
\chi_{3,3} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 3|q_1 \rangle \langle q_1|3 \rangle \langle 3|q_1 \rangle \langle q_1|3 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 3|q_2 \rangle \langle q_2|3 \rangle \langle 3|q_2 \rangle \langle q_2|3 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_4} \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle \langle 3|q_4 \rangle \langle q_4|3 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_4, \lambda_3} \langle 3|q_4 \rangle \langle q_4|3 \rangle \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 3|q_4 \rangle \langle q_4|3 \rangle \langle 3|q_4 \rangle \langle q_4|3 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{4} + \frac{1}{8} + \frac{1}{8} + \frac{1}{16} = \frac{5}{8}.
\end{aligned} \tag{A.113}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{3,4} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 3|q_1 \rangle \langle q_1|4 \rangle \langle 4|q_1 \rangle \langle q_1|3 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 3|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|3 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_4} \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|3 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_4, \lambda_3} \langle 3|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 3|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|3 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{16} = \frac{1}{8}.
\end{aligned} \tag{A.114}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{4,1} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 4|q_1 \rangle \langle q_1|1 \rangle \langle 1|q_1 \rangle \langle q_1|4 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|1 \rangle \langle 1|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|1 \rangle \langle 1|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_4} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|1 \rangle \langle 1|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_4, \lambda_3} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|1 \rangle \langle 1|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|1 \rangle \langle 1|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{16} = \frac{1}{8}.
\end{aligned} \tag{A.115}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{4,2} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 4|q_1 \rangle \langle q_1|2 \rangle \langle 2|q_1 \rangle \langle q_1|4 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|2 \rangle \langle 2|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|2 \rangle \langle 2|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_4} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|2 \rangle \langle 2|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_4, \lambda_3} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|2 \rangle \langle 2|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|2 \rangle \langle 2|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{4} + \frac{1}{16} = \frac{3}{8}.
\end{aligned} \tag{A.116}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{4,3} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 4|q_1 \rangle \langle q_1|3 \rangle \langle 3|q_1 \rangle \langle q_1|4 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|3 \rangle \langle 3|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_4} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle \langle 3|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_4, \lambda_3} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|3 \rangle \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|3 \rangle \langle 3|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{16} = \frac{1}{8}.
\end{aligned} \tag{A.117}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{4,4} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 4|q_1 \rangle \langle q_1|4 \rangle \langle 4|q_1 \rangle \langle q_1|4 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_4} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_4, \lambda_3} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{4} + \frac{1}{16} = \frac{3}{8}.
\end{aligned} \tag{A.118}$$

Podemos, então, calcular, para o caso 3, o valor médio $\tilde{\chi}^{(3)}$ sobre todas as possi-

bilidades de início da caminhada quântica. Obtemos:

$$\tilde{\chi}^{(3)} = \frac{\frac{5}{8} + \dots + \frac{3}{8}}{16} \approx 0.21. \quad (\text{A.119})$$

A.4 Caso 4: dendrímero modificado completo ($p = 1.0$)

Agora, vamos considerar um dendrímero modificado completo, isto é, quando adicionamos todas as ligações possíveis entre os vértices de mesma geração (Fig. A.4). Teremos:

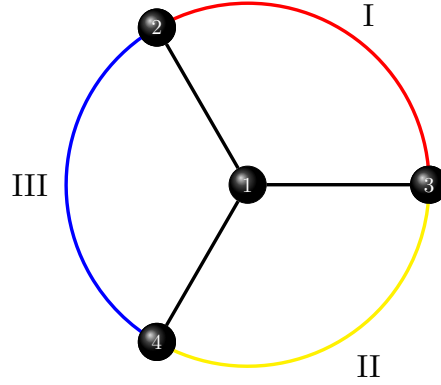


Figura A.4 - Rede dendrímero modificado completo ($p = 1.0$) com apenas uma geração ($G = 1$) e $N = 4$ vértices. Todas as ligações possíveis são adicionadas entre vértices de mesma geração através da ativação do parâmetro p .

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 3 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 3 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.120})$$

Agora, vamos determinar os autovalores da Eq. (A.120). Teremos:

$$\det \begin{vmatrix} 3 - \lambda & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 3 - \lambda & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 3 - \lambda & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 3 - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Desta forma, calculamos $-1A_{41} - 1A_{42} - 1A_{43} + (3 - \lambda)A_{44} = 0$. Teremos, assim:

$$\begin{aligned}
 & -(-1) \begin{vmatrix} -1 & -1 & -1 \\ 3 - \lambda & -1 & -1 \\ -1 & 3 - \lambda & -1 \end{vmatrix} - (1) \begin{vmatrix} 3 - \lambda & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \\ -1 & 3 - \lambda & -1 \end{vmatrix} - (-1) \begin{vmatrix} 3 - \lambda & -1 & -1 \\ -1 & 3 - \lambda & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{vmatrix} + \\
 & \quad (3 - \lambda) \begin{vmatrix} 3 - \lambda & -1 & -1 \\ -1 & 3 - \lambda & -1 \\ -1 & -1 & 3 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \\
 & -1 - 1 - (3 - \lambda)^2 + 1 - (3 - \lambda) - (3 - \lambda) - 1 - (3 - \lambda)^2 - 1 - (3 - \lambda)^2 - 1 - 1 - \\
 & \quad (3 - \lambda) - (3 - \lambda) + 1 + (3 - \lambda) [(3 - \lambda)^3 - 1 - 1 - 3(3 - \lambda)] = 0 \\
 & -3(3 - \lambda)^2 + 6(3 - \lambda) - 3 + (3 - \lambda) [(3 - \lambda)^3 - 3(3 - \lambda) - 2] = 0 \\
 & \lambda^4 - 12\lambda^3 + 51\lambda^2 - 88\lambda + 48 - 3\lambda^2 + 24\lambda - 48 = 0 \\
 & \lambda^4 - 12\lambda^3 + 48\lambda^2 - 64\lambda = 0 \\
 & \lambda(\lambda^3 - 12\lambda^2 + 48\lambda - 64) = 0 \\
 & \lambda(\lambda - 4)^3 = 0.
 \end{aligned} \tag{A.121}$$

Desta forma, temos os seguintes autovalores para um dendrímero modificado completo (ligações I, II e III adicionadas):

$$\lambda_1 = 0; \lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 = 4. \tag{A.122}$$

Agora, vamos determinar os autovetores associados a cada autovalor. Primeiramente, resolveremos para $\lambda_1 = 0$. Teremos o seguinte:

$$\begin{bmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 3 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{A.123}$$

após efetuar a multiplicação, encontramos o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} 3a - b - c - d = 0 \\ -a + 3b - c - d = 0 \\ -a - b + 3c - d = 0 \\ -a - b - c + 3d = 0. \end{cases} \tag{A.124}$$

Assim:

$$v_1 = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \\ a \\ a \\ a \end{bmatrix} = a \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.125})$$

Com:

$$a = \frac{1}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2}} = \frac{1}{2}.$$

Portanto, o autovetor normalizado $v_1 \equiv |q_1\rangle$ associado a $\lambda_1 = 0$ é dado por

$$|q_1\rangle = a \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} [|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle + |4\rangle]. \quad (\text{A.126})$$

Agora, resolveremos para $\lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 = 4$. Teremos o seguinte:

$$\begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.127})$$

após efetuar a multiplicação, encontramos o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} -a - b - c - d = 0 \\ -a - b - c - d = 0 \\ -a - b - c - d = 0 \\ -a - b - c - d = 0. \end{cases} \quad (\text{A.128})$$

Assim, temos uma família de autovetores, logo:

$$\begin{bmatrix} -b - c - d \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = b \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + c \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + d \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.129})$$

desta forma,

$$v_2 = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \text{ e } v_3 = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \text{ e } v_4 = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.130})$$

Utilizando o processo de ortogonalização de Gram-Schmidt, fazemos:

$$v'_1 = v_1 = (1, 1, 1, 1). \quad (\text{A.131})$$

Assim, para v_2 , teremos:

$$\begin{aligned} v'_2 &= v_2 - \frac{\langle v_2, v'_1 \rangle}{\langle v'_1, v'_1 \rangle} v'_1 \\ &= v_2 - \frac{0}{1} v'_1 \\ &= v_2 = (-1, 1, 0, 0). \end{aligned} \quad (\text{A.132})$$

Já para v_3 , obtemos:

$$\begin{aligned} v'_3 &= v_3 - \frac{\langle v_3, v'_2 \rangle}{\langle v'_2, v'_2 \rangle} v'_2 - \frac{\langle v_3, v'_1 \rangle}{\langle v'_1, v'_1 \rangle} v'_1 \\ &= v_3 - \frac{1}{2} v'_2 \\ &= (-1, 0, 1, 0) - \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right) = \left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 1, 0 \right). \end{aligned} \quad (\text{A.133})$$

E para v_4 , teremos:

$$\begin{aligned} v'_4 &= v_4 - \frac{\langle v_4, v'_3 \rangle}{\langle v'_3, v'_3 \rangle} v'_3 - \frac{\langle v_4, v'_2 \rangle}{\langle v'_2, v'_2 \rangle} v'_2 - \frac{\langle v_4, v'_1 \rangle}{\langle v'_1, v'_1 \rangle} v'_1 \\ &= v_4 - \frac{1}{3} v'_3 - \frac{1}{2} v'_2 \\ &= v_4 - \frac{1}{3} \left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 1, 0 \right) - \frac{1}{2} (-1, 1, 0, 0) \\ &= (-1, 0, 0, 1) + \left(\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}, 0 \right) \\ v'_4 &= \left(-\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}, 1 \right). \end{aligned} \quad (\text{A.134})$$

Agora, v'_1 , v'_2 , v'_3 e v'_4 são vetores ortogonais. Podemos, então, normalizar v'_2 , v'_3 e v'_4 .

Fazemos:

$$u_2 = \frac{v'_2}{|v'_2|} = \frac{v'_2}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1, 1, 0, 0), \quad (\text{A.135})$$

$$u_3 = \frac{v'_3}{|v'_3|} = \frac{v'_3}{\sqrt{\frac{3}{2}}} = \frac{\sqrt{6}}{3} \left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 1, 0 \right) \quad (\text{A.136})$$

e

$$u_4 = \frac{v'_4}{|v'_4|} = \frac{v'_4}{\sqrt{\frac{4}{3}}} = \frac{\sqrt{3}}{2} \left(-\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}, 1 \right). \quad (\text{A.137})$$

Portanto, os autovetores ortonormalizados $u_2 \equiv |q_2\rangle$, $u_3 \equiv |q_3\rangle$ e $u_4 \equiv |q_4\rangle$, associados a λ_2 , λ_3 e λ_4 , respectivamente, são dados por

$$|q_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} [-|1\rangle + |2\rangle], \quad (\text{A.138})$$

$$|q_3\rangle = \frac{\sqrt{6}}{3} \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{\sqrt{6}}{3} \left[-\frac{1}{2}|1\rangle - \frac{1}{2}|2\rangle + |3\rangle \right] \quad (\text{A.139})$$

e

$$|q_4\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2} \begin{bmatrix} -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{\sqrt{3}}{2} \left[-\frac{1}{3}|1\rangle - \frac{1}{3}|2\rangle - \frac{1}{3}|3\rangle + |4\rangle \right]. \quad (\text{A.140})$$

A partir de agora, com todos os autovalores e autovetores determinados, podemos

$$\begin{aligned}
\chi_{4,1} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 4|q_1 \rangle \langle q_1|1 \rangle \langle 1|q_1 \rangle \langle q_1|4 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|1 \rangle \langle 1|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_2, \lambda_3} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|1 \rangle \langle 1|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_4} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|1 \rangle \langle 1|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_2} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|1 \rangle \langle 1|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|1 \rangle \langle 1|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_4} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|1 \rangle \langle 1|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_2} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|1 \rangle \langle 1|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_4, \lambda_3} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|1 \rangle \langle 1|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|1 \rangle \langle 1|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{16} = \frac{1}{8}.
\end{aligned} \tag{A.153}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{4,2} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 4|q_1 \rangle \langle q_1|2 \rangle \langle 2|q_1 \rangle \langle q_1|4 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|2 \rangle \langle 2|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_2, \lambda_3} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|2 \rangle \langle 2|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_4} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|2 \rangle \langle 2|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_2} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|2 \rangle \langle 2|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|2 \rangle \langle 2|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_4} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|2 \rangle \langle 2|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_2} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|2 \rangle \langle 2|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_4, \lambda_3} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|2 \rangle \langle 2|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|2 \rangle \langle 2|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{16} = \frac{1}{8}.
\end{aligned} \tag{A.154}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{4,3} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 4|q_1 \rangle \langle q_1|3 \rangle \langle 3|q_1 \rangle \langle q_1|4 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|3 \rangle \langle 3|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_2, \lambda_3} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|3 \rangle \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_4} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|3 \rangle \langle 3|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_2} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle \langle 3|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_4} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|3 \rangle \langle 3|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_2} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|3 \rangle \langle 3|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_4, \lambda_3} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|3 \rangle \langle 3|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|3 \rangle \langle 3|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{1}{16} = \frac{1}{8}.
\end{aligned} \tag{A.155}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{4,4} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_1} \langle 4|q_1 \rangle \langle q_1|4 \rangle \langle 4|q_1 \rangle \langle q_1|4 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_2} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_2, \lambda_3} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_2, \lambda_4} \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_2} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle + \delta_{\lambda_3, \lambda_3} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_3, \lambda_4} \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_2} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \langle 4|q_2 \rangle \langle q_2|4 \rangle + \\
&\quad \delta_{\lambda_4, \lambda_3} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \langle 4|q_3 \rangle \langle q_3|4 \rangle + \delta_{\lambda_4, \lambda_4} \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \langle 4|q_4 \rangle \langle q_4|4 \rangle \\
&= \frac{1}{16} + \frac{9}{16} = \frac{5}{8}.
\end{aligned} \tag{A.156}$$

Podemos, então, calcular, para o caso 4, o valor médio $\tilde{\chi}^{(4)}$ sobre todas as possibilidades de início da caminhada quântica. Obtemos:

$$\boxed{\tilde{\chi}^{(4)} = \frac{\frac{5}{8} + \dots + \frac{5}{8}}{16} \approx 0.34.} \tag{A.157}$$

Portanto, como havíamos descoberto, de forma numérica, durante o texto desta Tese – argumentos presentes no Capítulo 3 e publicados em [65] –, o valor do limite de longo tempo, $\chi_{j,k}$, é menor quando há ausência de apenas uma única ligação entre vértices de mesma geração, para uma rede do tipo dendrímero. Abaixo, fazemos uma comparação:

$$\text{Caso 1} \rightarrow p = 0.0 \rightarrow \tilde{\chi}^{(1)} \approx 0.29$$

$$\text{Caso 2} \rightarrow p \neq 0.0 \rightarrow \tilde{\chi}^{(2)} = 0.25$$

$$\text{Caso 3} \rightarrow p \neq 0.0 \rightarrow \tilde{\chi}^{(3)} \approx 0.21$$

$$\text{Caso 4} \rightarrow p = 1.0 \rightarrow \tilde{\chi}^{(4)} \approx 0.34.$$

(A.158)

Capa da J. Phys. A: Math. Theor., Volume 51, 2018

Abaixo, destacamos a capa da publicação impressa da Revista Científica Internacional *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, Volume 51, de Dezembro de 2018. Tivemos o privilégio de termos uma das nossas figuras, publicadas em [65] e presente no Capítulo 3 [Fig. 3.7 (c)], escolhida para compor a capa do periódico.

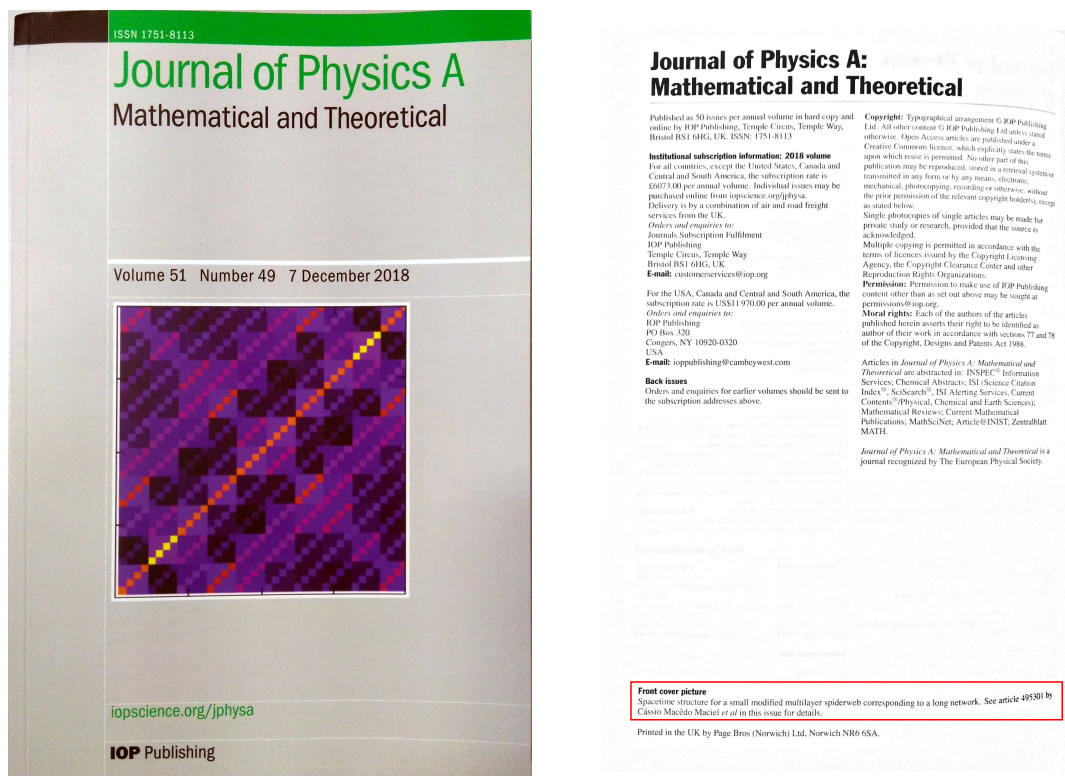


Figura B.1 - Capa da publicação impressa do Volume 51, de Dezembro de 2018, da Revista Científica Internacional *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. A figura presente na capa é a nossa Fig. 3.7 (c), contida no Capítulo 3 desta Tese.

Estruturas GSFNs com diferentes conjuntos de $(\gamma, K_{\min}, K_{\max})$

Neste apêndice, apresentamos outras estruturas GSFNs construídas a partir de diferentes conjuntos dos parâmetros $(\gamma, K_{\min}, K_{\max})$. Sua importância está baseada na possibilidade de visualizar como a topologia da rede é influenciada através da densidade de conexões γ e dos parâmetros de modularidade $K_{\min}$ (menor grau permitido) e $K_{\max}$ (maior grau permitido). O centro de cada estrutura está representado por um nó quadrado vermelho. Vértices que possuem grau igual ou acima de seis, estão representados por círculos com maior diâmetro. Nós que receberam alguma ligação, através da distribuição de probabilidade presente na Eq. 4.3, estão preenchidos. Vértices vazios, desta forma, não foram escolhidos para receber novas ligações. A linha sólida vermelha, presente em todas as figuras, representa o caminho linear mais longo. A cor de cada vértice indica a sua distância ao centro. Nossas redes GSFNs representam a mistura entre redes do tipo estrela e cadeias lineares. Valores pequenos do parâmetro γ resultam em redes compostas por poucos vértices que possuem muitas ligações, em contraste com valores elevados, que apresentam redes com maiores segmentos lineares. A sua escolha, combinada com a dos graus de modularidade, $K_{\min}$ e $K_{\max}$, nos permitem obter estruturas para as quais temos um melhor transporte quântico. A análise do transporte quântico sobre este tipo de estrutura pode ser encontrada no Capítulo 4.

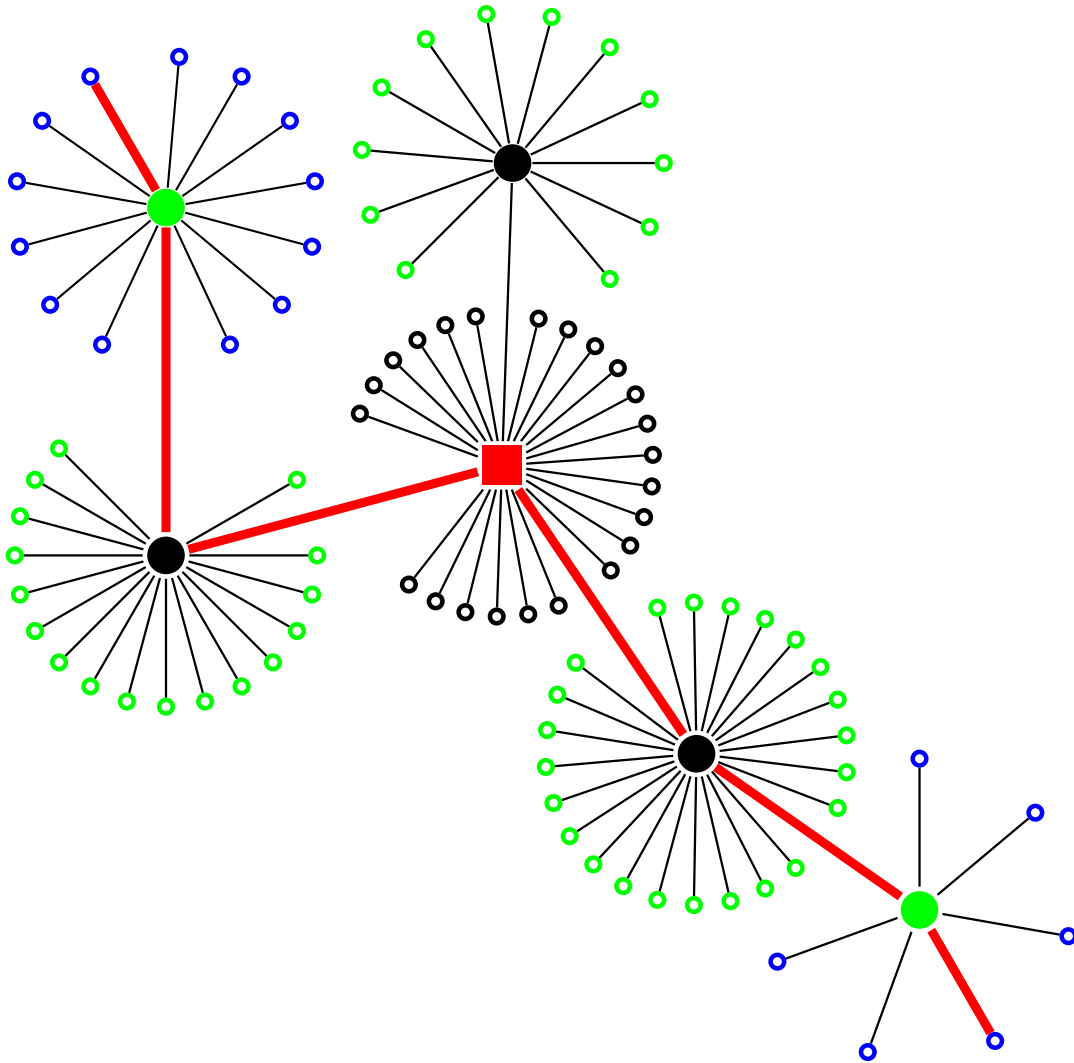


Figura C.1 - GSFN contendo $N = 100$ vértices. Sua construção foi realizada a partir dos parâmetros: $\gamma = 1.0$, $K_{\min} = 3$ e $K_{\max} = 99$.

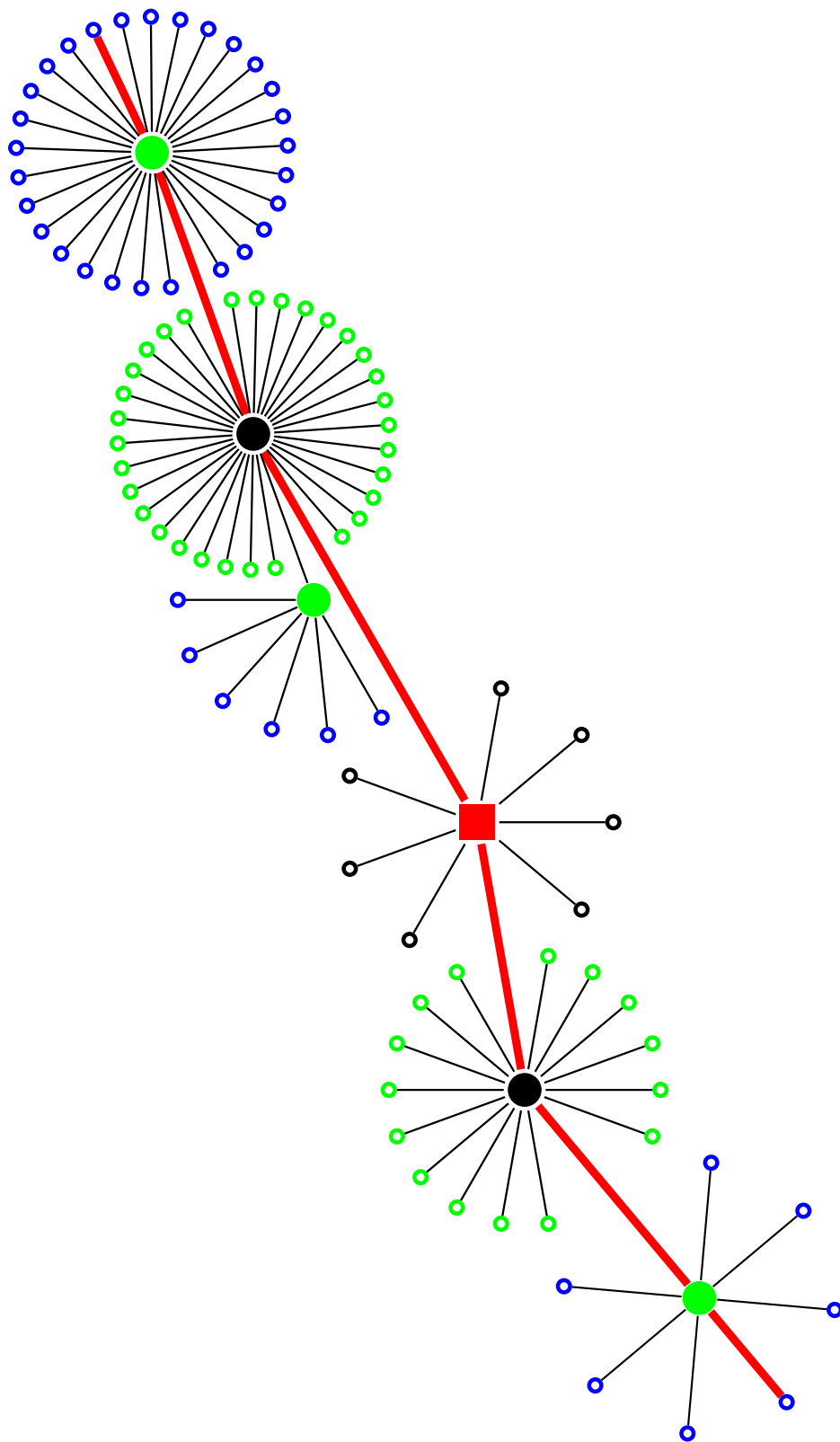


Figura C.2 - GSFN contendo $N = 100$ vértices. Sua construção foi realizada a partir dos parâmetros: $\gamma = 1.0$, $K_{\min} = 6$ e $K_{\max} = 99$.

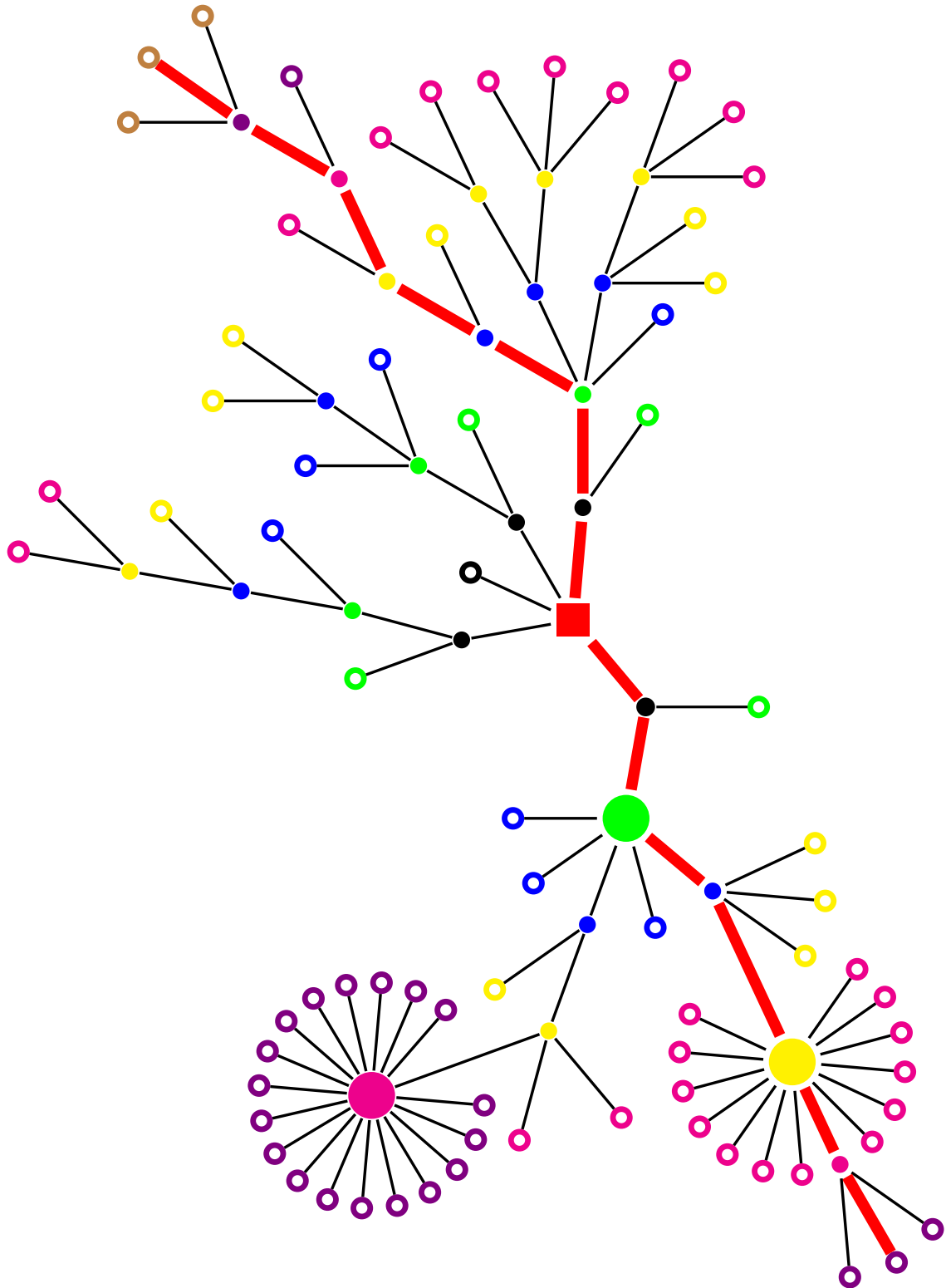


Figura C.3 - GSFN contendo $N = 100$ vértices. Sua construção foi realizada a partir dos parâmetros: $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 3$ e $K_{\max} = 99$.

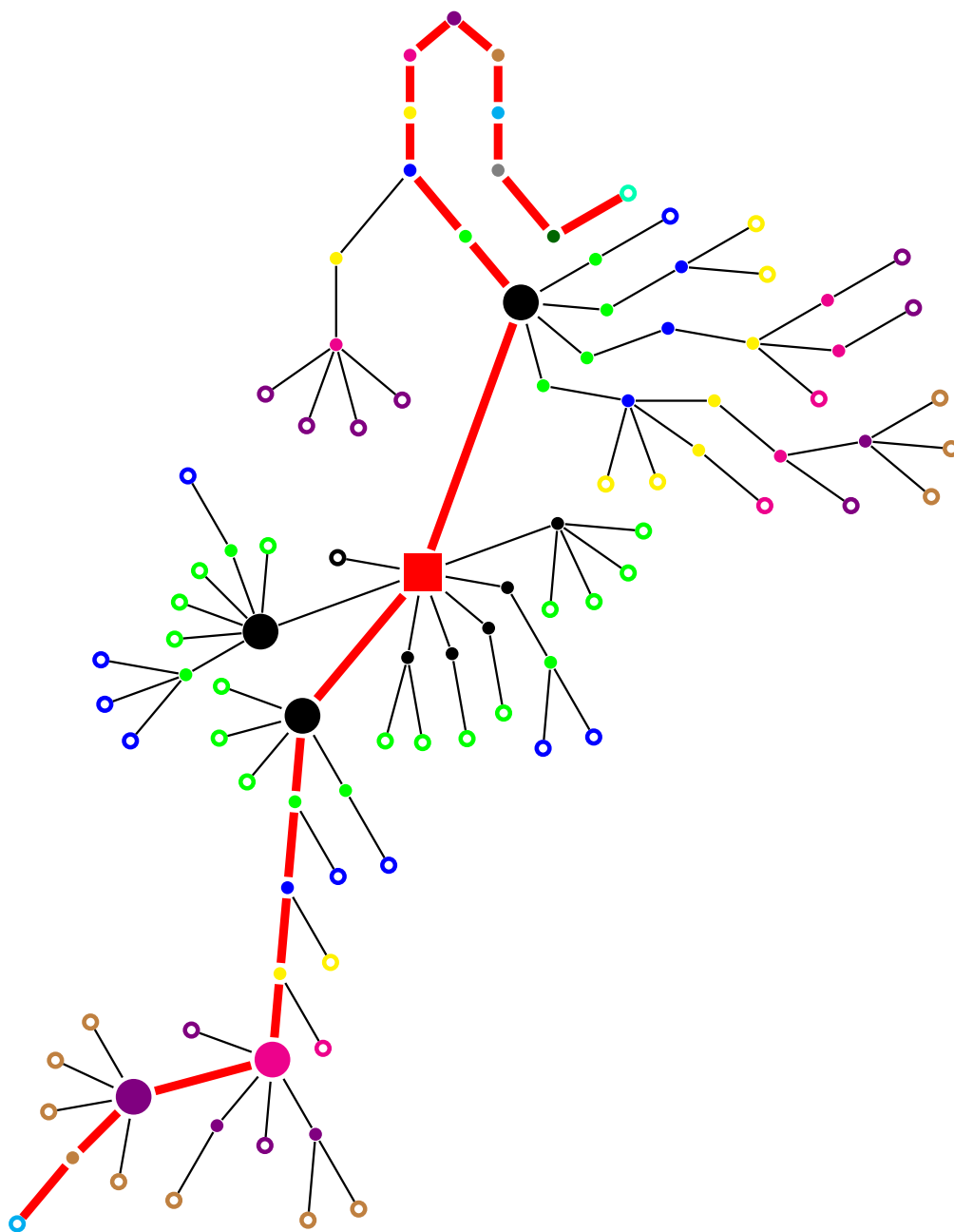


Figura C.4 - GSFN contendo $N = 100$ vértices. Sua construção foi realizada a partir dos parâmetros: $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 2$ e $K_{\max} = 10$.

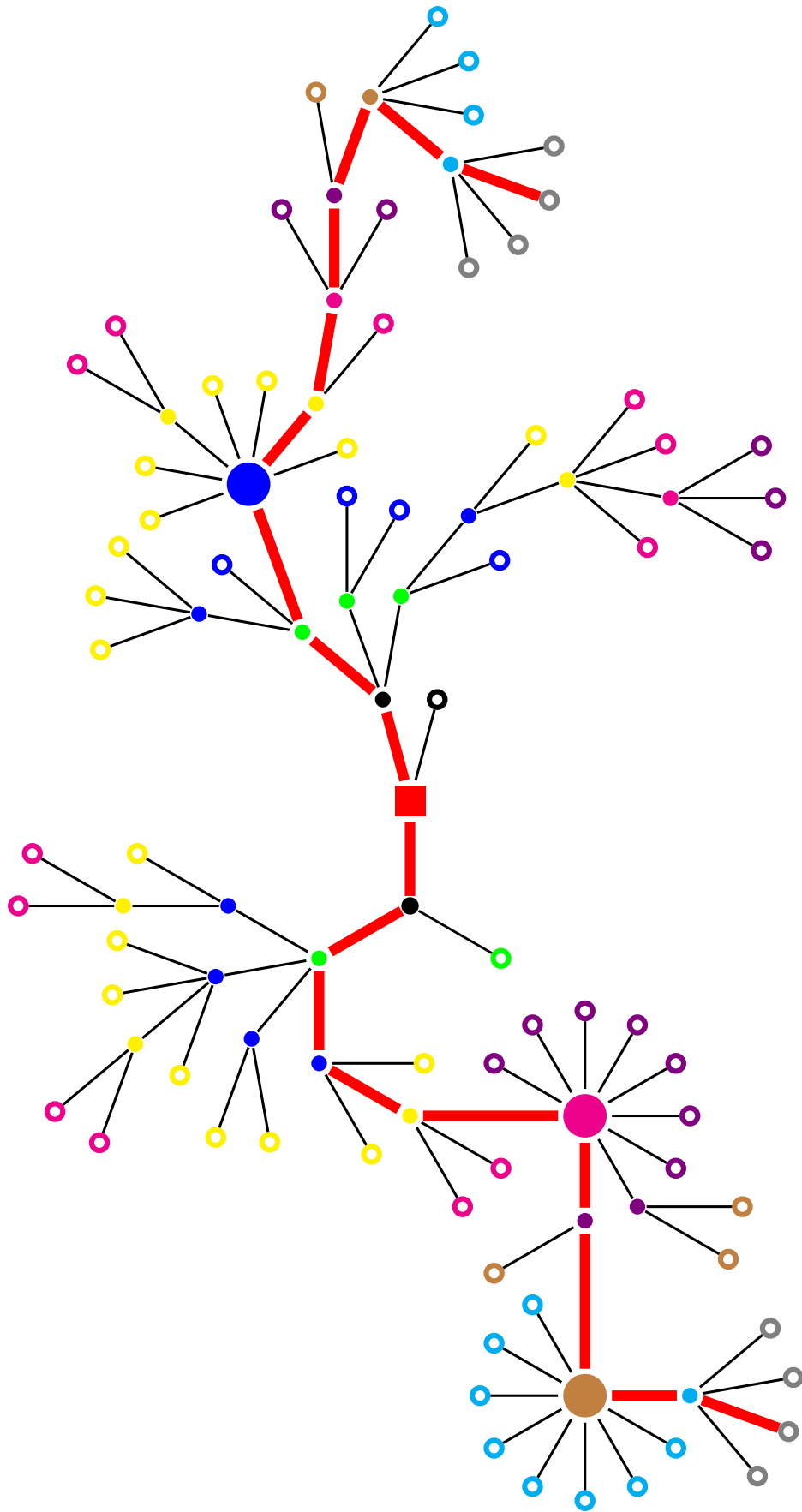


Figura C.5 - GSFN contendo $N = 100$ vértices. Sua construção foi realizada a partir dos parâmetros: $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 3$ e $K_{\max} = 10$.

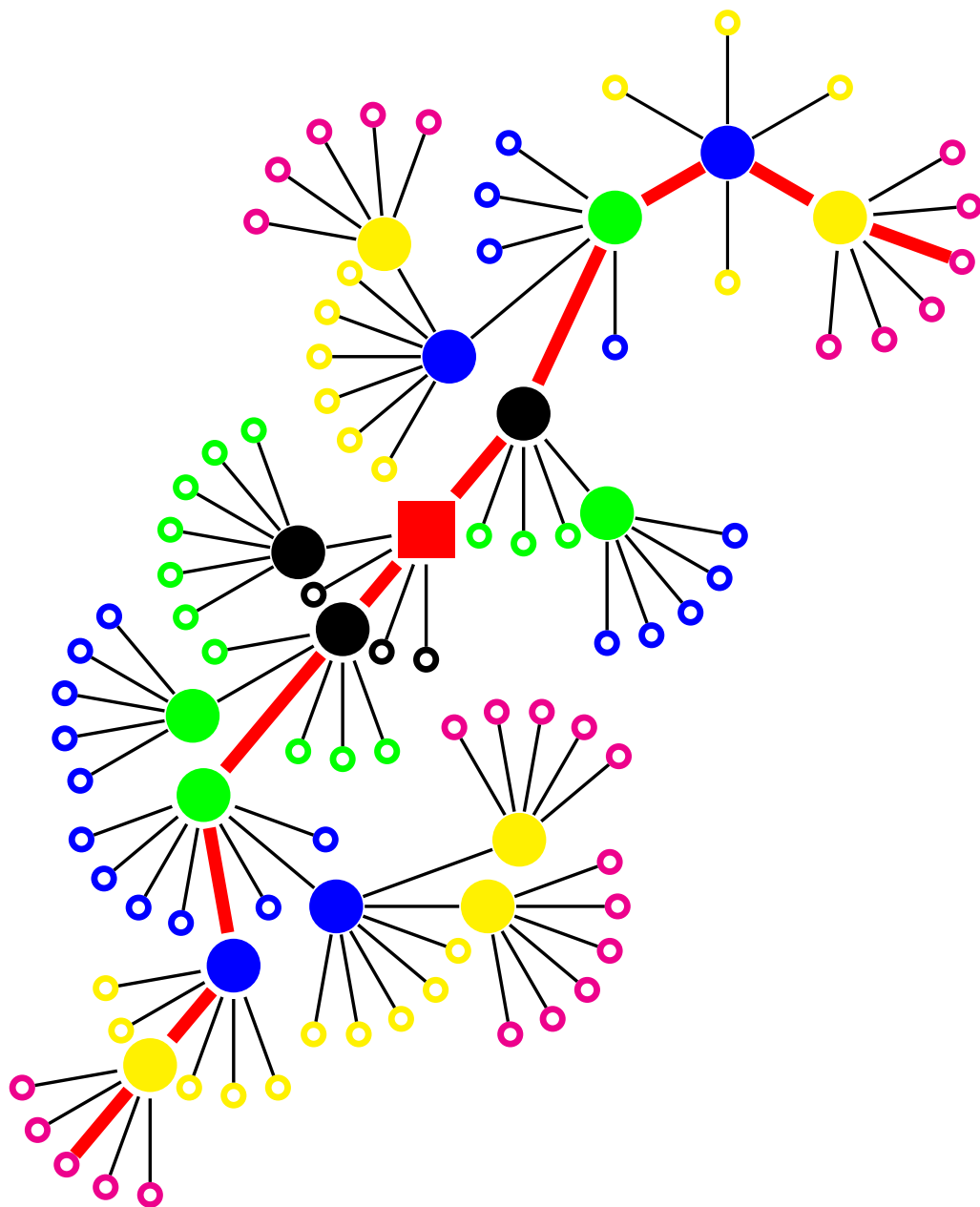


Figura C.6 - GSFN contendo $N = 100$ vértices. Sua construção foi realizada a partir dos parâmetros: $\gamma = 2.5$, $K_{\min} = 6$ e $K_{\max} = 10$.

Doutorado Sanduíche Aprovado - Chamada CNPq nº 22/2018

No dia 31 de Outubro de 2019, recebemos o resultado final dos Projetos contemplados com Bolsa para Doutorado Sanduíche no Exterior (SWE) do CNPq, chamada nº 22/2018. Nosso Projeto foi o único escolhido, dentro da área de Física e Astronomia, para implementação. O autor desta Tese escreveu o Projeto – cuja frente está logo abaixo – com auxílio do seu orientador. Infelizmente, por questões de saúde (que não serão detalhadas) este autor não pôde realizar as atividades deste Projeto. Não obstante, destacamos a relevância e potencial dos nossos sistemas de estudo.

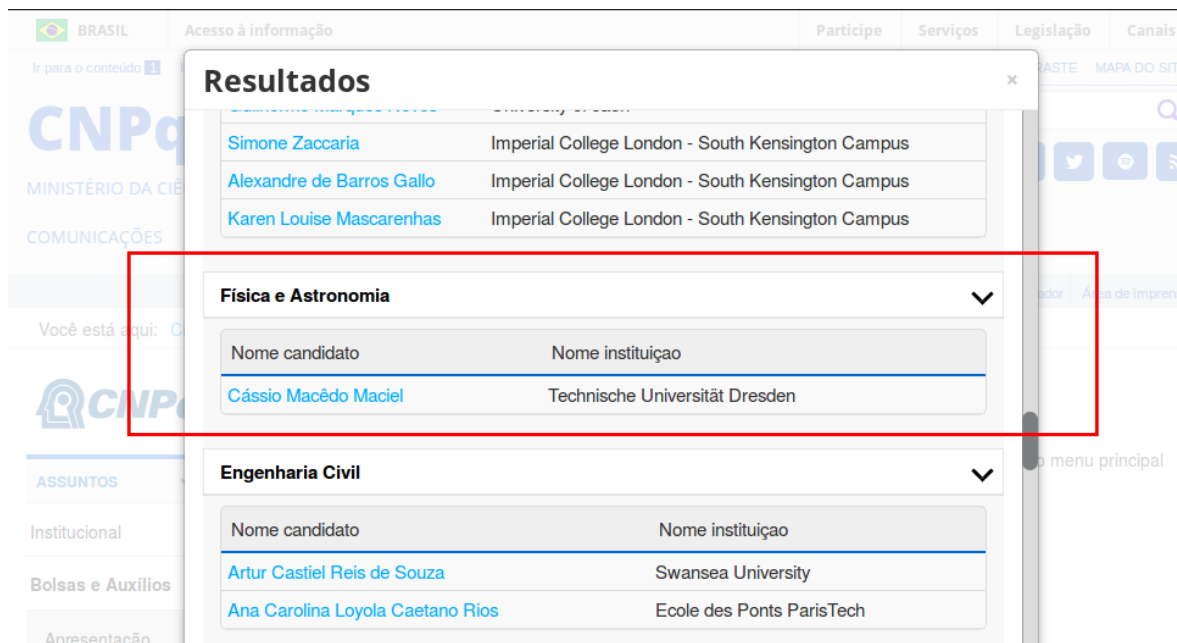


Figura D.1 - Recorte de tela referente ao resultado final da Chamada CNPq nº 22/2018 contendo os aprovados para a realização de Doutorado Sanduíche no Exterior (SWE).

Proposta de Bolsa para Doutorado Sanduíche no Exterior

Candidato: Cássio Macêdo Maciel (UFAM)

Orientador no Brasil: Mircea Daniel Galiceanu (UFAM)

Orientador externo: Walter T. Strunz (Technische Universität Dresden)

6 de March de 2019

Título: Transporte quântico em redes complexas

1 Introdução

Uma grande variedade de estudos sobre transporte quântico surgiu nos últimos anos, seja na física, química ou na criação de algoritmos quânticos, apresentam-se elementos de notável interesse científico. Entre algumas implementações experimentais podemos citar trabalhos envolvendo: redes ou cavidades ópticas [1], átomos de Rydberg [2] e fótons em arranjos de guia de ondas [3, 4]. A área de redes complexas fornece um ambiente rico na aplicação do transporte quântico, uma vez que os modelos de redes esboçam a topologia adjacente de inúmeras estruturas físicas, químicas, biológicas, econômicas e sociais. Três modelos de redes receberam enorme destaque, são eles: o modelo de rede aleatória, do tipo mundo pequeno e redes livres de