

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA
Programa de Pós-Graduação em Física

Teoria de órbitas periódicas no espectro e condutância de grafos quânticos *

Ricardo Mariense Wickert

Dissertação de Mestrado realizada sob orientação da Profa. Dra. Sandra Denise Prado e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento do requisito final para a obtenção do título de Mestre em Física.

Porto Alegre
Agosto de 2008

*Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Agradecimentos

Aos meus colegas de mestrado, pelo apoio, sugestões e aconselhamentos, em especial à Ana Paula Müller e Daniel Schardosim Calovi, pelos inúmeros conselhos nas diversas etapas de elaboração deste trabalho.

Aos amigos que, com bons momentos de diversão, contrabalancearam as ocasiões de isolamento necessárias às atividades intelectuais. Cometendo a injustiça de citar somente alguns, aos colegas da Engenharia, Física e Informática, Carolina Chiao, Franco Valduga, Pedro Kiefer, Rafael von Gehlen, Rodrigo Kassick e Vítório Sassi, aos companheiros da equipe Elipse Software/LAST de ciclismo, Gean e Gilnei Oliveira, e aos meus irmãos da família Hinrichs, Benjamin e Mônica.

À minha madrinha, Ruth, que desde os primórdios do colegial já me inspirava para a carreira de físico com visitas pelos laboratórios desta Universidade.

À profa. Dra. Sandra Denise Prado, não somente pela orientação, mas pela amizade e instigante estímulo pelo estudo da física teórica, desde a disciplina de Física Geral e Experimental IV, passando pela oportunidade de trabalhar como bolsista de Iniciação Científica e culminando, agora, com o trabalho de Mestrado.

Por fim, à família que, propiciando as condições necessárias, permitiu-me que me dedicasse a mais este projeto, minha profunda gratidão.

Abstract

The Fourier transform of the density of states of one-dimensional, closed quantum graph exhibits δ -peaks located precisely at the actions of Newtonian and non-Newtonian orbits. By introducing leads extending to infinity, we investigate the corresponding scattering problem; through the Fourier-transformed spectra, peaks are found indicating that also the conductance displays a signature of such periodic orbits. Our calculations indicate that results from previous work on closed graphs can be extended to open systems. In particular, we indicate a trace formula for three different cases.

Resumo

A transformada de Fourier da densidade de estados de grafos quânticos unidimensionais apresenta picos δ localizados precisamente nos valores da ação de trajetórias Newtonianas e não-Newtonianas. Introduzindo fios estendendo-se ao infinito, investigamos o problema de espalhamento correspondente; através do espectro transformado, encontramos picos que indicam que a condutância também apresenta uma assinatura destas órbitas. Cálculos indicam que resultados de trabalhos anteriores para grafos fechados podem ser estendidos para sistemas abertos. Em particular, uma fórmula do traço é apresentada para três exemplos em particular.

Sumário

Lista de Figuras

1	Introdução	p. 1
2	Dinâmicas clássica e quântica	p. 5
2.1	Caos clássico	p. 6
2.1.1	Dinâmica Simbólica	p. 9
2.1.2	Partição com órbitas periódicas	p. 9
2.1.3	Taxa de Escape	p. 10
2.1.4	Teoria de órbitas periódicas	p. 11
2.1.5	Função Zeta	p. 12
2.2	Caos Quântico	p. 13
2.2.1	Distribuição dos níveis de energia	p. 14
2.2.2	A Fórmula do traço	p. 16
3	Grafos Quânticos	p. 21
3.1	Definições Topológicas	p. 22
3.2	Operador de Schrödinger	p. 25
3.3	Função secular e o Operador de Evolução	p. 27
3.4	Dinâmica Clássica para Grafos	p. 27
3.5	Teoria espectral	p. 29
3.6	Grafos Abertos	p. 32

4 Exemplos	p. 35
4.1 Grafo duplo-degrau	p. 35
4.1.1 Modelo original de Dabaghian	p. 35
4.1.2 Variação não-escalonável	p. 37
4.1.3 Modelo aberto	p. 39
4.1.4 Fórmula do Traço para a Condutância	p. 42
4.1.5 <i>Wigner Time delay</i>	p. 45
4.2 Grafo T	p. 46
4.3 Grafo duplo-T	p. 48
4.3.1 Grafo fechado e estatísticas de níveis	p. 48
4.3.2 Grafo aberto e a condutância	p. 49
4.3.3 Fórmula do Traço	p. 51
5 Conclusões	p. 54
Referências Bibliográficas	p. 57

Lista de Figuras

2.1	O bilhar de três discos	p. 7
2.2	As distribuições de Poisson, GOE e GUE	p. 16
3.1	Grafo com 4 vértices e 5 elos (1 laço)	p. 22
4.1	O potencial degrau escalonável de Dabaghian, com órbitas não-newtonianas L , LRR e a trajetória newtoniana LR	p. 36
4.2	Resultado da transformada (4.3) da densidade de estados com $b = 0.7$ e $\lambda = 1/2$, contabilizada para 10 mil estados.	p. 37
4.3	O potencial degrau duplo fechado (4.6)	p. 38
4.4	Histograma da distribuição de primeiros vizinhos do grafo degrau duplo, comparado com as estatísticas de Poisson e GOE.	p. 38
4.5	O grafo degrau-duplo aberto (4.8)	p. 39
4.6	Ondas propagantes no grafo degrau-duplo aberto (4.8)	p. 40
4.7	Condutância do grafo degrau-duplo para $L_1 = \sqrt{3}$, $L_2 = 5$, $V_1 = 1.0$ e $V_2 = 2.0$	p. 41
4.8	Transformada de Fourier da condutância G (eq. 4.12) com 3 órbitas identificadas	p. 41
4.9	Comparação entre condutância obtida através de (4.12) e a fórmula (4.18)	p. 43
4.10	Condutância x fórmula do traço em região de baixo k	p. 44
4.11	Comparação do time delay obtida através de (4.19) com a fórmula (4.21)	p. 46
4.12	Grafo T	p. 46
4.13	Grafo duplo-T	p. 48
4.14	Histograma da distribuição de primeiros vizinhos do grafo duplo-T, comparado com as estatísticas de Poisson e GOE.	p. 49

4.15 Grafo duplo-T aberto	p. 49
4.16 Condutância do grafo duplo-T com $L_1 = \sqrt{3}$, $L_2 = 5$ e $L_3 = \sqrt{2}$	p. 50
4.17 Transformada de Fourier da condutância G (4.16) em função do comprimento, com algumas órbitas identificadas, e órbitas 'negativas' enfatizadas . .	p. 51
4.18 Comparação entre o coeficiente de transmissão obtido analiticamente e o protótipo da fórmula do t raço.	p. 53

1 *Introdução*

Dispositivos de escala nanométrica tornaram-se uma realidade concreta através de significativos avanços da física aplicada e da engenharia nas últimas décadas. Estes avanços tecnológicos permitiram o crescimento, ou fabricação, de nanoestruturas com notáveis propriedades eletrônicas, como nanotubos de carbonos, contatos e fios de dimensões atômicas, ou *quantum dots* de poucos elétrons [1].

Nessa escala, não somente as propriedades familiares do transporte macroscópico, como a lei de Ohm, são violadas [2], mas surgem também novos efeitos decorrentes da natureza quântica destes sistemas – coerência e descoerência, interações elétron-elétron, desordem e dimensionalidade reduzida, para citar alguns.

Apesar dos processos de fabricação e das técnicas de medida serem específicos para cada um destes dispositivos, os efeitos que se manifestam na escala nanométrica são, em geral, comuns a uma ampla classe de nanoestruturas [3] – são fenômenos ditos universais. Portanto, uma abordagem teórica, estabelecida a partir de primeiros princípios é de grande importância para estabelecer a origem dos mecanismos que afetam a dinâmica destes sistemas e permitir assim a extrapolação às futuras tecnologias, para as quais os modelos atuais não mais se aplicam.

Os dispositivos nanométricos mencionados acima encontram-se numa região intermediária entre as dimensões atômicas, nas quais a teoria quântica é empregada em sua plenitude, e as dimensões tradicionalmente associadas aos dispositivos mili- e micrométricos, nas quais domina a teoria clássica. Nesta região, denominada de *mesoscópica*, emprega-se o chamado li-

mite semiclássico da física quântica: fazendo $h \rightarrow 0$, em unidades nas quais h , a constante de Planck, é um parâmetro adimensional, espera-se utilizar o formalismo quântico para recuperar um comportamento próximo do clássico, porém com importantes correções devido à coerência introduzida pela Mecânica Ondulatória. Através do uso destas técnicas, é possível obter expressões para as propriedades desejadas que vão além dos modelos tradicionais, incluindo agora flutuações quânticas que, como veremos, são cada vez mais significativas nestes dispositivos.

Muitas vezes, tomar este limite não é trivial [4] - por razões que ficam claras, se examinarmos em detalhe o comportamento distinto dos regimes quântico e clássico. Ainda no século XIX, evidenciou-se que a maioria dos movimentos associados à mecânica clássica são “extraordinariamente sensíveis ao estado inicial do sistema”, conforme investigado por Poincaré em seus estudos sobre a mecânica celeste e o problema dos três corpos [5], resultado mais tarde consolidado com as pesquisas meteorológicas de Lorenz em 1962 [6], que estabeleceram a física da dinâmica não-linear nas formas que hoje conhecemos. Para uma revisão histórica recomendamos, por exemplo, a seção 1.1 do livro de Strogatz [7]. Por outro lado, a Mecânica Quântica, desenvolvida a partir da equação de Schrödinger, $H\Psi = E\Psi$, tem evolução linear – obedece, por exemplo, o princípio de superposição: se Ψ_1 e Ψ_2 são soluções válidas, então qualquer combinação da forma $a\Psi_1 + b\Psi_2$ também o será. Isto claramente contradiz o princípio de hipersensibilidade às condições iniciais, no qual dois pontos de partida distintos, mas infinitesimalmente próximos – por exemplo, $\Psi_1 + \varepsilon\Psi_2$ (com $\varepsilon \rightarrow 0$) – divergem exponencialmente em sua evolução.

A partir desta aparente incongruência, desenvolveu-se o estudo da dinâmica quântica de sistemas cujo análogo clássico é caótico – cunhando o termo “Caos Quântico”. O estabelecimento desta teoria seguiu um caminho tortuoso desde o estabelecimento da chamada “teoria quântica antiga” por Niels Bohr com seu famoso princípio da correspondência. Já em 1917 Einstein [8] apontou que este princípio poderia não funcionar na maior parte dos casos onde diversos graus de liberdade do sistema interferissem uns nos outros. Com o estabelecimento da equação de Schrödinger, em 1925/26, surgiu o primeiro método para trabalhar matematicamente esta conexão, através do trabalho de Leon Brillouin, Hendrik Kramers e Gregor Wentzel, conhe-

cido como a aproximação WKB. Porém, esta aproximação é válida somente em certos casos, impondo condições sobre a dimensionalidade e a forma do potencial [9].

Em 1948 Richard Feynman publicou um trabalho [10] oferecendo uma solução explícita para a equação de Schrödinger dependente do tempo, em termos de uma integral sobre todos os caminhos no espaço de posição que conectam a origem q' no tempo t' com sua detecção em q'' no instante t'' . Neste artigo, Feynman constatou que a técnica das integrais de caminho é apropriada para fazer a transição da Mecânica Quântica de volta à sua análoga clássica: se a integral da função Lagrangiana sobre uma trajetória clássica entre os dois extremos é grande se comparada à constante de Planck, então somente os caminhos na vizinhança desta trajetória (clássica) contribuirão, os demais cancelando-se devido à interferência destrutiva. Porém, Feynman não investigou o problema de usar os resultados da Mecânica Clássica para obter um valor explícito para o propagador num contexto mais geral.

Foi somente no final dos anos 60 que Martin Gutzwiller investigou a conexão dos propagadores e funções de Green para casos mais amplos, culminando com seu artigo de 1971 [11]. Nele, apresentou uma generalização da regra de quantização de Bohr para sistemas caóticos gerais com uma *fórmula do traço*, na qual associava as propriedades ondulatórias da Mecânica Quântica a órbitas periódicas instáveis da Mecânica Clássica. Como veremos, a soma coerente sobre todas as contribuições das trajetórias resulta no espectro quântico com precisão semiclássica.

Com base nos resultados de Gutzwiller, floresceu o estudo do Caos Quântico. Outro expoente da chamada “Escola de Bristol”, Michael Berry, utilizou os princípios de Gutzwiller para obter as propriedades estatísticas do espectro [12]. Estas estatísticas foram explorada pelo físico espanhol Oriol Bohigas, que conectou-as com resultados da Teoria de Matrizes Aleatórias (Random Matrices Theory, ou RMT), no que hoje é conhecida como a Conjectura de Bohigas-Giannoni-Schmit [13][14]. Outro desenvolvimento importante foi obtido estendendo o caos quântico para o domínio dos sistemas hamiltonianos, num resultado do brasileiro Alfredo M. Ozorio de Almeida, cuja obra [15] é hoje considerada referência na literatura do assunto.

Nos últimos anos, evidenciou-se que uma ampla classe de sistemas, cuja dinâmica clássica é caótica, possuem correlações universais no limite semiclássico (uma lista bastante abrangente pode ser obtida no artigo de revisão de Kottos e Smilansky [16]). As razões desta universalidade até hoje não foram completamente explicadas. Neste contexto, grafos despertaram o interesse da comunidade de caos quântico, por serem sistemas simples que apresentam as características típicas presentes em modelos mais complexos [17]. Em particular, grafos quânticos apresentam uma vantagem singular: enquanto para mapas ou sistemas hamiltonianos uma abordagem semiclássica é aproximativa, para grafos quânticos esta se revela uma técnica exata.

É neste contexto que o presente trabalho é desenvolvido: buscamos resultados universais para a modelagem dos fenômenos de transporte em sistemas caóticos, partindo de uma abordagem bastante simples baseada em grafos quânticos unidimensionais.

Esta dissertação está estruturada da seguinte forma: no capítulo 2, apresentamos algumas definições e resultados da dinâmica não-linear, tanto no caso clássico como no regime quântico. No capítulo 3, desenvolvemos os fundamentos dos grafos quânticos, apresentando definições e o formalismo matemático com o qual o problema do espalhamento será tratado. Como casos de estudo, três grafos distintos são apresentados no capítulo 4, empregando as técnicas desenvolvidas nos capítulos anteriores. Por fim, no capítulo 5 discutimos nossos resultados e apresentamos perspectivas de trabalhos futuros.

2 *Dinâmicas clássica e quântica*

No início do século XVIII, o barão Gottfried Leibniz declarou com confiança que, dadas as condições iniciais de um sistema determinístico, seu estado poderia ser descrito, mesmo num futuro distante, com absoluta precisão e certeza. Ele escreveu:

“That everything is brought forth through an established destiny is just as certain as that three times three is nine. (...) If, for example, one sphere meets another sphere in free space and if their sizes and their paths and directions before collision are known, we can then foretell and calculate how they will rebound and what course they will take after the impact. Very simple laws are followed which also apply, no matter how many spheres are taken or whether objects are taken other than spheres. From this one sees then that everything proceeds mathematically - that is, infallibly - in the whole wide world, so that if someone could have a sufficient insight into the inner parts of things, and in addition had remembrance and intelligence enough to consider all the circumstances and to take them into account, he would be a prophet and would see the future in the present as in a mirror.” [18]

À luz das novas descobertas que se fizeram com o surgimento da teoria quântica, esta afirmação provou-se errada: o estado de um sistema físico *nunca* pode ser especificado com precisão infinita, portanto uma única trajetória não possui sentido - somente uma *distribuição* de trajetórias é fisicamente realizável. Neste capítulo, buscaremos estabelecer a relação entre a distribuição destas trajetórias e a evolução dinâmica que resulta no sistema, primeiro no caso clássico e mais tarde no caso quântico. A primeira parte, abordando o caos clássico, possui

caráter informativo, e segue de perto a abordagem de Cvitanovic *et al* [19], enfatizando resultados físicos em detrimento das provas e do formalismo matemático. A segunda sessão trata da conexão com o regime quântico, procurando utilizar-se de sistemas simples para desenvolver o ferramental necessário para abordarmos o problema em grafos nos capítulos posteriores.

2.1 Caos clássico

Um sistema determinístico é um sistema no qual o estado no presente é plenamente estabelecido por suas condições iniciais, em distinção a um sistema estocástico, para o qual as condições iniciais determinam o estado atual de forma apenas parcial, devido à presença de ruído ou outras circunstâncias externas fora do nosso controle. Para um sistema estocástico, o estado presente reflete as condições iniciais do passado mais uma realização particular do ruído gerado.

Por outro lado, um sistema determinístico com dinâmica suficientemente complexa pode nos levar a interpretá-lo como sendo estocástico. Neste contexto, podemos nos perguntar “*o que é 'caos'?*”. Para responder esta pergunta utilizaremos, incidentalmente, o mesmo sistema descrito por Leibniz como paradigma para nosso estudo inicial: um jogo de bilhar bidimensional, composto por três discos equidistantes em um plano. Este modelo é um exemplo clássico da teoria de sistemas não-lineares, figurando em diversos trabalhos [20] [21] por prover uma idealização que permite desenvolver conceitos mais complicados. O bilhar é livre, desprovido de atrito, sem ruído e perfeitamente elástico. Contra tal sistema são disparadas partículas pontuais, de posições e ângulos aleatórios, que eventualmente escapam do sistema após ricochetearem entre os discos.

Em princípio, este sistema é determinístico: sabendo com precisão absoluta a posição e o ângulo do disparo de uma partícula, pode-se estabelecer a sua posição em qualquer instante de tempo futuro. Porém, se tomarmos duas trajetórias distintas que começam bastante próximas, veremos que elas se separam exponencialmente com o passar do tempo, e após um número finito de colisões, esta separação $\delta\vec{x}(t)$ atinge a magnitude de L , a distância característica do sistema. Tal propriedade pode ser descrita como:

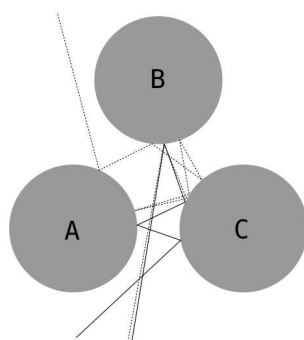


Figura 2.1: O bilhar de três discos

$$|\delta\vec{x}(t)| \approx e^{\lambda t} |\delta\vec{x}(0)|, \quad (2.1)$$

onde λ , a taxa média de separação entre as trajetórias do sistema, é o *expoente de Lyapunov*. Para qualquer precisão finita dos dados iniciais de δx , a dinâmica só é previsível até um instante de tempo finito, chamado de *tempo de Lyapunov*: $T \approx -\frac{1}{\lambda} |\delta x| / L$.

Porém, um coeficiente λ positivo não leva imediatamente ao caos. Poder-se-ia jogar uma versão análoga deste bilhar com apenas um ou dois discos; neste caso, o jogo não seria muito interessante: as trajetórias iriam apenas se separar, afastando-se indefinidamente. Para chegarmos ao caos, é preciso passarmos antes pelo conceito de *mistura*, ou seja, o “embaralhamento” das trajetórias. Formalmente [22], uma transformação \mathbf{M} de uma região compacta S é dita misturadora¹ se para quaisquer dois subconjuntos σ e σ' de S , ambos com medida de Lebesgue positiva ($\mu_L(\sigma) > 0, \mu_L(\sigma') > 0$), vale que

$$\frac{\mu_L(\sigma)}{\mu_L(S)} = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\mu_L[\sigma' \cap \mathbf{M}^m(\sigma)]}{\mu_L(\sigma')}, \quad (2.2)$$

onde μ deve ser invariante por M , i.e., $\mu(M^{-1}(A)) = \mu(A)$.

Enquanto localmente as trajetórias próximas se separam, a dinâmica é confinada a uma região finita do espaço de fase, e assim as trajetórias distintas podem reaproximar-se, tornando-se arbitrariamente próximas, em um número infinito de ocasiões.

¹“mixing”

No caso do bilhar em questão, temos 2^n trajetórias de n colisões que se originam de um dado disco. Em um caso geral, teríamos

$$N(n) \approx e^{hn} \quad (2.3)$$

onde h aqui representa a entropia topológica.

Através das duas definições (2.2) e (2.3), podemos finalmente definir o caos como sendo uma propriedade de um sistema que possui expoente de Lyapunov, λ , positivo, associado a uma entropia topológica h também positiva. Esta não é, porém, uma definição *prática*: medidas destas quantidades são assintóticas, e para qualquer sistema que observamos na natureza, tais valores estarão muito além do alcance analisável com os métodos de que dispomos. Esta visão foi posteriormente reformulada, definindo caos como a presença de instabilidade local (em termos de órbitas periódicas instáveis) e “mixagem” global (a existência de pontos homoclínicos, i.e., a intersecção entre as variedades² estáveis e instáveis das órbitas). Em outras palavras, uma região aberta do espaço de fase, mesmo que infinitamente pequena, em um intervalo de tempo finito, irá espalhar-se sobre toda a extensão assintoticamente acessível do espaço de fase³. Esta visão da teoria liberta-nos da tarefa hercúlea de procurar uma descrição precisa das trajetórias individuais, e foca em fornecer uma descrição geométrica do espaço, trabalhando com as médias estatísticas sobre este espaço.

A partir dos conceitos fundamentais desenvolvidos acima, podemos classificar uma série de sistemas - hamiltonianos, bilhares, mapas, grafos, etc. - como caóticos ou não, e estudar os diversos mecanismos e propriedades particulares a cada um e mecanismos que neles se fazem presentes. Como nosso objetivo final é somente estabelecer bases gerais para, mais tarde, explorarmos estes conceitos em grafos, evitaremos diversos temas que compõem uma abordagem tradicional em teoria de sistemas não-lineares.

²*manifold*

³A hipótese ergódica diz que, para períodos suficientemente grandes, o tempo em que uma partícula encontra-se numa região do espaço de fase (dos microestados de uma dada energia) é proporcional ao volume desta região, i.e. todos os microestados acessíveis ao sistema são igualmente prováveis [23].

2.1.1 Dinâmica Simbólica

Dado um sistema dinâmico possivelmente caótico, precisamos inicialmente de um mecanismo para identificar as trajetórias, sejam elas órbitas periódicas, que se repetirão indefinidamente, ou parte de um itinerário de espalhamento, ou seja, um caminho vindo do infinito e a ele escapando após uma seqüência finita de iterações.

No nosso bilhar, podemos nomear cada um dos três discos com as letras A, B e C, e identificar com uma seqüência a ordem com a qual a partícula colide nestes discos. Por exemplo, $BCAC$ ou $BCACBCBA$. Tal identificação é a forma mais simples de uma *dinâmica simbólica*. Podemos observar algumas regras através desta formulação. No caso deste bilhar, livre de quaisquer forças externas, a (única) regra de enumeração é bastante simples: a partícula não pode colidir duas vezes seguidas no mesmo disco. Portanto, uma seqüência que contenha duas letras iguais repetidas é automaticamente eliminada. Outras identificações também são possíveis. Explorando a simetria do sistema e a regra de enumeração, é possível reduzirmos o alfabeto utilizando um conjunto binário, 0 e 1: utilizamos 0 se a partícula retorna ao disco anterior, e 1 caso a partícula desloque-se ao terceiro disco.

2.1.2 Partição com órbitas periódicas

Utilizaremos uma noção semelhante de alfabeto para construir órbitas periódicas em grafos mais tarde. No presente momento, construiremos um esquema rudimentar que será utilizado para particionar o espaço de fase em questão. Entre duas colisões com os discos, a partícula move-se com velocidade constante, o que possibilita uma redução da dimensionalidade na representação do problema. Seja q_i a posição, ao longo da circunferência do disco, da qual a partícula ricocheteou, e $p_i = \sin\theta_i$ a componente de momentum, onde θ corresponde ao ângulo de incidência da partícula em relação à normal do disco. Construimos a secção de Poincaré através do mapa de retorno $f : (p_i, q_i) \mapsto (p_{i+1}, q_{i+1})$, que relaciona o ponto de partida no contorno de um disco com o ponto de colisão no contorno do próximo disco.

Nesta seção, podemos identificar duas faixas correspondentes às condições iniciais que so-

brevivem a um encontro (\mathcal{M}_0 , retornando ao disco de origem, e \mathcal{M}_1 , que se alterna para um terceiro disco). Dentro destas, encontram-se duas outras faixas, correspondentes aos sobreviventes de dois encontros (\mathcal{M}_{00} que mantém-se entre dois discos e \mathcal{M}_{01} , que alterna entre o disco inicial e um terceiro disco, além de \mathcal{M}_{10} e \mathcal{M}_{11} , seguindo a mesma nomenclatura). Tal construção segue-se *ad infinitum*, até que, após n colisões, os sobreviventes encontram-se distribuídos em 2^n faixas distintas.

2.1.3 Taxa de Escape

Como exemplo dos métodos apresentados acima, desenvolveremos aqui um exemplo particular ao bilhar de três discos, obtendo a taxa de escape - uma medida de quantas colisões uma partícula de teste sofre, em média, antes de escapar da região interior aos discos. Tal medida é intrinsicamente uma propriedade de transporte, que iremos comparar, mais tarde, à condutância ou ao *time delay*.

Podemos obter o número médio de colisões através de um procedimento numérico, lançando partículas em direções aleatórias e contando os encontros antes do escape. De forma analítica, queremos estimar o limite assintótico desta medida do bilhar, relacionando-a com a teoria de órbitas periódicas que desenvolveremos.

Em primeiro lugar, definimos a fração de partículas sobreviventes (i.e., que ainda permanecem na região interior aos discos) após n ricocheteadas no bilhar como:

$$\hat{\Gamma}_n = \sum_i^{(n)} |\mathcal{M}_i|, \quad (2.4)$$

onde i é a “etiqueta” definida pela dinâmica simbólica (de comprimento (n) , ou seja, correspondente a n choques) e $|\mathcal{M}_i|$ é a área da i -ésima faixa. É razoável supor que, após um número grande de colisões, uma fração semelhante das trajetórias seja perdida a cada nova colisão. Em outras palavras,

$$\frac{\hat{\Gamma}_{n+1}}{\hat{\Gamma}_n} = e^{-\gamma_n}. \quad (2.5)$$

No limite de n grande, γ_n tende a γ , a taxa de escape assintótica do sistema.

2.1.4 Teoria de órbitas periódicas

Naturalmente, (2.5) é uma definição pouco operacional. Muito mais interessante é a obtenção desta grandeza através de uma expansão exata de termos diretamente conectados às propriedades do sistema que sejam independentes de coordenadas, ou seja, propriedades gerais do fluxo. Primeiro, dizemos que as áreas $|\mathcal{M}_i|$ são aproximadamente iguais ao produto de uma altura fixa $\approx L$ vezes uma largura l_i .

As larguras l_i podem, por sua vez, ser expressas como um quociente de um pré-fator ($\approx O(1)$) pelo valor absoluto do autovalor instável do ponto periódico da i -ésima órbita. Com isso, a soma (2.4) é reescrita como

$$\Gamma_n = \sum_i^{(n)} 1/|\Lambda_i|. \quad (2.6)$$

A soma percorre todos os pontos periódicos de período n . Define-se então uma função geradora para somas de todos os pontos periódicos, de todos os comprimentos:

$$\Gamma(z) = \sum_i^{(n)} \Gamma_n z^n \quad (2.7)$$

A taxa de escape γ é determinada pelo menor valor de $z = e^\gamma$ para o qual a soma acima diverge⁴, e

$$\Gamma(z) \approx \sum_{n=1}^{(\infty)} (ze^{-\gamma})^n = \frac{ze^{-\gamma}}{1 - ze^{-\gamma}}. \quad (2.8)$$

Por outro lado, podemos escrever 2.7 de uma forma alternativa, para tornar explícita a conexão entre as órbitas periódicas e a taxa de escape:

$$\begin{aligned} \Gamma(z) &= \sum_{n=1}^{(\infty)} z^n \sum_i^{(n)} |\Lambda_i|^{-1} \\ &= \frac{z}{|\Lambda_0|} + \frac{z}{|\Lambda_1|} + \frac{z^2}{|\Lambda_{00}|} + \frac{z^2}{|\Lambda_{01}|} + \frac{z^2}{|\Lambda_{10}|} + \frac{z^2}{|\Lambda_{11}|} \\ &\quad + \frac{z^3}{|\Lambda_{000}|} + \frac{z^3}{|\Lambda_{001}|} + \frac{z^3}{|\Lambda_{010}|} + \dots \end{aligned} \quad (2.9)$$

A taxa γ é dada pelo primeiro pólo de (2.9), o que é mais viável de ser computado que a

⁴Para n grande, a soma (2.4) tende ao limite $\Gamma_n \rightarrow e^{-n\gamma}$

extrapolação da sequência de γ_n 's definida em (2.5). Convém manipular a expressão para estabelecer uma ligação com o zero de uma função relacionada.

2.1.5 Função Zeta

Se uma trajetória percorre um ciclo primitivo⁵ r vezes, o autovalor na direção expansiva⁶ é Λ_p^r . Para cada classe de permutação cíclica, existe apenas um ciclo primitivo, por exemplo, $p = \overline{0011} = \overline{1001} = \overline{1100} = \overline{0110}$ é um ciclo primo, mas $\overline{0101}$ não o é, pois trata-se de uma repetição de $\overline{01}$. Com isso, (2.9) pode ser reescrita como

$$\Gamma(z) = \sum_p n_p \sum_{r=1}^{\infty} \left(\frac{z^{n_p}}{|\Lambda_p|} \right)^r = \sum_p \frac{n_p t_p}{1 - t_p}, \quad t_p = \frac{z^{n_p}}{|\Lambda_p|}. \quad (2.10)$$

Seguindo um procedimento conhecido da Mecânica Estatística, o termo $n_p z^{n_p}$ sugere que a soma pode ser expressa como uma derivada

$$\Gamma(z) = -z \frac{d}{dz} \sum_p \ln(1 - t_p) \quad (2.11)$$

e, portanto, $\Gamma(z)$ é a derivada logarítmica do produto

$$1/\zeta(z) = \prod_p (1 - t_p). \quad (2.12)$$

Esta função é chamada de “função zeta dinâmica”, devido à sua semelhança com a função zeta de Riemann[24]. A taxa de escape é obtida quando (2.8) diverge, e isto ocorre quando $1/\zeta(z)$ tem um zero. Expandindo (2.12), e agrupando os termos de mesmo comprimento, temos

$$\begin{aligned} 1/\zeta(z) &= (1 - t_0)(1 - t_1)(1 - t_{10})(1 - t_{100}) \dots \\ &= 1 - t_0 - t_1 - [t_{10} - t_1 t_0] = [(t_{100} - t_{10} t_0) + (t_{101} - t_{10} t_1)] \\ &\quad - [(t_{1000} - t_0 t_{100}) + (t_{1110} - t_1 t_{110})] \\ &\quad + (t_{1001} - t_1 t_{001} - t_{101} t_0 + t_{10} t_0 t_1) - \dots, \end{aligned} \quad (2.13)$$

⁵Um ciclo primitivo p , também chamado de primo, é uma passagem que não pode ser decomposta em ciclos menores

⁶Um sistema caótico bidimensional tem um autovalor expansivo e outro contrativo, conforme [22] ou [7].

onde os termos de mesmo comprimento n decrescem exponencialmente; ou seja, com um conjunto finito de autovalores e comprimentos dos primeiros ciclos primitivos, obtemos uma aproximação polinomial para a função zeta, e com isto, para a taxa de escape.

2.2 Caos Quântico

Os conceitos desenvolvidos na seção anterior não são facilmente generalizados para o regime quântico. Há uma distinção inerente entre a evolução regida pelos termos não-lineares do sistema clássico e a evolução linear da equação de Schrödinger. Vimos na seção anterior como o conceito de separabilidade das trajetórias é fundamental para estabelecer que um certo sistema é caótico. Define-se um conceito semelhante no regime quântico. Sejam dois estados $|\Psi_1\rangle$ e $|\Psi_2\rangle$; uma medida da separação destes estados é a sobreposição, dada por $\langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle$. Tomamos então um operador de evolução temporal $U(t, t_0)$, unitário e hermitiano, através do qual evoluímos ambos sistemas de um tempo inicial t_0 até um instante t . Temos então

$$\begin{aligned} \langle \Psi_2(t) | \Psi_1(t) \rangle &= \langle \Psi_2(t_0) | U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) | \Psi_1(t_0) \rangle \\ &= \langle \Psi_2(t_0) | \Psi_1(t_0) \rangle, \end{aligned} \quad (2.14)$$

ou seja, a sobreposição é preservada. Uma análise apressada concluiria, portanto, que não há caos na Mecânica Quântica. Porém, convém notar que um estado não é um perfeito análogo de uma trajetória, e o mesmo deve ser comparado com uma distribuição clássica de trajetórias, caso no qual, seguindo o teorema de Liouville [25], a sobreposição será preservada.

Persiste a pergunta de como conciliar o caos clássico com o Princípio da Correspondência de Bohr [26], que nos diz “A Teoria Quântica deve se aproximar da Clássica assintoticamente no limite dos grandes números quânticos”. Podemos expressar esta afirmativa de forma equivalente substituindo “grandes números quânticos” com o limite $\hbar \rightarrow 0$, o chamado limite semiclássico. Neste ponto, temos descontinuidades devido ao caráter singular da equação de Schrödinger com respeito a \hbar , portanto, a quantização deve proceder com certos cuidados. Igualmente, devemos tomar $t \rightarrow \infty$, permitindo que o sistema tenha atravessado configurações transientes e

se estabelecido num regime estacionário [27].

2.2.1 Distribuição dos níveis de energia

Parece evidente que não há manifestação da dinâmica caótica em um nível de energia específico. Porém, podemos buscar na escala quântica evidências de um análogo clássico caótico, observando, por exemplo, a distribuição discreta dos níveis de energia.

Wigner [28] forneceu uma peça importante do quebra-cabeça, ao estudar a forma do espectro nuclear. A distribuição dos níveis e as secções de choque observados mostram que a dinâmica do núcleo é extremamente complexa. Assumindo que os diversos parâmetros do problema possuem valores definidos, mas desconhecidos, Wigner iniciou o estudo da chamada Teoria de Matrizes Aleatórias⁷, que recebeu também importantes contribuições de Dyson e Mehta [29] [30], e mostrou ser capaz de modelar com sucesso as propriedades do espectro nuclear através de ensembles de matrizes com elementos aleatórios. Esta teoria permite prever, por exemplo, as larguras das linhas espectrais e a distribuição das ressonâncias.

Dentre as possíveis coleções de matrizes da RMT, destaca-se o chamado Ensemble Gaussiano Ortogonal (GOE⁸), obtido através da coleção de matrizes que resultam da diagonalização de hamiltonianos da forma $H = \frac{p^2}{2m} + V(q)$. Distingue-se também o Ensemble Gaussiano Unitário (GUE⁹), construído de forma semelhante para hamiltonianos que tenham a simetria de reversão temporal quebrada pela presença de um potencial magnético, ou seja, $H = (\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c})^2 + V(q)$.

Coube ao trabalho pioneiro de Bohigas, Giannoni e Schmit [13][14] estabelecer a conexão entre o espectro de um sistema quântico com dinâmica clássica caótica e os resultados preditos pela RMT. Eles investigaram a distribuição de primeiros vizinhos (NND¹⁰), $P(X)$, onde X é a distância entre níveis de energia sucessivos $E_n - E_{n+1}$. Um sistema integrável de dois graus de liberdade apresenta níveis energéticos distribuídos ao acaso e sem qualquer correlação aparente, uma vez que este sistema pode, em geral, ser decomposto em subsistemas menores que são

⁷do inglês *Random Matrix Theory*, ou RMT

⁸do inglês *Gaussian Orthogonal Ensemble*

⁹*Gaussian Unitary Ensemble*

¹⁰*Nearest Neighbor Distribution*

desacoplados entre si. A probabilidade de ocorrência de níveis de energia muito próximos, ou mesmo degenerados, é relativamente alta; desta forma suas estatísticas espectrais podem ser descritas por uma distribuição de Poisson,

$$P(X) = e^{-X}. \quad (2.15)$$

Já um sistema caótico apresenta um padrão típico na distribuição dos níveis, pois não é possível decompor o sistema em partes isoladas, e a dinâmica ao longo de um eixo invariavelmente afeta componentes em outras direções [31]. Observam-se repulsões entre os níveis de energia, os chamados *avoided crossings*. As distribuições obtidas foram modeladas com sucesso através dos ensembles GOE e GUE da teoria RMT, que possuem NNDs dadas por

$$P(X) = \frac{\pi}{2} X e^{-\frac{\pi}{4} X^2}, \quad (2.16)$$

no caso ortogonal, e

$$P(X) = \frac{32}{\pi^2} X^2 e^{-\frac{\pi}{4} X^2} \quad (2.17)$$

no caso unitário. Hoje, este resultado é conhecido como a *Conjectura de Bohigas-Giannoni-Schmit*, utilizada como critério para estabelecer a caoticidade de um sistema físico com dois graus de liberdade. Desde então, vários trabalhos [32] [33] foram realizados, para diversas classes de sistemas hiperbólicos, com excelente correspondência entre as previsões analíticas e os dados numéricos. Encontrou-se um bom acordo quando esta conjectura foi comparada com resultados de grafos quânticos (definidos na seção 3.1) sob certas condições [34], evidenciando que também estes sistemas apresentam uma assinatura correspondente aos sistemas caóticos. Convém notar que, em bases matemáticas formais, tal conjectura é somente uma hipótese que ainda não foi demonstrada com o rigor necessário para ser tomada como prova. Todavia, as evidências físicas são suficientes para que ela seja adotada em nosso trabalho.

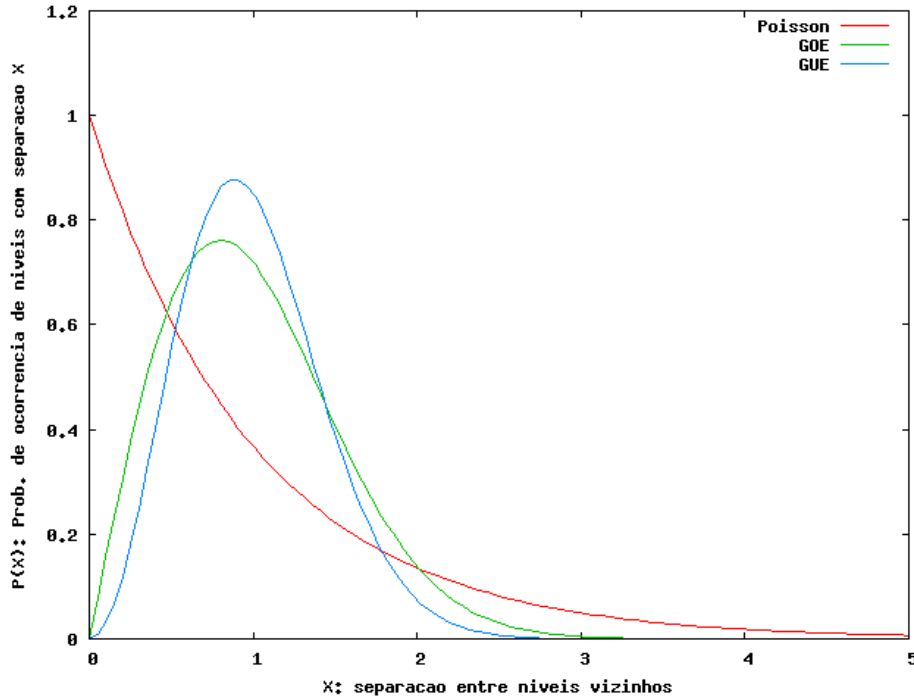


Figura 2.2: As distribuições de Poisson, GOE e GUE

2.2.2 A Fórmula do traço

A conexão entre a densidade dos níveis de energia e as órbitas periódicas de um sistema dinâmico ergódico e hiperbólico, no regime semiclássico em que¹¹ $\hbar \rightarrow 0$, pode ser expressa com a *Fórmula do traço de Gutzwiller*. A demonstração completa desta, incluindo uma abrangente discussão sobre as ferramentas e metodologias necessárias para se fazer a transição da dinâmica clássica ao regime quântico, pode ser encontrada na obra-referência de Gutzwiller [36]. Um roteiro mais compacto contendo todos os passos principais para a obtenção da expressão é apresentado também por Haake [37] ou Ott [22].

Para sistemas descritos por um Hamiltoniano da forma

$$H(\vec{p}, \vec{q}) = \frac{1}{2m} p^2 + V(\vec{q}), \quad (2.18)$$

com sua equação de Schrödinger correspondente:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(\vec{q}) \Psi, \quad (2.19)$$

¹¹Convém destacar que a notação $\hbar \rightarrow 0$ representa, na verdade, o limite no qual as quantidades típicas de energia e ação são várias ordens de grandeza superiores a \hbar , $\hbar = 6.62606896(33) \times 10^{-34} \text{J.s}$ [35].

a densidade de estados $d(E)$ é definida tal que

$$\int_{E_a}^{E_b} d(E)dE \quad (2.20)$$

é o número de níveis de energia entre E_a e E_b . Assim,

$$d(E) = \sum_i \delta(E - E_i), \quad (2.21)$$

assumindo que os níveis estão ordenados de tal forma que $E_i < E_{i+1}$.

Aplicamos o método da função de Green para a equação da onda quântica correspondente ao Hamiltoniano clássico $H(\vec{p}, \vec{q})$, obtendo

$$H(-i\hbar\nabla, \vec{q})G(\vec{q}, \vec{q}'; E) - EG(\vec{q}, \vec{q}'; E) = -\delta(\vec{q} - \vec{q}'). \quad (2.22)$$

Expressamos então G em termos de uma base ortonormal e completa Ψ_j ,

$$G(\vec{q}, \vec{q}'; E) = \sum_j c_j(\vec{q}', E)\Psi_j(\vec{q}), \quad (2.23)$$

e usando a relação de ortonormalidade das autofunções, podemos reescrever (2.22) como

$$G(\vec{q}, \vec{q}'; E) = \sum_j \frac{\Psi_j^*(\vec{q}')\Psi_j(\vec{q})}{E - E_j}. \quad (2.24)$$

Eliminamos a singularidade que ocorre quando E passa por E_j para cada j , substituindo E por $E + i\varepsilon$ (com $\varepsilon \rightarrow 0^+$)¹². Tomamos então a parte imaginária de (2.24), e temos que

$$\text{Im}G(\vec{q}, \vec{q}'; E) = -\pi \sum_j \Psi_j^*(\vec{q}')\Psi_j(\vec{q})\delta(E - E_j), \quad (2.25)$$

a qual, após integrar (no limite $\vec{q}' \rightarrow \vec{q}$), resulta em

$$\text{Im} \int G(\vec{q}, \vec{q}'; E)d^N\vec{q} = -\pi \sum_j \delta(E - E_j). \quad (2.26)$$

12

Utilizando $\frac{1}{x-x'\pm i\varepsilon} = \mp i\pi\delta(x-x') + P\frac{1}{x-x'}$ [9]

Com isto, e usando que (2.21), vem que

$$\begin{aligned} d(E) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int G(\vec{q}, \vec{q}'; E) d^N \vec{q} \\ &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} [\text{Tr}(G)], \end{aligned} \quad (2.27)$$

ou seja, uma expressão exata em termos do traço de G .

Por outro lado, consideremos o propagador $K(\vec{q}, t; \vec{q}', t')$, oriundo da integrais de caminho de Feynmann, correspondente à amplitude de probabilidade para levar uma partícula de \vec{q}' no instante inicial t' até \vec{q} no instante final t . Tal propagador é dado por uma integral sobre todos os possíveis caminhos que levam de \vec{q}' até \vec{q} através de n passos,

$$K(\vec{q}, t; \vec{q}', t') = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2\pi i \hbar} \right)^n \int d\vec{q}_1 \dots \int d\vec{q}_{n-1} e^{\int L(\vec{q}, \dot{\vec{q}})}. \quad (2.28)$$

Se a integral da função Lagrangiana no expoente do lado direito de (2.28) é grande se comparada com a constante de Planck, então somente os caminhos na vizinhança (da trajetória clássica) irão contribuir na integral; os demais cancelam-se devido à interferência destrutiva.

Através de métodos variacionais, obtém-se a fórmula de Van Vleck, que fornece uma expressão “quasi”-clássica para este propagador,

$$K_c(\vec{q}, \vec{q}', t) = \left(\frac{1}{2\pi i \hbar} \right)^{n/2} \sum_p \sqrt{C_p(\vec{q}, \vec{q}', t)} e^{[iR(\vec{q}, \vec{q}', t) - i\mu_p]}, \quad (2.29)$$

onde R_p é a integral da Lagrangiana sobre uma trajetória p , C_p é o inverso do determinante da matriz monodromia M_p , que equaciona a segunda variação desta trajetória, conforme

$$C_p(\vec{q}, \vec{q}', t) = \frac{1}{|\det(M_p - 1)|} = \left| -\frac{\partial^2 R}{\partial \vec{q}_i \partial \vec{q}'_j} \right|, \quad (2.30)$$

e μ_p é a fase de Maslov, calculada a partir do número de pontos conjugados da trajetória, ou seja, quantas vezes as trajetórias que começam no mesmo lugar, mas em direções um pouco diferentes, cortam a trajetória original [38].

Realizando uma transformada de Fourier sobre K_c , obtém-se a função de Green correspon-

dente,

$$G_c(\vec{q}, \vec{q}', E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{+\infty} dt K_c(\vec{q}, t; \vec{q}', t') e^{\frac{iEt}{\hbar}}, \quad (2.31)$$

onde, neste caso, podemos substituir (2.29) e aplicar o método de fases estacionárias ao integrar, obtendo assim

$$G_c(\vec{q}, \vec{q}', E) = \frac{2\pi}{(2\pi i\hbar)^{n/2}} \sum_p \sqrt{(-1)^{n+1} C} e^{iS(\vec{q}, \vec{q}', E)/\hbar - i\mu_p} \quad (2.32)$$

Note-se que a integração efetuada para levar (2.25) a (2.26) requer que o ponto de início/término \vec{q} seja variado continuamente por todo o espaço de posição acessível à energia E ; porém, \vec{p} pode diferir entre o valor inicial e final. Conforme o método das fases estacionárias utilizado para chegar a (2.32), a variação da ação, $S(\vec{q}, \vec{q}', E)$, com a variação de $\vec{q} = \vec{q}'$, é de grande importância; temos que:

$$\frac{\partial S(\vec{q}, \vec{q}', E)}{\partial \vec{q}} = \left(\frac{\partial S(\vec{q}'', \vec{q}', E)}{\partial \vec{q}''} + \frac{\partial S(\vec{q}'', \vec{q}', E)}{\partial \vec{q}'} \right)_{\vec{q}'' = \vec{q}' = \vec{q}} = \vec{p}'' - \vec{p}'. \quad (2.33)$$

Caso a trajetória não se feche de maneira suave, ou seja, $\vec{p}'' \neq \vec{p}'$, a integração sobre q tenderá a se anular devido à interferência destrutiva entre trajetórias que distam até $2\pi\hbar$. Por outro lado, se $\vec{p}'' = \vec{p}'$, as contribuições de diferentes pontos iniciais q serão somadas; assim, o cálculo do traço de $d(E)$ é reduzido a uma soma sobre todas as órbitas periódicas.

Com algumas considerações sobre o sistema de coordenadas, e utilizando-se de fases estacionárias e da aproximação do ponto de sela¹³, Gutzwiller obtém então:

$$d_c(E) = \tilde{d}(E) + \frac{1}{i\hbar} \text{Re} \sum_p \sum_n T_p(E) A_p^n(E) \exp \left[n \left(\frac{iS_p^n(E)}{\hbar} - \frac{\nu_p \pi}{2} \right) \right]. \quad (2.34)$$

Para \vec{q}' bastante próximo de \vec{q} , existe um caminho direto de \vec{q}' até \vec{q} , mais uma série de caminhos indiretos. O primeiro caminho corresponde às órbitas de comprimento zero, e é responsável pelo termo $\tilde{d}(E)$, que cresce suavemente com a energia, de acordo com a lei de Weyl, do qual recebe seu nome. Os demais caminhos contribuem à parte oscilante, muitas vezes representada como $d_{osc}(E)$, e contém a contribuição das órbitas periódicas. Nela, temos que:

$$T_p(E) = \frac{\partial S_p(E)}{\partial E} \text{ é o período da órbita primitiva } p;$$

¹³saddle point approximation

$S_p^n = \oint \vec{p} \cdot d\vec{q}$ é a ação da órbita p e suas repetições n ; e

$A_p^n = \frac{1}{\pi\hbar\sqrt{|Det(M_p^n - 1)|}}$ é o coeficiente de estabilidade, relacionado com o determinante da matriz monodromia (2.30) e seus autovalores v_n e u_n , conforme

$$\sqrt{|Det(M_p^n - 1)|} = \begin{cases} 2sinh(v_n) & \text{para órbitas hiperbólicas estáveis,} \\ 2cosh(v_n) & \text{para órbitas hiperbólicas instáveis, e} \\ 2sin(u_n) & \text{para órbitas elípticas.} \end{cases} \quad (2.35)$$

Com isto, obtém-se uma expressão relacionando as propriedades do sistema quântico - a densidade de estados - com elementos do regime clássico - as trajetórias ou órbitas periódicas no interior do sistema.

Fórmulas do traço são de grande valor por estabelecerem uma ligação entre dois regimes aparentemente distintos. Porém, convém notar que, exceto para sistemas bastante simples, expressões como (2.34) são de difícil implementação prática, devido à dificuldade de calcular os prefatores A_p e encontrar formas efetivas de percorrer todas as possíveis trajetórias.

3 *Grafos Quânticos*

O conceito matemático de um grafo (rede), no sentido mais geral de um conjunto de elementos conectados por alguma relação, encontra aplicações em diversos ramos da Física, Química, Engenharia, e até mesmo Ciências Biomédicas. Uma rede de ruas, estudada por um engenheiro de tráfego, redes de neurônios investigadas por um médico neurologista, ou a estrutura de um banco de dados na ciência da computação são exemplos de sistemas que podem ser descritos por grafos.

Recentemente, empregou-se a denominação de *grafos quânticos* aos grafos métricos nos quais um Laplaciano é aplicado, em termos da equação de difusão ou, mais especificamente, da equação de Schrödinger. Em certos casos, alguns aspectos específicos são estudados utilizando termos como “redes quânticas” ou “fios quânticos”. A história do emprego dos grafos na Física e na Matemática, apesar de recente, já é bastante extensa.

Provavelmente a primeira utilização do conceito de grafo na Física deu-se no contexto do modelo de elétrons livres para moléculas orgânicas, no estudo de Pauling [39], com desenvolvimentos subsequentes [40] [41]. Grafos quânticos foram também aplicados à supercondutividade [42] e a guias de ondas eletromagnéticas [43] [44], para citar somente alguns exemplos. Grafos quânticos foram recentemente simulados experimentalmente pelo grupo de Oleh Hul, utilizando um aparelho de microondas [45].

Ruedenberg e Scherr [46] foram os primeiros a abordar a construção de operadores auto-adjuntos - equações de onda com condições de contorno apropriadamente definidas - em grafos. Seu trabalho consistiu em considerar grafos como idealizações de redes de fios, ou guias de onda, de seção transversal finita, e tomar o limite no qual o diâmetro do fio é muito menor que

qualquer outra escala de comprimento.

Neste capítulo as definições topológicas são enunciadas seguindo a notação estabelecida por Gnutzmann e Smilansky [17] e Kottos e Smilansky [16], com pequenas adaptações para melhor adequar-se aos sistemas discutidos no capítulo 4.

3.1 Definições Topológicas

Um grafo $\mathcal{G}(V, B)$ consiste de V vértices conectados por B elos. Como exemplo, o grafo da figura 3.1 possui 4 vértices e 5 elos, sendo um deles um laço ($V = 4, B = 5$).

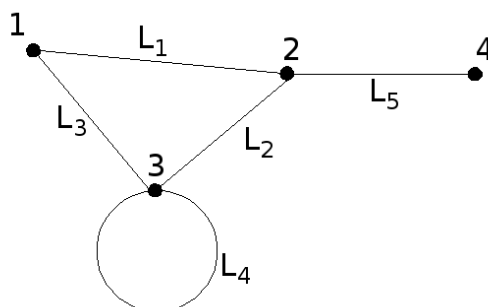


Figura 3.1: Grafo com 4 vértices e 5 elos (1 laço)

A estrutura de um grafo não precisa limitar-se ao plano, no entanto, os elos são necessariamente unidimensionais¹. A topologia de um grafo é dada pela sua matriz de conectividade (ou adjacência) $C_{i,j}$, de dimensão $V \times V$, definida como

$$C_{i,j} = C_{j,i} = \begin{cases} m & \text{se } i \neq j, \text{ onde } i \text{ e } j \text{ são vértices conectados por } m \text{ elos,} \\ 2m & \text{se } i = j \text{ e existem } m \text{ laços no vértice } i, \text{ ou} \\ 0 & \text{se não há conexão entre } i \text{ e } j. \end{cases} \quad (3.1)$$

¹Os elos são objetos abstratos, em princípio sem dimensão. No caso de um grafo métrico, cada elo está associado a um intervalo de \mathbb{R} , e assim pode ser visto como um objeto unidimensional.

Como exemplo, o grafo da figura 3.1 é descrito pela matriz abaixo:

$$C_{i,j} = \begin{cases} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{cases}$$

A valência (ou grau) v_i de um vértice i corresponde ao número de conexões a vértices j ligados a i , levando em conta possíveis elos paralelos ou laços, ou seja:

$$v_i = \sum_{j=1}^V C_{i,j}. \quad (3.2)$$

Ainda utilizando da matriz de adjacência, o número de elos pode ser expresso como

$$B = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^V \sum_{j=1}^V C_{i,j} \quad (3.3)$$

Definimos ainda a vizinhança Γ_i do vértice i , que consiste dos vértices j conectados a i .

Tal como Gnutzmann e Smilansky [17], consideraremos apenas grafos conexos, nos quais os vértices não podem ser divididos em dois subconjuntos não-vazios, tais que não haja um elo conectando os dois subconjuntos.

A literatura distingue diversas classes de grafos, com base em propriedades da conectividade:

- Grafos simples são aqueles que não possuem laços ou elos paralelos ligando dois vértices; para quaisquer i e j , $C_{i,j} \in \{0, 1\}$, e não havendo laços, os elementos da diagonal são nulos, $C_{i,i} = 0$.
- Grafos v -regulares são grafos simples cujos vértices possuem a mesma valência v . Um exemplo é um anel onde $v = 2$ e $V = B$; um anel é dito não-trivial se possuir pelo menos dois vértices. Um grafo v -regular é dito completo se $v = V - 1$
- Grafos de conectividade simples são aqueles que não possuem nenhum anel não-trivial como subgrafo

- Grafos-estrelas consistem de um elo central de valência ν , conectados a ν vértices periféricos de valência 1.

Os elos que emanam do vértice i formam a estrela

$$S^{(i)} = \bigcup_{j \in \Gamma_i} (i, j) \quad (3.4)$$

Em geral, denotamos um elo pelos vértices aos quais este se conecta, i.e., $b = (i, j) = (j, i)$, mas pode-se fazer referência diretamente aos elos, identificando-os por letras (a, b, c, d, \dots). Em certas situações definem-se elos direcionados, ou arcos, como elos nos quais uma direção é especificada: $b = [i, j]$ e $\hat{b} = [j, i]$. Uma notação alternativa é $\alpha = (b, w)$ onde $b \in (i, j)$ e $w = \pm 1, +1$ se $j > i$ e -1 se $i > j$. Os arcos que partem de i formam a estrela de saída

$$S_+^{(i)} = \bigcup_{j \in \Gamma_i} (i, j)[i, j], \quad (3.5)$$

igualmente define-se a estrela de entradas $S_-^{(i)}$ como o conjunto de elos direcionados que terminam em i .

Associamos uma métrica natural aos elos, tal que $x_b = x_{i,j}$ ($x_{j,i}$) denota a distância x do vértice i (j) ao longo do elo b . O comprimento do elo é denotado por L_b . Para um elo $b = (i, j)$ usamos também a notação x_b^i e x_b^j para os valores de x_b nos vértices: se $i < j$, $x_b^i = 0$ e $x_b^j = L_b$.

Fazemos aqui uma importante consideração sobre os comprimentos, assumindo que estes são incomensuráveis ou racionalmente independentes. Em outras palavras, para $m_b \in \mathbb{Q}$,

$$\sum_b m_b L_b = 0 \quad (3.6)$$

possui somente a solução trivial.

O arco $\alpha = [r, s]$ segue o arco $\beta = [k, l]$ se $r = l$. Neste caso, diz-se que $\alpha \in \mathcal{F}_r(\beta)$, ou seja, α pertence ao conjunto de elos que seguem β no vértice r . Uma trajetória de i até j , expressa por $t = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$, é uma sequência de arcos $\alpha_l = (b_l, w_l)$ tal que α_{l+1} segue α_l , e α_1 tem i como seu vértice inicial, e α_n tem j como vértice final. O comprimento topológico da trajetória

é o número $n \in \mathbb{N}$ de elos direcionados percorridos. Uma trajetória fechada tem $i = j$, e uma órbita periódica $p \equiv \overline{\alpha_1, \dots, \alpha_n}$, de período n , é composta pelas trajetórias fechadas que são iguais a menos de permutações cíclicas dos arcos que as compõem. Nesta terminologia, uma órbita periódica primitiva é aquela que possui um “código” que não possa ser expresso como repetição de nenhum código de comprimento menor.

Cada trajetória t define um subgrafo \mathcal{G}_t que consiste dos elos e vértices visitados pela trajetória. O número de pontos distintos em órbitas periódicas de período n é igual a $\text{tr}C^n$, e para n primo vale que:

$$\#(n) = \frac{1}{n} \text{tr}C^n = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^V \gamma_j^n \quad (3.7)$$

é o número de órbitas periódicas de período n ; γ_j correspondem aos autovalores da matriz $C_{i,j}$. Para o caso “típico” onde n não é primo, (3.7) serve como aproximação. Na expressão acima, o crescimento de $\#(n)$ é regido pelo maior autovalor e a contagem cresce exponencialmente, portanto há uma proliferação exponencial de órbitas com o comprimento n .

3.2 Operador de Schrödinger

Para um grafo fechado em que todos os elos possuem comprimentos finitos, define-se o operador de Schrödinger em um elo b como:

$$H_b = \left[\left(-i \frac{d}{dx_b} + A_b \right)^2 + V_b(x_b) \right], \quad (3.8)$$

onde a escolha de unidades é feita apropriadamente tal que $\hbar = 2m = 1$. A_b representa um potencial-vetor magnético e é responsável pela quebra de simetria temporal; V_b é uma função potencial, que tomamos como não-negativa e suave no intervalo $[0, L_b]$.

Os exemplos que serão estudados neste trabalho não incluem potenciais magnéticos, logo, os termos A_b são eliminados da discussão a seguir. Serão utilizados potenciais constantes não-nulos nos elos, apesar desse caso particular não ser o mais usual na literatura de grafos quânticos [17] [47].

Assim, nos elos, os componentes ψ_b da função de onda Ψ são soluções da equação de

Schrödinger unidimensional

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_b(x) = -k_b^2 \psi_b(x), \quad k_b = \sqrt{k^2 - V_b}, \quad (3.9)$$

onde k é o vetor de propagação livre, por exemplo, em um elo onde $V_b = 0$. As soluções são

$$\psi_b(x) = a_b e^{ik_b x} + c_b e^{-ik_b x}, \quad (3.10)$$

onde a_b e c_b são constantes arbitrárias.

Estabelecemos condições de contorno tais que a evolução induzida pelo operador seja consistente com funções de onda contínuas na junção de elos, bem como de forma a conservar a probabilidade, não existindo fontes ou sumidouros nos vértices. Desta forma, em cada vértice i vale que

$$\lim_{x_b \rightarrow x_b^i} \psi_b(x_b) = \phi_i, \quad \forall b \in \mathcal{S}^{(i)} \quad (3.11)$$

e

$$\sum_{(b,w) \in \mathcal{S}_+^{(i)}} w \frac{d}{dx_b} \psi_b \Big|_i = \lambda_i \phi_i, \quad \forall 1 \leq i \leq V \quad (3.12)$$

onde ϕ é uma constante e λ_i é um parâmetro que pode assumir valores arbitrários; casos-limite de especial interesse são $\lambda_i = 0$, que corresponde a condições de contorno de Neumann (também conhecidas como condições de Kirchhoff), e $1/\lambda_i = 0$, equivalente a condições de contorno de Dirichlet. Neste trabalho, utilizaremos o primeiro caso, pois fornecem um caso mais próximo daquele encontrado pelos físicos em modelos reais.

O espectro das autofunções (3.10) que satisfazem (3.9) é dado por $\{k_n^2\}_{n=1}^{\infty}$; tal espectro é discreto, não-negativo e ilimitado, e consiste dos valores k^2 para os quais existe uma solução não-trivial para o conjunto de $2V$ equações decorrentes das condições (3.11) e (3.12). A seqüência de autovalores é construída como em (2.21), ou seja, $k_n \leq k_m$ se $n < m$.

3.3 Função secular e o Operador de Evolução

Para facilitar a construção do espectro, define-se a chamada função secular ζ , cujos zeros correspondem de forma bijetiva ao espectro do grafo. Tal função é expressa em termos do operador evolução do grafo, $\mathcal{U}_B(k)$, definido como

$$\mathcal{U}_B(k) = T(k)S(k) \quad (3.13)$$

onde $T(k)$ é a matriz $2B \times 2B$ de propagação nos elos

$$T(k)_{(b,w),(b',w')} = \delta_{bb'} \delta_{ww'} e^{ik_b L_b} \quad (3.14)$$

responsável pela mudança de fase que ocorre na onda ao longo de sua propagação pelo elo. $S(k)$, igualmente de dimensão $2B \times 2B$, é a matriz de espalhamento no grafo:

$$S_{\alpha',\alpha} = \begin{cases} \sigma_{\alpha',\alpha}^{(i)} & , \text{ se } \alpha' \text{ segue } \alpha \text{ no vértice } i \\ 0 & , \text{ nos demais casos} \end{cases} \quad (3.15)$$

onde $\sigma_{\alpha',\alpha}^{(i)}$ é o coeficiente de espalhamento do arco α' para α no vértice i .

Com este operador, define-se a função secular

$$\zeta_B(k) \equiv \det(\mathbb{I} - \mathcal{U}_B(k)) = 0 \quad (3.16)$$

cujos zeros ocorrem nos valores de k que compõem o espectro do grafo \mathcal{G} .

3.4 Dinâmica Clássica para Grafos

Ao contrário da apresentação do capítulo 2, onde expomos a teoria do caos clássico (seção 2.1) e então procuramos uma conexão com o regime quântico (seção 2.2), a abordagem clássica para grafos toma o modelo quântico como ponto de partida.

Consideramos uma partícula clássica livre para se mover ao longo de um elo. Os vértices do grafo são pontos singulares, nos quais não é possível definir uma equação tradicional. A

alternativa é a utilização de uma construção probabilística entre diferentes pontos do “espaço de fases” correspondente, espaço este que é definido conforme

$$\begin{pmatrix} \text{posição} \\ \text{momentum} \end{pmatrix} \iff \begin{pmatrix} \text{índice do vértice} \\ \text{próximo vértice} \end{pmatrix} \equiv (b, w) \quad (3.17)$$

A evolução é descrita em intervalos de tempo discretos - o tempo topológico - e fica completamente estabelecida quando definirmos as probabilidades de transição $P_{\alpha \rightarrow \alpha'}^{(i)}$ entre os elos α e α' (no vértice i). É necessário que:

$$\sum_{\alpha' \in \mathcal{F}_i(\alpha)} P_{\alpha \rightarrow \alpha'}^{(i)} = 1, \quad \forall \alpha, \quad (3.18)$$

ou seja, deve haver conservação de probabilidade na passagem dos vértices.

Podemos definir um processo markoviano clássico com qualquer conjunto de probabilidades de transição que satisfaça (3.18); em particular, escolhemos os quadrados dos elementos da matriz do operador evolução, \mathcal{U}_b :

$$P_{\alpha \rightarrow \alpha'}^{(i)} = \left| \sigma_{\alpha, \alpha'}^{(i)} \right|^2. \quad (3.19)$$

Para condições de contorno de Neumann, no caso particular onde não temos um potencial nos elos, ou seja, os coeficientes não dependem de k , obtemos que:

$$P_{\alpha \rightarrow \alpha'}^{(i)} = \left(1 - \frac{4}{v_i} \right) \delta_{\alpha, \alpha'} + \frac{4}{v_i^2}. \quad (3.20)$$

Definimos o operador de evolução clássico de forma semelhante ao seu análogo quântico, porém, o módulo quadrado necessário para tornar o operador real elimina as fases da matriz de propagação, resultando em:

$$\mathcal{M}_{\alpha, \alpha'} = \left| \mathcal{U}_{B\alpha, \alpha'}(k) \right|^2. \quad (3.21)$$

Como o operador \mathcal{U}_B é unitário, \mathcal{M} é uma matriz biestocástica, satisfazendo

$$\sum_{\alpha} \mathcal{M}_{\alpha, \alpha'} = \sum_{\alpha'} \mathcal{M}_{\alpha, \alpha'} = 1, \quad \text{e} \quad 0 \leq \mathcal{M}_{\alpha, \alpha'} \leq 1. \quad (3.22)$$

Se $\rho_{\alpha}(n) > 0$ é a probabilidade de ocupação do arco α no tempo n , definimos o vetor $\vec{\rho} =$

$(\rho_1, \dots, \rho_{2B})$, e então:

$$\vec{\rho}(n+1) = \mathcal{M}\vec{\rho}(n) \quad (3.23)$$

é a equação-mestra de Markov². Temos também que a probabilidade de estar em qualquer lugar do grafo é unitária, ou

$$\|\vec{\rho}\| = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} = 1. \quad (3.24)$$

A probabilidade eqüidistribuída nos elos é definida como:

$$\rho_{\alpha}^{inv} = \frac{1}{2B}. \quad (3.25)$$

Tal probabilidade é invariante sob a evolução, ou seja, $\vec{\rho}^{inv} = \mathcal{M}\vec{\rho}^{inv}$.

Barra e Gaspard [48] afirmam que todo grafo dinamicamente conectado possui dinâmica clássica ergódica (em contrapartida a grafos quânticos, por exemplo, [49]). Se vale que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{M}^n \vec{\rho}(0) = \vec{\rho}^{inv}, \quad (3.26)$$

para qualquer $\vec{\rho}(0)$, então uma propriedade mais forte se aplica: diz-se que o grafo é misturante, conforme a definição da seção 2.1.

3.5 Teoria espectral

Desejamos agora conectar a densidade de estados, obtida através de (3.16), com trajetórias no interior do grafo, a exemplo do realizado na seção 2.2.2, onde construímos a fórmula do traço para um sistema hamiltoniano.

Da mesma forma como no capítulo anterior, definimos a densidade de estados como

$$d(k) = \sum_{n=1}^{\infty} \delta(k - k_n) \quad (3.27)$$

onde k toma a vez de E em (2.21). Definimos também a função de contagem, que informa o

²Markov Master equation

número de autovalores k_n menores que k , dada pela integral

$$N(k) = N_0 + \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \int_{\delta}^k dk' d(k') = \sum_{n=1}^{\infty} \theta(k - k_n) \quad (3.28)$$

onde N_0 é o número de estados com $k = 0$ e $\theta(k)$ é a função degrau de Heaviside³.

Trabalhando com o conjunto de autovalores $\{e^{i\phi_l(k)}\}$ do operador \mathcal{U}_b , Gnutzmann e Smilansky obtém

$$N(k) = N_0 + \frac{1}{2\pi} \text{Im} \ln \det \frac{\mathcal{U}_B(k + i\varepsilon)}{\mathcal{U}_B(\delta)} - \frac{1}{\pi} \text{Im} \ln \frac{\mathcal{U}_B(k + i\varepsilon)}{\mathcal{U}_B(\delta)} \quad (3.29)$$

(onde estão subentendidos os limites $\delta \rightarrow 0^+$ e $\varepsilon \rightarrow 0$). Como na seção 2.2.2, esta função pode ser decomposta em um termo suave e outro oscilatório;

$$N(k) = N^{\text{Weyl}}(k) + N^{\text{osc}}(k) \quad (3.30)$$

A parte suave, novamente identificada como termo de Weyl, é expressa por

$$N^{\text{Weyl}}(k) = \frac{B\bar{L}}{\pi} k + N(0) \quad (3.31)$$

enquanto a parte oscilatória é dada por

$$N^{\text{osc}} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \ln \zeta_B(k + i\varepsilon). \quad (3.32)$$

A partir da função de contagem, é trivial obter a densidade de estados, diferenciando em relação a k ;

$$d(k) = d^{\text{Weyl}}(k) + d^{\text{osc}}(k) \quad (3.33)$$

onde a parte suave é dada por

$$d^{\text{Weyl}}(k) = \frac{B\bar{L}}{\pi}, \quad (3.34)$$

e a parte oscilatória por

$$d^{\text{osc}} k = -\frac{1}{\pi} \frac{d}{dk} \text{Im} \ln \zeta_B(k + i\varepsilon) \quad (3.35)$$

Considerando as partes oscilatórias de $N(k)$ e $d(k)$, o logaritmo da função secular que apa-

³ $\theta(k) = \begin{cases} 0 & \text{para } k < 0 \\ 1/2 & \text{para } k = 0 \\ 1 & \text{para } k > 0 \end{cases}$, conforme a tabela de Abramowitz [50]

rece em (3.32) pode ser escrito como traços de potências do operador evolução,

$$\ln \det(\mathbb{I} - \mathcal{U}_B(k)) = \text{tr} \ln(\mathbb{I} - \mathcal{U}_B(k)) = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \text{tr} \mathcal{U}_B^n(k). \quad (3.36)$$

Por outro lado, o traço das potências de \mathcal{U}_B corresponde a um produto de coeficientes de espalhamento $\sigma_{\alpha', \alpha}$ da matriz $S(k)$ com fases $e^{ik_b x_b}$ da matriz $T(k)$. Com isso, podemos arranjar os termos de forma que

$$\begin{aligned} N^{osc}(k) &= \frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \text{tr} \mathcal{U}_B^n(k) \\ &= \text{Im} \sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{\pi r} A_p^r e^{ir S_p} \\ &= \sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{\pi r} |A_p|^r \sin r(S_p + \mu_p). \end{aligned} \quad (3.37)$$

Na passagem para a segunda linha, os elementos da soma são reagrupados em termos das órbitas periódicas p e suas repetições r . A ação da órbita p é

$$S_p = \sum_{b \in \mathcal{C}^r_p} L_b k_b, \quad (3.38)$$

onde $b \in \mathcal{C}^r_p$ subentende os elos b percorridos na trajetória p , e o coeficiente

$$A_p = \sigma_{\alpha_1, \alpha_2} \sigma_{\alpha_2, \alpha_3} \cdots \sigma_{\alpha_n, \alpha_1} \quad (3.39)$$

representa a amplitude desta trajetória. Esta expressão não requer nenhuma aproximação envolvendo propriedades geométricas da trajetória, por tratar-se de um objeto unidimensional. É importante ressaltar que a soma pode não ser absolutamente convergente, pois ocorre uma proliferação exponencial do número de trajetórias. Portanto, se não houver um decaimento correspondente de A_p com o tamanho⁴ da órbita, serão necessários infinitos termos para que a soma venha a convergir.

Derivando a expressão (3.37) para obter o termo oscilatório da densidade de estados:

$$d^{osc} = \text{Re} \sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{L_p}{\pi r} A_p^r \exp[ir S_p] \quad (3.40)$$

⁴Por tamanho, entenda-se o período ou comprimento da “palavra” correspondente

e combinando o termo oscilatório (3.40) com a expressão do termo suave d^{Weyl} (3.34), é direta uma analogia com a fórmula do traço de Gutzwiller (2.34) desenvolvida no capítulo anterior.

3.6 Grafos Abertos

Um grafo aberto (também chamado grafo de espalhamento ou *scattering graph*), $\tilde{\mathcal{G}}$, é construído adicionando fios, partindo de M ($\leq V$) vértices, estendendo-se ao infinito. A valência destes vértices é ajustada de acordo, $\tilde{v}_i = v_i + 1$, e os M fios são identificados pelo índice i do vértice no qual estão conectados.

Nos fios o potencial V_b é tomado como nulo, e temos:

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi_i(x) = -k^2 \Psi_b(x). \quad (3.41)$$

Podemos então expressar o conjunto das amplitudes no grafo em termos de ondas planas contra-propagantes, conforme:

$$\begin{aligned} - \text{nos elos (3.10):} \quad \Psi_b &= a_b e^{ik_b x_b} + c_b e^{-ik_b x_b} \\ - \text{nos fios:} \quad \Psi_i &= I_i e^{ik x_i} + O_i e^{-ik x_i} \end{aligned} \quad (3.42)$$

onde I_i e O_i representam, respectivamente, os coeficientes das ondas incidentes e espalhadas (“*Incoming*” e “*Outgoing*”).

Consideramos um vértice i de valência v_i . As amplitudes no fio e nos elos relacionam-se através de

$$\begin{pmatrix} O_i \\ a_{i,j_1} \\ \vdots \\ a_{i,j_{v_i}} \end{pmatrix} = \Sigma^{(i)} \begin{pmatrix} I_i \\ c_{j_1,i} \\ \vdots \\ c_{j_{v_i},i} \end{pmatrix}, \quad \Sigma^{(i)} = \begin{pmatrix} \rho^{(i)} & \tau_{j_1}^{(i)} & \cdots & \tau_{j_{v_i}}^{(i)} \\ \tau_{j_1}^{(i)} & \tilde{\sigma}_{j_1,j_1}^{(i)} & \cdots & \tilde{\sigma}_{j_1,j_{v_i}}^{(i)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \tau_{j_{v_i}}^{(i)} & \tilde{\sigma}_{j_{v_i},j_1}^{(i)} & \cdots & \tilde{\sigma}_{j_{v_i},j_{v_i}}^{(i)} \end{pmatrix}. \quad (3.43)$$

onde $\rho^{(i)}$ é o coeficiente de reflexão da onda do fio, $\{\tau_j^{(i)}\}$ é o conjunto das amplitudes de transmissão fio-eló/eló-fio, e $\tilde{\sigma}_{j,j'}^{(i)}$ definem os coeficientes da matriz de transmissões entre os elos.

Podemos notar que, a menos de um fator de fase, a onda que sai do vértice i na direção de j é idêntica à onda que chega no vértice j vinda de i , ou seja:

$$c_b = a_{\hat{b}} e^{i(k_{\hat{b}})L_b}, \quad a_b = c_{\hat{b}} e^{i(-k_{\hat{b}})L_b}. \quad (3.44)$$

Com base nestes elementos, Kottos e Smilansky [16] constróem a matriz de espalhamento do grafo substituindo os a_b 's em (3.43), e resolvendo para $c_{i,j}$ e O_i . Com uma definição apropriada, resulta:

$$\begin{aligned} c_{i,j'} &= \sum_{r,s} (\mathbf{1} - \tilde{S}_B(k))_{(i,r),(s,j)}^{-1} D_{(s,j)} \tau_s^{(j)} I_j \\ O_i &= \rho^{(i)} I_i + \sum_{j'} \tau_{j'}^{(i)} c_{i,j'}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Na expressão acima, $\tilde{S}_B(k)$ é uma matriz sub-unitária $2B \times 2B$, de construção semelhante ao operador de evolução (3.13), envolvendo o produto de uma matriz de propagação nos elos com uma matriz de espalhamento nos vértices. Em outras palavras, $\tilde{S}_B(k) = D(k)\tilde{R}$, com

$$\begin{aligned} D_{ij,i'j'}(k) &= \delta_{i,i'} \delta_{j,j'} e^{ik_b L_b} \\ \tilde{R}_{ji,nm} &= \delta_{n,i} C_{j,i} C_{i,m} \tilde{\sigma}_{ji,im}^{(i)}. \end{aligned} \quad (3.46)$$

$D(k)$ é uma matriz diagonal, unitária, que depende somente das propriedades métricas do grafo, e traz uma fase devido à propagação da onda no elo $b = (i, j)$. \tilde{R} depende da conectividade do grafo (através da matriz $C_{i,j}$) e das transições entre os elos, dadas pelos elementos da matriz $\tilde{\sigma}$. Utilizando os $c_{i,j'}$ na segunda equação de (4), conseguimos uma relação entre as amplitudes de saída e entrada, O_i e I_i , nos fios conectados ao vértice i .

$$O_i = \rho^{(i)} I_i + \sum_{j'jrs} \tau_{j'}^{(i)} (\mathbf{1} - \tilde{S}_B(k))_{(i,r),(s,j)}^{-1} D_{(s,j)} \tau_s^{(j)} I_j \quad (3.47)$$

Se combinarmos (3.47) para todos os fios $i = 1, \dots, M$, obtemos a matriz $M \times M$ de espalhamento do grafo,

$$S_{i,j}^{(V)} = \delta_{i,j} \rho^{(i)} + \sum_{r,s} \tau_r^{(i)} (\mathbf{1} - \tilde{S}_B(k))_{(i,r),(s,j)}^{-1} D_{(s,j)} \tau_s^{(j)}. \quad (3.48)$$

Podemos fazer uso da expansão

$$(1 - \tilde{S}_B(k))^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{S}_B^n(k) \quad (3.49)$$

para interpretar (3.48): a onda ganha uma fase $e^{ik_b L_b}$ a cada elo que atravessa e sua amplitude é multiplicada pelo fator $\sigma_{r,s}^{(i)}$ a cada vértice; eventualmente, ela é transmitida do elo (s, j) ao fio j , recebendo ainda uma amplitude $\tau_s^{(j)}$.

Portanto, pode-se escrever

$$S_{i,j}^{(V)} = \delta_{i,j} \rho^{(i)} + \sum_{p \in \tilde{\mathcal{T}}_{i \rightarrow j}} \mathcal{B}_p e^{i(S_p + \mu_p)} \quad (3.50)$$

onde $\tilde{\mathcal{T}}_{i \rightarrow j}$ é o conjunto de trajetórias “internas” no grafo que levam de i a j . \mathcal{B}_p é a amplitude da órbita p , que tem ação $S_p = \sum_{b \in t} k_b L_b$.

4 Exemplos

Neste capítulo, desenvolveremos dois grafos como exemplo para testar as teorias desenvolvidas nos capítulos anteriores. Procuramos sistemas simples nos quais seja possível traçar uma analogia com sistemas físicos conhecidos e, ainda assim, se observe uma dinâmica rica capaz de apresentar algumas das características que denotam caos conforme definido anteriormente.

4.1 Grafo duplo-degrau

4.1.1 Modelo original de Dabaghian

O primeiro sistema estudado é um grafo baseado em uma variação do potencial degrau, proposto por Dabaghian, Jensen e Blümel [51]. O sistema original é fechado e definido por um potencial escalonável

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } 0 < x \leq b \\ V_0 = \lambda E & \text{para } b < x < 1 \end{cases} \quad (4.1)$$

onde $\lambda < 1$ é a constante de escalonamento e E é a energia do sistema. Novamente, são utilizadas unidades tais que $\hbar = 2m = 1$.

No sistema original, define-se $\kappa = \beta k$ (com $\beta = \sqrt{1 - \lambda}$), e obtemos os níveis de energia através das raízes k_n de

$$\cos(kb)\sin[\kappa(1-b)] + \frac{\kappa}{k}\sin(kb)\cos[\kappa(1-b)] = 0, \quad (4.2)$$

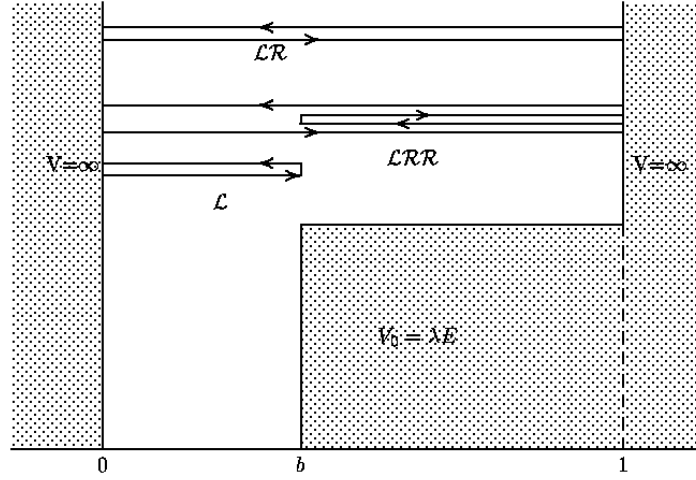


Figura 4.1: O potencial degrau escalonável de Dabaghian, com órbitas não-newtonianas L , LRR e a trajetória newtoniana LR .

com $E_n = k_n^2$. Os autores resolvem esta equação numericamente, resultando num grande número de raízes, nas quais aplicam uma transformada de Fourier

$$F(s) = \sum_{j=1}^{\infty} e^{-isk_j} \quad (4.3)$$

Sob a luz da fórmula do traço, os picos correspondem às ações das órbitas periódicas incluídas na soma; porém, a maioria dos picos observados não são correlacionados com as órbitas tradicionais, mas sim com as chamadas órbitas não-newtonianas, decorrentes do fenômeno de *ray splitting* [52]: reflexões no degrau do potencial, mesmo estando este muito abaixo da energia em questão. Tais órbitas não possuem análogo clássico e usualmente não são incluídas na soma (2.34), que leva em conta somente trajetórias clássicas.

Incluindo as órbitas não-newtonianas, obtém-se uma fórmula do traço exata para a densidade de estados:

$$\rho(E) = \bar{\rho}(E) + \frac{1}{\pi} Re \sum_p T_p \sum_{v=1}^{\infty} [(-1)^{\chi(p)} t^{2\tau(p)} r^{\sigma(p)}]^v e^{ivS_p} \quad (4.4)$$

onde $r = \frac{1-\beta}{1+\beta}$ e $t = \sqrt{1-r^2}$ são respectivamente os coeficientes de reflexão e transmissão; $\sigma(p)$ e $\tau(p)$ representam o número de reflexões e transmissões no degrau potencial, e $\chi(p)$ é um contador do número de vezes que a órbita foi refletida nas paredes. $(-1)^{\chi(p)}$ define a fase

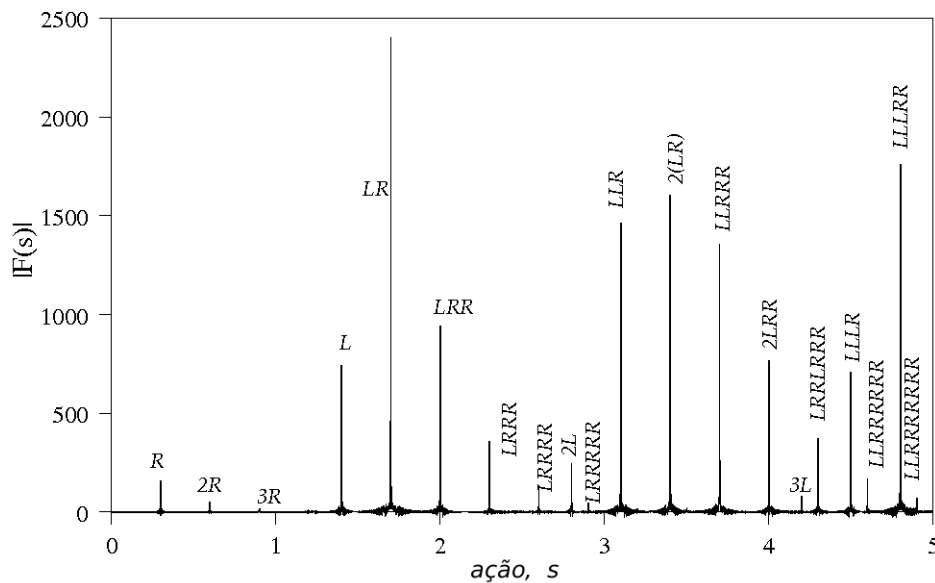


Figura 4.2: Resultado da transformada (4.3) da densidade de estados com $b = 0.7$ e $\lambda = 1/2$, contabilizada para 10 mil estados.

de Maslov na equação (2.34). Identificando as ações das órbitas (\mathcal{L}, \mathcal{R}) por $S_{\mathcal{L}}$ e $S_{\mathcal{R}}$, os autores concluem expressando a ação S_p de uma órbita como uma soma

$$S_p = n_{\mathcal{L}} S_{\mathcal{L}} + n_{\mathcal{R}} S_{\mathcal{R}} \quad (4.5)$$

para certos inteiros $n_{\mathcal{L}}$ e $n_{\mathcal{R}}$. Algumas destas trajetórias são identificadas na figura 4.1: as órbitas não-newtonianas L , LRR e a órbita newtoniana LR

4.1.2 Variação não-escalonável

Procurando uma plataforma para trabalharmos o limite semiclássico, ou seja, onde fosse possível definir $E \gg V$, alteramos a definição (4.1), propondo um sistema não-escalonável, ou seja, no qual a altura dos potenciais não varia conforme aumentamos a energia. Especificamos

$$V(x) = \begin{cases} V_1 & \text{para } 0 \leq x \leq L_1 \\ V_2 & \text{para } L_1 < x \leq L_2, \end{cases} \quad (4.6)$$

tal que L_1 e L_2 sejam racionalmente independentes (conforme (3.6)).

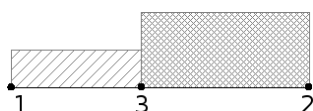


Figura 4.3: O potencial degrau duplo fechado (4.6)

Com condições de contorno de Neumann, resolvemos as equações definidas por (3.11) e (3.12), e encontramos os autovalores k_n^2 a partir das raízes de

$$\operatorname{tg}(k_1 L_1) + \operatorname{tg}(k_2 L_2) = 0 \quad , \quad (4.7)$$

onde $k_1 = \sqrt{k^2 - V_1}$ e $k_2 = \sqrt{k^2 - V_2}$.

Calculamos a distribuição de primeiros vizinhos (NND) para 5 mil autovalores de (4.7), com $L_1 = \sqrt{3}$, $L_2 = 5$, $V_1 = 1.0$ e $V_2 = 2.0$. A partir desta distribuição, produzimos o histograma que nos permite comparar este espectro com as estatísticas definidas em (2.15), (2.16) e (2.17). É esperado que, no limite de elos e vértices tendendo a infinito, o histograma se aproxime assintoticamente da previsão teórica [53] [34]. Observa-se que apenas dois elos, no caso do grafo duplo-degrau, já produzem uma boa concordância, especialmente para níveis mais afastados.

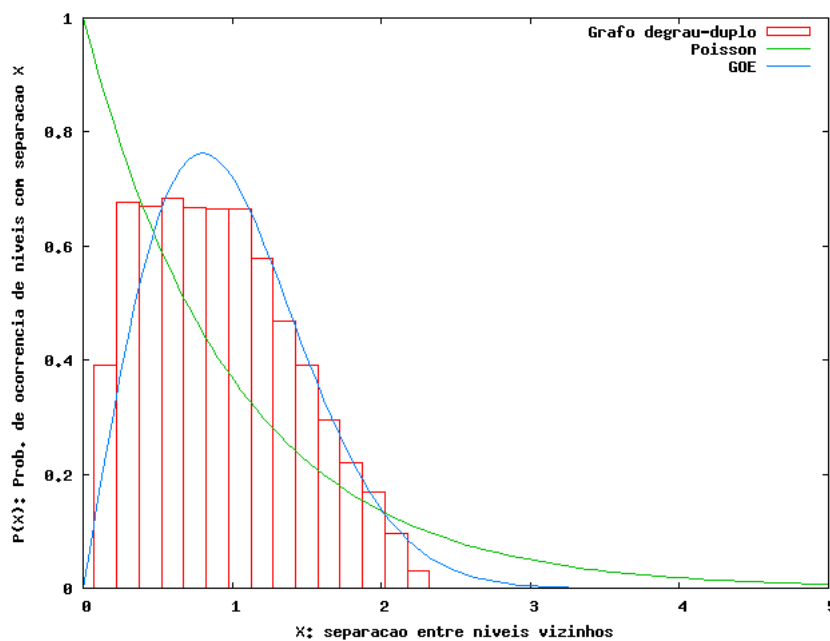


Figura 4.4: Histograma da distribuição de primeiros vizinhos do grafo degrau duplo, comparado com as estatísticas de Poisson e GOE.

4.1.3 Modelo aberto

Procurando estudar as propriedades de transporte, consideramos um sistema aberto. Modificamos (4.6), incluindo um fio em cada extremidade, conforme:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } x \leq 0 \\ V_1 & \text{para } 0 < x \leq L_1 \\ V_2 & \text{para } L_1 < x \leq L_2 \\ 0 & \text{para } x > L_2. \end{cases} \quad (4.8)$$

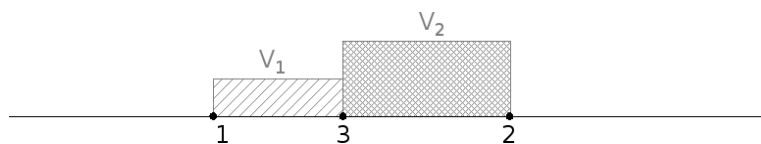


Figura 4.5: O grafo degrau-duplo aberto (4.8)

O sistema possui dois canais de entrada/saída; a matriz de espalhamento S do sistema é, portanto, 2×2 . A partir da simetria de reversão temporal do problema, construímos a matriz em termos dos coeficientes r e t . Temos que:

$$S(k) = \begin{pmatrix} r & t^\dagger \\ t & r^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

onde r e t são respectivamente os coeficientes de reflexão e transmissão do potencial como um todo. As saídas O_i relacionam-se com as entradas I_i conforme:

$$\begin{pmatrix} O_1 \\ O_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & t^\dagger \\ t & r^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \end{pmatrix}, \quad (4.10)$$

onde, no nosso exemplo, temos $I_1 = 1$ (onda plana normalizada) e $I_2 = 0$ (sem incidência pela direita do potencial). Explicitamente, resolvendo as equações dadas pelas condições de contorno (conforme a figura 4.6), obtemos:

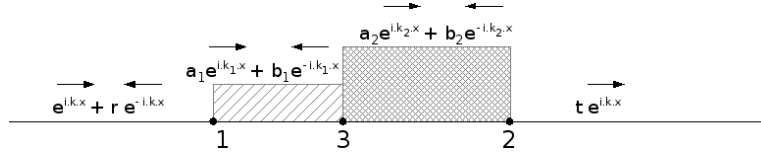


Figura 4.6: Ondas propagantes no grafo degrau-duplo aberto (4.8)

$$\begin{aligned}
 t &= \frac{-8k_1 e^{-ik(L_1+L_2)} k_2 k}{\text{den}} & (4.11) \\
 \text{den} &= -k_1^2 e^{i(k_2 L_2 + k_1 L_1)} k - k_1^2 e^{-i(k_2 L_2 + k_1 L_1)} k - k_1^2 e^{i(k_2 L_2 - k_1 L_1)} k_2 \\
 &+ e^{i(k_2 L_2 + k_1 L_1)} k_2^2 k_1 - e^{i(k_2 L_2 - k_1 L_1)} k_2^2 k_2 + e^{-i(k_2 L_2 - k_1 L_1)} k_2^2 k_2 \\
 &+ k_1^2 e^{-i(k_2 L_2 - k_1 L_1)} k + k_1 e^{i(k_2 L_2 - k_1 L_1)} k^2 + k_2^2 e^{-i(k_2 L_2 - k_1 L_1)} k \\
 &- k_2^2 e^{-i(k_2 L_2 + k_1 L_1)} k_1 + k_1^2 e^{i(k_2 L_2 - k_1 L_1)} k + e^{i(k_2 L_2 - k_1 L_1)} k_2^2 k_1 \\
 &+ e^{i(k_2 L_2 + k_1 L_1)} k^2 k_2 - e^{-i(k_2 L_2 + k_1 L_1)} k^2 k_2 - k_2^2 e^{-i(k_2 L_2 - k_1 L_1)} k_1 \\
 &+ k_1^2 e^{-i(k_2 L_2 - k_1 L_1)} k_2 - k_1 e^{-i(k_2 L_2 - k_1 L_1)} k^2 - k_2^2 e^{-i(k_2 L_2 + k_1 L_1)} k \\
 &+ k_1^2 e^{i(k_2 L_2 + k_1 L_1)} k_2 + e^{i(k_2 L_2 - k_1 L_1)} k_2^2 k - e^{i(k_2 L_2 + k_1 L_1)} k_2^2 k \\
 &- k_1 e^{-i(k_2 L_2 + k_1 L_1)} k^2 - k_1^2 e^{-i(k_2 L_2 + k_1 L_1)} k_2 - 2e^{-i(k_2 L_2 - k_1 L_1)} k k_2 k_1 \\
 &+ k_1 e^{i(k_2 L_2 + k_1 L_1)} k^2 - 2e^{i(k_2 L_2 + k_1 L_1)} k k_2 k_1 - 2e^{i(k_2 L_2 - k_1 L_1)} k k_2 k_1 \\
 &- 2e^{-i(k_2 L_2 + k_1 L_1)} k k_2 k_1
 \end{aligned}$$

Construímos uma expressão analítica para a condutância, quantidade observável (real) associada à transmissão, definida como [54]:

$$\frac{G}{G_0} = \text{tr}(t t^\dagger) \quad , \quad G_0 = \frac{e}{h} \quad (4.12)$$

onde e é a carga do elétron e h é a constante de Plank. A condutância é mostrada na figura 4.7 para um conjunto de dois milhões de pontos, com os mesmos parâmetros de comprimento e potencial definidos na seção 4.1.2 para a obtenção da distribuição de primeiros vizinhos. No detalhe, ampliamos uma região de alto k , correspondente ao limite semiclássico, que será utilizada mais tarde para o ajuste da fórmula do traço.

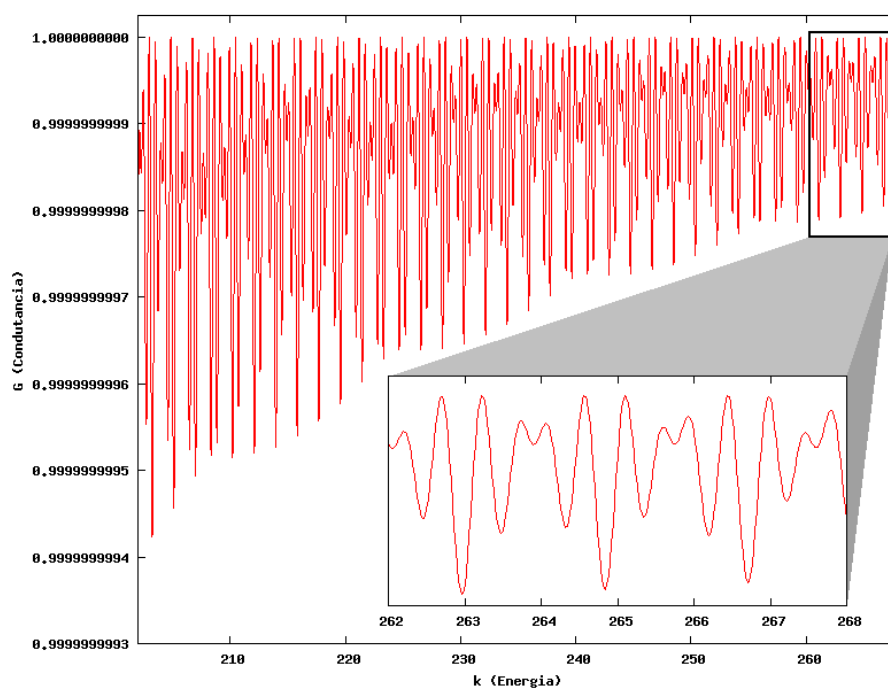


Figura 4.7: Condutância do grafo degrau-duplo para $L_1 = \sqrt{3}$, $L_2 = 5$, $V_1 = 1.0$ e $V_2 = 2.0$

Com base nos dados adquiridos, aplicamos uma transformada de Fourier da mesma forma que (4.3), exibida na figura 4.8. Identificamos a contribuição de três trajetórias, correspondentes a uma órbita no primeiro elo, no segundo elo, ou no conjunto do grafo, antes de ser transmitida para o fio à direita.

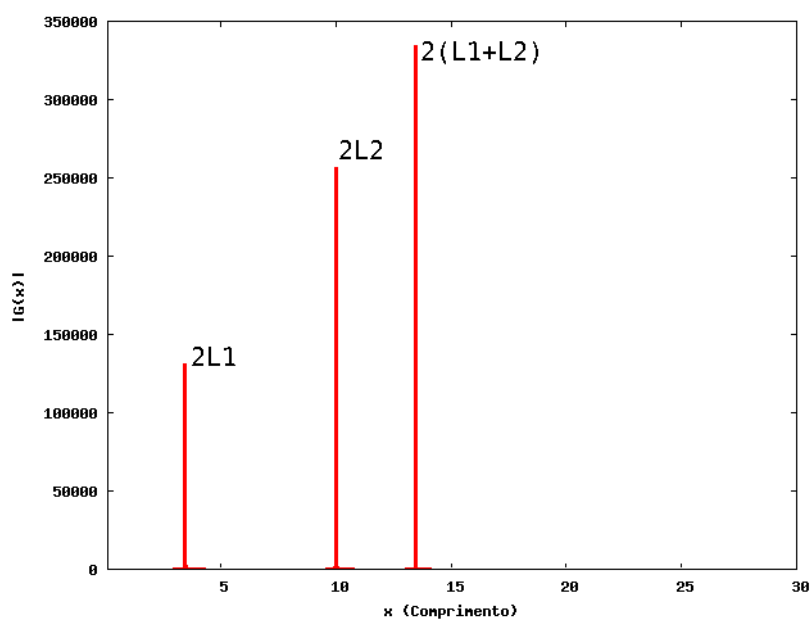


Figura 4.8: Transformada de Fourier da condutância G (eq. 4.12) com 3 órbitas identificadas

4.1.4 Fórmula do Traço para a Condutância

Utilizamos o formalismo matricial para definir o potencial acima em termos de um grafo com três vértices (2 elos \rightarrow 4 arcos), caracterizado pela matriz de adjacência

$$C_{i,j} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} . \quad (4.13)$$

A partir de $C_{i,j}$, construímos as matrizes (3.46):

$$D(k) = \begin{pmatrix} e^{ik_1L_1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{ik_1L_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_2L_2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{ik_2L_2} \end{pmatrix} \quad e \quad (4.14)$$

$$\tilde{R}(k) = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_{13,31}^{(3)} & \sigma_{13,32}^{(3)} & 0 \\ \sigma_{31,13}^{(1)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_{32,23}^{(2)} \\ 0 & \sigma_{23,31}^{(3)} & \sigma_{23,32}^{(2)} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

onde os coeficientes σ representam os coeficientes de transmissão e reflexão entre os arcos, dados explicitamente por:

$$\begin{aligned} \sigma_{13,32}^{(3)} = \sigma_{23,31}^{(3)} &= \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2} \\ \sigma_{13,31}^{(3)} = \sigma_{23,32}^{(3)} &= \sqrt{1 - \frac{16k_1^2k_2^2}{(k_1+k_2)^4}} \\ \sigma_{31,13}^{(1)} &= \sqrt{1 - \frac{16k_1^2k^2}{(k_1+k)^4}} \\ \sigma_{32,23}^{(2)} &= \sqrt{1 - \frac{16k_2^2k^2}{(k_2+k)^4}} . \end{aligned} \quad (4.16)$$

Os coeficientes τ de transmissão fio-elo e elo-fio são dados por:

$$\begin{aligned}\tau_{13}^{(1)} &= \frac{4kk_1}{(k+k_1)^2} \\ \tau_{32}^{(2)} &= \frac{4k_2k}{(k_2+k)^2}.\end{aligned}\quad (4.17)$$

Com estes ingredientes, somamos diversas potências da matriz $\tilde{S}_B(k)$, e agrupamos os termos de órbitas de mesmo comprimento, produzindo, por fim:

$$\begin{aligned}G(k) &= \overline{G}(k) + \frac{1}{2\pi} \text{Re} \sum_p \sum_{v=1}^{\infty} B_p^v e^{iv(S_p + \mu_p)} \\ B_p &= \tau_{13}^{(1)} \sigma_{13,31}^{(3)A} \sigma_{13,32}^{(3)B} \sigma_{23,31}^{(3)C} \sigma_{23,32}^{(3)D} \sigma_{31,13}^{(1)E} \sigma_{32,23}^{(2)F} \tau_{32}^{(2)}\end{aligned}\quad (4.18)$$

onde A, B, \dots, F são contadores que guardam o número de vezes que uma dada órbita p foi refletida e/ou transmitida pelo vértice em questão. A média clássica $\overline{G}(k)$ é dada por uma lei de potência, e segue $1 - \frac{3}{8}k^{-4}$ (obtida via ajuste numérico).

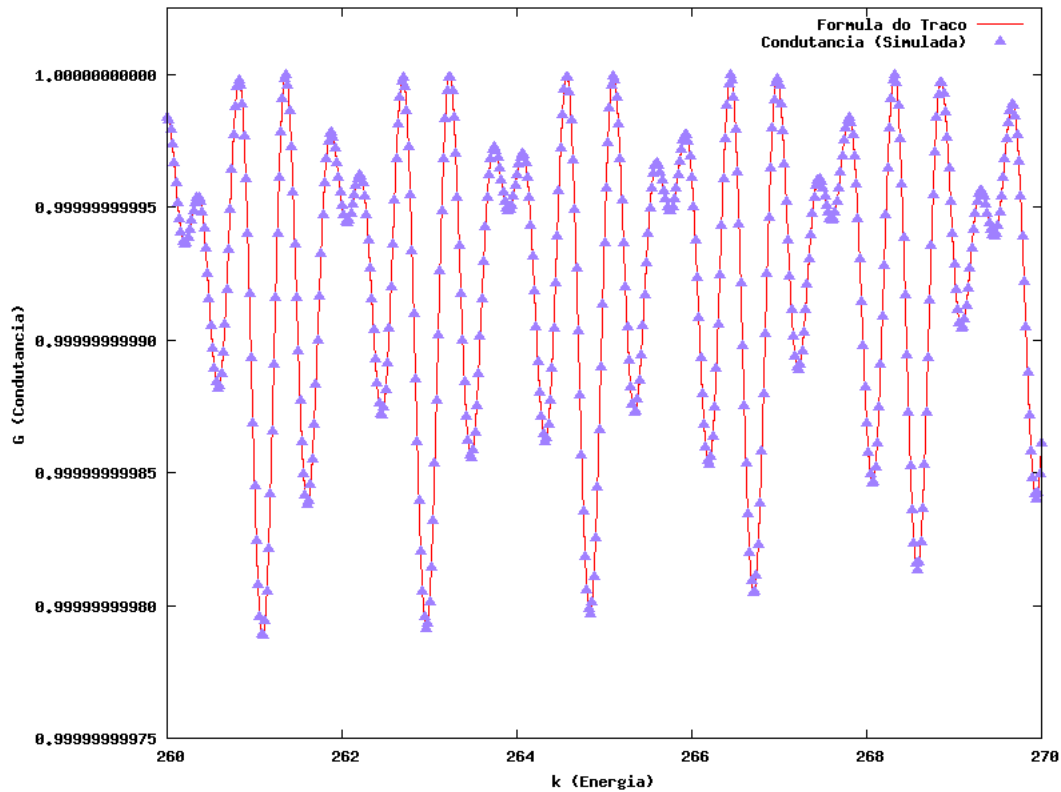


Figura 4.9: Comparação entre condutância obtida através de (4.12) e a fórmula (4.18)

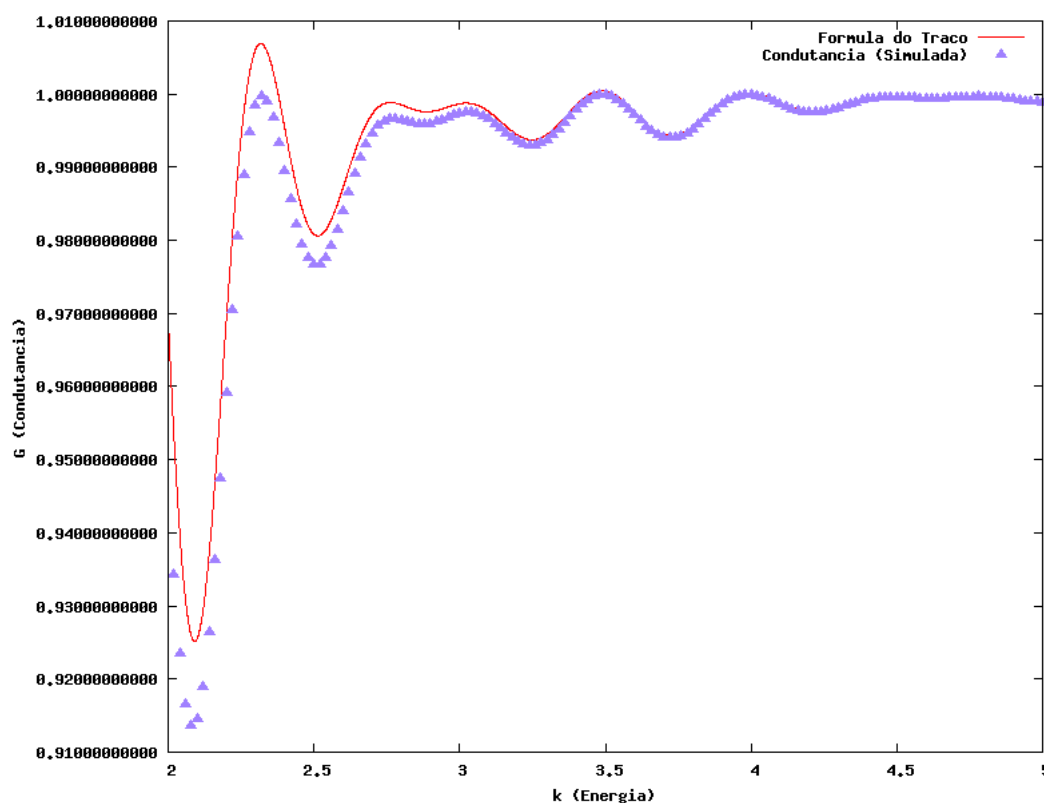


Figura 4.10: Condutância x fórmula do traço em região de baixo k

Contabilizando apenas as três órbitas principais e suas repetições de primeira ordem, o ajuste já é próximo do limite de precisão numérica da implementação. Os coeficientes σ para o potencial em questão são $O(10^{-4})$, logo as órbitas de comprimento simbólico maior (envolvendo um maior número de reflexões) decaem rapidamente, pois envolvem pelo menos duas reflexões a mais, sendo portanto pelo menos $O(10^{-8})$ menores. Investigamos também uma região de mais baixa energia do espectro (k próximo a V_1 e V_2), calculando a fórmula do traço com o mesmo número de órbitas periódicas, e na janela escolhida, é possível observar discrepâncias nas duas curvas. Notamos que nesta região os coeficientes são $O(10^{-2})$ e assim sendo, para obtermos uma concordância de boa qualidade, seria necessária uma quantidade muito maior de órbitas para que a soma alcançasse convergência satisfatória.

4.1.5 Wigner Time delay

Como exemplo de outra propriedade de transporte passível de análise pelo formalismo desenvolvido, expomos resumidamente o *time delay* [21], a defasagem sofrida por uma onda ao interagir com o potencial espalhador. Este conceito foi estudado por Wigner para sistemas com um único canal de entrada/saída, e posteriormente estendido por Smith e Eisenbud [55] para o caso de múltiplos canais. O *time delay* é definido em termos da matriz espalhamento como

$$\tau = -\frac{i}{\hbar} \text{tr} \left(S^\dagger \frac{\partial S}{\partial E} \right) , \quad (4.19)$$

onde E representa a energia (aqui tomada como k).

Partindo da expressão analítica para o coeficiente de transmissão t (4.11) e de uma construção semelhante para o coeficiente de reflexão r , construímos a matriz S completa:

$$S(k) = \begin{pmatrix} r & t^\dagger \\ t & r^\dagger \end{pmatrix} . \quad (4.20)$$

a partir da qual construímos a expressão exata para τ . Por outro lado, utilizando uma expansão semelhante à (3.49), obtemos uma expressão em termos de potências da matriz de espalhamento interno, que nos permite, após agruparmos termos de trajetórias de mesmo comprimento simbólico, estabelecer uma fórmula do traço [16], muito semelhante àquela obtida para a condutância:

$$\tau(k) = \bar{\tau}(k) + \frac{1}{2\pi} \text{Re} \sum_p \sum_{v=1}^{\infty} B'_p{}^v L_p e^{iv(S_p + \mu_p)} \quad (4.21)$$

onde L_p é o comprimento da órbita e B'_p é um coeficiente de estabilidade análogo ao definido em (4.18). Esta fórmula é comparada com o resultado analítico na figura 4.11. Observamos uma boa concordância para a fase, porém a amplitude apresenta pequenas discrepâncias, sobretudo nos picos. Isto se deve, em parte, ao termo L_p , que aumenta conforme incluímos órbitas de comprimento maior na soma, negando em parte o decaimento do coeficiente B'_p e exigindo que um maior número de trajetórias e/ou repetições venha a ser considerado.

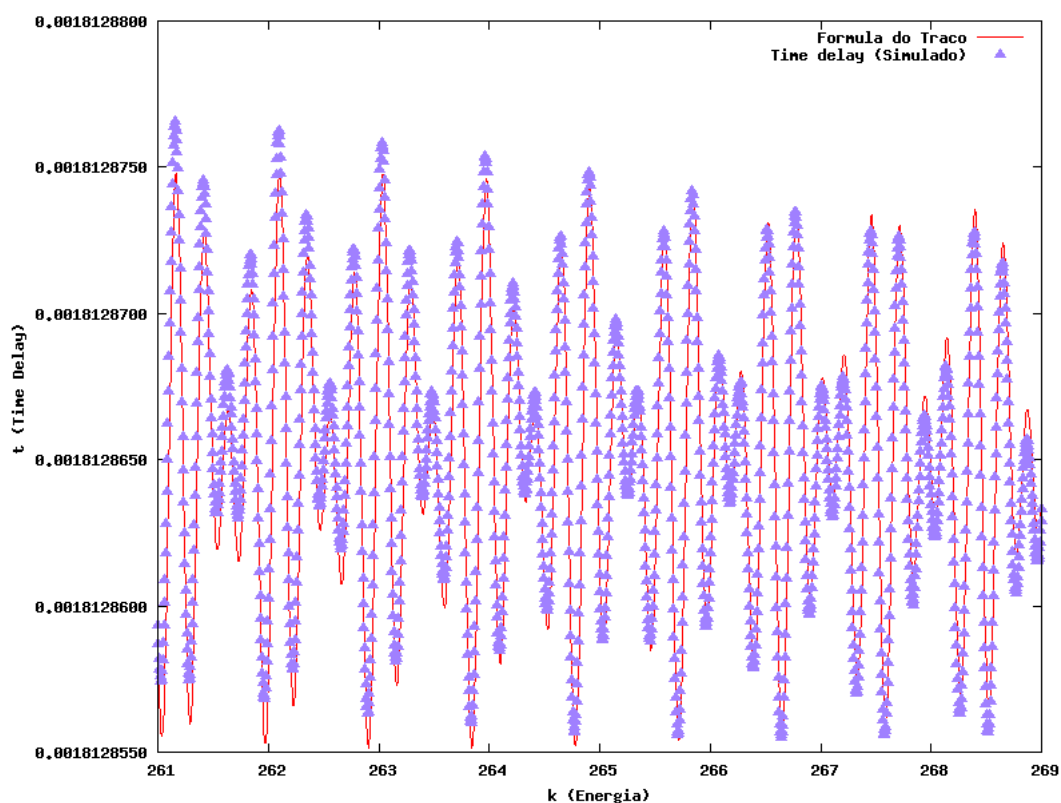


Figura 4.11: Comparação do time delay obtida através de (4.19) com a fórmula (4.21)

4.2 Grafo T

Como prelúdio para um grafo mais complexo, investigamos brevemente um segundo sistema, denotado como grafo T. Este modelo permite visualizar de forma simples a condutância e o *time delay* como uma expansão em órbitas periódicas.

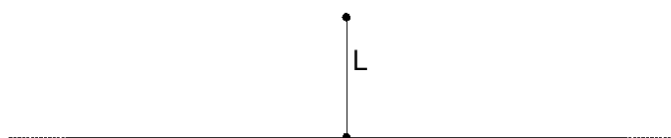


Figura 4.12: Grafo T

Seja uma onda plana normalizada e^{ikx} incidindo no fio à esquerda, uma onda refletida re^{-ikx} e uma onda transmitida te^{ikx} no fio à direita. No elo temos duas ondas contra-propagantes, ae^{ikl}

e be^{-ikl} . Impondo as condições de contorno, construímos o sistema de equações:

$$\begin{cases} 1 + r = a + b = t \\ -1 + r + t + a - b = 0 \\ ae^{ikl} - be^{-ikl} = 0 \end{cases} \quad (4.22)$$

para o qual encontramos o coeficiente de transmissão t :

$$t = \frac{4 \cos kl}{e^{ikl} + 3e^{-ikl}} \quad (4.23)$$

A condutância é dada por:

$$\begin{aligned} \frac{G}{G_0} = \text{tr}(tt^\dagger) &= \frac{4(1 + \cos 2kl)}{3 \cos 2kl + 5} \\ &= \frac{4}{5}(1 + \cos 2kl) \sum_{n=0}^{\infty} \left[-\frac{3}{5} \cos 2kl \right]^n, \end{aligned} \quad (4.24)$$

e o *time delay* é dado por:

$$\begin{aligned} \tau &= -\frac{i}{\hbar} \text{tr} \left(S^\dagger \frac{\partial S}{\partial E} \right) = \frac{8l}{5 + 3 \cos(2kl)} \\ &= \frac{8l}{5} \sum_{n=0}^{\infty} \left[-\frac{3}{5} \cos 2kl \right]^n, \end{aligned} \quad (4.25)$$

onde, em ambas expressões, utilizou-se de uma reorganização dos termos e de uma expansão geométrica. Com esta expressão, se evidenciam as repetições da única trajetória periódica do sistema, a saber, a órbita no elo de comprimento l ; as repetições entram na expansão através das sucessivas potências de $\cos 2kl$.

4.3 Grafo duplo-T

Buscando explorar outras propriedades de grafos com topologia mais avançada investigamos um terceiro sistema, denotado como grafo duplo-T.

4.3.1 Grafo fechado e estatísticas de níveis

O grafo fechado é composto por 5 elos com potencial V nulo, conforme a figura 4.13.

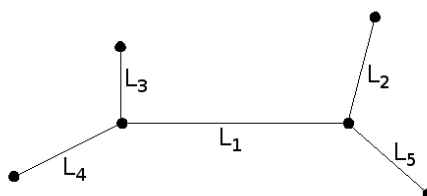


Figura 4.13: Grafo duplo-T

Novamente utilizamos condições de contorno de Neumann e resolvemos as equações (3.11) e (3.12) para encontramos os autovalores k_n^2 , utilizando com $L_1 = \sqrt{3}$, $L_2 = 5$, $L_3 = \sqrt{2}$, $L_4 = \ln 7$ e $L_5 = \ln 11$, valores escolhidos para satisfazerem (3.6). Com estes, calculamos a distribuição de primeiros vizinhos para os primeiros 10 mil autovalores e produzimos o histograma mostrado na figura (4.14).

Observamos um bom ajuste com a curva correspondente às estatísticas GOE – nosso critério para o estabelecimento de um sistema como caótico – para *gaps* mais afastados, porém há um padrão diferente para os *gaps* mais próximos. Além dos fatores já enunciados na seção 4.1.2, este padrão diferente poderia ser um indício de que o sistema apresenta uma distribuição mista, com autovalores regulares coexistindo no espectro com aqueles associados ao regime caótico, ou ainda de alguma simetria escondida. Todavia, é evidente que o espectro do sistema não corresponde àquele esperado para um sistema puramente regular (Poisson).

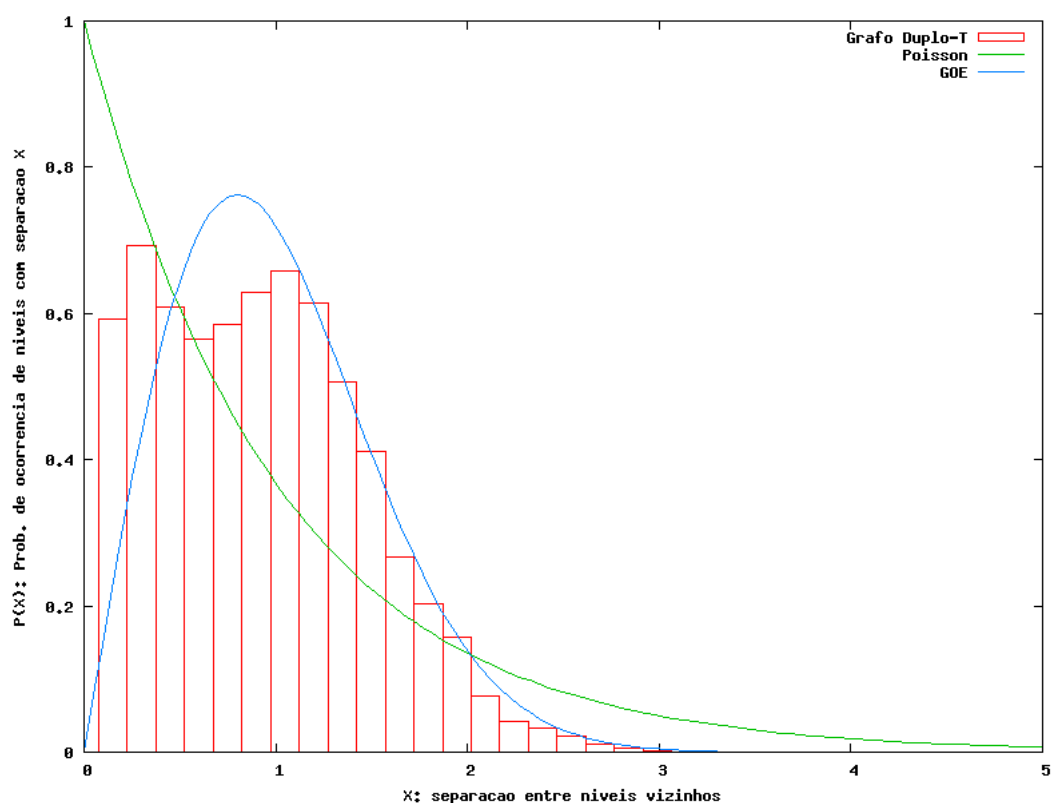


Figura 4.14: Histograma da distribuição de primeiros vizinhos do grafo duplo-T, comparado com as estatísticas de Poisson e GOE.

4.3.2 Grafo aberto e a condutância

Para abordarmos o problema de espalhamento, alteramos a topologia do grafo fechado, transformando dois dos elos em fios, como visto na figura 4.15.

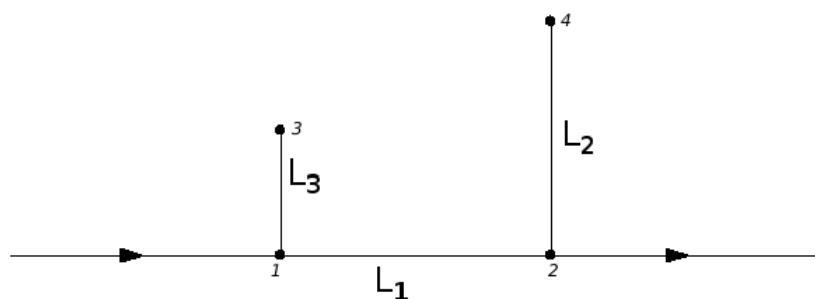


Figura 4.15: Grafo duplo-T aberto

Incidindo uma onda plana e^{ikx} pelo fio à esquerda, e resolvendo as equações de continuidade apropriadamente definidas em (3.11) e (3.12), encontramos uma expressão para o coeficiente de transmissão no fio à direita:

$$\frac{1}{t} = \frac{e^{ik(2L_3+L_1)} + 3e^{-ik(-2L_3+L_1)} + e^{ikL_1} - 9e^{-ikL_1} + e^{ik(2L_2+L_1)}}{4(e^{ik2L_3} - 1)(1 - e^{ik2L_2})} + \frac{e^{ik(2L_2+2L_3+L_1)} - e^{-ik(-2L_2-2L_3+L_1)} + 3e^{-ik(-2L_2+L_1)}}{4(e^{ik2L_3} - 1)(1 - e^{ik2L_2})} \quad (4.26)$$

A partir de (4.26), usando novamente $G/G_0 = \text{tr}(tt^\dagger)$, plotamos a condutância na figura 4.16. Com os dados, calculamos a transformada de Fourier, exibida na figura 4.17. Observamos uma quantidade muito maior de órbitas periódicas, e uma novidade: encontramos órbitas correspondentes às diferenças entre comprimentos, ie, $4L_1 - 2L_3$, por exemplo.

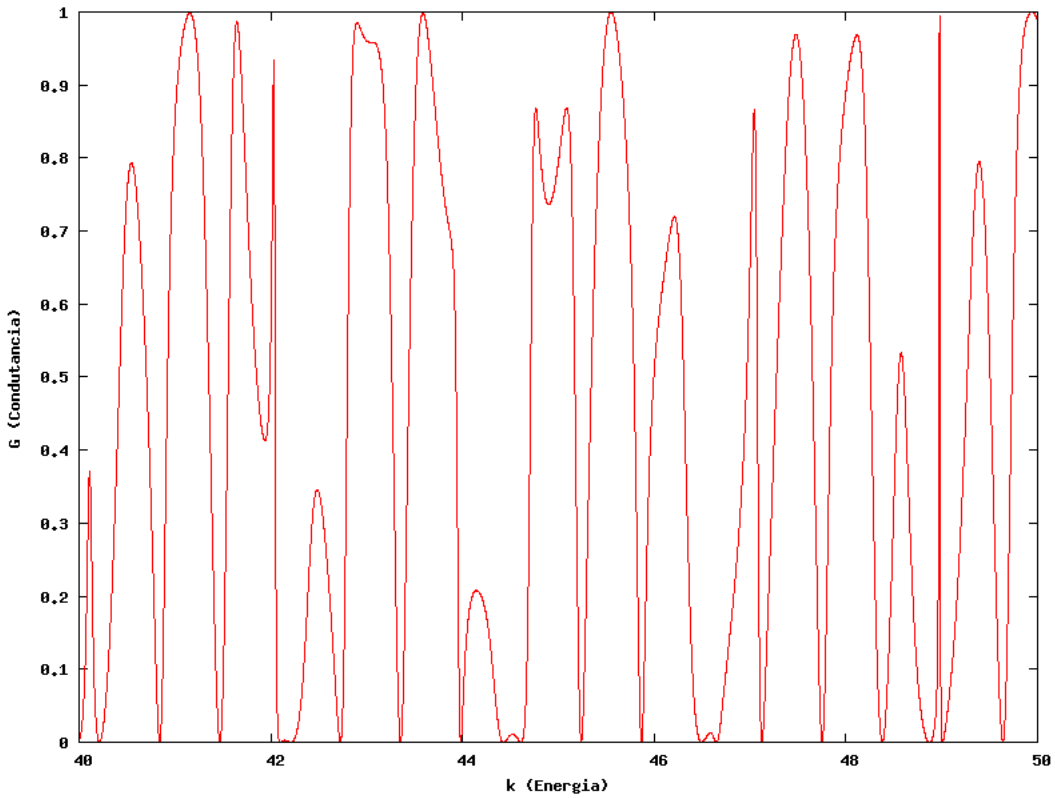


Figura 4.16: Condutância do grafo duplo-T com $L_1 = \sqrt{3}$, $L_2 = 5$ e $L_3 = \sqrt{2}$

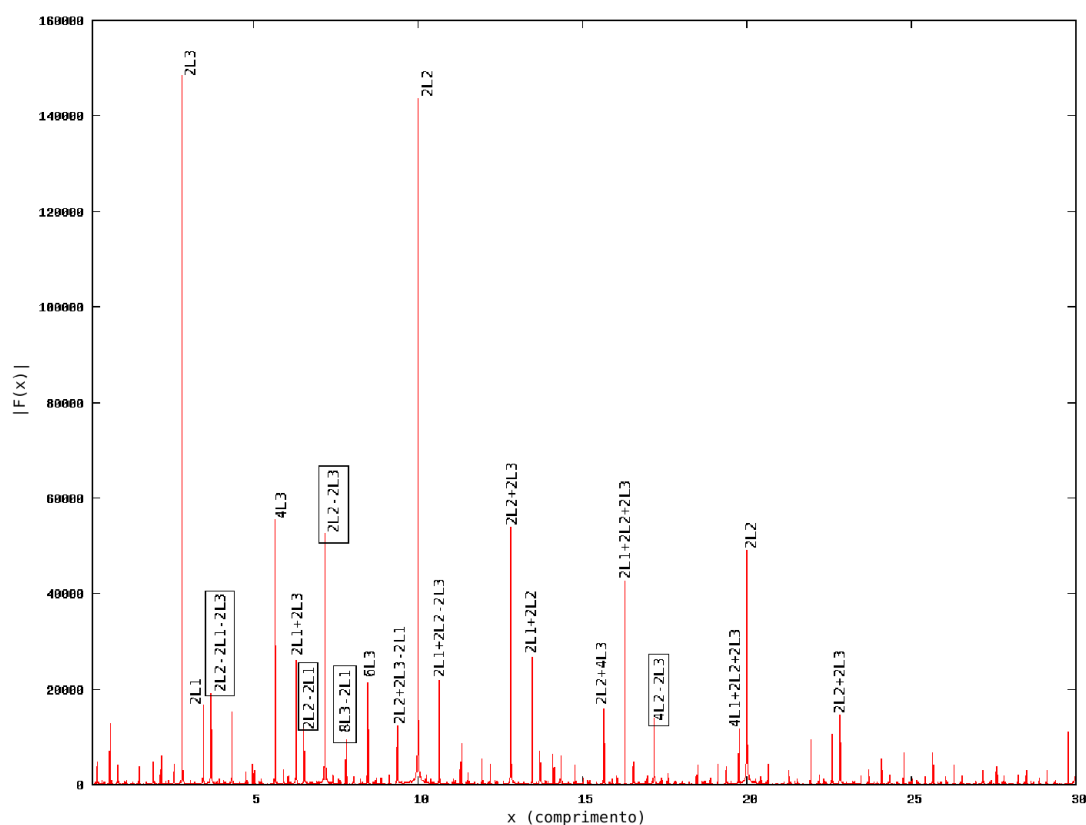


Figura 4.17: Transformada de Fourier da condutância G (4.16) em função do comprimento, com algumas órbitas identificadas, e órbitas 'negativas' enfatizadas

4.3.3 Fórmula do Traço

A topologia do grafo é descrita pela matriz

$$C_{i,j} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

Construímos então as matrizes (3.46):

$$D(k) = \begin{pmatrix} e^{ik_1L_1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{ik_1L_1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_2L_3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{ik_2L_3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{ik_2L_2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{ik_2L_2} \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

$$e \quad \tilde{R}(k) = \begin{pmatrix} 0 & r & 0 & 0 & t & 0 \\ r & 0 & t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & R & 0 & 0 \\ t & 0 & r & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & R \\ 0 & t & 0 & 0 & r & 0 \end{pmatrix} \quad (4.29)$$

onde os coeficientes, que não dependem de k , são dados por $t = \frac{4}{9}$, $r = \frac{1}{9}$ e $R = 1$ (reflexão total nas pontas). Um procedimento idêntico ao do grafo degrau-duplo nos leva a uma expressão baseada no agrupamento de termos correspondentes às órbitas de mesmo comprimento. Com esta, construímos um programa para percorrer as possíveis trajetórias e contabilizar suas respectivas contribuições.

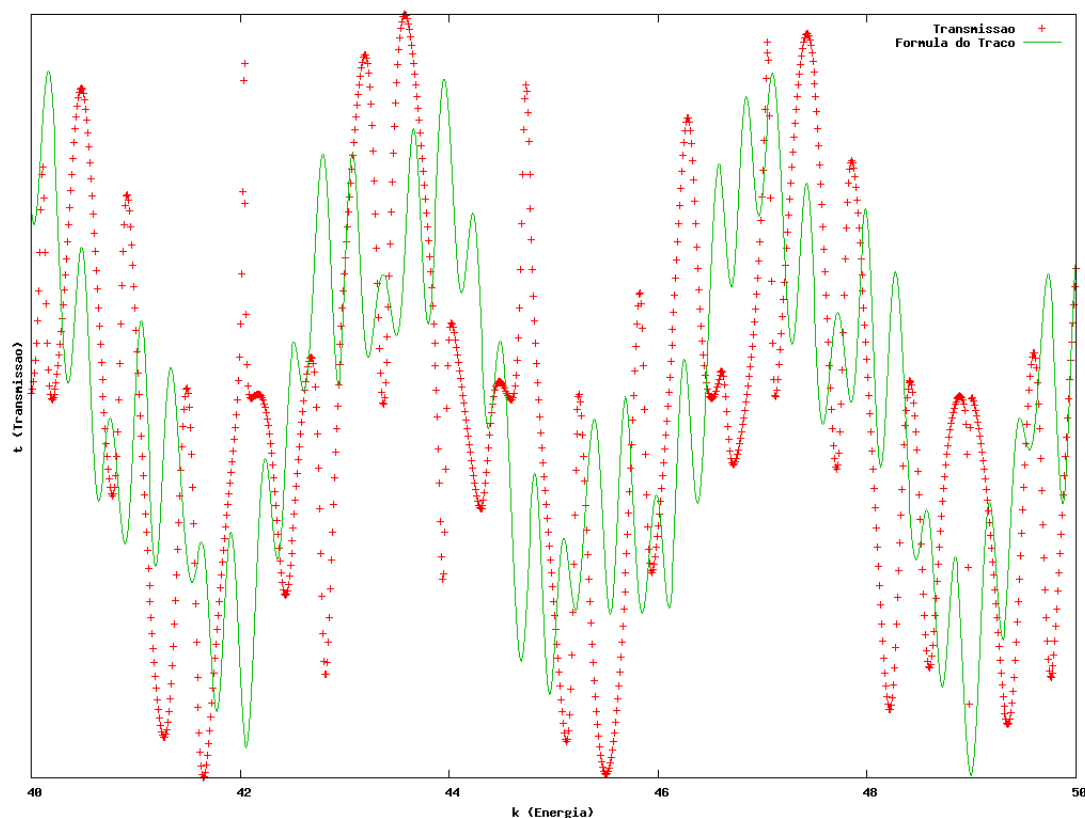


Figura 4.18: Comparação entre o coeficiente de transmissão obtido analiticamente e o protótipo da fórmula do traço.

O ajuste mostrado na figura 4.18 é claramente deficitário. As oscilações em larga escala, devido às órbitas de menor comprimento, são bem acompanhadas pela fórmula, porém as flutuações menores, provenientes de órbitas cada vez mais (simbolicamente) compridas, não encontram bom ajuste. Tal simulação foi obtida com 3280 órbitas, ou seja, todas que incluem até 7 reflexões nos diferentes elos.

5 *Conclusões*

Neste trabalho, estudamos fenômenos de transporte utilizando como modelos grafos quânticos, evidenciando diversas vantagens da aplicação da teoria de órbitas periódicas nesta abordagem.

O conceito de “caos” é tipicamente associado a sistemas de grande complexidade, envolvendo duas ou mais dimensões no espaço de fase, e usualmente compostos por modelos não-integráveis que exigem grande esforço numérico para a obtenção de soluções. Nos exemplos aqui trabalhados, evidenciamos no espectro de energia uma assinatura tipicamente associada a sistemas quântica de um análogo clássico clássico - a saber, o ajuste com a curva correspondente ao ensemble gaussiano ortogonal (GOE). Notamos que estes foram obtidos através de sistemas unidimensionais, o que pode permitir importantes avanços na compreensão do caos, ao simplificar o modelo ao ponto da integrabilidade.

Acompanhamos a introdução do conceito de *ray splitting*, desenvolvido por Couchman para Sistemas Hamiltonianos, e estendemos o mesmo para o domínio de grafos quânticos. Nesta adaptação, modificamos o modelo utilizado para incluir coeficientes de transmissão e reflexão dependentes de k , ao contrário do padrão invariante (“*non-scale invariant*”) tipicamente adotado na literatura [17]. A adoção desta mudança permitiu um melhor estudo do limite semiclássico, ao tornar possível observar uma região do espectro onde as energias são ordens de grandeza maiores que os potenciais envolvidos.

Com o conceito de *ray splitting*, evidenciou-se a necessidade de incluirmos trajetórias não-newtonianas na soma das órbitas periódicas da densidade de estados, como demonstrado por

Dabaghian *et al* [51], e da condutância. Tais órbitas são de grande importância para obter um ajuste exato na expressão da fórmula do traço, todavia, seu uso não era evidente nas principais referências da literatura.

Ainda quanto à fórmula do traço, notamos que a formulação para grafos quânticos é exata em qualquer faixa de energia, não se limitando ao limite semiclássico, tampouco envolvendo aproximações sobre a geometria do espaço de fase. A exatidão da expressão não requer que a mesma seja absolutamente convergente - se o fator de amplitude da trajetória não decair mais rapidamente que a proliferação exponencial das órbitas, serão necessários infinitos termos na soma para a obtenção de um resultado exato.

O presente trabalho estendeu o tratamento do potencial degrau duplo para um modelo aberto, calculando além da densidade de estados do sistema fechado, propriedades de transporte como a condutância e o *time delay*. Tais propriedades merecem destaque por modelarem fenômenos relacionados à comunicação e à propagação de informação, de grande importância na atual conjectura tecnológica.

Nesta extensão para sistemas abertos, notamos a necessidade de considerar as chamadas órbitas negativas no somatório de trajetórias. Ainda que o surgimento destas componentes seja naturalmente explicado pelo produto tt^\dagger , é importante ressaltar que é a condutância, e não o coeficiente de transmissão, que é a quantidade observável do sistema. Portanto, simulações “detectam” componentes negativas, para as quais uma interpretação consistente ainda não foi fornecida.

Vale frisar que a área de espalhamento caótico que lida com sistemas abertos cujas contrapartes (fechadas) clássicas são caóticas é bastante recente. Espera-se que boa parte da teoria desenvolvida para sistemas caóticos, no limite semiclássico, possa ser utilizada para a descrição e o entendimento dos sistemas caóticos abertos, mas essa transposição pode não ser tão direta como parece demonstrar o grafo duplo-T. Para a condutância, em particular, há pelo menos um precedente que nos leva a crer que ela possa ser entendida em termos de trajetórias clássicas e/ou órbitas periódicas que ficam presas no interior do sistema (aberto). O *time delay* (eq. (4.19))

é definido em termos da matriz espalhamento S como uma grandeza proporcional à $\text{tr} S^\dagger \frac{dS}{dE}$, enquanto a condutância, também definida em termos de S , é proporcional a $\text{tr}(tt^\dagger)$, sendo t um bloco da matriz S . Pode se mostrar que o time delay, no limite semiclássico, é totalmente descrito pelas órbitas periódicas que ficam confinadas no interior da cavidade.

Sugestões para trabalhos futuros incluem a exploração da distribuição dos níveis, buscando explicar os fatores que contribuem para os componentes “regular” e “caótico”. No contexto da fórmula do traço, formas mais eficientes de calcular órbitas podem ser exploradas, especialmente em grafos de topologias complexas. Outros modelos também devem ser estudados para elucidar a questão das trajetórias negativas, e uma maneira sistemática de incluí-las no somatório de órbitas. Destacamos ainda o estudo de grafos com tunelamento, independentes do limite semiclássico, bem como a propagação de pacotes de onda (“solitons”) em grafos, como dois ramos promissores para investigação futura.

Referências Bibliográficas

- [1] HARRISON, P. *Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures*. West Sussex: Wiley Interscience, 2005.
- [2] WIRTH, G. I. *Mesoscopic Phenomena in Nanometer Scale MOS Devices*. Tese (Doutorado) — Universität Dortmund, Fakultät für Elektrotechnik, 1999.
- [3] DATTA, S. *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge: Cambridge University Press, 1995.
- [4] BERRY, M. V. Quantizing a classically ergodic system: Sinai's billiard and the kkr method. *Ann. Phys.*, v. 131, n. 1, p. 163–216, 1981.
- [5] POINCARÉ, H. *Les méthodes nouvelles de la mécanique céleste*. Paris: Guthier-Villars, 1892.
- [6] LORENZ, E. N. Deterministic nonperiodic flow. *Journal of Atmospheric Sciences*, v. 20, p. 130–141, 1963.
- [7] STROGATZ, S. H. *Nonlinear Dynamics and Chaos*. Reading: Addison-Wesley, 1994.
- [8] EINSTEIN, A. Zum Quantensatz von Sommerfeld und Epstein. *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, n. 19, p. 82–92, 1917.
- [9] GOTTFRIED, K.; YAN, T. *Quantum Mechanics: Fundamentals*. New York: Springer, 2003.
- [10] FEYNMAN, R. The space-time formulation of nonrelativistic quantum mechanics. *Reviews of Modern Physics*, n. 20, p. 367–387, 1948.
- [11] GUTZWILLER, M. C. Periodic orbits and classical quantization conditions. *J. Math. Phys.*, n. 12, p. 343–358, 1971.
- [12] BERRY, M. V.; TABOR, M. Level clustering in the regular spectrum. *Proc. Royal Soc. London A*, v. 356, n. 1686, p. 375–394, 1977.
- [13] BOHIGAS, O. Random matrix theories and chaotic dynamics. In: GIANNONI, M. J.; VOROS, A.; ZINN-JUSTIN, J. (Ed.). *Les Houches Lecture Series Session LII*. Amsterdam: North-Holland, 1991. p. 87–199.
- [14] BOHIGAS, O.; GIANNONI, M. J.; SCHMIT, C. Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws. *Phys. Rev. Lett.*, v. 52, n. 1, p. 1–4, Jan. 1984.

- [15] ALMEIDA, A. M. O. de. *Sistemas Hamiltonianos: Caos e Quantização*. Campinas: Unicamp, 1987.
- [16] KOTTOS, T.; SMILANSKY, U. Quantum graphs: A simple model for chaotic scattering. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 36, n. 12, p. 3501–3524, 2003.
- [17] GNUTZMANN, S.; SMILANSKY, U. Quantum graphs: Applications to quantum chaos and universal spectral statistics. *Advances In Physics*, v. 55, p. 527 ff, 2006.
- [18] LEIBNIZ, G. W. Von den Verhängnissen. In: CASSIRER, E.; BUCHENAU, A. (Ed.). *Hauptschriften zur Grundlegung der Philosophie*. Leipzig: Meiner, 1924. v. 2.
- [19] CVITANOVIĆ, P. et al. *Chaos: Classical and Quantum*. Copenhagen: Niels Bohr Institute, 2008.
- [20] WEIBERT, K.; MAIN, J.; WUNNER, G. Periodic orbit quantization of the closed three-disk billiard as an example of a chaotic system with strong pruning. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*, n. 5, p. 393–406, 2002.
- [21] ECKHARDT, B. Order and chaos in quantum irregular scattering: Wigner's time delay. *Vistas in Astronomy*, n. 37, p. 43–55, 1993.
- [22] OTT, E. *Chaos in Dynamical Systems*. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1993.
- [23] REICHL, L. E. *A modern course in statistical physics*. New York: John Wiley, 1998.
- [24] KEATING, J. P. The riemann zeta function and quantum chaology. In: CASTI, G.; GUARNERI, I.; SMILANSKY, V. (Ed.). *Quantum Chaos*. [S.l.]: North-Holland, 1993. p. 145–185.
- [25] LANDAU, L. D. *Mechanics*. Oxford: Pergamon, 1960.
- [26] SAKURAI, J. J. *Modern Quantum Mechanics*. Reading: Addison-Wesley, 1994.
- [27] BERRY, M. V. Some quantum-to-classical asymptotics. In: GIANNONI, M. J.; VOROS, A.; ZINN-JUSTIN, J. (Ed.). *Les Houches Lecture Series Session LIII*. Amsterdam: North-Holland, 1991. p. 201–303.
- [28] WIGNER, E. P. Random matrices in physics. *SIAM Review*, v. 9, n. 1, p. 1–23, 1967.
- [29] MEHTA, M. L. *Random Matrices*. Amsterdam: Elsevier/Academic Press, 2004.
- [30] DYSON, F. J. Statistical theory of the energy levels of complex systems. *Journal of Mathematical Physics*, v. 3, n. 1, p. 140–156, 1962.
- [31] GUTZWILLER, M. C. Quantum chaos. *Scientific American*, n. 1, p. 26 ff, Jan. 1992.
- [32] MCDONALD, S. W.; KAUFMAN, A. N. Wave chaos in the stadium: Statistical properties of short-wave solutions of the Helmholtz equation. *Phys. Rev. A*, v. 37, n. 8, p. 3067–3086, 1988.
- [33] SELIGMAN, T. H.; VERBAARSCHOT, J. J. M.; ZIRNBAUER, M. R. The transition from order to chaos in quantum systems. *J. Phys A*, n. 18, p. 2751, 1985.

- [34] BERKOLAIKO, G. Form factor expansion for large graphs. In: BERKOLAIKO, G. et al. (Ed.). *Proceedings of Joint Summer Research Conference on Quantum Graphs and Their Applications*. Utah: AMS Contemporary Mathematics, 2006. p. 35–40.
- [35] MOHR, P. J.; TAYLOR, B. N. Codata recommended values of the fundamental physical constants. *Rev. Mod. Phys.*, v. 77, n. 1, p. 107, 2005.
- [36] GUTZWILLER, M. C. *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*. New York: Springer, 1990.
- [37] HAAKE, F. *Quantum signatures of chaos*. Berlin: Springer, 2001.
- [38] HECKLER, M. *Propriedades de Transporte em Nanocavidades*. Dissertação (Mestrado) — UFRGS, 2007.
- [39] PAULING, L. The diamagnetic anisotropy of aromatic molecules. *The Journal of Chemical Physics*, v. 4, n. 10, p. 673–677, 1936.
- [40] COULSON, C. A. Note on the applicability of the free-electron network model to metals. *Proc. Royal Soc. London A*, v. 67, p. 608 ff, 1954.
- [41] RICHARDSON, M. J.; BALAZS, N. L. On the network model of molecules and solids. *Annals of Physics*, n. 73, p. 308 ff, 1972.
- [42] ALEXANDER, S. Superconductivity of networks. a percolation approach to the effects of disorder. *Phys. Rev. B*, v. 27, n. 3, p. 1541–1557, 1983.
- [43] FLESIA, C.; JOHNSTON, R.; KUNZ, H. Strong localization of classical waves: a numerical study. *Europhysics Letters*, n. 3, p. 497 ff, 1987.
- [44] MITRA, R.; LEE, S. W. *Analytical Techniques in the Theory of Guided Waves*. New York: Macmillan, 1971.
- [45] HUL, O. et al. Experimental simulation of quantum graphs by microwave networks. *Phys. Rev. E*, v. 69, n. 5, p. 056205, 2004.
- [46] RUEDENBERG, K.; SCHERR, C. W. Free-electron network model for conjugated systems i - theory. *The Journal of Chemical Physics*, v. 21, n. 9, p. 1565–1581, 1953.
- [47] TEXIER, C.; MONTAMBAUX, G. Scattering theory on graphs. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 34, n. 47, p. 10307–10326, 2001.
- [48] BARRA, F.; GASPARD, P. Classical dynamics on graphs. *Phys. Rev. E*, v. 63, n. 6, p. 066215, 2001.
- [49] BERKOLAIKO, G.; KEATING, J. P.; WINN, B. No quantum ergodicity for star graphs. *Commun. Math. Phys.*, n. 250, p. 259, 2004.
- [50] ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. New York: Dover, 1972.
- [51] DABAGHIAN, Y.; JENSEN, R. V.; BLÜMEL, R. Exact trace formulas for a class of one-dimensional ray-splitting systems. *Phys. Rev. E*, v. 63, n. 6, p. 066201, 2001.

- [52] COUCHMAN, L.; OTT, E.; ANTONSEN, T. M. Quantum chaos in systems with ray splitting. *Phys. Rev. A*, v. 46, n. 10, p. 6193–6210, 1992.
- [53] TANNER, G. Unitary-stochastic matrix ensembles and spectral statistics. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 34, n. 41, p. 8485–8500, 2001.
- [54] FISHER, D. S.; LEE, P. A. A relation between conductivity and transmission matrix. *Phys. Rev. B*, v. 23, n. 12, p. 6851–6854, 1981.
- [55] SMITH, F. T. Lifetime matrix in collision theory. *Phys. Rev.*, v. 118, n. 1, p. 349–356, 1960.