

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE PONTA GROSSA
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIAS
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO – FÍSICA**

NATALY BARBOSA DE CASTILHO

ANÁLISE DE RESSONÂNCIAS EM GRAFOS QUÂNTICOS

PONTA GROSSA

2025

NATALY BARBOSA DE CASTILHO

ANÁLISE DE RESSONÂNCIAS EM GRAFOS QUÂNTICOS

Dissertação apresentada para obtenção do título de mestre em Física pelo Programa de Pós-Graduação em Ciências, área de Concentração em Física, da Universidade Estadual de Ponta Grossa.

Orientador: Prof. Dr. Fabiano Manoel de Andrade

PONTA GROSSA

2025

C352 Castilho, Nataly Barbosa de
 Análise de ressonâncias em grafos quânticos / Nataly Barbosa de Castilho.
Ponta Grossa, 2025.
59 f.

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

Orientador: Prof. Dr. Fabiano Manoel de Andrade.

1. Ressonâncias - grafos quânticos. 2. Fluxo de polos. 3. Matriz de
espalhamento. 4. Resolvente de ressonâncias. 5. Função de green. I. Andrade,
Fabiano Manoel de. II. Universidade Estadual de Ponta Grossa. Física. III.T.

CDD: 530

TERMO DE APROVAÇÃO

NATALY BARBOSA DE CASTILHO

ANÁLISE DE RESSONÂNCIAS EM GRAFOS QUÂNTICOS

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

Documento assinado digitalmente
 **FABIANO MANOEL DE ANDRADE**
Data: 30/04/2025 07:56:34-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Orientador- _____

Dr. Fabiano Manoel de Andrade – UEPG –

Titular/Presidente

Documento assinado digitalmente
 **DIONISIO BAZEIA FILHO**
Data: 30/04/2025 09:34:37-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Dr. Dionísio Bazeia Filho – UFPB – Titular

Documento assinado digitalmente
 **GABRIEL DE MORAIS COUTINHO**
Data: 03/05/2025 01:42:53-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Dr. Gabriel de Moraes Coutinho – UFMG – Titular

Ponta Grossa, 29 de abril de 2025.

AGRADECIMENTOS

Durante toda minha trajetória acadêmica e em especial no mestrado, contei com muito apoio. Assim, deixo meu agradecimento a todos que de alguma forma contribuíram nessa jornada.

De forma especial, agradeço ao Prof. Dr. Fabiano Manoel de Andrade por toda orientação, paciência e acolhida no grupo de Física Quântica e Informação Quântica (FQIQ).

Ao grupo FQIQ por todas as sugestões e partilhas de conhecimento, em especial ao Alison A. da Silva por toda colaboração durante a pesquisa.

A toda minha família pela compreensão e apoio, em especial a minha mãe Márcia, a minha avó Neuza, meu tio Marcelo, as minhas irmãs Danila, por aceitar ler minha dissertação, Ana Clara e Angelita por todas as discussões mesmo não sendo da área. Agradeço também ao Djmes e ao Augusto.

A todos os meus amigos e colegas pelo incentivo, motivação e por me ouvirem e sempre se preocuparem comigo.

A todos os professores que fizeram parte dessa trajetória e me auxiliaram de alguma forma. Agradeço ainda, a CAPES pelo fomento.

“A meditação humana não tem limite. Com riscos e perigos, analisa e esquadrinha seu próprio deslumbramento. Quase poderíamos dizer que, por uma espécie de esplêndida reação, ela deslumbra também a natureza; o misterioso mundo que nos cerca devolve o que recebe, é provável que os contempladores sejam contemplados. ”
(Victor Hugo)

RESUMO

Desde o surgimento da Teoria de Grafos atribuído a Euler no século XVIII, a solução de problemas modelados por grafos têm motivado muitas pesquisas em diversas áreas. Na física quântica, dentre as várias possibilidades destacam-se os estados grafos e os grafos quânticos. Nestes últimos, o estudo do espalhamento tem chamado atenção tanto do ponto de vista teórico quanto experimental. Com o estudo do espalhamento em grafos podemos observar como uma partícula interage com um potencial, ou uma barreira, a qual pode ser interpretada nesse contexto, como os vértices do grafo, dotados de suas condições de contorno. Dessa forma, podemos verificar o surgimento de ressonâncias. Para obtê-las é necessário realizar o cálculo da condição de ressonância, por meio dos quais encontramos os polos presentes no grafo; para tanto existem alguns métodos que podem ser utilizados, como a matriz de espalhamento, o resolvente das ressonâncias e a função de Green. Por meio dessas metodologias encontramos os polos do grafo, os quais podem ser classificados como ressonâncias de acordo com sua posição no plano complexo. Neste trabalho, fazemos uma breve revisão acerca dessas formas de cálculo, bem como mostramos sua equivalência, além de analisarmos o comportamento da probabilidade da amplitude de transmissão e dos polos de determinados grafos mediante a variação de certos parâmetros.

Palavras-chave: Grafos quânticos. Matriz de espalhamento. Resolvente. Função de Green. Ressonâncias. Ressonâncias em grafos quânticos. Fluxo de polos.

ABSTRACT

Since the emergence of graph theory, attributed to Euler in the 18th century, solving problems modeled by graphs has motivated researchers across various fields. In quantum physics, two notable applications are graph states and quantum graphs. The latter has attracted attention due to its role in scattering studies from both theoretical and experimental perspectives. By studying scattering on graphs, we can observe how a particle interacts with a potential or a barrier, which can be interpreted, in this context, as the vertices of the graph equipped with specific boundary conditions. This analysis allows us to identify the emergence of resonances. To determine them, it is necessary to compute the resonance condition. Several methods can be employed for this purpose, such as the scattering matrix, the resolvent, and the Green's function. These methodologies enable the identification of the poles of the graph, which can be classified as resonances based on their positions in the complex plane. In this work, we provide a brief review of these methods and show their equivalence. Furthermore, we analyze the behavior of the transmission amplitude probability and the poles of certain graphs as some parameters are varied.

Keywords: Quantum graphs. Scattering matrix. Resolvent. Green's Function. Resonances. Flow of Poles.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Exemplos de Grafos	12
Figura 2	Grafo ciclo C_3 com três <i>leads</i>	23
Figura 3	Grafo ciclo C_2	25
Figura 4	Grafo caminho P_2 com uma <i>lead</i>	30
Figura 5	Famílias de caminho p_{ij} presentes no grafo S_2	33
Figura 6	Grafo ciclo C_2 com um vértice adicionado	35
Figura 7	Classificação de Polos	42
Figura 8	Amplitude de transmissão do grafo C_2	43
Figura 9	Fluxo de polos no grafo C_2 com α variável	44
Figura 10	Fluxo de polos no grafo C_2 ao variar o comprimento das arestas	45
Figura 11	Amplitude de transmissão $ T(k) ^2$ para o grafo S_2	46
Figura 12	Fluxo de polos no grafo S_2	47
Figura 13	Fluxo de polos no grafo S_2 para diferentes γ	48
Figura 14	Fluxo de polos no grafo S_2 para diferentes α	49
Figura 15	Circuito formado por grafos em série	49
Figura 16	Composição do grafo C_2 em série	50
Figura 17	Composição em série do grafo C_3 para diferentes comprimentos de l	51
Figura 18	Composição em série do grafo C_3 para diferentes valores de α	52

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	9
1.1	ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO	11
2	GRAFOS	12
2.1	CLASSIFICAÇÃO DE GRAFOS	14
2.2	GRAFOS QUÂNTICOS.	15
2.3	ESPECTRO DE GRAFOS QUÂNTICOS	18
3	RESSONÂNCIAS EM GRAFOS QUÂNTICOS	20
3.1	MATRIZ DE ESPALHAMENTO	20
3.2	RESOLVENTE	26
3.3	FUNÇÃO DE GREEN	31
4	EQUIVALÊNCIA DOS MÉTODOS DE CÁLCULO DOS POLOS DE UM GRAFO QUÂNTICO	38
5	FLUXO DE POLOS	42
5.1	GRAFO CICLO	43
5.2	GRAFO ESTRELA	45
5.3	CIRCUITO EM SÉRIE COMPOSTO POR GRAFO CICLO	47
6	CONCLUSÕES	54
	REFERÊNCIAS	56

1 INTRODUÇÃO

A origem dos grafos remonta ao final do século XVIII com Euler e o famoso "Problema das Sete Pontes"(1), o qual se refere à então cidade Königsberg, onde havia sete pontes ligando quatro partes da localidade, hoje chamada de Kaliningrado e pertencente à Rússia.

O problema consistia em delinear uma trajetória para atravessar todas as sete pontes sem que nenhuma fosse repetida e visitar todas as porções de terra. Numa tentativa de solucionar o problema, Euler representou cada ponte possível em uma linha e as porções de terra como pontos, criando assim, um grafo. Todavia, ele provou, por meio do grafo utilizado para modelar o problema, que tal feito seria impossível.

Em 1847, Kirchhoff modelou circuitos elétricos por meio de grafos, dando origem aos chamados grafos tipo árvore, os quais utilizou para caracterizar conjuntos de ciclos independentes (2). Já em 1857, o pesquisador Cayley (3) também adotou tal modelagem para representar isômeros na Química, ou seja, substâncias com a mesma fórmula molecular (mesma quantidade e tipo de átomos) mas com disposição de átomos diferentes.

Apesar do início da teoria ser atribuída a Euler, o termo grafo passou a ser utilizado em 1878 por Sylvester (3). E somente em 1936, ocorreu a publicação do primeiro livro sobre a teoria de grafos, realizada por Köning.

O uso de grafos na representação de circuitos, mapas e redes se tornou comum, e com o avanço da tecnologia passaram a integrar a rotina de muitas empresas, principalmente com o intuito de fornecer uma solução mais rápida para problemas relacionados a computadores e redes de internet. Além disso, também são utilizados nas redes neurais por meio da inteligência artificial (4).

A aplicação de grafos na teoria quântica remonta à década de 1930 com a proposta de Pauling (5) para o uso de cadeias de hexágonos retilíneos para descrever moléculas de hidrocarbonetos e o fluxo de elétrons entre átomos adjacentes a ele. O que influenciou Griffith (6), em 1952, a introduzir a equação de Schrödinger para a partícula livre em uma dimensão para obter a densidade eletrônica ao longo das moléculas de naftaleno.

Na Física quântica, podemos destacar a representação de Q-bits como vértices de um grafo e as arestas que os conectam a correlação entre eles, os quais são conhecidos por estados grafos (7, 8) que proporcionam o estudo de emaranhamento e têm aplicações em computação quântica. Podemos destacar ainda, as redes neurais quânticas relacionadas a *machine learning*, que assim como a rede neural clássica, modelam a propagação de informação, entre outros (9).

Podemos ainda considerar os chamados grafos quânticos, os quais surgiram como modelos de elétrons livres em moléculas orgânicas. As moléculas eram visualizadas como um conjunto de átomos em posições fixas, conectados por caminhos ao longo dos quais os elétrons obedeciam à equação de Schrödinger (10).

Com relação aos grafos quânticos (11, 12) que serão abordados neste trabalho, bem como o estudo do espalhamento em grafos quânticos, ganharam muita visibilidade nas últimas décadas

com trabalhos de perspectiva matemática (13, 14, 15) e de viés físico (16, 17, 18, 19, 20), incluindo pesquisas na parte experimental (21, 22, 23).

Podemos definir os grafos quânticos como objetos unidimensionais singulares, ou seja, pensamos nas arestas como intervalos, sobre os quais ondas podem se propagar, seguindo certas condições (15). Por esse motivo, é interessante observar o espalhamento nesses grafos, isto é, estudar como uma partícula interage com um potencial, ou uma barreira, por exemplo. Nesse contexto, essa barreira pode ser interpretada como os vértices do grafo, munido de sua condição de contorno. Em outras palavras, podemos imaginar uma onda plana incidente, se movendo a uma determinada direção e encontrando um potencial de espalhamento (24), ou seja, procuramos a solução da Eq. de Schrödinger, no formato descrito na seção 2.2, definida em cada aresta do grafo, com as devidas condições de contorno nos vértices.

Para ilustrar uma aplicação, podemos citar o transporte quântico decorrente da comutação filamentar em regiões estreitas, onde a aproximação contínua do contato deixa de ser válida e apenas alguns átomos participam efetivamente do processo. Nesse contexto, os grafos quânticos permitem calcular a amplitude de espalhamento dos portadores de carga e analisar a interação entre a formação dos filamentos e os efeitos do transporte quântico (25).

Outra aplicação para os problemas de espalhamento em grafos quânticos é a modelagem de metamateriais (materiais artificialmente estruturados para apresentar propriedades que não ocorrem naturalmente) acústicos (26), os quais podem reduzir os problemas de ondas escalares a problemas de propagação unidimensional com acoplamento, proporcionando *insights* sobre as propriedades dispersivas de metamateriais. Por meio da verificação experimental, constataram que ao ampliar o modelo para incluir um sistema aberto, conectando a estrutura a uma metassuperfície acústica de cavidades ressonantes acopladas é possível obter refração negativa em uma interface sem a necessidade explícita de um índice negativo ou comportamento ressonante.

Por meio do estudo do espalhamento em grafos, podemos ainda analisar os polos de um grafo, os quais podem ser classificados como ressonâncias, antirressonâncias, estados ligados e estados antiligados, de acordo com sua representação gráfica (27). Podemos definir os estados ligados como estados estacionários com tempo de vida infinito (28), ou seja, estados que ficam confinados no grafo.

Pensamos nas ressonâncias de espalhamento como números complexos associados a estados ressonantes. Quando esses estados são propagados pela função de onda, sua parte real determina a velocidade da oscilação, já sua parte imaginária, fornece a taxa com que a onda escapa (tempo de vida). Mais genericamente, podemos vê-las como os autovalores de um operador não autoadjunto (15), ao contrário dos estados ligados.

Como de modo geral, os grafos quânticos são equipados com um operador diferencial autoadjunto (29), uma alternativa para o cálculo das ressonâncias é o uso da *external complex scaling* (30, 31, 32, 33, 34, 35, 36), definida na seção 3.2, a qual é responsável por transformar esse operador a um equivalente e não autoadjunto.

Lembramos que, um operador $\mathcal{A}$ com domínio $\mathfrak{D}(\mathcal{A})$, atuando em um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ complexo é dito hermitiano quando $\langle \varphi, \mathcal{A}\phi \rangle = \langle \mathcal{A}\varphi, \phi \rangle, \forall \varphi, \phi \in \mathfrak{D}(\mathcal{A})$. Esse operador $\mathcal{A}$ será

autoadjunto se $\mathcal{A} = \mathcal{A}^\dagger$ (37).

Assim, a análise dos polos e um grafo quântico é possível após o cálculo da condição de ressonância, a qual varia de acordo com o grafo. Existem alguns métodos que podem ser utilizados a fim de calcular tal condição como a matriz de espalhamento, o resolvente das ressonâncias e a função de Green. Dessa forma, buscamos apresentar uma breve explicação de cada um dos métodos mencionados por meio de uma revisão de literatura, demonstrar sua equivalência e analisar o comportamento dos polos, ou seja, o fluxo de polos ao variarmos determinados parâmetros em grafo ciclo C_2 , grafo estrela modificado S_2 e na composição em série de grafos ciclos C_2 e C_3 . Bem como, fornecer uma breve análise a respeito da probabilidade da amplitude de transmissão em comparação com os polos presentes em cada grafo estudado. Sendo (17, 38, 39, 40) aplicações do estudo de ressonâncias e da amplitude de transmissão associada a cada grafo, a motivação que proporcionou este trabalho.

1.1 ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO

Esta dissertação é organizada da seguinte maneira. No Capítulo 2 apresentamos a definição e a classificação dos grafos, assim como os elementos que os constituem, suas formas de representação gráfica e as matrizes que podem especificá-los. Introduzimos ainda os conceitos de grafos métricos e quânticos, além das condições de contorno relevantes nos cálculos associados aos grafos quânticos e seu espectro.

No Capítulo 3, desenvolvemos as construções, por meio de uma revisão de literatura, da matriz de espalhamento, do resolvente e da função de Green, os principais métodos de cálculo de polos, complementados por uma breve contextualização e alguns exemplos. Essa abordagem nos permite aplicar os conceitos previamente discutidos no capítulo anterior.

Já no Capítulo 4, demonstramos de maneira objetiva e diferente da presente na literatura, a equivalência entre os diferentes métodos aplicados ao cálculo dos polos. Essa análise permite evidenciar que, embora distintas na abordagem, somos conduzidos a resultados semelhantes, fornecendo uma gama de escolha para a realização dos cálculos em questão.

No Capítulo 5, apresentamos os resultados obtidos ao longo da pesquisa, com foco na análise do fluxo de polos em grafos quânticos. Destacamos os principais parâmetros utilizados, bem como aqueles que exercem maior influência sobre o comportamento dos sistemas estudados.

Finalmente, no Capítulo 6 trazemos nossas conclusões acerca do trabalho realizado, bem como algumas perspectivas de estudo que julgamos interessantes.

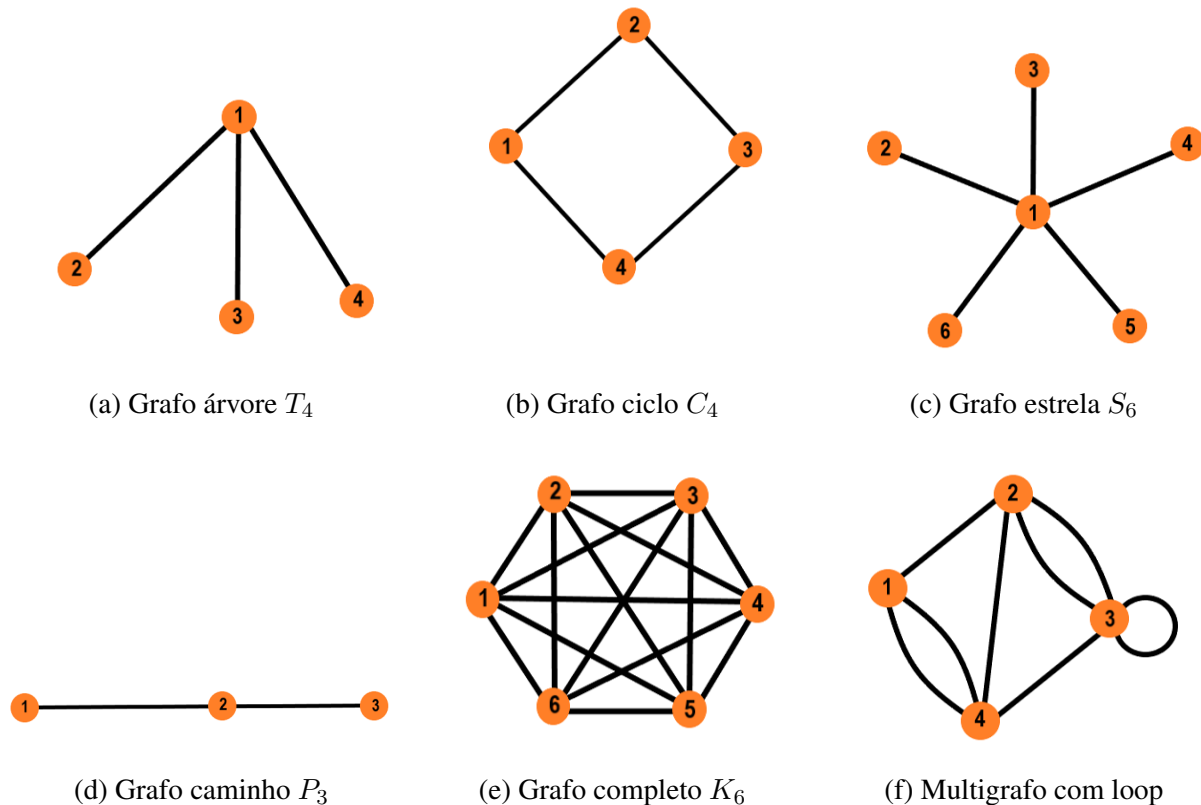
2 GRAFOS

Um grafo $G = G(V, E)$ é um par ordenado de conjuntos disjuntos V e E tal que, V é o conjunto dos vértices, os quais costumam ser representados por pontos, e $E = E(G)$ é o conjunto das arestas, um subconjunto de pares de elementos de V . Diz-se que uma aresta $\{a, b\}$ une os vértices a e b . Dois vértices a e b são adjacentes se apresentarem uma aresta em comum e denotamos $a \sim b$ (41, 42, 43). O conceito de adjacência também pode ser estendido para duas arestas u e v que apresentam um vértice em comum e denotamos por $u \sim v$.

Um grafo pode ser classificado quanto à sua topologia, ou seja, a forma com que os vértices estão conectados, como grafos árvore, ciclo, estrela e caminho, por exemplo. Em cada caso, podemos observar o número de vértices e a quantidade de arestas presentes, em que o número de arestas conectadas a um dado vértice é denominado como o grau desse vértice.

Na Figura 1(a), observamos que o conjunto V é dado por $V = \{1, 2, 3, 4\}$ e o conjunto das arestas é dado por $E = \{\{1, 2\}, \{1, 3\}, \{1, 4\}\}$. Note que o vértice 1 possui três arestas incidentes, ou seja, o grau do vértice é 3, e denotamos por $d(1) = 3$. Já nos vértices 2, 3 e 4, há apenas uma aresta incidente, logo, $d(2) = d(3) = d(4) = 1$. Outras formas de especificar um grafo são por meio das seguintes matrizes:

Figura 1 – Exemplos de Grafos



Fonte: A autora.

i) a matriz de adjacência A , que pode ser definida como

$$A_{u,v} = \begin{cases} 1 & \text{se } u \sim v; u, v \in E \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}; \quad (2.1)$$

ii) pela matriz de grau, que pode ser denotada por D , tal que

$$D_{u,v} = d_v \delta_{u,v}, \quad (2.2)$$

onde d_v é o grau do vértice v e

$$\delta_{u,v} = \begin{cases} 1 & \text{se } u = v \\ 0 & \text{se } u \neq v, \end{cases} \quad (2.3)$$

iii) pela matriz Laplaciana L , em que

$$L_{u,v} = \begin{cases} d_u & \text{se } u = v \\ -1 & \text{se } u \sim v \\ 0 & \text{caso contrário;} \end{cases} \quad (2.4)$$

iv) e Laplaciana harmônica, como definido por (11, 12) Δ , a qual é dada por

$$\Delta = D^{-1}L. \quad (2.5)$$

No caso do grafo ciclo da Figura 1(b), temos que a matriz de adjacência é

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

e a matriz de grau é dada por

$$D = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix},$$

enquanto a Laplaciana e a Laplaciana harmônica são dadas respectivamente por

$$L = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix},$$

$$\Delta = \begin{pmatrix} 1 & -1/2 & 0 & -1/2 \\ -1/2 & 1 & -1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 & 1 & -1/2 \\ -1/2 & 0 & -1/2 & 1 \end{pmatrix}.$$

2.1 CLASSIFICAÇÃO DE GRAFOS

Ao nos referirmos a grafos, falamos de estruturas simples, mas que têm a capacidade de modelar sistemas sofisticados, simplificando o problema original por meio de sua álgebra. Isso nos leva à análise de sua ampla representação topológica, permitindo sua classificação com base em suas características, conforme (41, 43, 42). Assim, um grafo é dito completo se todos os seus pares de vértices são adjacentes, ou seja, para todo $u, v \in V$, $u \neq v$, tem-se que u e v pertencem à mesma aresta; se o grafo apresentar n vértices o denotamos por K_n , como o representado na Figura 1 (e).

Dentre os casos especiais de grafos, se destacam aqueles nos quais ao menos um par de vértices u, v estão conectados por mais de uma aresta, os quais são chamados de multigrafos. Temos ainda aqueles que possuem um vértice v com uma aresta conectada nele mesmo, formando um *loop*, como presente na Figura 1 (f). Já os conhecidos como grafos simples não apresentam multiarestas, ou *loops*. Nesse trabalho consideraremos apenas os grafos simples, ou seja, aqueles que não apresentam multiarestas ou laços (*loops*).

Ao aprofundarmos um pouco mais, a teoria de grafos traz conceitos como os de subgrafos. Dizemos que um grafo G' é um subgrafo de G se $V(G') \subseteq V(G)$ e $E(G') \subseteq E(G)$. Um subgrafo G' de G é um subgrafo induzido se dois vértices de $V(G')$ são adjacentes em G' se, e somente se, eles são adjacentes em G .

Alguns grafos merecem destaque, pois serão abordados ao longo deste trabalho, como os grafos caminho. Um caminho é um grafo não-vazio $P(V, E)$ tal que $V = \{v_1, \dots, v_n\}$ e $E = \{e_1, \dots, e_k\}$, onde os vértices v_{j-1} e v_j são conectados por uma aresta, um grafo com n vértices é denotado por P_n , um exemplo é dado na Figura 1(d).

Outro tipo de grafo são os chamados ciclos, em que cada vértice presente está conectado a duas arestas, ou seja, o grau de cada vértice v_i é $d(v_i) = 2$, denotamos um grafo ciclo com n arestas por C_n . Já no caso de grafos acíclicos e conexos, isto é, aqueles que não possuem ciclos, e a cada dois vértices u, v há uma sequência de arestas que os conecta, são conhecidos por árvore e denotados por T_n , como podemos observar na Figura 1(a).

Além desses, temos que dado um inteiro $r \geq 2$, um grafo $G(V, E)$ é chamado r -partido se V admite uma partição em r classes tal que para vértices na mesma classe não devem ser adjacentes. Com efeito, dizemos que uma partição é um subconjunto finito de pontos $\mathcal{P} = \{t_0 < t_1 < \dots < t_{m-1} < t_m\} \subset [a, b]$ tal que $a, b \in \mathcal{P}$ (44). Finalmente, denominamos um grafo com n vértices bipartido, com um vértice no centro e $d(v_1) = n - 1$ por estrela e denotamos por S_n ; um exemplo é visto na Figura 1 (c).

2.2 GRAFOS QUÂNTICOS

Um grafo métrico $\Gamma(V, E)$ é constituído por um conjunto de vértices V , tal que $V = \{1, 2, \dots, n\}$, um conjunto de arestas $E = \{e_1, \dots, e_j, \dots, e_m\}$, com comprimento positivo l_{e_j} , uma métrica $x_{e_j} \in [0, l_{e_j}]$ definida ao longo de cada aresta conectando dois vértices associados a uma coordenada x_{e_j} , e N arestas com comprimento $l_{e_j} = +\infty$, as quais são chamadas de *leads*: arestas semi-infinitas. Para uma melhor compreensão do texto podemos definir uma métrica como (45), dado um conjunto $\mathcal{Y}$, uma métrica em $\mathcal{Y}$ é qualquer função $\mathcal{D} : \mathcal{Y} \times \mathcal{Y} \rightarrow \mathbb{R}$ que satisfaça as seguintes propriedades:

- i) $(x, y) \geq 0$, para todo $x, y \in \mathcal{Y}$;
- ii) $(x, y) = (y, x)$ para todo $x, y \in \mathcal{Y}$;
- iii) $(x, y) \leq (x, z) + (z, y)$ para todo $x, y, z \in \mathcal{Y}$.

O que significa dizer que a métrica limita a posição dos vértices ligados por uma mesma aresta. Em outras palavras, podemos dizer que se a sequência de arestas presentes no grafo formam um caminho, então, para dois vértices u e v , a distância entre eles é definida como o caminho de comprimento mínimo entre u e v (46). O que permite definir um operador diferencial em cada aresta presente no grafo por exemplo.

Dessa forma, podemos definir um grafo quântico como um grafo métrico no qual é definido o operador de Schrödinger H definido ao longo de cada aresta como descrito em (16, 19, 29), tal que $H = -d^2/dx^2 + V$, onde V é o potencial elétrico, e as condições de contorno apropriadas nos vértices. Assim, a equação de autovalor para o operador de Schrödinger é fornecida por

$$-\frac{d^2\psi_j}{dx^2} + V\psi_j = \lambda\psi_j. \quad (2.6)$$

Considerando-se $V = 0$, a Eq. (2.6) é reescrita como

$$-\frac{d^2\psi_j}{dx^2} = \lambda\psi_j, \quad (2.7)$$

sendo ψ_j as funções de onda de uma partícula e λ os autovalores para H . Para o caso das ondas planas, λ coincide com k^2 , isto é, $\lambda = k^2$. Nesse caso, k é chamado de número de onda e é dado por $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, em que E é a energia da partícula no grafo, m sua massa e $\hbar$ a constante de Planck reduzida.

A solução da equação diferencial (2.7) é dada por

$$\psi_j(x) = a_{i,j}e^{ikx} + b_{i,j}z_{i,j}e^{-ikx}, \quad (2.8)$$

onde $z_{i,j} = e^{ikl_{e_j}}$.

As condições de contorno são necessárias para tornar o operador de Schrödinger autoadjunto, sendo necessário e suficiente que AB seja autoadjunto em cada vértice (47). Isso garante que

haja a conservação de probabilidade e que o problema de autovalores para H seja bem definido, "conectando" as soluções (2.8) presentes em cada aresta de Γ e, dessa forma manter as funções de onda ψ_j no domínio desse operador. Essas condições Ω podem ser escritas de forma geral (11) como

$$A_v \Psi(v) + B_v \Psi'(v) = 0, \quad (2.9)$$

onde A e B são matrizes $d_v \times d_v$, em que o grau do vértice v é $d = d_v$ e

$$\Psi(v) = (\psi_1(v), \dots, \psi_n(v))^t, \quad (2.10)$$

$$\Psi'(v) = (\psi'_1(v), \dots, \psi'_n(v))^t, \quad (2.11)$$

representam as funções de onda presentes no grafo e suas derivadas ao longo de cada aresta, respectivamente. A e B podem ser definidas de acordo com (30), como $A = U - \mathbb{I}$ e $B = i(U + \mathbb{I})$, sendo $\mathbb{I}$ a matriz identidade e U uma matriz unitária $d_v \times d_v$. Dessa forma, reescrevemos (2.9) como

$$(U_v - \mathbb{I})\psi(v) + i(U_v + \mathbb{I})\psi'(v) = 0 \quad (2.12)$$

em que

$$U_v = -(A + ikB)^{-1}(A - ikB), \quad (2.13)$$

de modo que a matriz (A, B) de dimensão $d_{v_j} \times 2d_{v_j}$ possua posto máximo d_{v_j} e $AB^* = BA^*$ para que seja possível determinar as soluções admissíveis no vértice, garantindo assim que AB seja autoadjunta. Como sugerido por (11, 30, 46, 47), podemos considerar um caso particular em que para cada vértice v de grau d_v , existem três projetores ortogonais Q_1, Q_2 e Q_3 , onde Q_1 e Q_2 são projetores do núcleo $\ker(U + \mathbb{I})$ e $\ker(U - \mathbb{I})$, respectivamente, e $Q_3 = \mathbb{I} - Q_2 - Q_1$. Assim, ao substituírmos esses projetores em (2.12) (48) podemos definir

$$\begin{cases} Q_1 \Psi(v) = 0 \text{ parte de Dirichlet;} \\ Q_2 \Psi'(v) = 0 \text{ parte de Neumann - Kirchhoff;} \\ Q_3 \Psi'(v) = \Lambda Q_3 \Psi(v) \text{ parte de Robin,} \end{cases} \quad (2.14)$$

onde Λ é um operador autoadjunto. Garantindo que $\psi(x)$ seja contínua em $v_j, j = 1, 2, \dots, n$, levamos a função de onda ser bem definida nos vértices v_j . Podemos então, escrever essas mesmas condições de uma forma diferente, dadas por

- Dirichlet

$$\psi_j(v_j) = 0; \quad (2.15)$$

- Standard (natural / Neumann - Kirchhoff)

$$\sum_{e \in E_j} \psi'_j(v_j) = 0, \quad (2.16)$$

a qual podemos interpretar como a conservação da corrente (de probabilidade) (11);

- Robin

$$\alpha_{v_j} \psi_j(v_j) = \psi'_j(v_j) \quad (2.17)$$

em que α é um parâmetro real, podemos pensar nela como uma junção das condições Dirichlet e Neumann - Kirchhoff;

- do tipo - δ

$$\sum_{e \in E_j} \psi'_j(v_j) = \alpha_{v_j} \psi_{v_j}, \quad (2.18)$$

com $\alpha \in \mathbb{R}$. Quando $\alpha < 0$ temos δ atrativo e para $\alpha > 0$, δ é repulsivo.

Em outras palavras, para a Eq. (2.18) se $\alpha = 0$ temos a condição de contorno de Neumann, e para o limite de (2.18) quando $\alpha \rightarrow \infty$ temos a condição do tipo Dirichlet.

Ao considerarmos situações com espalhamento com as devidas condições de contorno em cada vértice do grafo, isto é, ao interpretarmos o grafo como um centro de espalhamento da função de onda de uma partícula, a qual pode ser transmitida para as arestas adjacentes a um vértice v_j , ou refletida para a aresta inicial, podemos associar uma matriz de espalhamento em termos de A e B , nos moldes da Eq. (2.13) como observado em (12).

Assumindo a condição de contorno δ para um vértice v_j de grau $d_{v_j} \geq 2$, podemos reescrever as matrizes A e B como

$$A_{m,n} = \left(1 - \delta_{m,d_{v_j}}\right) (\delta_{n,m} - \delta_{n,m+1}) - \alpha \delta_{m,d_{v_j}} \delta_{n,1}, \quad \alpha \in \mathbb{R} \quad (2.19)$$

$$B_{m,n} = \delta_{m,d_{v_j}}. \quad (2.20)$$

Substituindo (2.19) e (2.20) em (2.12) obtemos os coeficientes de reflexão r_j e transmissão t_j , os quais são fornecidos por

$$r_j = \frac{2\alpha - (d-2)ik}{dik - 2\alpha}; \quad t_j = \frac{2ik}{dik - 2\alpha}, \quad (2.21)$$

tal que d é o grau do vértice $j = 1, 2, \dots, n$ e α é a intensidade. Note que quando $\alpha = 0$ temos a condição Neumann - Kirchhoff

$$r_j = \frac{2}{d} - 1; \quad t_j = \frac{2}{d}. \quad (2.22)$$

Todavia, quando $d = 1$ escrevemos (2.21) como

$$r_j = \frac{2\alpha + ik}{ik - 2\alpha}, \quad (2.23)$$

definindo $\gamma = 2\alpha$ e substituindo em (2.23) o coeficiente de reflexão passa a ser escrito como

$$r_j = \frac{ik + \gamma}{ik - \gamma}, \quad (2.24)$$

o coeficiente r_j para a condição Robin. Outra forma de escrever (2.24) seria como uma exponencial complexa, semelhante à (49, 50), ou seja, se

$$\gamma = \rho \cos \theta \quad (2.25)$$

$$k = \rho \sin \theta, \quad (2.26)$$

onde $\rho = \sqrt{\gamma^2 + k^2}$ então,

$$r_j = \frac{i \sin \theta + \cos \theta}{-(-i \sin \theta + \cos \theta)}. \quad (2.27)$$

Logo, por meio da relação de Euler segue que

$$r_j = -\frac{e^{i\theta}}{e^{-i\theta}} = -e^{2i\theta}, \quad (2.28)$$

em que $\theta = \arccos\left(\frac{\gamma}{\sqrt{\gamma^2 + k^2}}\right)$.

Com efeito, nos casos em que $d_j = 1$, para Neumann - Kirchhoff temos $r_j = 1$ e considerando o limite de (2.23) quando $\alpha \rightarrow \infty$ segue que $r_j = -1$, o caso para Dirichlet.

2.3 ESPECTRO DE GRAFOS QUÂNTICOS

O espectro $\sigma(\mathcal{A}) \subset \mathbb{C}$ de um operador $\mathcal{A}$ em $\mathcal{H}$ consiste em todos os valores complexos $\lambda \in \mathbb{C}$ tais que $\mathcal{A} - \lambda \mathbb{I}$, em que $\mathbb{I}$ é a identidade, não possui inverso limitado (11, 19, 51), ou seja se $\ker(\mathcal{A} - \lambda \mathbb{I})$ é não trivial. Logo, podemos classificar o espectro de $\mathcal{A}$ como

- espectro pontual $\sigma_P(\mathcal{A})$: o conjunto de todos os autovalores de $\mathcal{A}$;
- espectro discreto $\sigma_D(\mathcal{A})$: o conjunto de todos os autovalores de $\mathcal{A}$ isolados e com multiplicidade finita;
- espectro essencial $\sigma_{\text{ess}}(\mathcal{A})$: o complemento do espectro discreto de $\mathcal{A}$, isto é $\sigma_{\text{ess}}(\mathcal{A}) := \sigma(\mathcal{A}) - \sigma_D(\mathcal{A})$.

Quando pensamos em grafos, o seu espectro pode ser definido como o conjunto de autovalores de alguma matriz que especifique esse grafo, como a matriz de adjacência A , ou a matriz Laplaciana L , dependendo da situação observada (52).

No contexto de grafos quânticos, o operador em questão seria o hamiltoniano H , ou equivalente, e assim, podemos interpretar os autovalores λ provenientes da Eq. (2.7) como o espectro pontual do operador $\sigma_P(H)$ (53).

Entretanto, esses autovalores são aqueles que são isolados e possuem multiplicidade finita, ou seja, fazem parte de $\sigma_D(\mathcal{A})$ e podem ser interpretados como os estados ligados existentes no grafo, o que nos levaria a obter apenas uma parte do espectro (11, 29).

Eventualmente, podemos encontrar algum λ que seja solução para Eq. (2.7) mas $\lambda \notin \mathcal{H}$ (o que ocorre com os polos de $(H - \lambda \mathbb{I})^{-1}$ que são ressonâncias, contrariando o fato de H ser um operador autoadjunto). Nesse caso, podemos recorrer a métodos como o descrito na seção 3.2 para contornar este problema e então sendo $\lambda = k^2$, a multiplicidade de k^2 no espectro coincide com a multiplicidade de k como raízes da equação secular, a qual é apresentada na seção 3 (16).

Para ilustrar a ideia de obter o espectro de um grafo quântico, vamos considerar um grafo laço, com um único vértice e a condição de contorno Neumann - Kirchhoff, Eq. (2.16). Então, adotando a solução de (2.7) na forma $\psi(x) = a \sin kx + b \cos kx$ segue que

$$\begin{cases} b = a \sin kl + b \cos kl \\ ak - ak \cos kl + bk \sin kl = 0 \end{cases} \quad (2.29)$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \sin kl & \cos kl - 1 \\ k - k \cos kl & k \sin kl \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0. \quad (2.30)$$

Calculando o determinante de (2.30) temos

$$-2k(-1 + \cos kl) \quad (2.31)$$

e para (2.31) igual a zero, as raízes $k = \frac{2n\pi}{l}, l \neq 0, n \in \mathbb{Z}$ fornecem os autovalores no espectro desse grafo.

Ao utilizarmos a função de Green (Seção 3.3), consideramos uma situação análoga ao caso do ciclo C_2 (Figura 6). Logo, obtemos

$$\begin{cases} p_{12} = e^{ikl_{12}}(r_2 p_{21} + t_2 p_{23}) \\ p_{13} = e^{ikl_{13}}(r_3 p_{31} + t_3 p_{23}) \\ p_{21} = e^{ikl_{12}}(r_1 p_{12} + t_1 p_{13} + t_1) \\ p_{23} = e^{ikl_{23}}(r_3 p_{32} + t_3 p_{31}) \\ p_{31} = e^{ikl_{13}}(r_1 p_{13} + t_1 p_{12} + t_1) \\ p_{32} = e^{ikl_{23}}(r_2 p_{23} + t_2 p_{21}), \end{cases} \quad (2.32)$$

como consideramos a condição de contorno Neumann - Kirchhoff (2.22), $r_2 = r_3 = 0, t_2 = t_3 = 1, r_1 = -\frac{1}{3}$ e $t_1 = \frac{2}{3}$, segue que

$$\begin{cases} p_{12} = e^{ikl_{12}} p_{23} \\ p_{13} = e^{ikl_{13}} p_{32} \\ p_{21} = e^{ikl_{12}} \left(-\frac{1}{3} p_{12} + \frac{2}{3} p_{13} + \frac{2}{3}\right) \\ p_{23} = e^{ikl_{23}} p_{31} \\ p_{31} = e^{ikl_{13}} \left(-\frac{1}{3} p_{13} + \frac{2}{3} p_{12} + \frac{2}{3}\right) \\ p_{32} = e^{ikl_{23}} p_{21}. \end{cases} \quad (2.33)$$

A expressão $t_1(p_{12} + p_{13})$ nos fornece a amplitude T e quando o denominador de T é igual a zero, obtemos $k = \frac{2n\pi}{l}, l \neq 0, n \in \mathbb{Z}$, coincidindo com o resultado anterior.

3 RESSONÂNCIAS EM GRAFOS QUÂNTICOS

No início do século XX, Gamow propôs uma explicação para o decaimento α , isto é, uma análise do decaimento radioativo proveniente de um núcleo atômico instável que ao emitir uma partícula α (partícula com alta energia e carga elétrica positiva) sofre a alteração da sua massa e da sua carga, a partir da equação de Schrödinger estacionária com autovalores complexos (54). Os resultados obtidos por ele, podem ser interpretados como funções de onda; em outras palavras, a representação na posição de certos vetores de estado generalizados, os quais, atualmente são conhecidos por vetores de Gamow e correspondem aos polos da matriz - S, conforme (27).

Os polos obtidos via matriz de espalhamento (matriz - S), resolvente, ou função de Green, oferecem uma descrição de estados ligados e decaimentos, entre outros aspectos, como apontado em (27). Aqueles polos cujas partes reais são diferentes de zero são chamados de ressonâncias ou estados ressonantes. As ressonâncias estão localizadas no quarto quadrante do plano complexo, enquanto seus pares simétricos se encontram no terceiro quadrante e são denominadas antirressonâncias.

As ressonâncias podem ser definidas como ressonâncias de espalhamento e ressonâncias do resolvente conforme definido em (19). As primeiras são os polos da matriz de espalhamento, ou, da função de Green, enquanto as outras são os polos da continuação meromórfica do resolvente, em outros termos, uma extensão do domínio do resolvente de forma que ele seja meromorfo. A fim de facilitar a compreensão desta última afirmação, lembramos que uma função f é dita meromorfa num domínio $\mathcal{X}$, se ela apresenta um subconjunto $\mathcal{X}'$ de polos discretos (pontos isolados) e é holomorfa em $\mathcal{X} - \mathcal{X}'$, ou seja, funções diferenciáveis complexamente (55).

Neste capítulo mostraremos como obter cada uma dessas ressonâncias, que apesar de serem calculadas por diferentes métodos, são equivalentes (13, 56, 57).

3.1 MATRIZ DE ESPALHAMENTO

Um dos métodos mais utilizados para o cálculo de polos de grafos quânticos é a matriz de espalhamento $S = S(k)$, uma matriz $N \times N$ unitária para valores reais de k mas, para energias complexas, seus elementos podem apresentar polos.

A partir dessa ideia, podemos defini-la como o operador que mapeia o vetor das amplitudes das ondas incidentes no vetor das amplitudes das ondas espalhadas. Essas ondas podem ser parametrizadas por e^{-ikl} e e^{ikl} , respectivamente. O que significa, pensar no grafo como centro de espalhamento e as *leads* como os canais de entrada e saída das funções de onda.

Ao considerarmos c_j as amplitudes das ondas incidentes e d_j as amplitudes das ondas espalhadas, podemos escrever as equações que as definem no formato da Eq. (2.8), as quais são conectadas nos vértices por meio das condições de contorno. Separando as amplitudes das soluções da equação de Schrödinger nas arestas, obtemos o seguinte sistema de equações

$A(k)c_j = B(k)d_j$. Partindo desse resultado podemos obter a matriz de espalhamento definida em (30) como $S(k) = d_j/c_j = B(k)^{-1}A(k)$.

De uma forma mais prática temos que, adotando a condição de contorno δ para um grafo geral, escrevemos as soluções da equação de Schrödinger para cada aresta como $\psi_j(x) = a_j \sin kx + b_j \cos kx$ e $f_j(x) = c_j e^{-ikx} + d_j e^{ikx}$ para cada *lead*. Assim, por meio de (2.18) obtemos o seguinte sistema de equações

$$\begin{cases} b_{j+1} = a_j \sin kl + b_j \cos kl = c_{j+1} + d_{j+1} \\ a_{j+1}k - a_j k \cos kl + b_j \sin kl + (d_{j+1} - c_{j+1})ik = \alpha(d_{j+1} + c_{j+1}) \\ b_j = a_{j+1} \sin kl + b_{j+1} \cos kl = c_j + d_j \\ a_j k - a_{j+1}k \cos kl + b_{j+1} \sin kl + (d_j - c_j)ik = \alpha(d_j + c_j), j = 1, 2, \dots, n. \end{cases} \quad (3.1)$$

Da primeira e da terceira equação do sistema em (3.1) observamos que

$$b_j = c_j + d_j, \quad (3.2)$$

podemos então substituir (3.2) em (3.1) e reescreve-lo como

$$\left(\begin{array}{cc|cc|cc} 0 & \sin kl & -1 & \cos kl & -1 & \cos kl \\ k & -k \cos kl & -ik - \alpha & k \sin kl & ik - \alpha & k \sin kl \\ \hline \sin kl & 0 & \cos kl & -1 & \cos kl & -1 \\ -k \cos kl & k & k \sin kl & -ik - \alpha & k \sin kl & ik - \alpha \end{array} \right) \begin{pmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{c} \\ \mathbf{d} \end{pmatrix} = 0, \quad (3.3)$$

onde

$$\mathbf{a} = (a_1, a_2, \dots, a_n)^T;$$

$$\mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_n)^T;$$

$$\mathbf{d} = (d_1, d_2, \dots, d_n)^T.$$

Para facilitar os cálculos escreveremos a Eq. (3.3) como

$$\left(\begin{array}{c|c|c} B & C & D \\ \hline E & F & J \end{array} \right) \begin{pmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{c} \\ \mathbf{d} \end{pmatrix} = 0. \quad (3.4)$$

Segundo (19), para que a solução exista é necessário que a matriz B seja invertível, portanto, realizamos a permutação das linhas da matriz se necessário. Logo,

$$B\mathbf{a} + C\mathbf{c} + D\mathbf{d} = 0 \quad (3.5)$$

$$E\mathbf{a} + F\mathbf{c} + J\mathbf{d} = 0. \quad (3.6)$$

Isolando $\mathbf{a}$ em (3.5) e substituindo em (3.6) temos que

$$\mathbf{a} = -B^{-1}C\mathbf{c} - B^{-1}D\mathbf{d} \quad (3.7)$$

$$\implies E(-B^{-1}C\mathbf{c} - B^{-1}D\mathbf{d}) + F\mathbf{c} + J\mathbf{d} = 0, \quad (3.8)$$

agora, isolando $\mathbf{d}$ em (3.8) ficamos com

$$\mathbf{d} = - (J - EB^{-1}D)^{-1} (F - EB^{-1}C) \mathbf{c}. \quad (3.9)$$

Portanto, como definido por Lipovsky e Exner (19, 30), a matriz de espalhamento $S = S(k)$ é dada por

$$S = - (J - EB^{-1}D)^{-1} (F - EB^{-1}C), \quad (3.10)$$

e a condição de ressonância (36) é dada por

$$\det(S) = 0. \quad (3.11)$$

Outros autores como Kottos, Smilansky e Berkolaiko (16, 18, 58) adotam uma construção diferente. A partir da solução da equação de Schrödinger $\psi_j(x) = a_j e^{ikx} + b_j e^{-ikx}$ e $f_j(x) = c_j e^{-ikx} + d_j e^{ikx}$, escrevemos

$$\begin{pmatrix} d_j \\ a_{j,m_1} \\ a_{j,m_2} \\ \vdots \\ a_{j,m_{v_j}} \end{pmatrix} = \Sigma^{(j)} \begin{pmatrix} c_j \\ b_{j,m_1} \\ b_{j,m_2} \\ \vdots \\ b_{j,m_{v_j}} \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

com

$$\Sigma^{(j)} = \begin{pmatrix} \rho^{(j)} & \tau_{m_1}^{(j)} & \cdots & \tau_{m_{v_j}}^{(j)} \\ \tau_{m_1}^{(j)} & \sigma_{m_1,m_1}^{(j)} & \cdots & \sigma_{m_1,m_{v_j}}^{(j)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \tau_{m_{v_j}}^{(j)} & \sigma_{m_{v_j},m_1}^{(j)} & \cdots & \sigma_{m_{v_j},m_{v_j}}^{(j)} \end{pmatrix}.$$

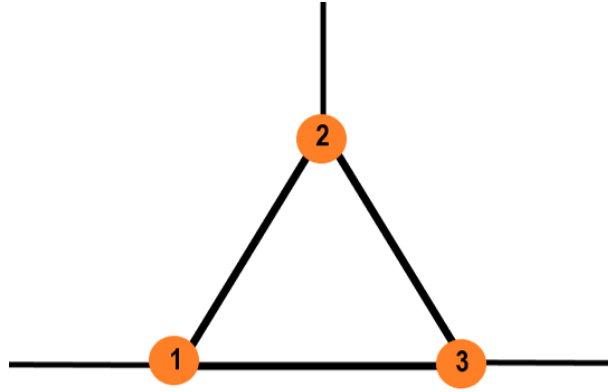
Quando, para um grafo qualquer, adotamos a condição de contorno Neumann - Kirchhoff (2.22) vemos que $\rho = \frac{2}{d} - 1$ é o coeficiente de reflexão no vértice $j = 1, \dots, n$, $\tau = \frac{2}{d}$ o coeficiente de transmissão entre *lead* e aresta interna, e $\sigma_{m,m'} = \frac{2}{d} - \delta_{m,m'}$ o coeficiente de transmissão entre duas arestas internas. Frequentemente, podemos encontrar a matriz Σ escrita da forma sugerida por Valdière e Truc (13) entre outros, como

$$S = \Sigma = \begin{pmatrix} R & T_o \\ T_i & U(e^{ikl})_2 \end{pmatrix}, \quad (3.13)$$

uma matriz quadrada de ordem $2n + N$, onde T_o, T_i representam a transmissão da onda *outgoing* e *incoming*, respectivamente. Temos ainda $U(e^{ikl}) = \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} e^{ikl_{jm}} \delta_{i,m} b_{m,j} b_{j,i} \sigma_{jm,ji}^j$.

Para auxiliar na compreensão do que foi mencionado acima trazemos alguns exemplos. Lembramos que aqui consideramos o grafo como centro de espalhamento sendo as *leads* os canais de entrada e saída do grafo. Nesse caso, a solução da Eq (2.7) é dada por

$$\psi_v(x) = a_v \sin(kx) + b_v \cos(kx), \quad (3.14)$$

Figura 2 – Grafo ciclo C_3 com três *leads*

Fonte: A autora

para cada aresta $e = 1, 2, \dots, n$ do grafo e

$$f_j(x) = c_j e^{-ikx} + d_j e^{ikx}, \quad (3.15)$$

para cada *lead* $j = 1, 2, \dots, N$.

Considerando o grafo ciclo C_3 da Figura 2 e adotando a condição de contorno de Neumann - Kirchhoff (2.16), segue que para

$$\psi'_j(x) = a_j k \cos(kx) + b_j k \sin(ikx), \quad (3.16)$$

$$f'_j(x) = -ikc_j \exp(-ikx) + ikd_j \exp(ikx) \quad (3.17)$$

obtemos o seguinte sistema de equações

$$b_1 = a_3 \sin(kl) + b_3 \cos(kl) = c_1 + d_1 \quad (3.18)$$

$$a_1 k - a_3 k \cos(kl) + b_3 k \sin(kl) + ikd_1 - ikc_1 = 0 \quad (3.19)$$

$$b_2 = a_1 \sin(kl) + b_1 \cos(kl) = c_2 + d_2 \quad (3.20)$$

$$a_2 k - a_1 k \cos(kl) + b_1 k \sin(kl) + ikd_2 - ikc_2 = 0 \quad (3.21)$$

$$b_3 = a_2 \sin(kl) + b_2 \cos(kl) = c_3 + d_3 \quad (3.22)$$

$$a_3 k - a_2 k \cos(kl) + b_2 k \sin(kl) + ikd_3 - ikc_3 = 0. \quad (3.23)$$

Considerando $b_i = c_i + d_i$ para $i = 1, 2, 3$ nas equações acima e dividindo por k as equações (3.19), (3.21) e (3.23), podemos reescrever o sistema da seguinte forma

$$a_3 \sin(kl) + (c_3 + d_3) \cos(kl) - c_1 - d_1 = 0 \quad (3.24)$$

$$a_1 - a_3 \cos(kl) + (c_3 + d_3) \sin(kl) + id_1 - ic_1 = 0 \quad (3.25)$$

$$a_1 \sin(kl) + (c_1 + d_1) \cos(kl) - c_2 - d_2 = 0 \quad (3.26)$$

$$a_2 - a_1 \cos(kl) + (c_1 + d_1) \sin(kl) + id_2 - ic_2 = 0 \quad (3.27)$$

$$a_2 \sin(kl) + (c_2 + d_2) \cos(kl) - c_3 - d_3 = 0 \quad (3.28)$$

$$a_3 - a_2 \cos(kl) + (c_2 + d_2) \sin(kl) + id_3 - ic_3 = 0. \quad (3.29)$$

Podemos então escrever o sistema acima na sua forma matricial como

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \sin kl & -1 & 0 & \cos kl & -1 & 0 & \cos kl \\ 1 & 0 & -\cos kl & -i & 0 & \sin kl & i & 0 & \sin kl \\ -\cos kl & 1 & 0 & \sin kl & -i & 0 & \sin kl & i & 0 \\ \sin kl & 0 & 0 & \cos kl & -1 & 0 & \cos kl & -1 & 0 \\ 0 & \sin kl & 0 & 0 & \cos kl & -1 & 0 & \cos kl & -1 \\ 0 & -\cos kl & 1 & 0 & \sin kl & -i & 0 & \sin kl & i \end{pmatrix} \times (a_1; a_2; a_3; c_1; c_2; c_3; d_1; d_2; d_3)^T = 0. \quad (3.30)$$

Conseguimos blocar a matriz da equação (3.30) em seis partes para encontrarmos a matriz de espalhamento. Assim,

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sin kl \\ 1 & 0 & -\cos kl \\ -\cos kl & 1 & 0 \end{pmatrix}, C = \begin{pmatrix} -1 & 0 & \cos kl \\ -i & 0 & \sin kl \\ \sin kl & -i & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.31)$$

$$D = \begin{pmatrix} -1 & 0 & \cos kl \\ i & 0 & \sin kl \\ \sin kl & i & 0 \end{pmatrix}, E = \begin{pmatrix} \sin kl & 0 & 0 \\ 0 & \sin kl & 0 \\ 0 & -\cos kl & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.32)$$

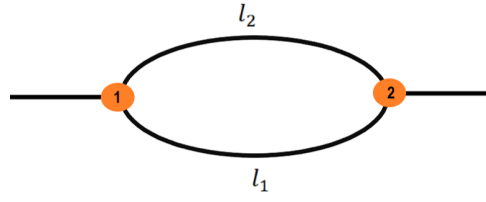
$$F = \begin{pmatrix} \cos kl & -1 & 0 \\ 0 & \cos kl & -1 \\ 0 & \sin kl & -i \end{pmatrix}, J = \begin{pmatrix} \cos kl & -1 & 0 \\ 0 & \cos kl & -1 \\ 0 & \sin kl & i \end{pmatrix}.$$

A matriz de espalhamento $S = S(k)$ será dada após uma sequência de operações, na forma

$$S(k) = -(J - EB^{-1}D)^{-1}(F - EB^{-1}C). \quad (3.33)$$

Quando o denominador do determinante da matriz de espalhamento for igual a zero, temos os polos do grafo, nesse caso

$$\det(S) = -\frac{(-1 + 3e^{ikl})(1 + 2e^{ikl} + 3e^{2ikl})^2}{(-3 + e^{ikl})(3 + 2e^{ikl} + e^{2ikl})^2} \implies (-3 + e^{ikl})(3 + 2e^{ikl} + e^{2ikl})^2 = 0. \quad (3.34)$$

Figura 3 – Grafo ciclo C_2 

Fonte: A autora

Considerando agora, um grafo ciclo C_2 como na Figura 3 vemos que o processo é análogo ao primeiro. Logo,

$$\psi_j(x) = a_j \sin(kx) + b_j \cos(kx), \quad (3.35)$$

para $j = 1, 2$ nas arestas e

$$f_j(x) = c_j e^{-ikx} + d_j e^{ikx}, \quad (3.36)$$

com $j = 1, 2$ para as *leads*. Então ao considerarmos as condições de contorno δ (2.18) segue que

$$\begin{cases} b_1 = a_2 \sin kl + b_2 \cos kl = c_1 + d_1 \\ b_2 = a_1 \sin kl + b_1 \cos kl = c_2 + d_2 \\ k(a_1 - a_2 \cos kl + b_2 \sin kl - c_1 i + d_1 i) = \alpha(c_1 + d_1) \\ k(a_2 - a_1 \cos kl + b_1 \sin kl - c_2 i + d_2 i) = \alpha(c_2 + d_2). \end{cases} \quad (3.37)$$

Dividindo as duas últimas equações por k e assumindo $b_j = c_j + d_j$, com $j = 1, 2$, podemos reescrever (3.37) da seguinte forma

$$\begin{pmatrix} 0 & \sin kl & -1 & \cos kl & -1 & \cos kl \\ 1 & -\cos kl & -i - \frac{\alpha}{k} & \sin kl & i - \frac{\alpha}{k} & \sin kl \\ \sin kl & 0 & \cos kl & -1 & \cos kl & -1 \\ -\cos kl & 1 & \sin kl & -i - \frac{\alpha}{k} & \sin kl & i - \frac{\alpha}{k} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ c_1 \\ c_2 \\ d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} = 0. \quad (3.38)$$

É possível dividir a matriz da equação (3.38) em outras seis matrizes, assim

$$\begin{aligned} B &= \begin{pmatrix} 0 & \sin kl \\ 1 & -\cos kl \end{pmatrix}, C = \begin{pmatrix} -1 & \cos kl \\ -i - \frac{\alpha}{k} & \sin kl \end{pmatrix}, D = \begin{pmatrix} -1 & \cos kl \\ i - \frac{\alpha}{k} & \sin kl \end{pmatrix}, \\ E &= \begin{pmatrix} \sin kl & 0 \\ -\cos kl & 1 \end{pmatrix}, F = \begin{pmatrix} \cos kl & -1 \\ \sin kl & -i - \frac{\alpha}{k} \end{pmatrix}, J = \begin{pmatrix} \cos kl & -1 \\ \sin kl & i - \frac{\alpha}{k} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Analogamente ao cálculo anterior, para encontrarmos a matriz de espalhamento $S(k)$ temos que

$$S(k) = -(J - EB^{-1}D)^{-1}(F - EB^{-1}C). \quad (3.40)$$

Temos que $\det(S)$ na sua forma exponencial é dado por

$$\det(S) = \frac{(-1 + 9e^{2ikl})k^2 - 2ik\alpha(1 + 3e^{2ikl}) - (-1 + e^{2ikl})\alpha^2}{(-9 + e^{2ikl})k^2 - 2ik\alpha(3 + e^{2ikl}) - (-1 + e^{2ikl})\alpha^2} \quad (3.41)$$

e para obtermos os polos, calculamos

$$(-9 + e^{2ikl})k^2 - 2ik\alpha(3 + e^{2ikl}) - (-1 + e^{2ikl})\alpha^2 = 0. \quad (3.42)$$

3.2 RESOLVENTE

O resolvente das ressonâncias são os polos da continuação meromórfica do operador $(H - \lambda\mathbb{I})^{-1}$ ao longo do eixo real positivo, em que $\mathbb{I}$ é a identidade e $\lambda = k^2$ é tal que existe uma solução da equação de Schrödinger independente do tempo, com assíntotas $\alpha_j e^{ikx}$ em todas as *leads*. Dessa forma, podemos dizer que as ressonâncias são os polos de uma extensão do domínio de $(H - \lambda\mathbb{I})^{-1}$, de modo que ele possua pontos isolados e seja diferenciável no conjunto dos números complexos $\mathbb{C}$.

Por outro lado, a solução da equação de Schrödinger para a partícula livre nos fornece $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, se adotarmos $\hbar = 1$ e $m = 1/2$ temos que $k^2 = E$. Então, podemos considerar que para um Hamiltoniano independente do tempo, como o definido na Seção 2, sua transformada de Laplace define o resolvente (27), que pode ser escrito como

$$(H - E\mathbb{I})^{-1} = \sum_{\nu} \frac{|E_{\nu}\rangle\langle E_{\nu}|}{E_{\nu} - E}, \quad (3.43)$$

onde E_{ν} são os autovalores de H , $|E_{\nu}\rangle$ são seus autovetores, sendo o segundo membro de (3.43) a forma espectral do resolvente.

Calcular o resolvente para ressonâncias não é uma tarefa trivial; todavia ao calcularmos o resolvente encontramos uma ferramenta poderosa, onde sua solução combina o espectro discreto σ_d e o espectro essencial σ_{ess} do grafo. Isto é, dado um operador T , seu espectro $\sigma(T)$ pode ser dividido em σ_d e σ_{ess} , ou seja, o conjunto de autovalores com multiplicidade finita que são pontos isolados do espectro $\sigma(T)$ e $\sigma(T) - \sigma_d(T)$ respectivamente.

Em 1971, J. Combes (31, 35) e seus colaboradores introduziram a ideia de *external complex scaling* (ECS) para o resolvente $(H - z)^{-1}$, transformando o operador H auto-adjunto em um operador H_{θ} não auto-adjunto por meio de uma transformação unitária U_{θ} . Em 1978, Barry Simon realizou uma análise mais profunda a cerca das ressonâncias com *complex scaling* (33), por volta de 1980 esse método foi implementado por Sigal gerando uma generalização do método(32), e em 1991, Johannes e Zworski aprofundaram a análise acerca dos polos obtidos por meio do resolvente com o hamiltoniano transformado via *complex scaling* (34). Mais recentemente, em 2011, J. Lipovsky e P. Exner (30) adaptaram essa transformação para grafos quânticos, aplicando a transformação U_{θ} nas funções de onda das *leads* do grafo, a mesma pode ser aprofundada em (36, 59).

Ao estudarmos as ressonâncias, que são estados instáveis da matriz S , a partir do resolvente, recaímos ao fato das soluções dos problemas de espalhamento para as partículas que saem do grafo não serem quadrado integráveis, não pertencendo ao espaço de Hilbert $\mathcal{H}$.

No entanto, ao aplicarmos a (ECS), é possível modificar essas soluções para que elas se tornem quadrado-integráveis. Essa abordagem permite calcularmos as ressonâncias como autovalores de H_θ , a qual consiste em rotacionar H no plano complexo, o transformando em um operador não autoadjunto.

Como demonstrado em (19, 30), ao considerarmos as ressonâncias na forma $k = k_r + ik_i$, com $k_i > 0$ existe uma solução da equação de Schrödinger com a função de onda nas *leads* dadas por $f_j(x) = \beta_j e^{ikx}$. Todavia, para $f_j(x) = \beta_j e^{ik_r x} e^{-ik_i x}$ segue que $\int_0^1 |f_j(x)|^2 dx < \infty$, o que faz de k^2 um autovalor de H , o que contradiz o fato dele ser autoadjunto. Entretanto, para H_θ a $\text{Im}(\theta)$ é suficientemente grande o que nos permite acessar os polos como pontos isolados sem maiores problemas.

Ao considerarmos um grafo com as condições de contorno descritas na Seção 2.2 temos que

$$H_\theta \begin{pmatrix} \psi_j(x) \\ f_j(x) \end{pmatrix} = U_\theta H U_{-\theta} \begin{pmatrix} \psi_j(x) \\ f_j(x) \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

$$= U_\theta \left(\frac{d^2}{dx^2} \right) \begin{pmatrix} \psi_j(x) \\ e^{-\theta/2} f_{\theta_j}(e^{-\theta} x) \end{pmatrix} \quad (3.45)$$

$$= U_\theta \left(\frac{d}{dx} \right) \begin{pmatrix} \psi'_j(x) \\ e^{-\theta/2} f'_{\theta_j}(e^{-\theta} x) e^{-\theta} \end{pmatrix} \quad (3.46)$$

$$= U_\theta \begin{pmatrix} -\psi''_j(x) \\ -e^{-\theta/2} f''_{\theta_j}(e^{-\theta} x) e^{-\theta} e^{-\theta} \end{pmatrix} \quad (3.47)$$

$$= \begin{pmatrix} -\psi''_j(x) \\ -e^{-2\theta} e^{-\theta/2} U_\theta f''_{\theta_j}(e^{-\theta} x) \end{pmatrix} \quad (3.48)$$

$$= \begin{pmatrix} -\psi''_j(x) \\ -e^{-2\theta} e^{-\theta/2} e^{\theta/2} f''_{\theta_j}(e^{-\theta} e^\theta x) \end{pmatrix} \quad (3.49)$$

$$= \begin{pmatrix} -\psi''_j(x) \\ -e^{-2\theta} f''_j(x) \end{pmatrix}. \quad (3.50)$$

Nesse cenário, o espectro essencial de H_θ é dado por $e^{-2\theta}[0, \infty)$ (30) e as ressonâncias podem ser encontradas a partir dos autovalores positivos com multiplicidade finita de H_θ para imagem de θ , já que H_θ possui um conjunto discreto de autovalores (59). Para tanto, aplicamos as condições de contorno em cada vértice do grafo e resolvemos o sistema de equações que na sua forma matricial, nos dá a condição de ressonância pelo seu determinante igual a zero. De forma genérica, a partir das soluções da Eq. (2.7) para cada aresta $\psi_j(x) = a_j \sin kx + b_j \cos kx$ e *lead* $f(x) = d_j e^{ikx}$ de um grafo geral de n vértices. Com efeito, nessa abordagem, $f(x) = d_j e^{ikx}$ fornece os estados ressonantes (36). Com a condição de contorno do tipo δ temos que

$$B.C = 0, \quad (3.51)$$

onde B é uma matriz $2n \times 2n$ dada por

$$B = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \text{sen } kl & \cos kl \\ k & ik - \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -k \cos kl & k \text{sen } kl \\ \text{sen } kl & \cos kl & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -k \cos kl & k \text{sen } kl & k & ik - \alpha & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \text{sen } kl & \cos kl & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & k & ik - \alpha \end{pmatrix} \quad (3.52)$$

e

$$C^T = (a_1; b_1; a_2; b_2; \cdots; a_n; b_n).$$

Todavia, podemos reescrever (3.52) de uma forma mais geral para um grafo com n arestas e N leads com *complex scaling* da forma $f_j(x) = e^{-\theta/2} f_{\theta_j}$, $j = 1, 2, \dots, N$, utilizando a Eq. (2.12) segue que

$$(U - \mathbb{I})B_1(k)C + ik(U + \mathbb{I})B_2(k)C = 0, \quad (3.53)$$

nesse caso, escrevemos a matriz C como

$$C = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ \vdots \\ a_n \\ b_n \\ e^{-\theta/2} f_{\theta_1} \\ \vdots \\ e^{-\theta/2} f_{\theta_N} \end{pmatrix}$$

e a partir da conservação de probabilidade presente nas condições de contorno, ou seja, por meio da solução da Eq. (2.7) na forma trigonométrica $\psi_j(x) = a_j \text{sen } kx + b_j \cos kx$ temos que $\psi_j(0) = b_j$; $\psi'_j(0) = a_j k$; $\psi_j(l) = a_j \text{sen } kl + b_j \cos kl$; $\psi'_j(l) = a_j k \cos kl - b_j \text{sen } kl$. Logo,

$$\begin{pmatrix} \psi_j(0) \\ \psi_j(l) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \text{sen } kl & \cos kl \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_j \\ b_j \end{pmatrix};$$

$$\begin{pmatrix} \psi'_j(0) \\ \psi'_j(l) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k & 0 \\ -k \cos kl & k \text{sen } kl \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_j \\ b_j \end{pmatrix}.$$

Então definimos as matrizes B_1 e B_2 como

$$B_1^T = \text{diag}(B_{1;1}, B_{1;2}, \dots, B_{1;n}, \mathbb{I}), B_2^T = \text{diag}(B_{2;1}, B_{2;2}, \dots, B_{2;n}, \mathbb{I})$$

respectivamente, com

$$B_{1;j}(k) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \text{sen } kl & \cos kl \end{pmatrix} \text{ e } B_{2;j}(k) = \begin{pmatrix} k & 0 \\ -k \cos kl & k \text{sen } kl \end{pmatrix}.$$

Portanto, a condição geral de ressonância é dada pelo determinante

$$\det [(U - \mathbb{I})B_1(k) + ik(U + \mathbb{I})B_2(k)] = 0. \quad (3.54)$$

De forma prática vemos que para calcularmos o resolvente das ressonâncias do grafo da Figura 2, considerando a condição Neumann - Kirchhoff (2.16) temos que, em cada aresta está definida

$$\psi_j = a_j \text{sen } kx + b_j \cos kx, \text{ com } j = 1, 2, 3, \quad (3.55)$$

isto é, a solução da Eq. (2.7), e para as *leads*

$$f_j(x) = d_j e^{ikx}, \text{ com } j = 1, 2, 3. \quad (3.56)$$

Logo, podemos escrever

$$\begin{cases} b_1 = a_3 \text{sen } kl + b_3 \cos kl = d_1 \\ b_2 = a_1 \text{sen } kl + b_1 \cos kl = d_2 \\ b_3 = a_2 \text{sen } kl + b_2 \cos kl = d_3 \\ k(a_1 - a_3 \cos kl + b_3 \text{sen } kl + d_3 i) = 0 \\ k(a_2 - a_1 \cos kl + b_1 \text{sen } kl + d_2 i) = 0 \\ k(a_3 - a_2 \cos kl + b_2 \text{sen } kl + d_3 i) = 0, \end{cases} \quad (3.57)$$

assumindo $b_j = d_j$, a equação (3.57) na forma matricial é dada por

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & \text{sen } kl & \cos kl \\ k & ik & 0 & 0 & -k \cos kl & k \text{sen } kl \\ \text{sen } kl & \cos kl & -1 & -1 & 0 & 0 \\ -\cos kl & k \text{sen } kl & k & ik & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \text{sen } kl & \cos kl & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -k \cos kl & k \text{sen } kl & k & ik \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ a_2 \\ b_2 \\ a_3 \\ b_3 \end{pmatrix} = 0. \quad (3.58)$$

Calculando o determinante igual a zero encontramos os polos do grafo, ou seja

$$-k^3(-2 + 2 \cos kl - i \text{sen } kl)(1 + 2 \cos kl - i \text{sen } kl)^2 = 0. \quad (3.59)$$

Na Figura 3, como temos duas arestas e duas *leads*, teremos a solução da equação (2.7) definida em cada uma delas. Ou seja, no formato da Eq. (3.55) e (3.56), respectivamente, com $j = 1, 2$. Aplicando a *external complex scaling*, temos que $U_\theta f_j(x) = e^{-\theta/2} f_{\theta_j}(\theta x)$. Logo,

$$\begin{aligned} f_j(x) = d_j e^{ikx} &\implies U_\theta f_j(0) = e^{-\theta/2} f_{\theta_j}(0) \\ f'_j(x) = dik e^{ikx} &\implies U_\theta f'_j(0) = ik e^{-\theta/2} f_{\theta_j}(0), \end{aligned}$$

pela condição de contorno δ (2.18), segue que

$$\begin{cases} b_1 = a_2 \sin kl + b_2 \cos kl = e^{-\theta/2} f_{\theta_1}(0) \\ b_2 = a_1 \sin kl + b_1 \cos kl = e^{-\theta/2} f_{\theta_2}(0) \\ k(a_1 - a_2 \cos kl + b_2 \sin kl + ie^{-\theta/2} f_{\theta_1}(0)) = \alpha e^{-\theta/2} f_{\theta_1}(0) \\ k(a_2 - a_1 \cos kl + b_1 \sin kl + ie^{-\theta/2} f_{\theta_2}(0)) = \alpha e^{-\theta/2} f_{\theta_2}(0), \end{cases} \quad (3.60)$$

tomando $b_j = e^{-\theta/2} f_{\theta_j}(0)$ e reescrevendo (3.60) na forma matricial segue

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 & \sin kl & \cos kl \\ k & ik - \alpha & -k \cos kl & k \sin kl \\ \sin kl & \cos kl & 0 & -1 \\ -k \cos kl & k \sin kl & k & ik - \alpha \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = 0. \quad (3.61)$$

Logo, o determinante da matriz em (3.61)

$$\sin kl(4ik(k + i\alpha) \cos kl + (5k^2 + 2ik\alpha - \alpha^2) \sin kl) = 0, \quad (3.62)$$

fornece a condição de ressonância do grafo, isto é, os polos.

Figura 4 – Grafo caminho P_2 com uma *lead*



Fonte: A autora

Para encontrarmos a condição de ressonância do grafo da Figura 4, considerando a condição de contorno do tipo δ no vértice 1 e Dirichlet no vértice 2, é necessário considerar a transformação $U_\theta f(x) = e^{-\theta/2} f(e^\theta x)$ para a *lead*. Considerando para a aresta

$$\psi(x) = a \sin kx + b \cos kx, \quad (3.63)$$

para a *lead*

$$f(x) = de^{ikx}, \quad (3.64)$$

e aplicando as condições de contorno obtemos o seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} \psi(0) = 0 \\ \psi(l) = f(0) \\ -\psi'(l) + f'(0) = \alpha f(0) \end{cases} \quad (3.65)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} b = 0 \\ a \sin kl + b \cos kl = e^{-\theta/2} f(0) \\ -ak \cos kl + bk \sin kl + ike^{-\theta/2} f(0) = \alpha e^{-\theta/2} f(0). \end{cases}$$

Resolvendo o sistema de equações (3.65) temos que a condição de ressonância é dada por

$$(\alpha - ik) \sin kl + k \cos kl = 0. \quad (3.66)$$

3.3 FUNÇÃO DE GREEN

A função de Green é uma forma alternativa para o cálculo dos polos de um grafo, proveniente de um resolvente em função das autoenergias do sistema em questão. Ela pode ser obtida de forma mais geral como podemos observar em (60, 61), ou na sua forma exata para grafos quânticos e poços quânticos por exemplo (20, 57, 62). A partir desse método de abordagem podemos obter soluções para o espalhamento observando os estados ligados proveniente do sistema, bem como uma análise do comportamento de seus outros polos e suas características (63).

Essa formulação é pensada a partir das possíveis trajetórias de uma partícula em um grafo nesse caso, com uma ideia similar a das integrais de Feynman. No entanto, podemos obter a função de Green de uma forma simples e precisa, sem ser necessário o uso de cálculos complexos, o que faz dela uma ferramenta poderosa e prática, principalmente no contexto deste trabalho, pois permite a mudança de vários parâmetros a partir da mesma função, já que ela é construída de acordo com o formato do grafo sem a necessidade da especificação imediata das condições de contorno.

Para determinarmos a função de Green independente do tempo em sua forma mais básica, para um sistema em uma dimensão, como no caso de grafos quânticos, partimos da equação diferencial não homogênea

$$[E - H(x_f)] \mathcal{G}(x_f, x_i, E) = \delta(x_f - x_i), \quad (3.67)$$

obedecendo às condições de contorno e sendo H o Hamiltoniano descrito pela Seção 2.2, $\mathcal{G}$ é a função de Green e δ é a delta de Dirac.

Podemos interpretar a função de Green como a amplitude de probabilidade de uma partícula partir de um ponto x_i e chegar a um ponto x_f para uma determinada energia E . Então, pela notação de Dirac

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(x_f, x_i, E) &= \langle x_f | \mathcal{G}(E) | x_i \rangle, \\ \langle x_f | x_i \rangle &= \delta(x_f - x_i), \\ \psi(x) &= \langle x | \psi \rangle, \psi^*(x) = \langle \psi | x \rangle, \\ \int dx \psi_n^*(x) \psi_m(x) &= \delta_{nm}, \\ \int dx |x\rangle \langle x| &= 1, \end{aligned}$$

reescrevemos (3.67) da seguinte forma

$$\langle x_f | (E - H) \mathcal{G}(E) | x_i \rangle = \langle x_f | x_i \rangle \quad (3.68)$$

$$E \langle x_f | \mathcal{G}(E) | x_i \rangle - \langle x_f | H \mathcal{G}(E) | x_i \rangle = \langle x_f | x_i \rangle. \quad (3.69)$$

Substituindo

$$\langle x_f | x_i \rangle = \sum_n \langle x_f | \psi_n \rangle \langle \psi_n | x_i \rangle,$$

onde $\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = 1$ é a relação de completeza, em (3.68) temos

$$E \langle x_f | \mathcal{G}(E) | x_i \rangle - \langle x_f | H \mathcal{G}(E) | x_i \rangle = \sum_n \langle x_f | \psi_n \rangle \langle \psi_n | x_i \rangle \quad (3.70)$$

$$E \langle x_f | \mathcal{G}(E) | x_i \rangle - \int dx \langle x_f | H | x \rangle \langle x | \mathcal{G}(E) | x_i \rangle = \sum_n \langle x_f | \psi_n \rangle \langle \psi_n | x_i \rangle \quad (3.71)$$

$$E \langle x_f | \mathcal{G}(E) | x_i \rangle - \int dx H \mathcal{G}(E) \langle x | x_i \rangle \langle x_f | x \rangle = \sum_n \langle x_f | \psi_n \rangle \langle \psi_n | x_i \rangle \quad (3.72)$$

$$E \langle x_f | \mathcal{G}(E) | x_i \rangle - H \mathcal{G}(E) \delta_{x_i x_f} = \sum_n \langle x_f | \psi_n \rangle \langle \psi_n | x_i \rangle \quad (3.73)$$

Supondo que $\{\psi_n(x)\}$ é ortonormal e $H|\psi_n\rangle = E_n\psi_n$ fornece os autovalores de energia, então podemos escrever

$$\mathcal{G}(x_f, x_i; E) = \frac{\sum_n \langle x_f | \psi_n \rangle \langle \psi_n | x_i \rangle}{E - H} + \int_0^\infty dv \frac{\langle x_f | \psi_v \rangle \langle \psi_v | x_i \rangle}{E - \hbar^2 v^2 / 2m} \quad (3.74)$$

$$= \frac{\sum_n \psi(x_f) \psi_n^*(x_i)}{E - E_n} + \int_0^\infty dv \frac{\psi_v(x_f) \psi_v^*(x_i)}{E - \hbar^2 v^2 / 2m}, \quad (3.75)$$

sendo $(E - H + i\eta)^{-1}$ o resolvente quando $\eta \rightarrow 0^+$, em que o parâmetro η pode ser visto como parte de E (61) para assegurar sua convergência. Notamos ainda que, a partir da Eq. (3.74) podemos obter os polos discretos e contínuos, esse último presente para $E \in [0, \infty)$, bem como a função de onda, a qual é proveniente de seus resíduos.

Outra forma de se obter a função de Green (exata) é por meio da análise do espalhamento de uma partícula num determinado grafo, isto é, pela soma dos caminhos (amplitudes de probabilidade) que conectam o ponto x_i numa *lead*, a um ponto x_f em outra *lead* (57).

Essas amplitudes de probabilidade são dadas de acordo com a topologia do grafo e com as amplitudes de espalhamento, que por sua vez, são definidas pelas condições de contorno nos vértices. Assim, podemos escrever a função de Green para um grafo quântico, na forma

$$\mathcal{G}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} T e^{ik(x_i + x_f)}, \quad (3.76)$$

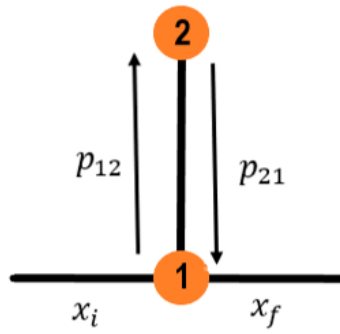
onde $T = T^{(if)} = t_i \sum_{j=1}^V A_{ij} P_{ij}$ é a amplitude de transmissão dada pela soma das amplitudes de probabilidade p_{ij} , pela matriz de adjacência A , pelos coeficientes de reflexão r_j e transmissão t_j , de forma que T obedeça a condição de normalização $|T|^2 + |R|^2 = 1$. De forma similar, a amplitude de reflexão é dada por

$$R = r_i + t_i \sum_{j=1}^V A_{ij} P_{ij}. \quad (3.77)$$

Para determinarmos as amplitudes de probabilidade presentes em um grafo, utilizamos a matriz P_{ij} a qual representa todas as amplitudes de probabilidade presentes e deve ter a mesma ordem da matriz A . Dessa forma, podemos utilizar o produto Schur - Hadamard, que para duas matrizes M e N de mesma ordem é definido por $(M \circ N)_{ij} := (M)_{ij}(N)_{ij}$. Assim, podemos construir essas amplitudes levando em consideração todos as possíveis trajetórias que a partícula pode percorrer, por meio de

$$p_{ij} = e^{ikl_{ij}}(\delta_{jn}t_n + r_j p_{ji}), p_{ji} = e^{ikl_{ij}}(r_i p_{ij} + \sum t_i p_{li}). \quad (3.78)$$

Figura 5 – Famílias de caminho p_{ij} presentes no grafo S_2



Fonte: A autora

Como um exemplo, considere o grafo na Figura 5

$$A \circ P = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} \\ p_{21} & p_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & p_{12} \\ p_{21} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.79)$$

Logo, o que devemos calcular são as amplitudes p_{ij} , que são dadas de acordo com (3.78), então

$$\begin{cases} p_{12} = e^{ikl_{12}} r_2 p_{21} \\ p_{21} = e^{ikl_{12}} (r_1 p_{12} + t_1) \end{cases}, \quad (3.80)$$

a partir da resolução do sistema de equações podemos obter a amplitude de transmissão $T = T(k)$ que é dada pela soma dos elementos da primeira linha da matriz $A \circ P$ (3.79) multiplicada pelo coeficiente de transmissão do vértice de entrada, isto é, $T = t_1 p_{12}$. Portanto,

$$T = \frac{t_1 r_2 e^{2ikl_{12}}}{1 - r_1 r_2 e^{2ikl_{12}}}. \quad (3.81)$$

Para obtermos os polos de um grafo a partir desta abordagem, calculamos os polos da amplitude de transmissão T , caso existam. Logo, adotando r_1 no formato da expressão (2.21) e r_2 na forma de (2.24) obtemos os polos do grafo por meio de

$$1 - r_1 r_2 e^{2ikl_{12}} = 1 - \left(\frac{2\alpha - ik}{3ik - 2\alpha} \right) \left(\frac{ik + \gamma}{ik - \gamma} \right) e^{2ikl_{12}} = 0. \quad (3.82)$$

Para obtermos a função de Green no caso do grafo da Figura 2, consideramos primeiramente as *leads* nos vértices 1 e 2. Logo, a matriz de adjacência

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.83)$$

e as amplitudes de probabilidade são determinadas por P_{ij} , que nesse caso é

$$P = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} \end{pmatrix}. \quad (3.84)$$

Então, ao calcularmos o produto Schur-Hadamard das matrizes (3.83) e (3.84) temos as amplitudes de probabilidade presentes no grafo

$$P_{C_3} = P \circ A = \begin{pmatrix} 0 & p_{12} & p_{13} \\ p_{21} & 0 & p_{23} \\ p_{31} & p_{32} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.85)$$

Portanto, devemos calcular cada amplitude presente em (3.85) que nesse caso, serão dadas por

$$\begin{cases} p_{12} = e^{ikl_1}(r_2 p_{21} + t_2 p_{23} + t_2) \\ p_{13} = e^{ikl_3}(r_3 p_{31} + t_3 p_{23}) \\ p_{21} = e^{ikl_1}(r_1 p_{12} + t_1 p_{13}) \\ p_{23} = e^{ikl_2}(r_3 p_{32} + t_3 p_{31}) \\ p_{31} = e^{ikl_3}(r_1 p_{13} + t_1 p_{12}) \\ p_{32} = e^{ikl_2}(r_2 p_{23} + t_2 p_{21} + t_2), \end{cases} \quad (3.86)$$

em que, $t_j = \frac{2}{d}$ e $r_j = \frac{2}{d} - 1$ com $j = 1, 2, 3$ tal que d é o grau do vértice, de acordo com a condição de contorno Neumann - Kirchhoff. Devido a simetria presente no grafo, quando consideramos as *leads* nos vértices 1 e 3, temos a mesma matriz de adjacência (3.83) e as amplitudes de probabilidade são similares as que observamos em (3.85), mudando apenas o canal de saída então,

$$\begin{cases} p_{12} = e^{ikl_1}(r_2 p_{21} + t_2 p_{23}) \\ p_{13} = e^{ikl_3}(r_3 p_{31} + t_3 p_{23} + t_3) \\ p_{21} = e^{ikl_2}(r_1 p_{12} + t_1 p_{13}) \\ p_{23} = e^{ikl_2}(r_3 p_{32} + t_3 p_{31} + t_3) \\ p_{31} = e^{ikl_3}(r_1 p_{13} + t_1 p_{12}) \\ p_{32} = e^{ikl_2}(r_2 p_{23} + t_2 p_{21}). \end{cases} \quad (3.87)$$

Logo, a amplitude de transmissão é dada pela soma dos elementos da primeira linha da matriz (3.85) multiplicada pelo coeficiente de transmissão em cada vértice de entrada, ou seja

$$T = t_1(p_{12} + p_{13}), \quad (3.88)$$

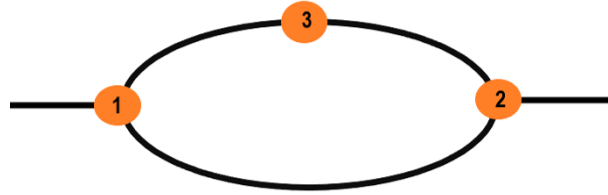
onde $t_1 = \frac{2}{3}$.

Portanto,

$$T(k) = -\frac{4(e^{ik(l_1+l_2)} + e^{ikl_3} - e^{ik(2(l_1+l_2)+l_3)} - e^{ik(l_1+l_2+2l_3)})}{-9 + e^{2ik(l_1+l_2)} + e^{2ikl_3} + 8e^{ik(l_1+l_2+l_3)} - e^{2ik(l_1+l_2+l_3)}} \quad (3.89)$$

e os polos são dados pelo denominador de $T(k)$ igual a zero.

Figura 6 – Grafo ciclo C_2 com um vértice adicionado



Fonte: A autora

Para encontrarmos os polos a partir da função de Green para o exemplo da Figura 3, podemos considerar o grafo com um terceiro vértice como na Figura 6, assim, a matriz de adjacência é

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.90)$$

e as amplitudes de probabilidade são determinadas de acordo com a matriz P_{ij} , que nesse caso é dada por

$$P = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} \end{pmatrix}. \quad (3.91)$$

Então, ao calcularmos o produto Schur-Hadamard das matrizes (3.90) e (3.91) temos as amplitudes de probabilidade presentes no grafo

$$P_{C_2} = P \circ A = \begin{pmatrix} 0 & p_{12} & p_{13} \\ p_{21} & 0 & p_{23} \\ p_{31} & p_{32} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.92)$$

Portanto, devemos calcular cada amplitude presente em (3.92), que nesse caso, serão dadas por

$$\begin{cases} p_{12} = e^{ikl_{12}}(r_2 p_{21} + t_2 p_{23} + t_2) \\ p_{13} = e^{ikl_{13}}(r_3 p_{31} + t_3 p_{23}) \\ p_{21} = e^{ikl_{12}}(r_1 p_{12} + t_1 p_{13}) \\ p_{23} = e^{ikl_{23}}(r_3 p_{32} + t_3 p_{31}) \\ p_{31} = e^{ikl_{13}}(r_1 p_{13} + t_1 p_{12}) \\ p_{32} = e^{ikl_{23}}(r_2 p_{23} + t_2 p_{21} + t_2), \end{cases} \quad (3.93)$$

em que, por (2.22) $t_3 = \frac{2}{d}$ e $r_3 = \frac{2}{d} - 1$ tal que d é o grau do vértice e pela condição de contorno δ (2.21) temos que $t_j = \frac{2ik}{dik-\alpha}$ e $r_j = \frac{\alpha-(d-2)ik}{dik-\alpha}$, para $j = 1, 2$. Logo, como a amplitude de transmissão é dada pela soma dos elementos da primeira linha da matriz (3.92) multiplicada pelo coeficiente de transmissão em cada vértice, ou seja

$$T = t_1 p_{12} + t_3 p_{13}, \quad (3.94)$$

onde $t_1 = \frac{2ik}{3ik-\alpha}$ e $t_3 = 1$.

Portanto,

$$T = -\frac{8e^{ikl}k^2}{(-9 + e^{ikl})k^2 + 2i(-3 + e^{ikl})k\alpha - (e^{ikl} - 1)\alpha^2} \quad (3.95)$$

e os polos são dados por $(-9 + e^{ikl})k^2 + 2i(-3 + e^{ikl})k\alpha - (e^{ikl} - 1)\alpha^2 = 0$.

Para encontrarmos a condição de ressonância para o grafo da Figura 4 via função de Green, temos que a matriz de adjacência A e a matriz das famílias de caminhos P são dadas por

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} P = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} \\ p_{21} & p_{22} \end{pmatrix}, \quad (3.96)$$

pelo produto Schur-Hadamard vem que

$$A \circ P = \begin{pmatrix} 0 & p_{12} \\ p_{21} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.97)$$

Logo, as amplitudes p_{12} e p_{21} são obtidas por

$$\begin{cases} p_{12} = e^{ikl}(t_2 + r_2 p_{21}) \\ p_{21} = e^{ikl} r_1 p_{12} \end{cases}. \quad (3.98)$$

Resolvendo o sistema (3.98) encontramos o coeficiente de transmissão, o qual é dado pela soma dos elementos da primeira linha da matriz (3.97), ou seja,

$$T = \frac{e^{ikl}t_2}{1 - r_1 r_2 e^{2ikl}}, \quad (3.99)$$

aplicando a condição de contorno δ no vértice 1 e Dirichlet no vértice 2, temos que $r_1 = \frac{\alpha}{2ik-\alpha}$ e $r_2 = -1$. Como os polos são encontrados ao calcularmos $1 - r_1 r_2 e^{2ikl} = 0$, segue que

$$\begin{aligned} 1 + \frac{\alpha}{2ik - \alpha} e^{2ikl} &= 0 \\ \Rightarrow (2ik - \alpha)e^{-ikl} + \alpha e^{ikl} &= 0 \\ \Rightarrow (2ik - \alpha)(\cos kl - i \sin kl) + (\alpha \cos kl + i \sin kl) &= 0 \quad (3.100) \\ \Rightarrow (\alpha i + k)2 \sin kl + 2ik \cos kl &= 0 \\ \Rightarrow (\alpha - ik) \sin kl + k \cos kl &= 0 \end{aligned}$$

portanto, $(\alpha - ik) \sin kl + k \cos kl = 0$ nos fornece a condição de ressonância do grafo. Note que, essa é a mesma obtida ao calcularmos os polos pelo resolvente Eq. (3.66).

Então, podemos dizer que a condição de ressonância Res via função de Green é dada por

$$\text{Res} := \text{Denominador}(T(k)) = 0, \quad (3.101)$$

o que coincide com a condição de ressonância da matriz S , em outras palavras, é o mesmo cenário que encontramos ao calcularmos (3.11), o qual também pode ser descrito pela equação secular

$$\det(\mathbb{I} - SD) = 0, \quad (3.102)$$

que é amplamente difundida na literatura (16, 18), e pode ser encontrada de forma análoga para o caso da função de Green (57) como mencionaremos no próximo capítulo.

4 EQUIVALÊNCIA DOS MÉTODOS DE CÁLCULO DOS POLOS DE UM GRAFO QUÂNTICO

Podemos verificar por meio de alguns cálculos que as ressonâncias (polos) obtidos via resolvente, matriz de espalhamento e função de Green são equivalentes (56, 57), essa equivalência pode ser mostrada por abordagens diferentes, dentre elas destacamos uma mais direta.

Seja

$$(H - E)\psi_j(x) = 0, \quad (4.1)$$

onde $\psi_j(x) = a_j e^{ikx} + b_j e^{-ikl}$ (f_j) é a função de onda para cada aresta (*lead*) do grafo. Temos que $(H - E)^{-1}$ é o resolvente de um grafo qualquer, considerando o Hamiltoniano H nas condições descritas na Seção 2.2, pela Eq. (2.7), com $E = \Xi = k^2$.

Considerando um grafo qualquer, utilizando a (ECS) descrita na Seção 3.2 para as *leads* e assumindo a condição de contorno δ nos vértices, segue que o sistema de equações obtido por meio de (2.18) é dado por

$$\begin{cases} a_j + b_j = a_{j+1} e^{ikl_{j+1}} + b_{j+1} e^{-ikl_{j+1}} = e^{-\theta/2} f_{j\theta}(0) \\ a_j ik - b_j ik - a_{j+1} ik e^{ikl_{j+1}} + b_{j+1} ik e^{-ikl_{j+1}} + ik e^{-\theta/2} f_{j\theta}(0) = \alpha e^{-\theta/2} f_{j\theta}(0) \\ a_{j+1} + b_{j+1} = a_j e^{ikl_j} + b_j e^{-ikl_j} = e^{-\theta/2} f_{j+1\theta}(0) \\ a_{j+1} ik - b_{j+1} ik - a_j ik e^{ikl_j} + b_j ik e^{-ikl_j} + ik e^{-\theta/2} f_{j+1\theta}(0) = \alpha e^{-\theta/2} f_{j+1\theta}(0). \end{cases} \quad (4.2)$$

Observe que (4.2) é obtido a partir de

$$\begin{aligned} f_j(0) &= e^{-\theta/2} f_{j\theta}(0); \\ f'_j(0) &= ik e^{-\theta/2} f_{j\theta}(0); \\ \psi_j(l) &= a_j e^{ikl_j} + b_j e^{-ikl_j}; \\ \psi_j(0) &= a_j + b_j; \\ \psi'_j(0) &= a_j ik - b_j ik; \\ \psi'_j(l) &= a_j ik e^{ikl_j} - b_j ik e^{-ikl_j}. \end{aligned}$$

Tomando $a_j + b_j = e^{-\theta/2} f_{j\theta}(0)$ e substituindo em (4.2), reescrevemos o sistema da seguinte forma

$$\begin{cases} a_j + b_j = a_{j+1} e^{ikl_{j+1}} + b_{j+1} e^{-ikl_{j+1}} \\ a_j ik - b_j ik - a_{j+1} ik e^{ikl_{j+1}} + b_{j+1} ik e^{-ikl_{j+1}} + ik(a_j + b_j) = \alpha(a_j + b_j) \\ a_{j+1} + b_{j+1} = a_j e^{ikl_j} + b_j e^{-ikl_j} \\ a_{j+1} ik - b_{j+1} ik - a_j ik e^{ikl_j} + b_j ik e^{-ikl_j} + ik(a_{j+1} + b_{j+1}) = \alpha(a_{j+1} + b_{j+1}). \end{cases} \quad (4.3)$$

Logo, isolando b_{j+1} na primeira equação de (4.3) e substituindo na segunda equação, isolando

b_j na terceira e substituindo na última equação de (4.3), escrevemos a_j e a_{j+1} como

$$a_j = \frac{2a_{j+1}ike^{ikl_{j+1}} - (ik - \alpha)b_j}{dik - \alpha} \quad (4.4)$$

$$a_{j+1} = \frac{2a_jike^{ikl_j} - (ik - \alpha)b_{j+1}}{dik - \alpha}, \quad (4.5)$$

tal que d é o grau do vértice $v_j, j = 1, \dots, n$.

Note que, para a condição Neumann-Kirchhoff $\alpha = 0$ e então

$$a_j = \frac{2a_{j+1}e^{ikl_{j+1}} - b_j}{d} \quad (4.6)$$

$$a_{j+1} = \frac{2a_je^{ikl_j} - b_{j+1}}{d}. \quad (4.7)$$

Partindo de (4.6) e (4.7) podemos escrever a matriz de espalhamento $S = S(k)$ (16, 14) da forma

$$S_{j', \bar{j}} = \begin{cases} \frac{2}{d} - 1, & \text{se } j' = \bar{j}, \\ \frac{2}{d}, & \text{se } j' \text{ é adjacente a } j \text{ e } j' \neq \bar{j}, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (4.8)$$

Para encontrarmos os polos da matriz $S(k)$ utilizamos o determinante secular

$$\Xi_S(k) = \det(\mathbb{I} - U_S) = \det(\mathbb{I} - SD), \quad (4.9)$$

onde $\Xi_S(k)$ é um valor complexo, $\mathbb{I}$ é a matriz identidade, $U_S = SD$, em que S é a matriz de espalhamento e $D = D_{S(k)} = \text{diag}(z_{12}, z_{12}, z_{13}, z_{13}, \dots, z_{1n}, z_{1n})$, para $z_{ij} = e^{ikl_{e_j}}$.

Vamos definir então, um equivalente real da equação secular (4.9), no formato apresentado em (16).

Teorema: Seja $\mathcal{L} = \sum_{e \in \{l_{ij}\}} l_{ij}$ o comprimento total do grafo, a função analítica

$$\xi_S(k) = \frac{e^{-ik\mathcal{L}}}{\sqrt{\det(S)}} \det[\mathbb{I} - SD] \quad (4.10)$$

é real no eixo real e possui os mesmos polos do determinante secular $\Xi_S(k)$.

Demonstração:

Dadas as matrizes unitárias S, D, U_S e uma matriz X qualquer, sabemos que

$$S \cdot S^\dagger = \mathbb{I}, \quad D \cdot D^\dagger = \mathbb{I}, \quad U_S \cdot U_S^\dagger = \mathbb{I},$$

$$X \cdot X^\dagger = \mathbb{I} \Rightarrow \det X \det X^\dagger = \mathbb{I} \Rightarrow \det X^\dagger = (\det X)^{-1}.$$

Note que $e^{-ik\mathcal{L}} = e^{-ikl_{11}}e^{-ikl_{12}} \dots e^{-ikl_{1n}}$ e como $\det D = (e^{-ikl_{12}})^2(e^{-ikl_{13}})^2 \dots \times (e^{-ikl_{1n}})^2$, temos que $e^{-ik\mathcal{L}} = \sqrt{\det(D)}$. Logo, podemos escrever (4.10) como

$$\begin{aligned} \xi_S(k) &= \frac{[\det(D)]^{-1/2}}{[\det(S)]^{1/2}} \det[\mathbb{I} - SD] \\ &= [\det D \det S]^{-1/2} \det[\mathbb{I} - SD] \\ &= [\det U_S]^{-1/2} \det[\mathbb{I} - SD]. \end{aligned}$$

Calculando o complexo conjugado de $\xi(k)$ temos que

$$\xi_S^*(k) = \left[\det U_S^\dagger \right]^{-1/2} \det [\mathbb{I} - U_S^\dagger],$$

como

$$\det U_S^\dagger = [\det U_S]^{-1}$$

e

$$\mathbb{I} - U_S^\dagger = U_S U_S^\dagger - U_S^\dagger = (U_S - \mathbb{I}) U_S^\dagger \quad (4.11)$$

então,

$$\begin{aligned} \xi_S^*(k) &= [\det U_S]^{1/2} \det [\mathbb{I} - U_S^\dagger] \\ &= [\det U_S]^{1/2} \det [(U_S - \mathbb{I}) U_S^\dagger] \\ &= [\det U_S]^{1/2} \det [U_S - \mathbb{I}] \det (U_S^\dagger) \\ &= [\det U_S]^{1/2} \det [U_S - \mathbb{I}] [\det (U_S)]^{-1} \\ &= [\det U_S]^{-1/2} \det [U_S - \mathbb{I}] \\ &= [\det U_S]^{-1/2} \det [(-1)(U_S - \mathbb{I})] \\ &= [\det U_S]^{-1/2} (-1)^n \det [\mathbb{I} - U_S], \end{aligned}$$

onde n é a ordem da matriz U_S . O número de linhas dessa matriz corresponde a duas vezes o número de arestas do grafo, podemos dizer então que U_S é uma matriz de ordem par e portanto, $(-1)^n = 1$.

Por consequência,

$$\xi_S^*(k) = [\det U_S]^{-1/2} \det [\mathbb{I} - U_S] = \xi(k). \quad (4.12)$$

□

Analogamente, podemos mostrar que a equação secular a partir da função de Green (57) é equivalente a obtida via matriz S . Seja a equação secular

$$\Xi_{\mathcal{G}}(k) = \det [\mathbb{I} - DS] = 0, \quad (4.13)$$

em que $\Xi_{\mathcal{G}}(k)$ é um valor complexo da função. Definimos, então, um equivalente real da Eq. (4.13).

Teorema: Dado $\mathcal{L} = \sum_{e \in \{l_{ij}\}} l_{ij}$ o comprimento total do grafo, a função analítica

$$\xi_{\mathcal{G}}(k) = \frac{e^{-ik\mathcal{L}}}{\sqrt{\det(S)}} \det [\mathbb{I} - DS] \quad (4.14)$$

é real no eixo real e possui os mesmos polos do determinante secular $\Xi_{\mathcal{G}}(k)$.

Demonstração:

Considerando a unitariedade das matrizes S, D e $U_{\mathcal{G}} = DS$, assim como na demonstração anterior. E ainda,

$$X \cdot X^\dagger = \mathbb{I} \Rightarrow \det X \det X^\dagger = \mathbb{I} \Rightarrow \det X^\dagger = (\det X)^{-1}, \quad (4.15)$$

podemos reescrever (4.14) como

$$\begin{aligned} \xi_{\mathcal{G}}(k) &= \frac{[\det(D)]^{-1/2}}{[\det(S)]^{1/2}} \det[\mathbb{I} - DS] \\ &= [\det D \det S]^{-1/2} \det[\mathbb{I} - DS] \\ &= [\det U_{\mathcal{G}}]^{-1/2} \det[\mathbb{I} - DS] \\ &= [\det U_{\mathcal{G}}]^{-1/2} \det[\mathbb{I} - U_{\mathcal{G}}]. \end{aligned}$$

Tomando o complexo conjugado de $\xi_{\mathcal{G}}(k)$ temos que

$$\xi_{\mathcal{G}}^*(k) = [\det U_{\mathcal{G}}^\dagger]^{-1/2} \det[\mathbb{I} - U_{\mathcal{G}}^\dagger],$$

por (4.15) sabemos que $\det U_{\mathcal{G}}^\dagger = (\det U_{\mathcal{G}})^{-1}$ e por consequência,

$$\xi_{\mathcal{G}}^*(k) = [\det U_{\mathcal{G}}]^{1/2} \det[\mathbb{I} - U_{\mathcal{G}}^\dagger].$$

Semelhante a (4.11), vem que

$$\begin{aligned} \xi_{\mathcal{G}}^*(k) &= [\det U_{\mathcal{G}}]^{1/2} \det[U_{\mathcal{G}} - \mathbb{I}] [\det(U_{\mathcal{G}})]^{-1} \\ &= [\det U_{\mathcal{G}}]^{-1/2} \det[U_{\mathcal{G}} - \mathbb{I}] \\ &= [\det U_{\mathcal{G}}]^{-1/2} \det[(-1)(U_{\mathcal{G}} - \mathbb{I})] \\ &= [\det U_{\mathcal{G}}]^{-1/2} (-1)^n \det[\mathbb{I} - U_{\mathcal{G}}], \end{aligned}$$

onde n é a ordem da matriz $U_{\mathcal{G}}$.

Note que $U_{\mathcal{G}}$ é uma matriz de ordem par, já que, seu número de linhas é duas vezes a quantidade de arestas, isto é, $(-1)^n = 1$. Portanto,

$$\xi_{\mathcal{G}}^*(k) = [\det U_{\mathcal{G}}]^{-1/2} \det[\mathbb{I} - U_{\mathcal{G}}] = \xi_{\mathcal{G}}(k). \quad (4.16)$$

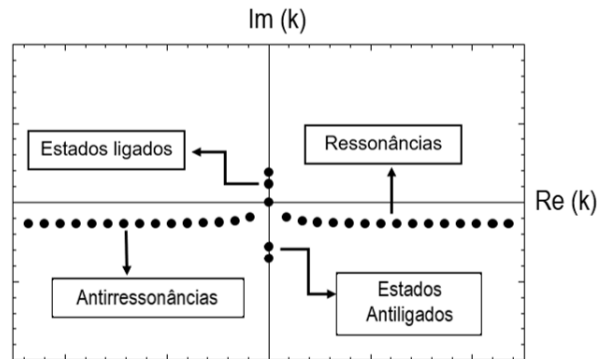
□

Concluimos que $\xi_{\mathcal{G}}(k)$ é um valor real da função e uma vez que $\det(U_{\mathcal{G}}) = \det(DS)$ nunca será igual a zero. Portanto, todos os zeros de $\xi_{\mathcal{G}}(k)$ são dados em $\det(\mathbb{I} - U_{\mathcal{G}})$.

5 FLUXO DE POLOS

Quando calculamos os polos, podemos classificá-los como estado ligado, estado antiligado, antirressonâncias ou ressonâncias, de acordo com a posição desses polos no plano complexo (27), Figura 7. As ressonâncias apresentam $Re(k) > 0$, já as antirressonâncias possuem $Re(k) < 0$ e, os estados ligados e os estados antiligados com $Re(k) = 0$, onde $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ é o número de onda, presente na Eq. (2.7), para a energia E . Podemos ainda, definir que os chamados estados ligados são autovetores do Hamiltoniano H , com valores de energia E bem definidos, em outras palavras, são estados estacionários com tempo de vida infinito (28).

Figura 7 – Classificação de Polos

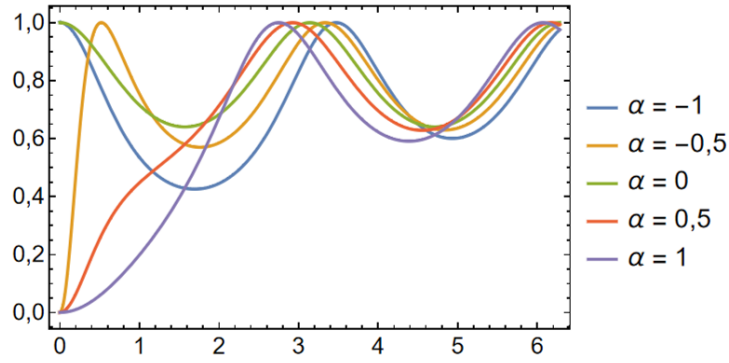
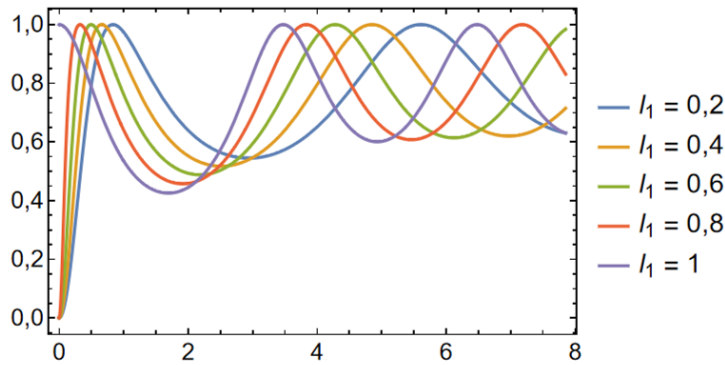


Fonte: A autora

Há ainda estudos sobre os chamados Estados Ligados no Contínuo (ELC), ou, *Boundary state in the Continuum (BIC)*, os quais estão presentes em sistemas abertos como apresentado por (64). No entanto, esses ELC's também podem ser observados em grafos quânticos como apresentado por Wang e seus colaboradores (22), os quais ocorrem em grafos ciclos independentemente da quantidade de arestas (*leads*) presentes, e segundo a definição de ressonâncias topológicas introduzida por Gnutzmann, Schanz e Smilansky (17) esse tipo de ressonância é um polo da matriz S que pode ser "movido" para o eixo real formando um ELC, alternando algum comprimento de aresta. As chamadas ressonâncias topológicas foram experimentalmente constatadas em 2021 por Lawniczak, Lipovsky, Bialous e Sirko (21).

Dessa forma, buscamos verificar o fluxo dos polos, ou seja, o comportamento desses polos, ao variarmos alguns dos parâmetros presentes no grafo - o comprimento das arestas l , as condições de contorno - como o ciclo C_2 (Figura 3), estrela S_2 (Figura 5) e uma composição do grafo C_2 em série. Pois, apesar desses grafos serem modelos simples e favorecerem a comparação de resultados como os obtidos por Exner e Lipovsky, (19), Waltner e Smilansky (65), fornecem inúmeros cenários para análise.

Para tanto, calculamos os polos a partir da amplitude de transmissão obtida pela função de Green, via matriz de espalhamento e via resolvente, para compararmos os resultados obtidos que devem ser equivalentes.

Figura 8 – Amplitude de transmissão do grafo C_2 (a) α variável(b) l variável

Fonte: A autora

5.1 GRAFO CICLO

Para um grafo ciclo C_2 , com a condição de contorno do tipo δ nos vértices temos que a amplitude de transmissão, como observado na seção 3.3, é dada por

$$T(k) = -\frac{8e^{ikl_2}k^2}{(-9 + e^{ik(l_1+l_2)})k^2 + 2i(-3 + e^{ik(l_1+l_2)})k\alpha - 4(e^{ik(l_1+l_2)} - 1)\alpha^2}, \quad (5.1)$$

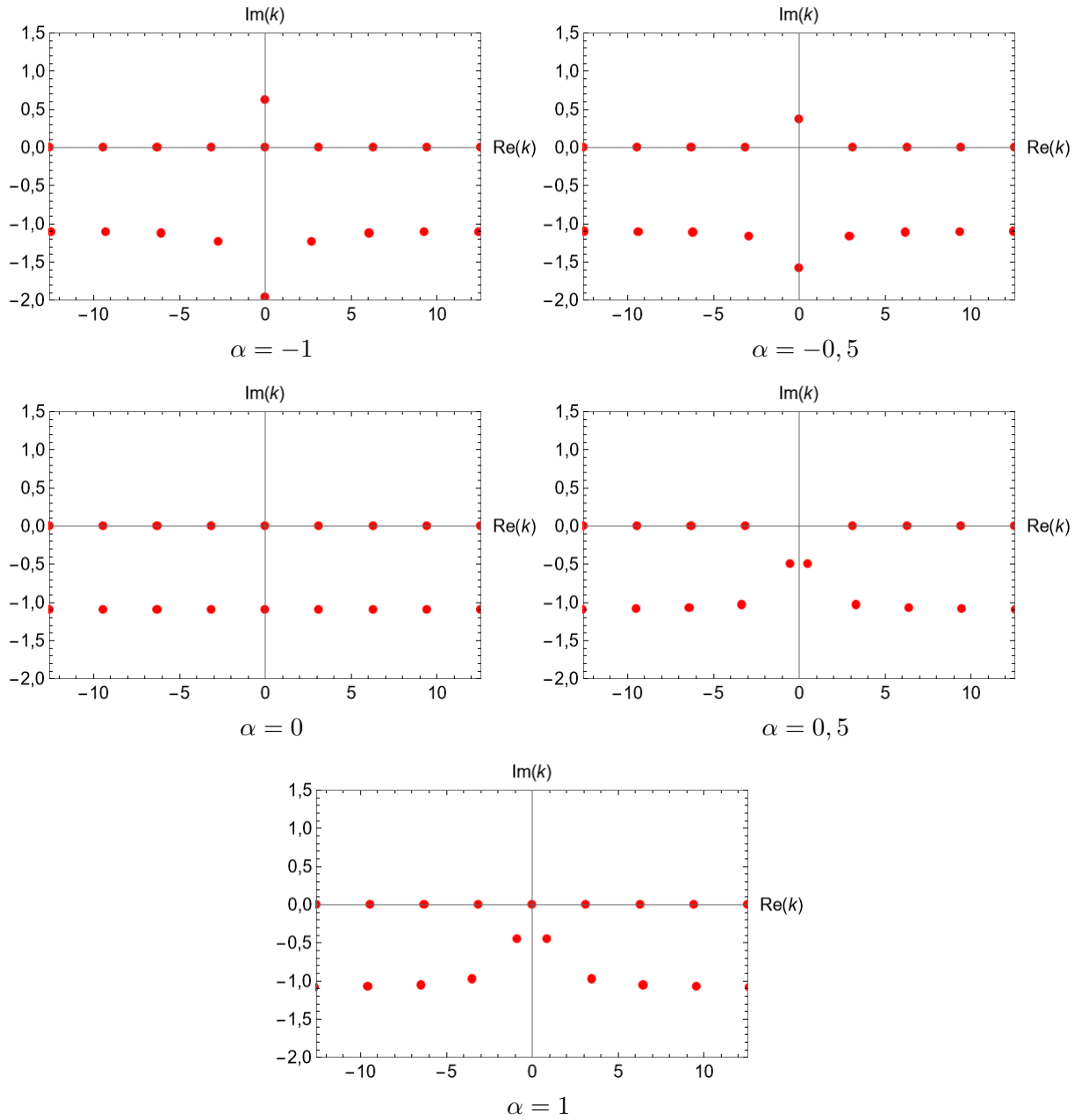
e para o cálculo das ressonâncias fazemos o denominador de T igual a zero.

Na Figura 8 (a) mostramos a variação da amplitude de transmissão $T(k)$ conforme variamos α e podemos notar a proximidade dos picos de transmissão, o que não ocorre ao variarmos l e mantermos α fixo, como na Figura 8 (b).

Ao variarmos a intensidade α e fixarmos os comprimentos das arestas $l_j = 1$ verificamos o deslocamento dos seus polos, levando ao surgimento (desaparecimento) de estados ligados, ressonâncias, ou ainda, antirressonâncias, e estados antiligados, como representado na Figura 9. Note que, o surgimento de estados ligados é possível para $\alpha < 0$, pois nesse caso temos δ atrativo.

Para o caso em que variamos o comprimento l das arestas e mantemos $\alpha = -1$ fixo, é notável a mudança no comportamento dos polos ao compararmos a Figura 9 com a Figura 10, em que há

Figura 9 – Fluxo de polos no grafo C_2 com α variável



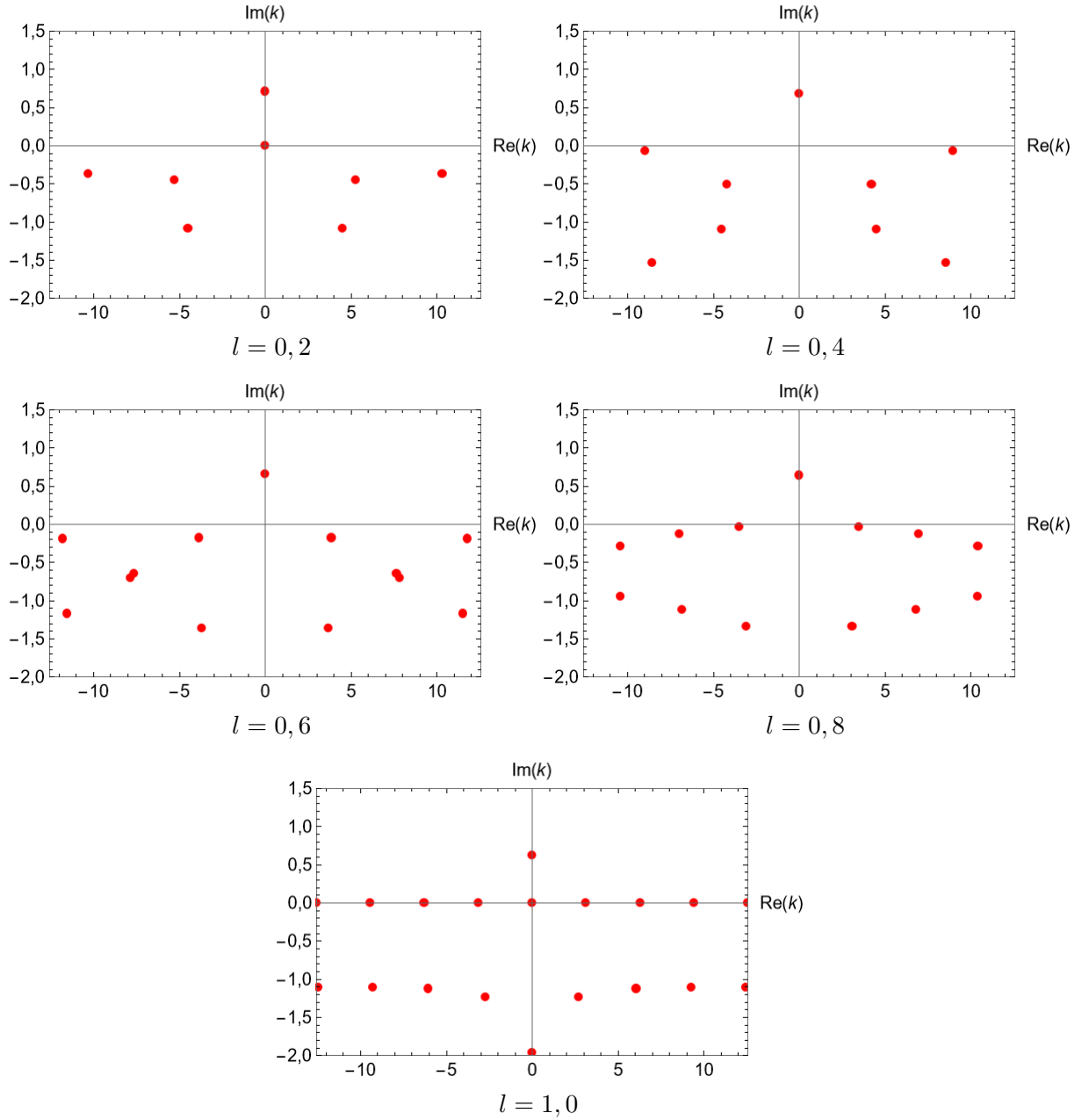
Fonte: A autora

um deslocamento dos polos para a parte inferior do gráfico. Outro aspecto interessante é que a medida que o comprimento das arestas l aumenta ocorre um acréscimo na quantidade de polos. Note que para todos os casos nos deparamos com polos duplos, os quais podem ser verificados pelo comportamento da curva de transmissão.

Com efeito, para o caso especial de $\alpha = 0$, os polos são dados por

$$\mathcal{P} = \frac{2n\pi - i \log 9}{2(l_1 + l_2)}, n \in \mathbb{Z}. \quad (5.2)$$

Figura 10 – Fluxo de polos no grafo C_2 ao variar o comprimento das arestas



Fonte: A autora

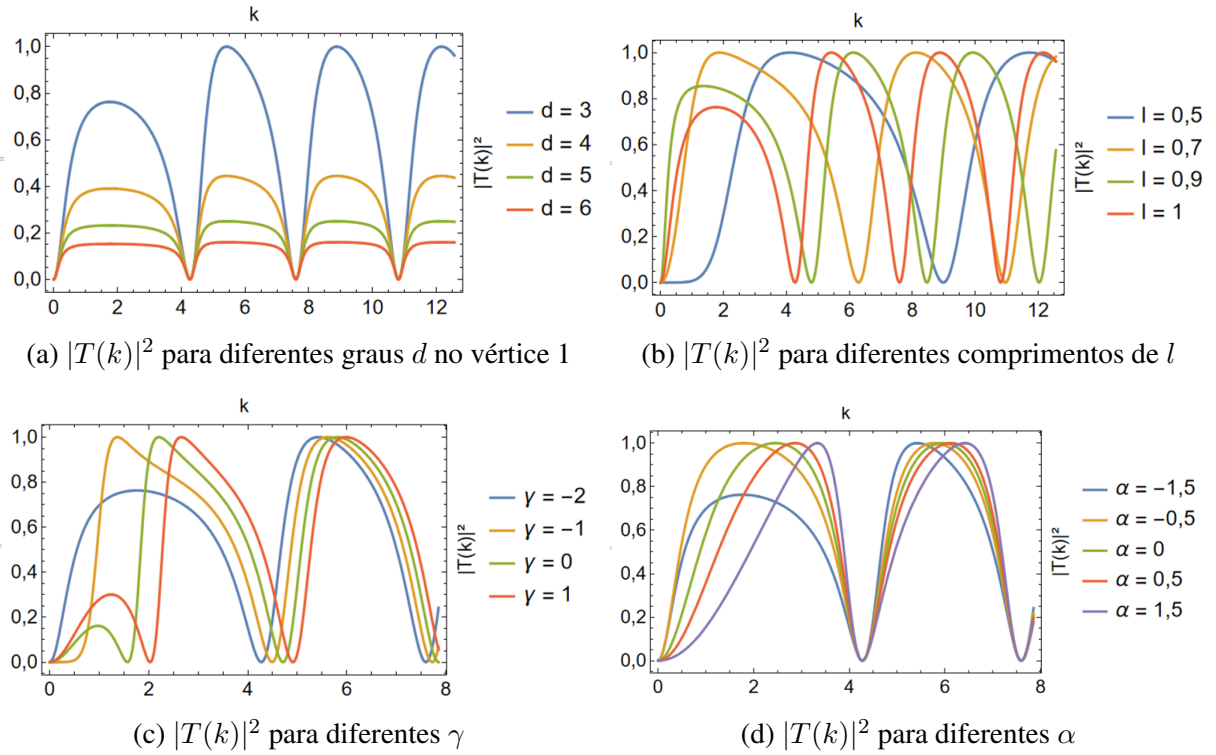
5.2 GRAFO ESTRELA

Para o grafo estrela S_2 (Figura 5) com duas *leads*, adotamos a condição de contorno do δ para o vértice de maior grau e a condição de contorno Robin para o outro, conforme os cálculos da Seção 3.3.

Para esse caso, a amplitude de transmissão

$$T(k) = \frac{2k(k + i\gamma)}{e^{-ikl}(dk + 2i\alpha)(k - i\gamma) - [(-2 + d)k + 2i\alpha](k + i\gamma)} \quad (5.3)$$

Figura 11 – Amplitude de transmissão $|T(k)|^2$ para o grafo S_2



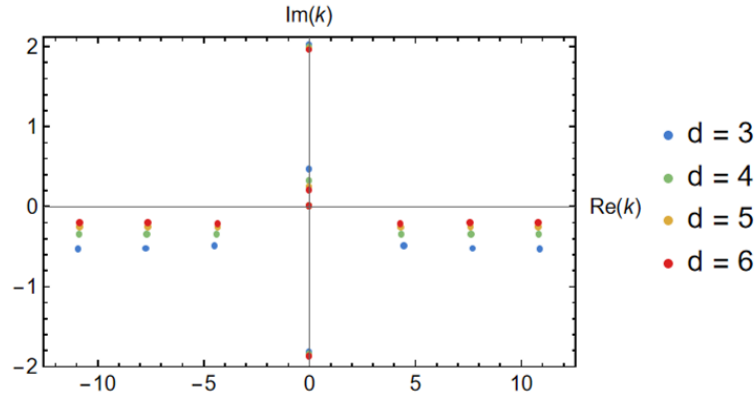
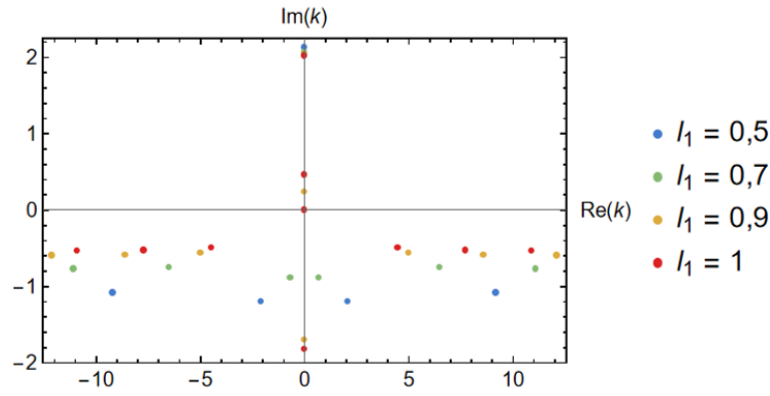
Fonte: A autora

apresenta seus picos deslocados para a parte inferior do quadrante conforme o grau d para o vértice 1 é variado, Figura 11 (a). Enquanto $|T(k)|^2$ tem seus picos próximos apesar do seu período ser deslocado significativamente de acordo com l , Figura 11 (b).

Num primeiro momento, para analisarmos o fluxo dos polos, variamos apenas o grau d do vértice 1 com $l = 1$ na Figura 12(a), e posteriormente o comprimento l com $d = 3$ na Figura 12(b), para ambos os casos $\gamma = -2$, $\alpha = -1,5$ pois, como mostramos nas Figuras 12 e 13, pudemos observar um maior surgimento de estados ligados com esses parâmetros. Com efeito, observamos um deslocamento desses estados conforme aumentamos o grau do vértice, além do incremento na quantidade de polos.

Posteriormente, analisamos a variação do comportamento dos polos bem como da transmissão para diferentes intensidades γ com $\alpha = -1,5$, e para diferentes α , quando $\gamma = -2$, referentes as condições de contorno de Robin e δ respectivamente, como mostramos nas Figuras 11(c) e 11(d). Concluímos que a variação de γ desloca a curva da transmissão horizontalmente (Figura 11 (c)), enquanto para α as curvas tem seus picos quase sobrepostos (Figura 11(d)).

Para o caso retratado na Figura 13, podemos ver que o surgimento de estados ligados ocorre quando $\gamma \leq -1$, $\gamma \in \mathbb{Z}$, ou, para $\alpha \leq -1$, $\alpha \in \mathbb{Z}$ na Figura 14. Com efeito, quanto menores os valores de α e γ , mais próximos os polos estão dos quadrantes superiores.

Figura 12 – Fluxo de polos no grafo S_2 (a) Fluxo de polos ao variarmos d (b) Fluxo de polos ao variarmos l

Fonte: A autora

5.3 CIRCUITO EM SÉRIE COMPOSTO POR GRAFO CICLO

Para a composição de circuitos em série utilizando grafo o ciclo C_2 , o cálculo da amplitude de transmissão é feito a partir do grafo caminho P_2 formado pelos vértices 2 e 3, sendo responsável por ligar os dois ciclos, Figura 15 (a).

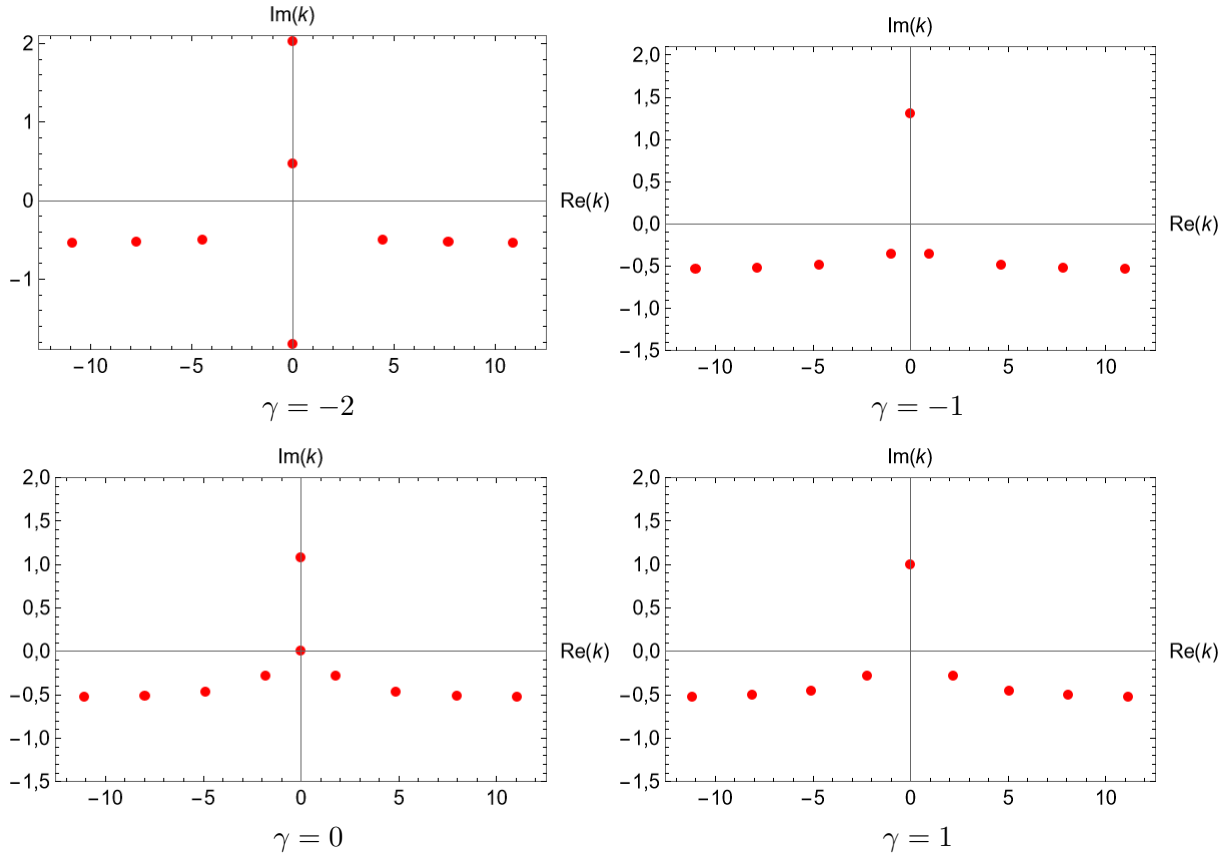
Assim, a amplitude de transmissão obtida via solução da função de Green (66, 38, 39) é dada por

$$T = \frac{t_1 t_2 e^{ikl}}{1 - r_1 r_2 e^{2ikl}}, \quad (5.4)$$

onde t_j e r_j são fornecidos pelas amplitudes de transmissão e reflexão, respectivamente, do grafo C_2 . Ou seja, t é dado pela Eq. (5.1) e por (3.77) temos que a reflexão será

$$r_1 = -\frac{(3 + 3e^{ik(l_1+l_2)})k^2 + 2i(-3 + e^{ik(l_1+l_2)})k\alpha - (e^{ik(l_1+l_2)} - 1)\alpha^2}{(-9 + e^{ik(l_1+l_2)})k^2 + 2i(-3 + e^{ik(l_1+l_2)})k\alpha - (e^{ik(l_1+l_2)} - 1)\alpha^2}, \quad (5.5)$$

para r_2 e t_2 trocamos l_1 e l_2 por l_4 e l_5 nas equações (5.1) e (5.5), referentes ao segundo ciclo. Dessa forma, ao substituirmos (5.1) e (5.5) em (5.4) obtemos a amplitude de espalhamento do

Figura 13 – Fluxo de polos no grafo S_2 para diferentes γ 

Fonte: A autora

circuito em série, utilizando a condição de contorno δ em todos os vértices.

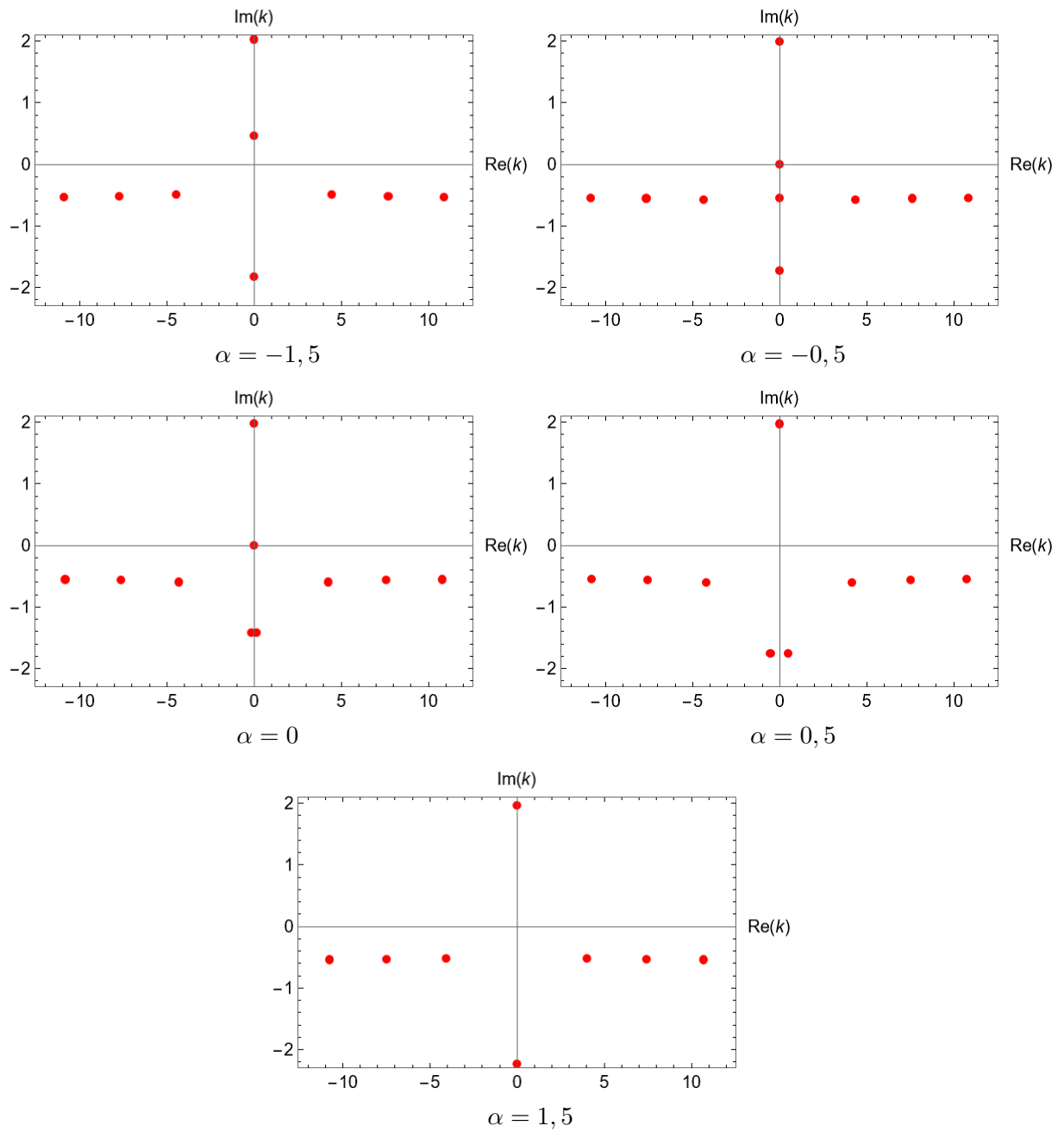
Nesse cenário, a curva de transmissão $|T(k)|^2$, Figura 16 (a), passa a ter três picos próximos ainda que para diferentes valores de α com $l = 1, 0$, o que nos sugere um agrupamento de polos, como observamos nas Figuras 16 (d-f). Ao variarmos o comprimento das arestas superiores dos ciclos (40) de forma que $l_1 = l_5$ e fixando $l_j = 1, j = 2, 3, 4$, vemos que os polos são deslocados para a parte inferior dos quadrantes conforme aumentamos o comprimento das arestas, além de um leve incremento na quantidade de polos, Figura 16 (c). Quando observamos a curva de transmissão tem sua largura reduzida, levando ao surgimento de linhas finas, Figura 16 (b).

A presença de linhas finas para a probabilidade da amplitude de transmissão é um fato interessante, já que este fato parece se relacionar com as chamadas ressonâncias topológicas, as quais são definidas como os polos da matriz de espalhamento que podem ser movidas para o eixo real formando um estado ligado no contínuo ao alterar algum comprimento da aresta continuamente, enquanto as condições de contorno permanecem inalteradas (17).

Apesar de não ser tão nítido para a composição em série de grafos C_2 ao analisarmos os grafos C_n com $n \geq 3$ nesse mesmo formato, vemos o surgimento dessas linhas (38, 39).

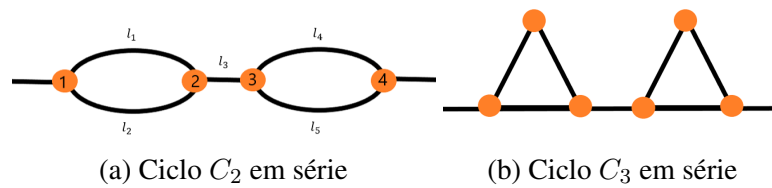
Para o caso em que $n = 3$ Figura 15 (b), a amplitude de transmissão também é dada por (5.4).

Figura 14 – Fluxo de polos no grafo S_2 para diferentes α

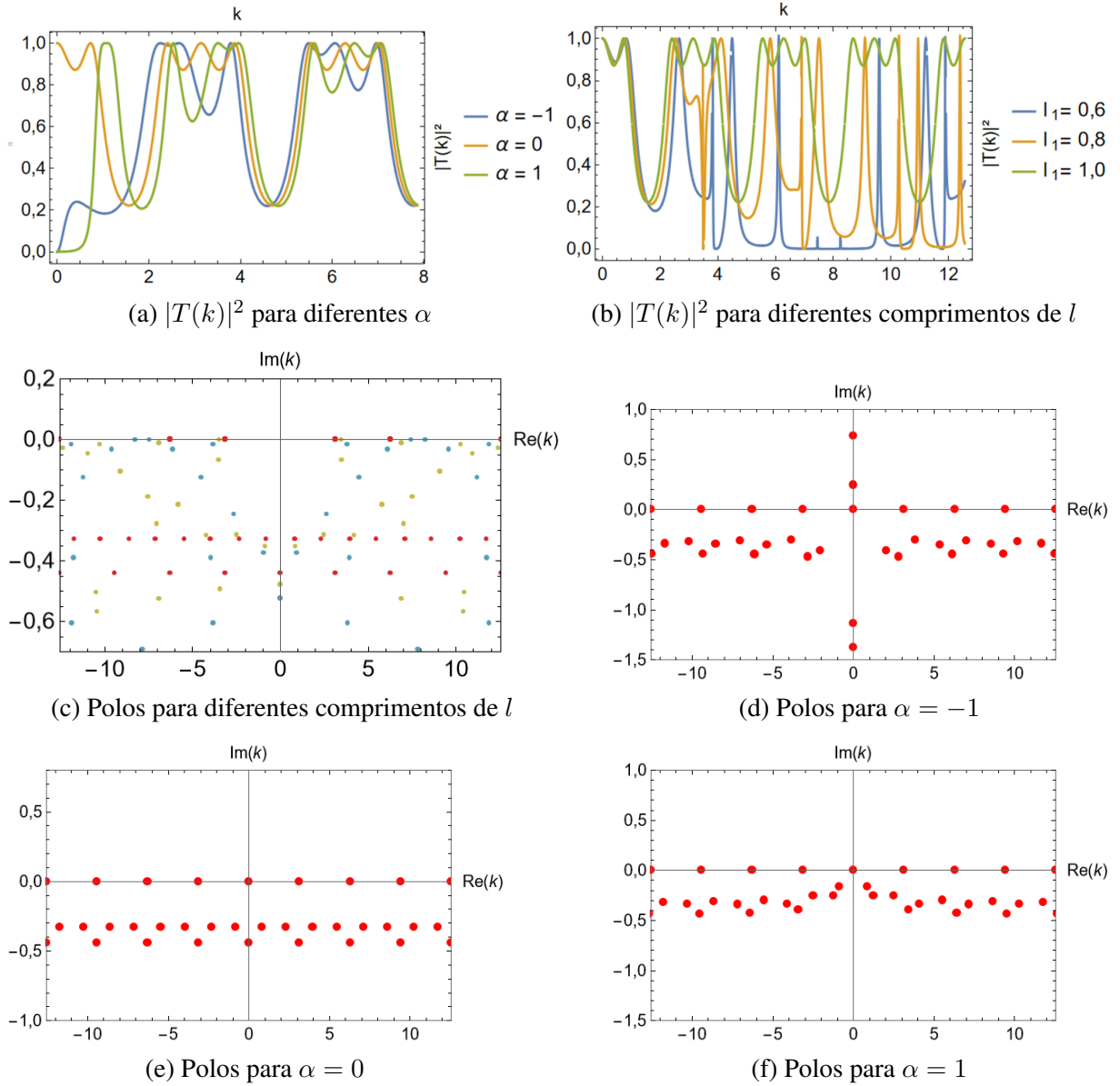


Fonte: A autora

Figura 15 – Circuito formado por grafos em série



Fonte: A autora

Figura 16 – Composição do grafo C_2 em série

Fonte: A autora

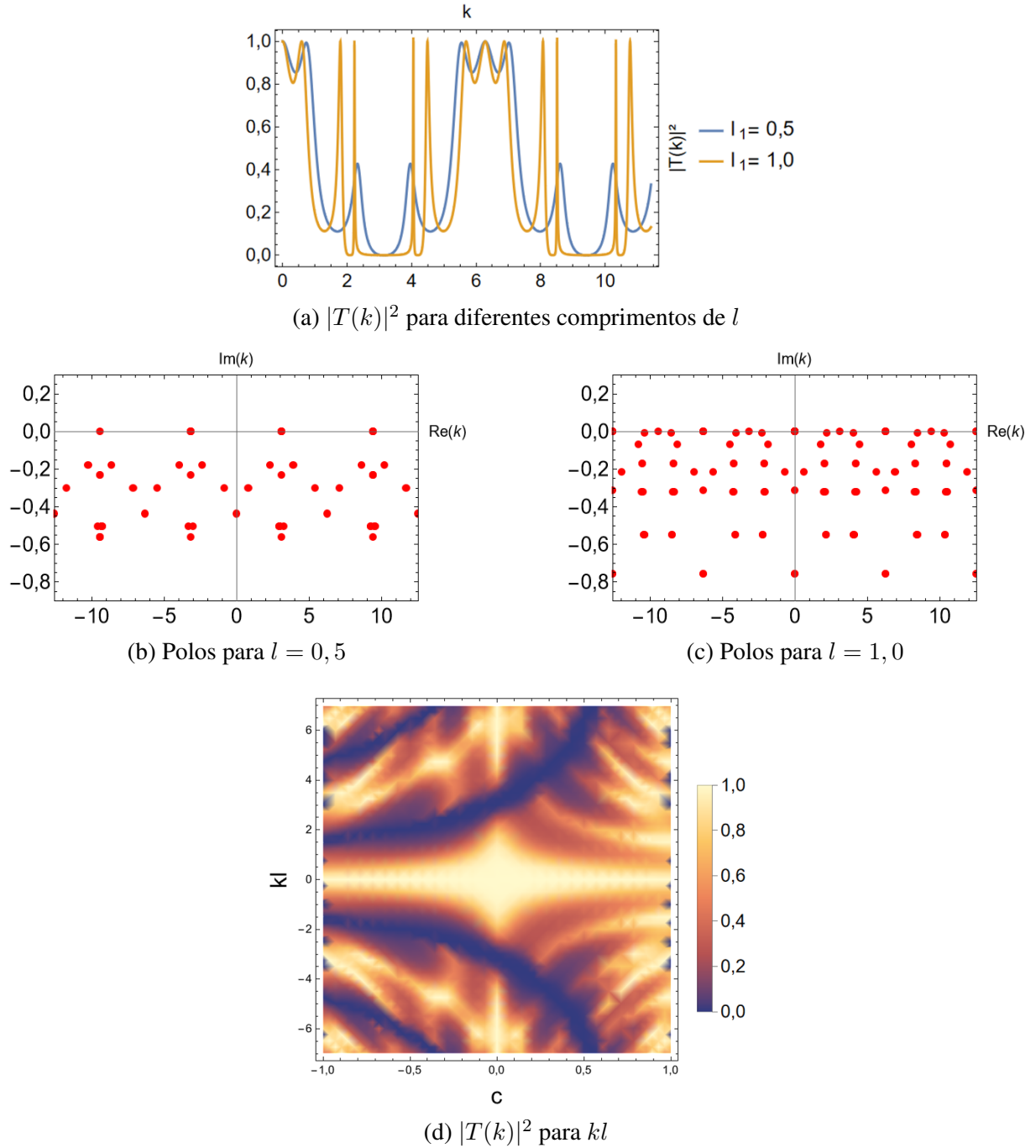
Entretanto, t_1 é dada de acordo com o apresentado em (3.89) e

$$r_1 = \frac{3 + e^{2ik(l_1+l_2)} + e^{2ikl_3} - 8e^{ik(l_1+l_2+l_3)} + 3e^{2ik(l_1+l_2+2l_3)}}{-9 + e^{2ik(l_1+l_2)} + e^{2ikl_3} + 8e^{ik(l_1+l_2+l_3)} - e^{2ik(l_1+l_2+l_3)}}, \quad (5.6)$$

para t_2 e r_2 apenas substituímos l_1, l_2 e l_3 por l_5, l_6 e l_7 respectivamente. Observe que para esta situação adotamos a condição de contorno Neumann - Kirchhoff.

Ao analisarmos a amplitude de transmissão notamos o surgimento de linhas finas mesmo ao variarmos o comprimento das arestas, Figura 17 (a). Quanto aos polos, Figura 17 (b) e 17 (c), observamos um comportamento similar a composição em série do grafo C_2 , ou seja, a proximidade com que esses polos se encontram, bem como o surgimento de polos com a mesma parte real $Re(k)$ e seu leve agrupamento. Outra abordagem interessante é adotar um comprimento $l_j = c \pm 1$, $j = 1, 2, 3, 5, 6$ e 7 , tal que $0 < c < 1$. Nessa situação a probabilidade

Figura 17 – Composição em série do grafo C_3 para diferentes comprimentos de l

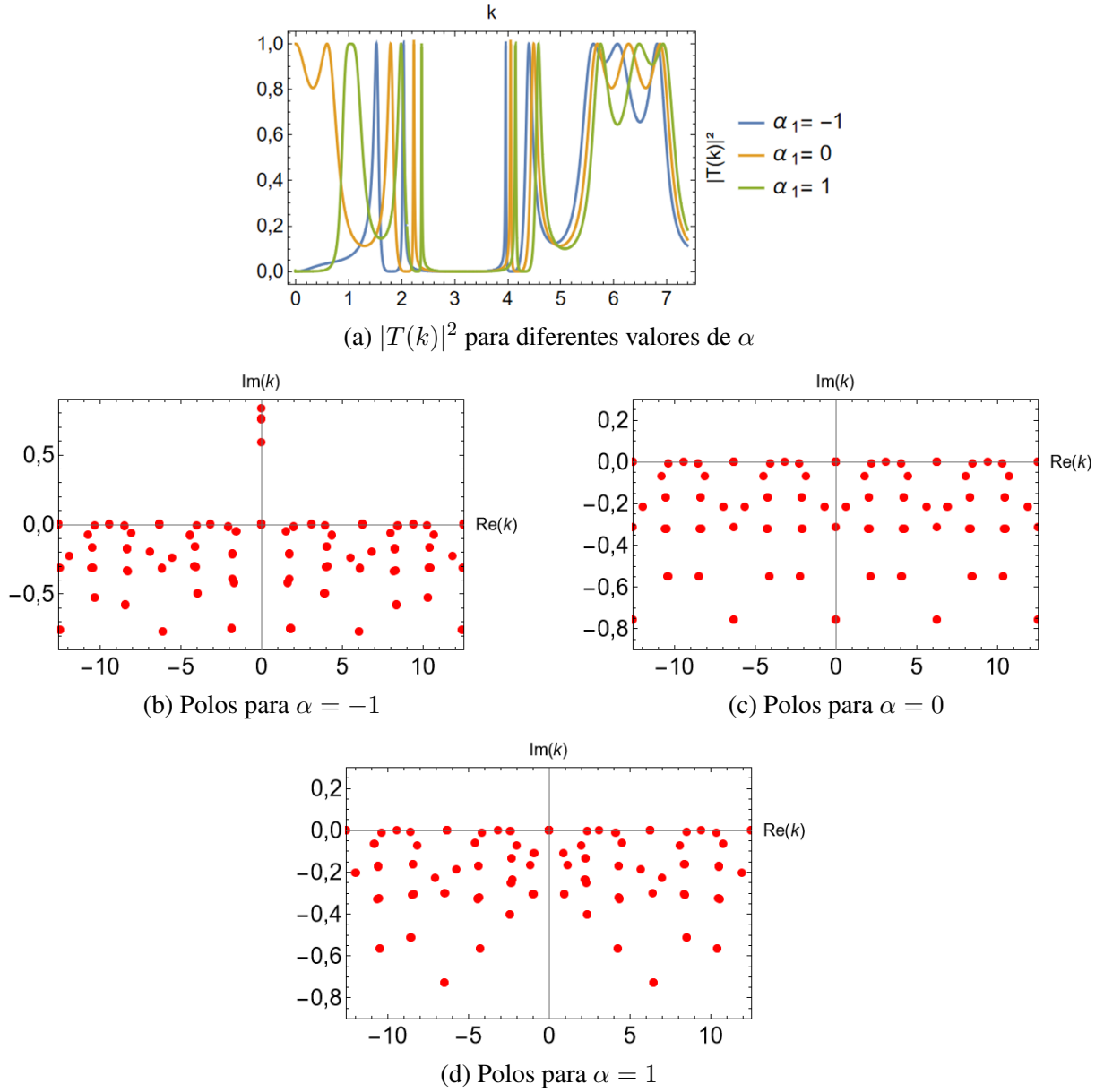


Fonte: A autora

de transmissão é apresentada na Figura 17(d). Para o caso em que fixamos $l = 1,0$ e variamos α , notamos que há um leve deslocamento no período do gráfico de $|T(k)|^2$, Figura 18 (a), todavia, as linhas finas observadas na Figura 17 (a) se mantém. Ao analisarmos os polos, verificamos o seu agrupamento conforme α aumenta e o surgimento de estados ligados quando $\alpha = -1$ Figura 18 (b-d).

Nessa perspectiva, para qualquer condição de contorno, podemos escrever $t = \frac{A}{B}$, e $r = \frac{C}{B}$

Figura 18 – Composição em série do grafo C_3 para diferentes valores de α



Fonte: A autora

onde

$$A = t_1 t_3 \left[(-1 + r_2(r_3 - t_3)z_2^2)z_3 - (r_1 - t_1)z_1^2(-r_2 + (r_2 - t_2)(r_2 + t_2) \right. \\ \left. \times (r_3 - t_3)z_2^2)z_3 + t_2 z_1 z_2 (-1 + (r_1 - t_1)(r_3 - t_3)z_3^2) \right],$$

$$B = -1 + 2t_1 t_2 t_3 z_1 z_2 z_3 + r_1 r_3 z_3^2 + r_2 z_2^2 (r_3 + r_1(-r_3^2 + t_3^2)z_3^2) + z_1^2 \\ \times [r_2(r_1 + r_3(-r_1^2 + t_1^2)z_3^2) + (r_2 - t_2)(r_2 + t_2)z_2^2(-r_1 r_3 + (r_1 - t_1)(r_1 + t_1) \\ (r_3 - t_3)(r_3 + t_3)z_3^2)]$$

e

$$\begin{aligned}
C = & r_1 (-1 + r_2 r_3 z_2^2) + 2(r_1 - t_1)t_1 t_2 t_3 z_1 z_2 z_3 - (r_1 - t_1)(r_1 + t_1)(-r_3 + r_2 \\
& \times (r_3 - t_3)(r_3 + t_3)z_2^2)z_3^2 + (r_1 - t_1)z_1^2[(r_1 + t_1)(r_2 + r_3(-r_2^2 + t_2^2)z_2^2) \\
& + (r_1 - t_1)(r_1 + 2t_1)(-r_2 r_3 + (r_2 - t_2)(r_2 + t_2)(r_3 - t_3)(r_3 + t_3)z_2^2)z_3^2].
\end{aligned}$$

Dessa forma, definimos t_j e r_j de acordo com as condições de contorno apropriadas e fazemos $z_j = e^{ikl_j}$. Podemos ainda utilizar este formato para C_2 , basta assumirmos que $z_1 = z_2 = e^{ik\frac{l}{2}}$ e $r_2 = 0, t_2 = 1$, ou seja, a condição Neumann - Kirchhoff no vértice 2, nos moldes da Figura 17.

Pelos resultados obtidos, observamos que o comportamento das ressonâncias está intimamente relacionado ao comprimento das arestas, assim como às condições de contorno adotadas. Além disso, o surgimento dos estados ligados ocorre exclusivamente quando a intensidade adotada, representada por α e γ , assume valores negativos. Um resultado inesperado foi constatado ao nos depararmos com o surgimento de polos duplos, presentes nos grafos ciclos.

Adicionalmente, ao dispor grafos em série, identificamos a presença de picos finos na probabilidade de transmissão, os quais podem ser associadas às ressonâncias topológicas (17). Essas ressonâncias foram verificadas experimentalmente (21) por meio de microondas e cabos coaxiais organizados na forma de grafos que possuem ciclos.

6 CONCLUSÕES

Neste trabalho, procuramos investigar o comportamento da probabilidade de transmissão e dos polos em diferentes grafos quânticos, motivados por resultados da literatura que têm ganhado destaque nas últimas décadas. Nesse contexto, deparamo-nos com diferentes metodologias de cálculo desses polos, como a matriz de espalhamento, o resolvente das ressonâncias e a função de Green.

Observamos que a matriz de espalhamento é o método mais tradicional na literatura, enquanto podemos dizer que o resolvente é o método mais rigoroso, em termos matemáticos. Já a função de Green exata para grafos quânticos possui um grande potencial na perspectiva dos problemas de espalhamento, apesar de nem sempre ser abordada.

Apesar das diferenças nos métodos de cálculo dos polos, observamos a equivalência entre os métodos utilizados. Todavia, percebe-se que, tanto para a matriz de espalhamento quanto para o resolvente, é necessária uma construção distinta para cada condição de contorno, uma vez que estas são definidas no início dos cálculos. Em contrapartida, no caso da função de Green, tais condições são requeridas apenas para a determinação dos coeficientes de transmissão, o que possibilita sua modificação de maneira mais ágil e eficiente. Em outras palavras, podemos dizer que o método da função de Green deixa as condições de contorno abertas.

Além do que foi mencionado anteriormente, verificamos que para grafos com poucos vértices e arestas, as matrizes que encontramos, embora sejam geradas de maneira simples, tornam os cálculos um tanto mais complicados. Entretanto, os diferentes métodos abordados fornecem uma análise rica e precisa dos polos presentes em cada grafo.

Sendo assim, verificamos quais parâmetros são responsáveis pela maior alteração do fluxo dos polos para cada modelo. Buscamos ainda, compreender como os parâmetros abordados influenciam na probabilidade de transmissão, e a forma como estas se relacionam com as ressonâncias. Assim, concluímos que as ressonâncias apresentam-se nos pontos em que $|T(k)|^2$ é máxima.

No caso do ciclo C_2 a variação do comprimento l traz mudanças mais significativas no comportamento dos polos e da amplitude de transmissão em comparação com a variação de α . Para o grafo estrela S_2 as mudanças mais consideráveis ocorrem com os diferentes valores de d e l adotados, embora o surgimento de estados ligados esteja diretamente relacionado a α e γ , principalmente quando $\gamma = -2$, e $\alpha = -1$, 5 quando há o surgimento de dois estados ligados. Finalmente, para a composição em série do grafo C_2 notamos as maiores mudanças com a variação do comprimento da aresta l como o surgimento das linhas finas para a probabilidade da amplitude de transmissão quando $l = 1, 0$, o que não ocorre ao fixarmos l e variarmos α . No caso da composição do C_3 em série, o surgimento das linhas finas é mais acentuado quando $l = 1, 0$ e consideramos $\alpha = -1, 0, 1$. Todavia ao variarmos l notamos uma mudança no comportamento dos polos bem como o desaparecimento dessas linhas.

No entanto, ainda há aspectos pouco explorados no estudo dos polos em grafos quânticos,

como as ressonâncias topológicas, que surgem a partir de estados ligados no contínuo, e a origem dos polos duplos. Ambos os fenômenos estão diretamente ligados à topologia do grafo, que deve apresentar um ciclo. Ademais, a análise dos polos em grafos com campo magnético representa uma área de interesse que merece ser explorada mais profundamente.

No futuro, pretendemos aprofundar este estudo para identificar com maior precisão os estados ligados no contínuo, compreender melhor o surgimento das ressonâncias topológicas e sua relação com as amplitudes de reflexão e transmissão, e o que leva ao surgimento de ressonâncias com $Re(k)$ iguais e $Im(k)$ diferentes. Além disso, buscamos explorar a ocorrência de polos sob diferentes perspectivas, ampliando nosso entendimento sobre o fenômeno.

REFERÊNCIAS

- 1 SCHEINERMAN, E. **Mathematics: A Discrete Introduction**. [S.l.]: 2. ed. Brooks/Cole, 2005.
- 2 HARARY, F. **Graph Theory**. [S.l.]: 1 ed. Addison-Wesley Publishing Company, 1969.
- 3 NETTO, P. **Grafos: Teoria, Modelos, Algoritmos**. [S.l.]: 5 ed. Blucher, 2012.
- 4 GAO, J. et al. Analoggenie: A generative engine for automatic discovery of analog circuit topologies. **arXiv:2503.00205**, v.1, p. 1–19, 2025.
- 5 PAULING, L. The diamagnetic anisotropy of aromatic molecules. **The journal of Chemical Physics**, v.4, p. 673–677, 1936.
- 6 GRIFFITH, S. A free-electron theory of conjugated molecules. part 1—polycyclic hydrocarbons. **Transactions of the Faraday Society, Royal Society of Chemistry**, v. 49, p. 345–351, 1953.
- 7 SAJJAD, A. et al. Lower bounds on bipartite entanglement in noisy graph states. **arXiv:2404.09014**, v.1, p. 1–20, 2024.
- 8 SUDEVAN, S.; DASY, S. n-qubit states with maximum entanglement across all k vs n-k bi-partitions: A graph state approach. **arXiv:2201.05622**, v.2, p. 1–9, 2022.
- 9 BEER, K. et al. Training deep quantum neural networks. **Nature Communications**, v. 11, p. 1–6, 2020.
- 10 KOTTOS, T.; SMILANSKY, U. Periodic orbit theory and spectral statistics for quantum graphs. **Annals of Physics**, v. 274, p. 76 –124, 1999.
- 11 BERKOLAIKO, G.; KUCHMENT, P. **Introduction to quantum graphs**. [S.l.]: American Mathematical Society, 2013.
- 12 KURASOV, P. **Spectral Geometry of Graphs**. [S.l.]: Birkhäuser, 2023. 9, 13, 17
- 13 VERDIERE, Y. C.; TRUC, F. Topological resonances on quantum graphs. **Annales Henri Poincaré**, v. 19, p. 1419–1438, mar. 2018.
- 14 INGREMEAU, M. Scattering resonances of large weakly open quantum graphs. **Pure and applied Analysis**, v. 4, n. 1, p. 49–83, 2022.
- 15 INGREMEAU, M. A trace formula for scattering resonances of unbalanced quantum graphs. **North-Western European Journal of Mathematics**, n. 9, p. 77–99, 2023.
- 16 BERKOLAIKO, G. An elementary introduction to quantum graphs. **ArXiv:1603.07356**, v. 1, p. 1–30, 2016.
- 17 GNUTZMANN, S.; SCHANZ, H.; SMILANSKY, U. Topological resonances in scattering on networks (graphs). **Physical Review Letters**, v. 110, p. 1–5, 2013.
- 18 KOTTOS, T.; SMILANSKY, U. Quantum graphs: a simple model for chaotic scattering. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 36, p. 3501–3524, 2003.
- 19 LIPOVSKY, J. Quantum graphs and their resonance properties. **Acta Physica Slovaca**, v.66, p. 265–363, 2016.

- 20 ANDRADE, F. M. et al. Green's function approach for quantum graphs: An overview. **Physics Reports**, v. 647, p. 1–46, 2016.
- 21 LAWNICZAK, M. et al. Application of topological resonances in experimental investigation of a fermi golden rule in microwave networks. **Physical Review E**, v.103, p. 1–8, 2021.
- 22 WANG, C.-Z. et al. Bound states in the continuum induced via local symmetries in complex structures. **Physical Review Applied**, v. 22, p. 14010–14020, 2024.
- 23 AFSHIN, A.; BIALOUS, M.; SIRKO, L. Quantum graphs and microwave networks as narrow-band filters for quantum and microwave devices. **Physical Review E**, v. 108, p. 034219–034226, 2023.
- 24 GRIFFITHS, D. J. **Mecânica Quântica**. [S.l.]: 2.ed.São Paulo: Pearson, 2011.
- 25 SILVA, A. A.; ANDRADE, F. M.; CARAVELLI, F. Quantum graph models for transport in filamentary switching. **Physical Review B**, v.111, p.045145–045163, 2025.
- 26 LAWRIE, T. M. et al. Application of quantum graph theory to metamaterial design: Negative refraction of acoustic waveguide modes. **Physical Review Materials**, v.8, p. 105201–105209, 2024.
- 27 BELCHEV, B.; NEALE, S.; WALTON, M. Flow of s-matrix poles for elementary quantum potentials. **Can. J. Physics**, v. 89, p. 1127–1140, 2011.
- 28 SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. **Modern Quantum Mechanics**. [S.l.]: 2. ed. San Francisco: Pearson, 2011.
- 29 KUCHMENT, P. Quantum graphs: Ii. some spectral properties of quantum and combinatorial graphs. **Journal of Physics A: Mathematical and general**, v. 38, p. 4887–4900, 2005.
- 30 LIPOVSKY, J. **Quantum Graphs and Their Generalizations**. Tese (Doutorado) — Nuclear Physics Institute ASCR, 2011.
- 31 AGUILAR, J.; COMBES, J. M. A class of analytic perturbations for one-body schrödinger hamiltonians. **Commun. math. Physics**, v.22, p. 269—279, 1971.
- 32 SIGAL, I. M. Complex transformation method and resonances in one-body quantum systems. **Annales de l'Inst. Henri Poincaré**, v.41, p.103–114, 1984.
- 33 SIMON, B. Resonances and complex scaling: A rigorous overview. **International Journal of Quantum Chemistry**, v.14, p. 529–542, 1978.
- 34 SJOSTRAND, J.; ZWORSKI, M. Complex scaling and the distribution of scattering poles. **Journal of the American Mathematical Society**, v. 4, n. 4, p. 729–769, 1991.
- 35 BALSLEV, E.; COMBES, J. M. Spectral properties of many-body schrödinger operators with dilatation-analytic interactions. **Commun. math. Physics**, v. 22, p. 280—294, 1971.
- 36 DYATLOV, S.; ZWORSKI, M. **Mathematical Theory of Scattering Resonances**. [S.l.]: Providence: American Mathematical Society, 2019.

- 37 CINTIO, A.; MICHELANGELI, A. Self-adjointness in quantum mechanics: a pedagogical path. **Quantum Stud.: Math. Found.**, v. 8, p. 271–306, 2021.
- 38 DRINKO, A.; ANDRADE, F. M.; BAZEIA, D. Narrow peaks of full transmission in simple quantum graphs. **Physical Review A**, v. 100, p. 1–9, 2019.
- 39 DRINKO, A.; ANDRADE, F. M.; BAZEIA, D. Simple quantum graphs proposal for quantum devices. **The European Physical Journal Plus**, v. 135, p. 1–7, 2020.
- 40 AHMED, M. et al. Meta-networks: Reconfigurable cable network topologies for interference control. **IEEE International Joint EMC/SI/PI and EMC Europe Symposium**, p. 520–523, 2021.
- 41 BOLLOBAS, B. **Modern Graph Theory**. [S.l.]: Springer, 1998.
- 42 GODSIL, C.; ROYLE, G. F. **Algebraic Graph Theory**. [S.l.]: Springer, 2001. (Graduate Texts in Mathematics).
- 43 DIESTEL, R. **Graph Theory**. [S.l.]: Springer Berlin Heidelberg, 2010. (Graduate Texts in Mathematics).
- 44 LIMA, E. L. **Análise Real volume 1: Funções de uma variável**. [S.l.]: 12. ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2017.
- 45 CIPOLATTI, R. **Cálculo Avançado**. [S.l.]: 1. ed. Rio de Janeiro: SBM, 2018.
- 46 KUCHMENT, P. Quantum graphs: an introduction and a brief survey. **arXiv:0802.3442**, v. 1, p. 1–39, 2008.
- 47 KUCHMENT, P. Quantum graphs: I. some basic structures. **Waves Random Media**, v. 14, p. 107–128, 2004.
- 48 FULLING, S. A.; KUCHMENT, P.; WILSON, J. H. Index theorems for quantum graphs. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, v. 40, p. 14165–14184, 2007.
- 49 MAHESWARI, A. U.; PREMA, P.; SHASTRY, C. S. Resonant states and transmission coefficient oscillations for potential wells and barriers. **American Journal Physics**, v. 78, p. 412 – 417, 2010.
- 50 KOSTRYKIN, V.; SCHRADER, R. Kirchhoff’s rule for quantum wires. **Journal Physics A: Math. Gen.**, v. 32, p. 595–630, 1999.
- 51 AMARAL, B.; BARAVIERA, A. T.; CUNHA, M. O. T. **Mecânica Quântica para Matemáticos em Formação**. [S.l.]: Rio de Janeiro: IMPA, 2011.
- 52 BROUWER, A. E.; HAEMERS, W. H. **Spectra of graphs**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012.
- 53 BERKOLAIKO, G.; WINN, B. Relationship between scattering matrix and spectra of quantum graphs. **Transactions of the American Mathematical Society**, v. 362, n. 12, p. 6261–6277, 2010.
- 54 KRORI, K. D.; DEY, S. Gamow’s alpha decay theory revisited. **Springer Nature**, v. 29, p. 977–984, 2024.

- 55 SOARES, M. G. **Cálculo em uma variável complexa**. [S.l.]: 1. ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2014.
- 56 EXNER, P.; LIPOVSKY, J. Equivalence of resolvent and scattering resonances on quantum graphs. **ArXiv:0610065**, v.1, p.1–9, 2006.
- 57 ANDRADE, F. M.; SEVERINI, S. Unitary equivalence between the green's function and schr/odinger approaches for quantum graphs. **Physical Review A**, v. 98, p. 1–5, 2018.
- 58 KOTTOS, T.; SCHANZ, H. Statistical properties of resonance widths for open quantum graphs. **Waves Random Media**, v. 14, p. 91–105, 2003.
- 59 DAVIES, E. B.; PUSHNITSKI, A. Non-weyl resonance asymptotics for quantum graphs. **ANALYSIS AND PDE**, v. 4, n. 5, p. 729–756, 2011.
- 60 ECONOMOU, E. N. **Green's Functions in Quantum Physics**. [S.l.]: 3.ed. Springer, 2006.
- 61 NEWTON, R. G. **Scattering theory of waves and particles**. [S.l.]: 2. ed. New York: Springer Science+Business Media, 1982.
- 62 ANDRADE, F. M. Exact green's function for rectangular potentials and its application to quasi-bound states. **Physics Letters A**, v. 378, p.1461–1468, 2014.
- 63 FONDA, L. Bound states embedded in the continuum and the formal theory of scattering. **Annals of Physics**, v. 22, p. 123–132, 1963.
- 64 HSU, C. W. et al. Bound states in the continuum. **Nature Reviews | Materials**, v. 1, p. 1–13, 2016.
- 65 WALTNER, D.; SMILANSKYA, U. Scattering from a ring graph - a simple model for the study of resonances. **Acta Physica Polonica A**, v. 124, p. 1087–1090, 2013.
- 66 SILVA, A. A.; ANDRADE, F. M.; BAZEIA, D. Scattering entropies of quantum graphs with several channels. **European Physical Journal Plus**, v. 139, p. 1–24, 2024.