

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

GEYSON MAQUINÉ BATALHA

TRANSPORTE QUÂNTICO EM REDES HEXAGONAIS

**MANAUS
2022**

GEYSON MAQUINÉ BATALHA

TRANSPORTE QUÂNTICO EM REDES HEXAGONAIS

Dissertação apresentada como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física, do Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Amazonas.

Orientador: Dr. Mircea Daniel Galiceanu.

**MANAUS
2022**

Ficha Catalográfica

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

B328t Batalha, Geyson Maquiné
Transporte quântico em redes hexagonais / Geyson Maquiné
Batalha . 2022
49 f.: il. color; 31 cm.

Orientador: Mircea Daniel Galiceanu
Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal do Amazonas.

1. Caminhada Quântica. 2. Tempo Contínuo. 3. Grafeno. 4. Fulereo. I. Galiceanu, Mircea Daniel. II. Universidade Federal do Amazonas III. Título

GEYSON MAQUINÉ BATALHA

TRANSPORTE QUÂNTICO EM REDES HEXAGONAIS

Dissertação apresentada como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física, do Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Amazonas.

Aprovado em 28 de janeiro de 2022:



Prof. Dr. Mircea Daniel Galiceanu, Presidente



Prof. Dr. Octavio Daniel Rodriguez Salmon, Membro



Prof. Dr. Antonio Volta, Membro

AGRADECIMENTOS

A realização deste trabalho contou com o apoio de diversas pessoas as quais gostaria de expressar meus agradecimentos.

- Em primeiro lugar agradeço a Deus, por sempre me manter firme para superar os obstáculos até hoje.
- A minha mãe por sempre me incentivar e apoiar na minha jornada,
- A minha irmã por também apoiar e auxiliar quando eu preciso.
- Ao professor Dr. Mircea Daniel Galiceanu pelos ensinamentos, sugestões e orientação deste trabalho.
- Aos professores do Programa de Pós-Graduação em Física (PPGFIS), por compartilharem seus conhecimentos durante todo o curso.
- Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo auxílio financeiro e a Universidade Federal do Amazonas (UFAM) pela infraestrutura para realização desta pesquisa.

RESUMO

A caminhada quântica é o análogo quântico da caminhada aleatória, e se divide em dois modelos: o de tempo discreto e o de tempo contínuo. Neste trabalho foi utilizado o modelo de tempo contínuo para analisar a probabilidade média de retorno e o seu valor médio ao longo do tempo nas redes de grafeno e fulereno. Essas quantidades são determinadas a partir dos autovalores e autovetores da matriz Laplaciano. Para as estruturas de grafeno, a medida que reduzimos o número de hexágonos ao longo da direção x , a eficiência do transporte diminui. Além disso, essa perda também ocorre quando temos uma menor quantidade de vértices. Logo, a rede mais eficiente foi o grafeno com 17 faces hexagonais ao longo de x e 1 face hexagonal ao longo de y , e a mais ineficiente foi o fulereno C_{60} .

Palavras-chaves: Caminhada Quântica. Tempo Contínuo. Grafeno. Fulereno.

ABSTRACT

The quantum walk is the quantum analog of the random walk, and is divided into two models: the discrete-time and the continuous-time models. In this work, the continuous-time model was used to analyze the average return probability and its average value over time in graphene and fullerene networks. These quantities are determined from the eigenvalues and eigenvectors of the Laplacian matrix. For the graphene structures, as we reduce the number of hexagons along the x direction, the transport efficiency decreases. Moreover, this loss also occurs when we have a smaller number of vertices. Therefore, the most efficient network was the graphene with 17 hexagonal faces along x and 1 hexagonal face along y , and the most inefficient was fullerene C_{60} .

Keywords: Quantum Walk. Continuous Time. Graphene. Fullerene.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Ilustração das ilhas e as pontes que as ligam entre si e às margens (C e D) do rio Pregel na cidade de Königsberg.	12
Figura 2 – Esquema do problema das Pontes de Königsberg, onde os vértices representam as margens e ilhas, e as pontes correspondem as arestas.	12
Figura 3 – Exemplo de grafo com número de vértices $V = 4$ e arestas $E = 4$	13
Figura 4 – Representações do grafo G_1 , em que a primeira estrutura apresenta arestas que se cruzam, resultando em um grafo planar. Enquanto as três últimas estruturas, possuem arestas independentes, conseqüentemente serão grafos planares.	13
Figura 5 – Representação dos sólidos Platônicos (parte superior) e seus respectivos diagramas de Schlegel (parte inferior).	14
Figura 6 – Na esquerda ilustra o grafo associado ao cubo com vértices e faces enumerados em preto e azul, respectivamente. A direita temos o diagrama de Schlegel deste sólido com sua enumeração correspondente.	14
Figura 7 – Distribuição eletrônica em orbitais do carbono, a esquerda representa a configuração eletrônica no estado fundamental e a direita o seu estado excitado. Observamos que a energia necessária para promover um elétron para camada mais externa corresponde a diferença de energia entre os subníveis $2s$ e $2p$ que é cerca de 4 eV.	17
Figura 8 – Distribuição eletrônica em orbitais para as hibridizações do carbono, que da esquerda para direita temos os tipos sp , sp^2 e sp^3 . Os orbitais hibridizados são originados a partir da superposição dos orbitais $2s$ e $2p$	17
Figura 9 – Estrutura favo de mel composta por sub-redes A e B , representadas por círculos branco e preto, respectivamente. Os vetores \vec{a}_1 e \vec{a}_2 indicam os vetores primitivos da sub-rede A de tamanho a	18
Figura 10 – O grafeno é considerado a “Mãe” de todas as formas gráficas, em que sua construção 2D pode gerar materiais de outras dimensionalidades. O material pode ser embrulhado para formar fulerenos (0D), enrolado forma nanotubos (1D) ou empilhado forma o grafite (3D).	19
Figura 11 – Na parte superior mostra a semelhança entre C_{60} e uma bola de futebol, abaixo mostra a paridade entre C_{70} e a bola de rúgbi.	20
Figura 12 – Ilustração de uma rede unidimensional, em que o caminhante executa passos discretos de tamanho ℓ	21
Figura 13 – Gráfico da distribuição de probabilidade obtida pela equação (2.25) para uma caminhada aleatória de 50 passos. Tal distribuição, traz a probabilidade do caminhante ir para esquerda ou direita, com isso obtemos uma gaussiana centrada no seu ponto de partida (ou seja $x = 0$).	22

Figura 14 – Representação de uma cadeia de Markov, em que cada estado é fixo durante um período de tempo n	23
Figura 15 – Diagrama de transição de estados para uma caminhada aleatória unidimensional com estados inteiros. O processo tem início a partir do estado 0, cada passo executado para direita ou esquerda, gera uma probabilidade de transição p e $1 - p$ respectivamente.	24
Figura 16 – Grafo de transição correspondente a caminhada aleatória unidimensional, no qual as arestas unidirecionais determinam tanto a probabilidade do caminhante ir para direita quanto a esquerda.	25
Figura 17 – Representação das folhas de grafeno enumeradas, no qual à esquerda tem-se uma rede com dimensão $(H_x, H_y)=(17,1)$ na parte superior e na região inferior a estrutura com $(H_x, H_y)=(8,3)$. Ao lado direito, é apresentado a folha de grafeno de tamanho $(H_x, H_y)=(5,5)$	33
Figura 18 – Diagrama de Schlegel para os fulerenos, na parte superior é apresentada a posição dos átomos de carbono para rede C_{60} e na parte inferior para C_{70}	34
Figura 19 – Representação esquemática das etapas implementadas para obtenção dos parâmetros de probabilidade.	35
Figura 20 – Gráfico da probabilidade média de retorno $\bar{p}(t)$ para uma caminhada aleatória clássica. Observa-se que no limite ao longo do tempo, a probabilidade decai a um valor de $1/N$, em que $N = 70$ para as folhas de grafeno com dimensões $(17,1)$, $(8,3)$, $(5,5)$ e o fulereno C_{70} , e $N = 60$ para o fulereno C_{60}	36
Figura 21 – Gráfico da probabilidade média de retorno quântico $\bar{\pi}(t)$ das redes de grafeno e fulereno. Constata-se que nas curvas dos fulerenos as oscilações reduzem quando maior é o número de vértices na rede, enquanto no grafeno o aumento de H_y resulta na redução de desempenho no transporte.	37
Figura 22 – Gráficos de contorno da probabilidade de transição $\pi_{a,b}(10)$. Em (a) e (b) temos o comportamento da caminhada dos fulerenos C_{60} e C_{70} , respectivamente. Temos ainda, em (c), (d) e (e) as respectivas transições do caminhante nas estruturas de grafeno com dimensões $(17,1)$, $(8,3)$ e $(5,5)$	39
Figura 23 – Representação gráfica do valor médio $\bar{\chi}$ e seu limite inferior $\bar{\chi}^*$ obtidos para as folhas de grafeno e fulerenos.	40
Figura 24 – Espectro de autovalores para as folhas de grafeno e os fulerenos. As curvas mais contínuas representam estruturas com menor ocorrência de autovalores degenerados e as regiões em que λ é constante são as degenerescências.	41

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
1.1	Objetivo	11
1.2	Organização do Trabalho e contribuições	11
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	12
2.1	Teoria de Grafos e Matriz Laplaciano	12
2.2	Nanoestruturas de Carbono	16
2.3	Caminhadas Aleatórias Clássicas	21
2.4	Caminhadas Aleatórias Clássicas de Tempo Discreto em Grafos	23
2.5	Caminhadas Aleatórias Clássicas de Tempo Contínuo em Grafos	25
2.6	Caminhadas Quânticas de Tempo Contínuo	30
3	PROCEDIMENTOS	33
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	36
4.1	Probabilidade Média de Retorno Clássico $\bar{p}(t)$	36
4.2	Probabilidade Média de Retorno Quântico $\bar{\pi}(t)$	36
4.3	Probabilidade de Transição Quântica $\pi_{a,b}(t)$	37
4.4	Eficiência de $\bar{\chi}$	40
5	CONCLUSÃO	42
	REFERÊNCIAS	43

1 INTRODUÇÃO

A caminhada aleatória foi introduzida através dos estudos de Brown (1828) sobre o movimento irregular das partículas de pólen na superfície da água, que em sua homenagem, atualmente é conhecido como movimento browniano. O termo caminhada aleatória foi originalmente proposto por Pearson (1905) em uma carta a Nature. Nesta carta, ele mostrou um modelo simples para descrever a infestação de mosquitos em uma floresta (RYCROFT; BAZANT, 2005). Pode-se aplicar este modelo em diversas outras áreas além da Física: na Economia, para a dinâmica de preços de mercado descrito em Scalas (2006) ou na Biologia, em que é possível descrever o movimento das bactérias (SCHNITZER, 1993). Porém, quando se trata de elementos naturais em pequenas escalas, devemos encontrar uma nova forma de modelar o problema. Para essa eventualidade, surge o análogo quântico para as caminhadas aleatórias, que envolve partículas quânticas como fótons ou elétrons. As caminhadas quânticas surgiram como consequência da computação quântica, que é uma área que unifica a computação clássica e a mecânica quântica, e teve sua origem pelas ideias de Feynman (1982), quando ele propôs o computador quântico. Nessa abordagem, o caminhante percorre todos os caminhos possíveis em superposição, resultando em uma interferência de amplitudes de probabilidade em cada posição (SEPHTON *et al.*, 2019).

Existem dois tipos de caminhadas quânticas: o modelo de tempo discreto e o de tempo contínuo. O modelo de tempo discreto foi introduzido inicialmente por Aharonov *et al.* (1993), no qual é abordado por meio da introdução do espaço moeda (\mathcal{H}_M) como responsável da dinâmica do caminhante, juntamente com o espaço posição (\mathcal{H}_P). Anos depois, Farhi e Gutmann (1998) apresentaram uma abordagem de tempo contínuo para as caminhadas quânticas (CTQW). A proposta deste modelo é a relação entre a matriz de transferência clássica (\mathbf{T}) e o Hamiltoniano quântico (\mathbf{H}), em que é mantido o espaço de posição \mathcal{H}_P e o tempo se torna uma variável contínua, tirando a necessidade da utilização do espaço moeda. A base da abordagem é a utilização das cadeias de Markov de tempo contínuo, tendo os vértices da rede como estados quânticos que formam uma base no espaço de Hilbert (FARHI; GUTMANN, 1998). Os elementos da matriz \mathbf{H} serão determinados através das conexões, existentes ou não, entre os vértices. Deste modo, o sistema quântico evoluirá no tempo através da introdução do operador evolução $U(t) = e^{-i\mathbf{H}t}$.

As caminhadas quânticas possuem relevância nos estudos de várias áreas da ciência. Podemos destacar as pesquisas de Knight *et al.* (2003) sobre cavidades ópticas, e também, a computação quântica e a construção de algoritmos quânticos vistos no trabalho de Childs (2009). Estes cálculos computacionais são ferramentas essenciais na teoria de informação quântica. Ressaltam-se dois importantes exemplos, como o algoritmo de Shor (1994), que tem utilidade na fatoração de números primos (na aplicação nos métodos de criptografia de mensagens) e o algoritmo de Grover (1997), empregado no rastreamento de informações em um banco de dados. Esses estudos motivaram implementações experimentais como mostram Spring *et al.* (2012) que construíram uma máquina quântica baseada no modelo de amostragem de bósons através de circuitos fotônicos, e no trabalho de Böhm *et al.* (2015) que implementaram algoritmos quânticos

de busca utilizando guias de ondas ressonantes em redes de grafeno.

O carbono é um dos elementos mais abundantes na natureza, ele se destaca por sua versatilidade de formar vários tipos de ligações, resultando na existência de vários alótropos (RASHID, 1985). Durante muito tempo, o grafite e o diamante eram os principais alótropos do carbono, essa situação muda quando Kroto *et al.* (1985) sintetizaram os fulerenos C_{60} e C_{70} ao vaporizarem o grafite através de um laser em uma atmosfera contendo gás hélio. Recentemente, Novoselov *et al.* (2004) produziram e caracterizaram o grafeno através da esfoliação mecânica do grafite utilizando uma fita adesiva.

O grafeno e o fulereno são conhecidos como nanoestruturas de carbono, por serem materiais de escala nanométrica (HU *et al.*, 2006). Eles despertam interesse da comunidade científica devido a suas características notáveis como maior resistência mecânica, alta condutividade elétrica, excelentes propriedades térmicas, ópticas e magnéticas (ISMAIL; GOH, 2018; MONDAL *et al.*, 2019). O fulereno tem mostrado potencial nas áreas da biomedicina na inibição vírus (HURMACH *et al.*, 2021) e da eletrônica na produção de transistores orgânicos (ZHANG *et al.*, 2007). Já o grafeno pode ser implementado na fabricação de transistores (LIN *et al.*, 2010) e em membranas para dessalinização da água (HOMAEIGO HAR; ELBAHRI, 2017).

1.1 Objetivo

O objetivo desta dissertação é utilizar o modelo de caminhadas quânticas de tempo contínuo para determinar qual tipo de nanoestrutura apresenta o transporte mais eficiente e o mais ineficiente. Nessa linha de raciocínio, o trabalho de Bougroura *et al.* (2016) investigam a eficiência do transporte nas redes C_{60} e nanotubos de carbono utilizando o modelo de caminhada quântica discreta. Já em nossa abordagem, vamos utilizar três estruturas de grafeno com diferentes dimensionalidades e os fulerenos C_{60} e C_{70} .

1.2 Organização do Trabalho e contribuições

Esta dissertação está dividida em 5 capítulos, contanto com a introdução. No segundo capítulo apresenta-se o referencial teórico, no qual retrata conceitos fundamentais de teoria de grafos e matriz Laplaciano, Nanoestruturas de Carbono, caminhadas aleatórias clássicas e sua abordagem em grafos, caminhadas quânticas. No terceiro capítulo descreve-se os procedimentos, que envolve as ferramentas utilizadas para construção das redes e os gráficos, além de como será feita a modelagem computacional. No quarto capítulo, apresentam-se os resultados e discussões da pesquisa, no que diz respeito as medidas de probabilidade clássica e quântica. No quinto capítulo termos a conclusão e após as referências.

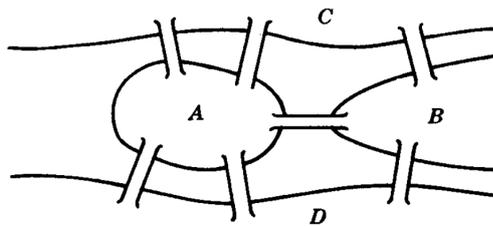
Pretende-se com esta pesquisa, contribuir para estudos de transporte quântico do grafeno e estruturas relacionadas, algoritmos quânticos e informação quântica. E ainda, implementações experimentais como em qubits supercondutores (YAN *et al.*, 2019), experimentos de algoritmos de busca quântica (BÖHM *et al.*, 2015) e chips fotônicos (TANG *et al.*, 2018).

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Teoria de Grafos e Matriz Laplaciano

O conceito de grafos foi introduzido por Leonard Euler (1736), quando tentava demonstrar que o problema das pontes de Königsberg não teria solução. Königsberg (atualmente chamada de Kaliningrado na Rússia) era localizada na Prússia Oriental. Pregel, o rio que corta a cidade, continha duas ilhas que eram ligadas por uma ponte. As ilhas ligavam-se ainda às margens com mais 6 pontes, como é representado na Figura 1. O problema discutido entre os habitantes da cidade era encontrar um percurso para um passeio que iniciasse de uma das margens e caminhasse uma única vez cada uma das sete pontes e voltasse para a margem de origem (NETTO; JURKIEWICZ, 2017).

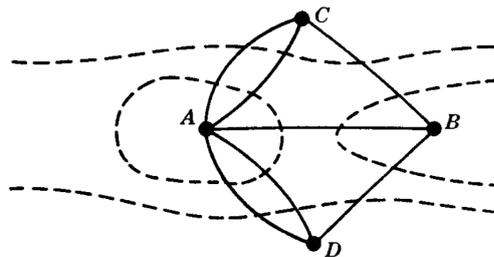
Figura 1 – Ilustração das ilhas e as pontes que as ligam entre si e às margens (C e D) do rio Pregel na cidade de Königsberg.



Fonte: Lipschutz e Lipson (2009).

Euler analisou que o número de caminhos entre uma margem para uma ilha, ou entre ilhas era sempre ímpar. Tal análise é ilustrada na Figura 2, em que cada ponte é representada por uma linha e cada margem ou ilha é ilustrada por um ponto. A partir desta observação, ele percebeu a impossibilidade de transitar por um ponto que tivesse um número ímpar de ligações (PORCELLO; BANKS, 2018). Desta forma, o problema só haveria solução se, e somente se, a quantidade de linhas conectadas em cada ponto seja um número par (VASCONCELOS, 2018).

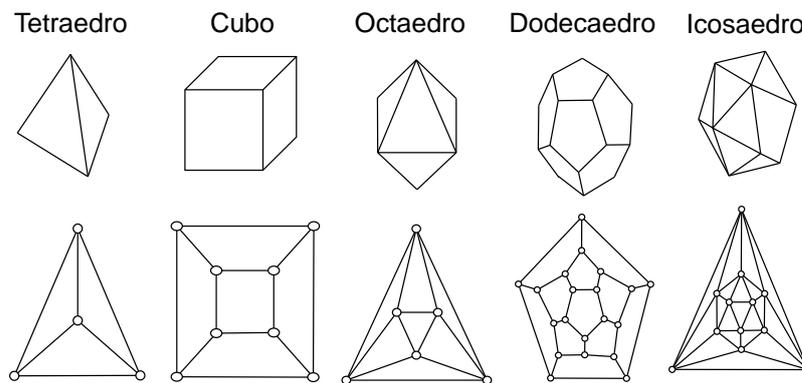
Figura 2 – Esquema do problema das Pontes de Königsberg, onde os vértices representam as margens e ilhas, e as pontes correspondem as arestas.



Fonte: Lipschutz e Lipson (2009).

No espaço tridimensional, grafos são representados através de poliedros, que são sólidos constituídos de faces poligonais em sua superfície (NETTO; JURKIEWICZ, 2017; KING, 1992). A topologia dos vértices e arestas neste espaço é expresso por meio de um grafo planar conhecido como diagrama de Schlegel (O'KEEFFE; HYDE, 2020). A Figura 5 apresenta exemplos de poliedros mais conhecidos com seus respectivos diagramas de Schlegel. Essas estruturas são chamadas de sólidos Platônicos que incluem: tetraedro, cubo (hexaedro), octaedro, dodecaedro e icosaedro (CHARTRAND; ZHANG, 2020).

Figura 5 – Representação dos sólidos Platônicos (parte superior) e seus respectivos diagramas de Schlegel (parte inferior).

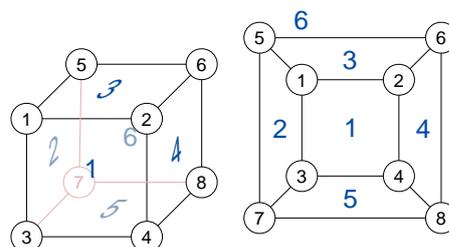


O número de vértices V , arestas E e faces F de um sólido podem ser relacionados mediante a fórmula de Euler para poliedros (GROSS *et al.*, 2014), isto é,

$$V - E + F = 2. \quad (2.1)$$

Devido a correspondência entre grafos e poliedros mencionada anteriormente, a expressão de Euler é também válida em grafos planares (GRATTAN-GUINNESS, 1994; LIU, 2018). A Figura 6 ilustra o exemplo dessa observação, em que o grafo associado ao cubo e seu diagrama de Schlegel são enumerados de acordo com suas faces e vértices correspondentes. Portanto, vemos que o cubo possui pela fórmula de Euler $V - E + F = 8 - 12 + 6 = 2$ e em seu diagrama há $V - E + F = 8 - 12 + 6 = 2$.

Figura 6 – Na esquerda ilustra o grafo associado ao cubo com vértices e faces enumerados em preto e azul, respectivamente. A direita temos o diagrama de Schlegel deste sólido com sua enumeração correspondente.



Para conseguirmos trabalhar com grafos computacionalmente, é necessário representá-los matricialmente (SARKAR; CHAKRABORTY, 2016). Desta forma, através da matriz adjacência podemos representar vértices ligados entre si. De acordo com Newman (2018), a matriz adjacência \mathbf{A} de um grafo simples possui elementos A_{ij} , de tal modo que

$$A_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se ocorrer ligação entre os vértices } i \text{ e } j, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.2)$$

Podemos ver, por exemplo, que a ilustração da Figura 3 possui a matriz adjacência dada por:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Podemos observar que $A_{ij} = A_{ji}$, demonstrando que não há distinção dos sentidos de uma aresta qualquer, que nos traz a afirmação que a matriz adjacência é uma matriz simétrica. Outro ponto interessante, são os elementos da diagonal principal que serão nulos, comprovando a inexistência de ligações nas próprias arestas.

Existe uma outra matriz de grande importância, relacionada com a matriz adjacência, que nos permite identificar outras propriedades da estrutura dos grafos (NEWMAN, 2018). Tal matriz, é chamada de Laplaciano \mathbf{L} , por conta de sua relação com o operador Laplaciano ∇^2 e é definida como

$$\mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{A}, \quad (2.4)$$

sendo \mathbf{A} a matriz adjacência e \mathbf{D} a matriz diagonal escrita em termos do número de ligações k_i dos vértices (também chamada como grau de ligações), ou seja,

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} k_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & k_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & k_3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

A matriz Laplaciano também é chamada de matriz de conectividade como é visto em trabalhos de Galiceanu e Strunz (2016) e Mülken e Blumen (2011), seus elementos são definidos por:

$$L_{ij} = \begin{cases} k_i, & i = j, \\ -1, & \text{se } i \neq j \text{ e ocorrer ligação entre os vértices } i \text{ e } j, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.6)$$

Podemos observar, por exemplo, a partir da Figura 3, que a matriz \mathbf{L} será:

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Do mesmo modo analisado na matriz adjacência, a matriz \mathbf{L} também é simétrica. Além disso, ela é real e positiva semi-definida como é analisado em Pozrikidis (2014).

A matriz Laplaciano, relacionada com seus autovalores e autovetores é descrita na seguinte forma

$$\mathbf{LW} = \mathbf{\Lambda W}, \quad (2.8)$$

dado que $\mathbf{\Lambda}$ é uma matriz diagonal com os autovalores do Laplaciano e \mathbf{W} é uma matriz coluna com seus autovetores, que satisfaz $\mathbf{W}^T = \mathbf{W}^{-1}$. Assim, podemos escrever seus elementos como:

$$L_{ij} \mathbf{w}_i = \lambda_i \mathbf{w}_i, \quad (2.9)$$

em que \mathbf{w}_i será o autovetor ortogonal com qualquer elemento da matriz \mathbf{W} e terá um autovalor $\lambda_i \in \mathbb{R}$, correspondente. Além disso, foi dito anteriormente que a matriz \mathbf{L} é semi-definida, então seus autovalores serão:

$$0 = \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_N,$$

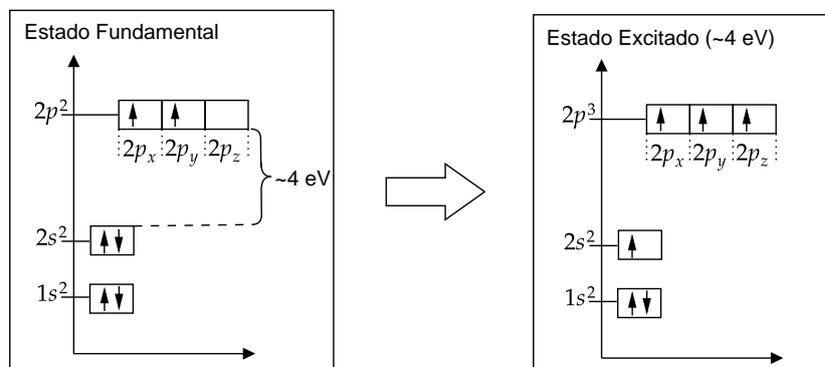
sendo que o primeiro autovalor será sempre zero, enquanto o restante serão valores positivos diferentes de zero (POZRIKIDIS, 2014).

2.2 Nanoestruturas de Carbono

O carbono pertence ao grupo 14 da tabela periódica, seu átomo contém seis elétrons com configuração eletrônica de $1s^2 2s^2 2p^2$ no estado fundamental (TORRES *et al.*, 2020). Os dois elétrons do orbital $1s$ são fortemente ligados ao núcleo, enquanto os quatro elétrons restantes são chamados de elétrons de valência, pois possuem ligações mais fracas e pertencem aos orbitais $2s$ e $2p$ (GAVRILENKO, 2020).

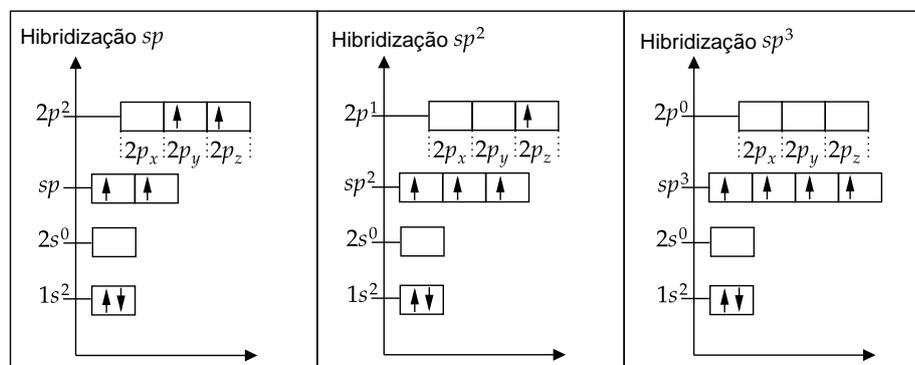
Os elétrons de valência podem ocupar parcialmente orbitais $2s$ e $2p$, porque a diferença de energia entre esses subníveis é pequena (≈ 4 eV). E ainda, a função de onda desses quatro elétrons podem se sobrepor e formar orbitais hibridizados (YASUDA *et al.*, 2003). O orbital $2s$ é uma função de onda que pode ocupar dois elétrons de spins opostos. Por outro lado, o orbital $2p$ se divide em três funções de onda, ou seja, três orbitais orientados nas direções x , y e z (PROCTOR *et al.*, 2017). A Figura 7 apresenta a distribuição eletrônica desses orbitais, que são representados por setas verticais e suas direções indicam estados de spin do elétron (YOUNG *et al.*, 2018). A transição do carbono para o estado excitado necessita de cerca de 4 eV de energia, e assim um elétron de $2s$ será promovido a um orbital $2p$ vazio.

Figura 7 – Distribuição eletrônica em orbitais do carbono, a esquerda representa a configuração eletrônica no estado fundamental e a direita o seu estado excitado. Observamos que a energia necessária para promover um elétron para camada mais externa corresponde a diferença de energia entre os subníveis $2s$ e $2p$ que é cerca de 4 eV .



A partir do estado excitado, o carbono irá se hibridizar, levando seus elétrons formarem uma ligação simples e uma tripla (sp), duas ligações simples e uma dupla (sp^2) e quatro ligações simples (sp^3). Na Figura 8 são mostrados os três tipos de hibridizações do carbono, sendo que mistura entre os orbitais $2s$ e $2p$ resultam em um novo subnível intermediário preenchido apenas com um elétron. Torres *et al.* (2020) argumentam que dois orbitais híbridos sp são oriundos de um orbital $2s$ e um $2p$, e sua geometria é linear com ângulo entre seus orbitais de 180° . Enquanto os orbitais sp^2 são formados por um orbital $2s$ e dois $2p$, e sua geometria é trigonal plana com ângulo entre seus orbitais de 120° . Já o orbital sp^3 é construído a partir de um orbital $2s$ e quatro $2p$, e sua geometria é tetraédrica com ângulo entre seus orbitais de $109,5^\circ$. Vale ressaltar que todos os tipos de hibridizações realizam ligações σ entre seus vizinhos. Porém, a sp e a sp^2 não ocorre superposição de todos os orbitais $2p$, com isso elas formam ligações π que são responsáveis por suas ligações duplas e triplas.

Figura 8 – Distribuição eletrônica em orbitais para as hibridizações do carbono, que da esquerda para direita temos os tipos sp , sp^2 e sp^3 . Os orbitais hibridizados são originados a partir da superposição dos orbitais $2s$ e $2p$.

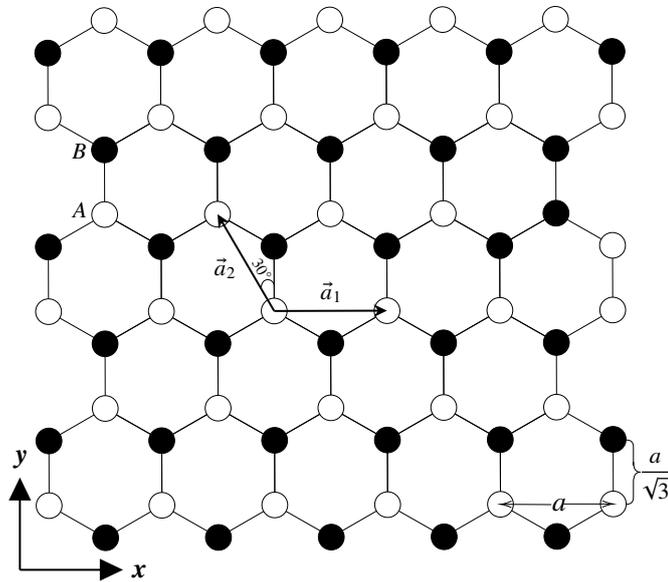


A hibridização do carbono é base para formação de alótropos, em razão de seus diferentes tipos de ligações (LAGOW *et al.*, 1995). Essas substâncias são constituídas por estruturas favo de mel (*honeycomb*) contendo anéis hexagonais com seis átomos de carbono cada (MOHAN *et*

al., 2018; YAHYA, 2010). Tal estrutura não é uma rede braval, pois o arranjo de átomos se difere quando observamos, por exemplo, os ligantes dos átomos *A* e *B* como mostra a Figura 9. Porém, podemos encontrar redes hexagonais utilizando as sub-redes de *A* ou *B* representadas pelos círculos branco e preto, respectivamente (KUBOZONO, 2019). Logo, considerando a sub-rede *A* de tamanho *a* e com distância entre os vizinhos mais próximos de $a/\sqrt{3} = 1,42 \text{ \AA}$ (YANG *et al.*, 2020), seus vetores primitivos \vec{a}_1 e \vec{a}_2 serão

$$\vec{a}_1 = a\hat{i} \quad \text{e} \quad \vec{a}_2 = -\frac{a}{2}\hat{i} + \frac{a\sqrt{3}}{2}\hat{j}. \quad (2.10)$$

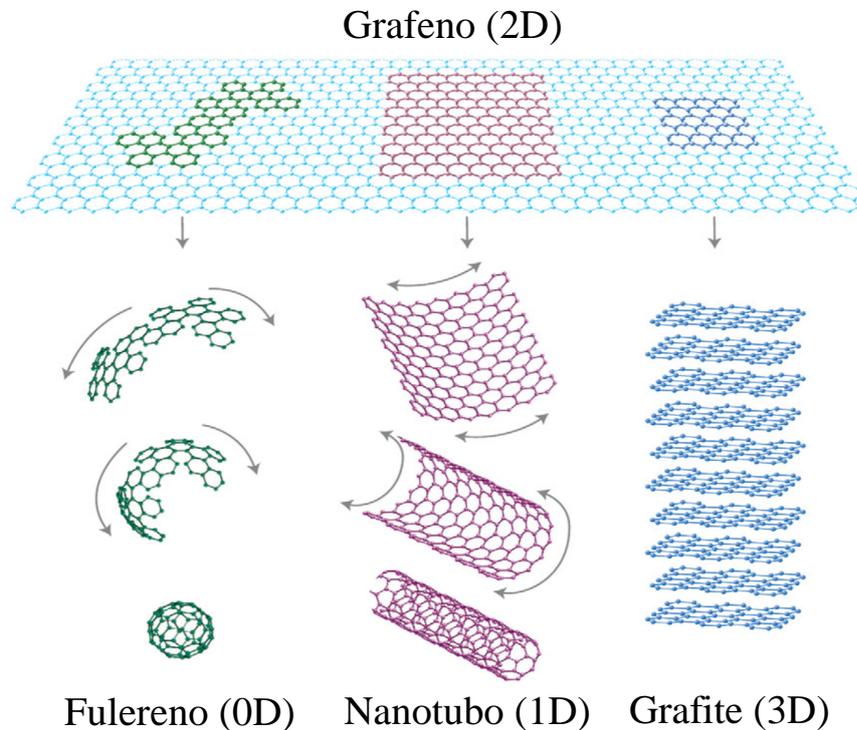
Figura 9 – Estrutura favo de mel composta por sub-redes *A* e *B*, representadas por círculos branco e preto, respectivamente. Os vetores \vec{a}_1 e \vec{a}_2 indicam os vetores primitivos da sub-rede *A* de tamanho *a*.



O grafeno é formado por uma folha (ou monocamada) de átomos de carbono dispostos bidimensionalmente (2D) em uma estrutura favo de mel. A partir dele, pode-se construir materiais gráfiticos com outras dimensionalidades. Conforme visto na Figura 10, podemos embrulhá-lo para gerar fulerenos (0D), enrolá-lo para obter nanotubos de carbono (1D) e empilhá-lo para produzir o grafite (3D) (WANG *et al.*, 2011).

Cada átomo do grafeno é covalentemente ligado a três outros átomos de carbono com hibridização do tipo sp^2 . Dessa forma, os orbitais hibridizados formam ligações σ no plano da folha de grafeno, enquanto que o orbital $2p_z$, realiza ligações do tipo π que são distribuídas perpendicularmente no plano da estrutura (YANG *et al.*, 2018). As ligações σ são covalentes fortes e responsáveis pelas propriedades mecânicas e elásticas do grafeno (WONG; AKINWANDE, 2011). Em contrapartida, as ligações π não se conectam com átomos de carbono e permanecem como elétrons livres, que se movem facilmente por toda estrutura. Com isso, o grafeno é considerado um bom condutor com propriedades elétricas superiores (YILDIZ *et al.*, 2021).

Figura 10 – O grafeno é considerado a “Mãe” de todas as formas gráficas, em que sua construção 2D pode gerar materiais de outras dimensionalidades. O material pode ser embrulhado para formar fulerenos (0D), enrolado forma nanotubos (1D) ou empilhado forma o grafite (3D).



Fonte: Adaptado de Geim e Novoselov (2007).

Fulerenos são moléculas esferoidais de carbono, em forma de gaiolas ocas e fechadas, cuja sua estrutura é constituída por anéis hexagonais e pentagonais (AMER, 2010; FOWLER; MANOLOPOULOS, 2006). A hibridização dessa molécula é predominantemente sp^2 , porém como seu arranjo de átomos não é planar, ocorre a presença de algumas hibridizações sp^3 (PUTZ, 2020).

Do ponto de vista matemático, estruturas de fulereno C_n são poliedros esféricos contendo número de vértices $V = n$ de três ligações e arestas $E = 3n/2$ (FOWLER; MANOLOPOULOS, 2006). Consequentemente, o número de faces obtidas utilizando a fórmula de Euler é $F = n/2 + 2$. Também podemos determinar a quantidade de faces hexagonais H e pentagonais P (AMER, 2010), escrevendo o número de faces como

$$F = H + P, \quad (2.11)$$

e o número de arestas

$$E = \frac{(6H + 5P)}{2}. \quad (2.12)$$

Então, igualando a equação (2.12) com número arestas obtido anteriormente, teremos

$$\frac{3n}{2} = \frac{(6H + 5P)}{2}, \quad (2.13)$$

ou

$$n = \frac{(6H + 5P)}{3}. \quad (2.14)$$

Para encontrar o número de faces hexagonais e pentagonais, vamos igualar a equação (2.11) com sua expressão anterior,

$$H + P = \frac{n}{2} + 2, \quad (2.15)$$

substituindo n pela equação (2.14), chega-se no número de faces pentagonais

$$H + P = \frac{(6H + 5P)}{6} + 2$$

$$6H - 6H + 6P - 5P = 12$$

$$P = 12. \quad (2.16)$$

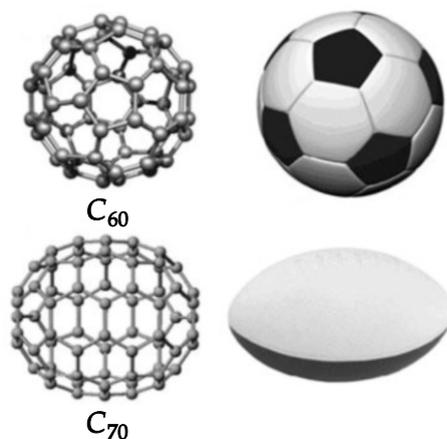
Com o valor de P alcançado, iremos substituí-lo na relação (2.15) e adquirir a seguinte expressão para quantidade de faces hexagonais

$$H = \frac{n}{2} - 10. \quad (2.17)$$

Portanto, todo fulereno C_n é formado por 12 anéis pentagonais e $n/2 - 10$ anéis hexagonais (FOWLER; MANOLOPOULOS, 2006).

A estrutura C_{60} é a molécula mais abundante da família dos fulerenos, ela é constituída por 12 pentágonos e 20 hexágonos similar a uma bola de futebol, como mostra a Figura 11 (KROTO *et al.*, 1985). A segunda molécula mais abundante é o C_{70} , contém 12 pentágonos e 25 hexágonos e seu formato é parecido com uma bola de rúgbi (DINADAYALANE; LESZCZYNSKI, 2010).

Figura 11 – Na parte superior mostra a semelhança entre C_{60} e uma bola de futebol, abaixo mostra a paridade entre C_{70} e a bola de rúgbi.

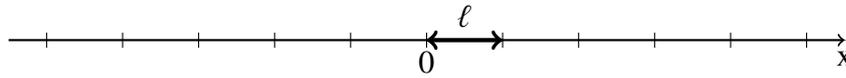


Fonte: Dinadayalane e Leszczynski (2010).

2.3 Caminhadas Aleatórias Clássicas

A caminhada aleatória é uma sucessão de passos, em que a direção de cada passo é aleatório, ou seja, segue uma lei de probabilidade (CASQUILHO; TEIXEIRA, 2012). Para exemplificar, será considerado inicialmente uma partícula que caminha ao longo de um determinado eixo (abscissa), conforme mostra a Figura 12, partindo da origem $x = 0$. Tal partícula executa passos discretos de tamanho ℓ , que tem grau de liberdade para direita ou esquerda, cada passo possui uma distribuição de probabilidade em que denotamos p para o lado direito e q para o esquerdo. Com isso, pode-se afirmar que a probabilidade total de cada passo é dada por $\wp_T = p + q = 1$ e como consequência $q = 1 - p$ (LEONEL, 2015). Em N passos que um caminhante realiza,

Figura 12 – Ilustração de uma rede unidimensional, em que o caminhante executa passos discretos de tamanho ℓ



teremos que n_1 passos serão realizados a direita e n_2 para a esquerda. Dessa forma, o número total de passos será

$$N = n_1 + n_2. \quad (2.18)$$

Também existe a possibilidade de determinar a quantidade de passos realizadas por um caminhante, para se deslocar em uma posição x . Segundo Leonel (2015), esse número de passos efetivos é definido por

$$n = n_1 - n_2. \quad (2.19)$$

Então pelo resultado de (2.19), podemos definir o deslocamento efetivo por

$$x = n \cdot \ell. \quad (2.20)$$

A partir do que foi descrito, obtemos três situações que podem ocorrer no deslocamento efetivo n :

1. Caso $n_1 > n_2$, o caminhante terá deslocamento efetivo para a direita.
2. No caso $n_1 < n_2$, o deslocamento efetivo é executado para a esquerda.
3. Quando $n_1 = n_2$, ocorre que o caminhante pode ter feito inúmeros tipos de trajetórias, porém seu deslocamento efetivo é nulo.

Dado dois eventos independentes, sendo a probabilidade p do caminhante dar um passo para direita e $q = 1 - p$ a probabilidade de dar um passo para esquerda, para uma ocorrência de N passos, onde n_1 são passos executados para a direita e n_2 executados para esquerda, podemos afirmar que a probabilidade de uma sequência de passos será do tipo $\wp = (p \cdot p \cdot p \cdot p) \cdot (q \cdot q \cdot q \cdot q)$, ou seja,

$$\wp = p^{n_1} \cdot q^{n_2}. \quad (2.21)$$

Existem maneiras distintas para se obter n_1 passos para direita e n_2 passos para esquerda, dado um N número de passos. Assim, é possível enunciar que o número de sequências diferentes possíveis para uma combinação n_1 e n_2 será

$$N_{\varphi} = \frac{N!}{n_1! \cdot n_2!}. \quad (2.22)$$

Levando em consideração a ocorrência de várias sequências distintas, sua probabilidade em um movimento de N passos é descrita como

$$\varphi_N(n_1) = \frac{N!}{n_1! \cdot n_2!} \cdot p^{n_1} \cdot q^{n_2}. \quad (2.23)$$

Pela equação (2.18), podemos obter a probabilidade em termos de n_1 como

$$\varphi_N(n_1) = \frac{N!}{n_1! \cdot (N - n_1)!} \cdot p^{n_1} \cdot q^{N-n_1}. \quad (2.24)$$

As caminhadas aleatórias obedecem o teorema do limite central, em que a somas das probabilidades tendem a uma distribuição gaussiana (WANG *et al.*, 2012). A equação (2.24) descreve a distribuição de probabilidade correspondente ao sucesso de passos a direita. Podemos ainda reescrever a equação (2.23) em termos do número de passos efetivo, somando e subtraindo as equações (2.18) com (2.19) e teremos respectivamente as relações:

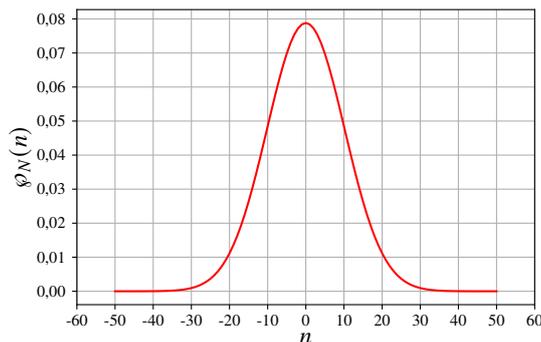
$$n_1 = \frac{1}{2}(N + n) \quad e \quad n_2 = \frac{1}{2}(N - n).$$

Substituindo na equação (2.23) e introduzindo $q = 1 - p$:

$$\varphi_N(n) = \frac{N!}{\left[\frac{1}{2}(N + n)\right]! \cdot \left[\frac{1}{2}(N - n)\right]!} \cdot p^{\frac{1}{2}[N+n]} \cdot (1 - p)^{\frac{1}{2}[N-n]}. \quad (2.25)$$

Na Figura 13 é apresentada a distribuição probabilidade em função do número de passos efetivos n , onde a curva representada será uma gaussiana centrada no seu ponto de partida, ou seja, no ponto $x = 0$.

Figura 13 – Gráfico da distribuição de probabilidade obtida pela equação (2.25) para uma caminhada aleatória de 50 passos. Tal distribuição, traz a probabilidade do caminhante ir para esquerda ou direita, com isso obtemos uma gaussiana centrada no seu ponto de partida (ou seja $x = 0$).



2.4 Caminhadas Aleatórias Clássicas de Tempo Discreto em Grafos

As caminhadas aleatórias e as cadeias de Markov se relacionam, pois ambas são caracterizadas como processos estocásticos (BENSON *et al.*, 2017). A seguir será apresentado esse tipo de processo e sua aplicação para construção das caminhadas aleatórias em grafos.

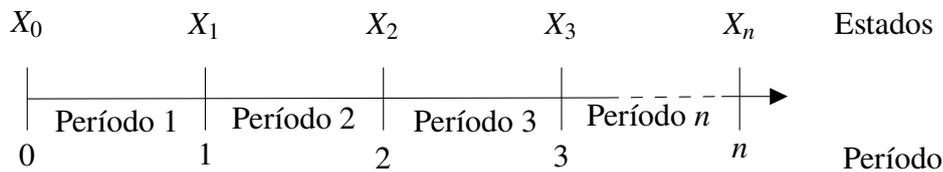
O processo estocástico é definido como um conjunto de variáveis aleatórias $\{X_t, t \in T\}$ definidas em um espaço de estado S , onde o tempo t percorre um conjunto de índices T que depende do processo (DOBROW, 2016). O processo estocástico de tempo discreto é caracterizado por uma sequência de variáveis aleatórias com índices $T = \{0, 1, 2, \dots\}$. Em contrapartida, o processo estocástico de tempo contínuo é descrito por um conjunto de variáveis aleatórias incontáveis com índices $T = [0, \infty)$ (OLOFSSON; ANDERSSON, 2012).

Variáveis aleatórias discretas e contínuas possuem em comum os índices t e os estados X_t . Dessa forma, o processo estocástico $\{X_t\} = \{X_0, X_1, X_2, \dots\}$, representa a evolução do estado de um sistema físico ao longo do tempo (DOBROW, 2016; HILLIER; LIEBERMAN, 2015).

O processo markoviano $\{X_n\}$ é um processo estocástico, cuja principal propriedade é a ausência de memória, ou seja, a probabilidade de obter um estado futuro depende apenas do estado atual, isso resulta na independência dos estados passados na evolução do processo (KARLIN; TAYLOR, 1998; RODRIGUES; CARVALHO, 2001). Segundo Ibe (2009), os estados discretizados em um processo markoviano, podem ser classificados como cadeias de Markov de tempo discreto e contínuo.

Uma cadeia de Markov discreta é uma sequência de variáveis $\{X_0, X_1, \dots, X_n\}$, sendo que X_n representa um estado da cadeia observado em um período de tempo n , conforme é mostrado na Figura 14 (SHESKIN, 2011). As mudanças de estados recentes denota-se como transições, e as probabilidades oriundas de várias mudanças de estado como probabilidades de transição (ou probabilidade condicional) (BLANCHARD; VOLCHENKOV, 2011).

Figura 14 – Representação de uma cadeia de Markov, em que cada estado é fixo durante um período de tempo n .



A probabilidade de transição tem finalidade de determinar a probabilidade que um sistema evoluir do estado i para o estado j , através da seguinte condição

$$P(X_{n+1} = j | X_n = i, X_{n-1} = i_{n-1}, \dots, X_0 = i_0) = P(X_{n+1} = j | X_n = i), \quad (2.26)$$

tendo todos os períodos de tempo n e todos os estados $i_0, \dots, i_{n-1}, i, j$ no espaço da cadeia de Markov, com valores inteiros e não-negativos $\{0, 1, \dots, N\}$ (PINSKY; KARLIN, 2011). De acordo com Sheskin (2011), as probabilidades de transição com tempo homogêneo (ou em uma

etapa), é independente de n . Então, a equação (2.26) resulta em

$$p_{i,j} = P(X_{n+1} = j | X_n = i) = P(X_1 = j | X_0 = i), \quad (2.27)$$

no qual as probabilidades de transição em uma etapa serão constantes em qualquer período de tempo.

Em virtude da relação (2.26) possuir probabilidades dependentes dos estados i e j , as probabilidades de transição podem ser escritas em uma matriz chamada de matriz de transição. Diante disso, para uma cadeia de Markov, sua matriz de transição será

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} p_{0,0} & p_{0,1} & \cdots & p_{0,N} \\ p_{1,0} & p_{1,1} & \cdots & p_{1,N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{N,0} & p_{N,1} & \cdots & p_{N,N} \end{pmatrix}. \quad (2.28)$$

A matriz acima contém as probabilidades de transição em uma etapa, do estado de linha para o estado de coluna (HILLIER; LIEBERMAN, 2015). Dessa forma, as seguintes propriedades serão satisfeitas

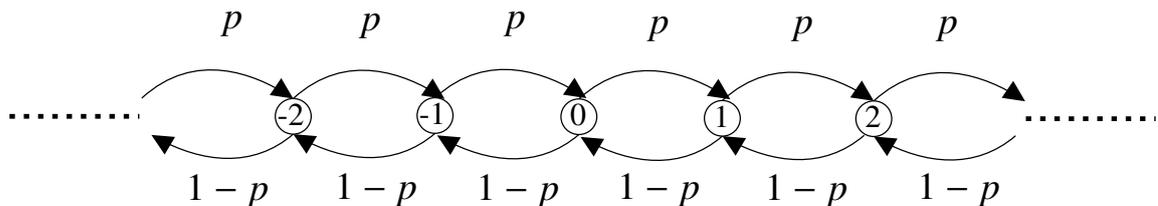
$$p_{i,j} \geq 0 \text{ para todo } i \text{ e } j \quad (2.29)$$

e

$$\sum_{j=0}^N p_{i,j} = 1 \text{ para todo } i. \quad (2.30)$$

Uma caminhada aleatória com estados finitos possui um processo estocástico equivalente a cadeia de Markov discreta, ou seja, a mudança de estado do processo depende apenas do último estado e das probabilidades de transição (BENSON *et al.*, 2017). Então, dada uma cadeia de Markov de estados inteiros $0, \pm 1, \pm 2, \dots$, sua probabilidade de transição em qualquer estado i para estados vizinhos $i + 1$ (passos a direita) será p e para qualquer vizinho $i - 1$ (passos a esquerda) a probabilidade de transição será $q = 1 - p$. Tais transições podem ser representadas através do diagrama de transição de estados como é ilustrado na Figura 15, em que o processo é iniciado a partir do estado 0 (STEWART, 2009).

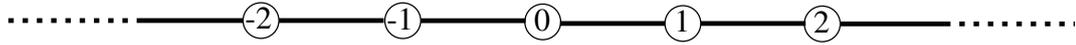
Figura 15 – Diagrama de transição de estados para uma caminhada aleatória unidimensional com estados inteiros. O processo tem início a partir do estado 0, cada passo executado para direita ou esquerda, gera uma probabilidade de transição p e $1 - p$ respectivamente.



O diagrama de transição também é chamado de grafo de transição, sendo que os vértices representam os estados e as arestas as transições. Tais arestas, determinam a probabilidade $p_{i,j}$ de um vértice i partir para um vértice j (BRÉMAUD, 2017).

Brémaud (2017) mostra que é possível reescrever as arestas direcionadas de modo mais compacto, substituindo-as por arestas unidirecionais. Portanto, o diagrama da Figura 15 é rerepresentado pela estrutura abaixo.

Figura 16 – Grafo de transição correspondente a caminhada aleatória unidimensional, no qual as arestas unidirecionais determinam tanto a probabilidade do caminhante ir para direita quanto a esquerda.



A cadeia de Markov da Figura 16 é chamada de caminhada aleatória simples em grafos, pois o caminhante tem possibilidades iguais de se mover nos vértices vizinhos (DOBROW, 2016). De modo geral, define-se uma caminhada aleatória em grafos conforme é tratado nas obras Ibe (2009), Dobrow (2016), Grimmett e Welsh (2014):

Definição 2.4.1 *Dado $G = (V, E)$ um grafo conectado unidirecionalmente contendo N vértices e M arestas. A partícula se move sobre os vértices de G , com passos ao longo das arestas. Para a posição da partícula X_n no tempo n , em $n + 1$ ela irá se mover para seu vizinho mais próximo. Assim, a caminhada aleatória é uma cadeia de Markov $\mathbf{X} = \{X_n : n \geq 0\}$ com espaço de estado V e probabilidades de transição $p_{i,j}$ dadas por*

$$p_{i,j} = \begin{cases} \frac{1}{k_i}, & \text{se } i \text{ e } j \text{ são vizinhos,} \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.31)$$

Por exemplo, a caminhada aleatória no grafo da Figura 3, terá a seguinte matriz de transição

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 & 0 \\ 1/3 & 1/3 & 0 & 1/3 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

2.5 Caminhadas Aleatórias Clássicas de Tempo Contínuo em Grafos

A cadeia de Markov de tempo discreto foi definida como uma sequência de períodos de tempo, em que o estado muda ou é mantido. Porém, na cadeia de Markov de tempo contínuo, uma mudança de estado pode ocorrer em qualquer período de tempo (STEWART, 2009).

De modo geral, Ibe (2009) e Stewart (2009) descrevem uma cadeia de Markov de tempo contínuo sendo um processo estocástico $\{X(t), t \geq 0\}$, com instantes de tempo s, t, u e estados inteiros não-negativos $i, j, k = \{0, 1, \dots, N\}$. Assim, a probabilidade de transição obedece a seguinte condição

$$P[X(t+s) = j | X(s) = i, X(u) = k] = P[X(t+s) = j | X(s) = i], \quad (2.33)$$

para $t \geq 0$, $s \geq 0$ e $0 \leq u \leq s$. Tal condição, indica que o estado futuro no tempo $t + s$ depende somente do estado presente em s e independe dos estados passados. Portanto, se $P[X(t + s) = j | X(s) = i]$ for independente de s , o processo $\{X(t), t \geq 0\}$ possui tempo homogêneo e probabilidade de transição estacionária dada por:

$$p_{i,j}(t) = P[X(t + s) = j | X(s) = i] = P[X(t) = j | X(0) = i]. \quad (2.34)$$

A relação (2.34) determina a probabilidade de transição para a cadeia de Markov mudar do estado i para estado j após um tempo adicional t Ibe (2009). Dessa forma, a condição é satisfeita

$$\sum_{j=0}^N p_{i,j}(t) = 1 \text{ para } j = 0, 1, \dots, N. \quad (2.35)$$

Por simplicidade, representa-se a probabilidade de transição estacionária iniciando no instante $s = 0$ com estado atual i até o estado j em t , que nos traz

$$p_{i,j}(t) = P[X(t) = j | X(0) = i], \quad (2.36)$$

A equação (2.34) demonstra que a probabilidade de transição no instante inicial $s = 0$ permanece constante, então no estado futuro em $t + s$ será

$$p_{i,j}(t + s) = P[X(t + s) = j | X(0) = i]. \quad (2.37)$$

Dado que a qualquer momento o processo esteja em um estado intermediário k em qualquer tempo intermediário t , a relação (2.37) pode ser reescrita pelo teorema da probabilidade total, conforme descrevem Dobrow (2016) e Pinheiro *et al.* (2009), como

$$\begin{aligned} p_{i,j}(t + s) &= \sum_{k=0}^N P[X(t + s) = j, X(t) = k | X(0) = i] \text{ para } s, t \geq 0, \\ p_{i,j}(t + s) &= \sum_{k=0}^N \frac{P[X(t + s) = j, X(t) = k, X(0) = i]}{P[X(0) = i]} \\ p_{i,j}(t + s) &= \sum_{k=0}^N \frac{P[X(t) = k, X(0) = i]}{P[X(0) = i]} \frac{P[X(t + s) = j, X(t) = k, X(0) = i]}{P[X(0) = i]} \\ p_{i,j}(t + s) &= \sum_{k=0}^N \frac{P[X(t) = k, X(0) = i]}{P[X(0) = i]} \frac{P[X(t + s) = j, X(t) = k, X(0) = i]}{P[X(t) = k, X(0) = i]} \\ p_{i,j}(t + s) &= \sum_{k=0}^N P[X(t) = k | X(0) = i] P[X(t + s) = j | X(t) = k, X(0) = i], \end{aligned}$$

pelas equações (2.33) e (2.34), obtem-se a equação de Chapman-Kolmogorov para cadeia de Markov de tempo contínuo

$$p_{i,j}(t + s) = \sum_{k=0}^N p_{i,k}(t) p_{k,j}(s). \quad (2.38)$$

A relação (2.38) descreve a probabilidade de transição de i para j em $t + s$ é obtida a partir do produto das probabilidades de i ir até k no tempo t e k até j em s , com a soma de todos os estados intermediários em k (MONTEIRO, 2006).

As interações entre os estados na cadeia de Markov de tempo contínuo, são representadas através de taxas de transições. Diante disso, a taxa $q_{i,j}(t)$ por unidade de tempo para se mover de um estado i no tempo t para outro estado j , é descrita pela matriz taxa de transição $\mathbf{Q}(t)$ do sistema (STEWART, 2009).

A probabilidade de ocorrer uma transição de estado, não depende apenas do estado atual, mas também da duração do intervalo de observação Δt , que ocorre em tempo muito pequeno ($\Delta t \rightarrow 0$). Portanto, Stewart (2009) descreve que taxa de transição para cadeia de Markov de tempo contínuo e homogêneo sendo

$$q_{i,j} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{p_{i,j}(\Delta t)}{\Delta t} \right), \quad i \neq j; \quad q_{j,j} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{p_{j,j}(\Delta t) - 1}{\Delta t} \right). \quad (2.39)$$

Através da equação de Chapman-Kolmogorov, encontra-se as probabilidades de transição durante a observação em Δt . Logo, pela equação (2.38)

$$p_{i,j}(t + \Delta t) = \sum_{k=0}^N p_{i,k}(t) p_{k,j}(\Delta t), \quad \text{para } t, \Delta t \geq 0$$

$$p_{i,j}(t + \Delta t) = \sum_{k \neq j} p_{i,k}(t) p_{k,j}(\Delta t) + p_{ij}(t) p_{jj}(\Delta t),$$

subtraindo por $p_{i,j}(t)$ e dividindo com Δt na igualdade,

$$\frac{p_{i,j}(t + \Delta t) - p_{i,j}(t)}{\Delta t} = \sum_{k \neq j} \frac{p_{i,k}(t) p_{k,j}(\Delta t) + p_{i,j}(t) p_{j,j}(\Delta t) - p_{i,j}(t)}{\Delta t}$$

$$\frac{p_{i,j}(t + \Delta t) - p_{i,j}(t)}{\Delta t} = \sum_{k \neq j} p_{i,k}(t) \left(\frac{p_{k,j}(\Delta t)}{\Delta t} \right) + p_{i,j}(t) \left(\frac{p_{j,j}(\Delta t) - 1}{\Delta t} \right).$$

Tomando o limite $\Delta t \rightarrow 0$ e relembrando a equação (2.39)

$$\frac{dp_{i,j}(t)}{dt} = \sum_{k \neq j} p_{i,k}(t) q_{i,j} + p_{i,j}(t) q_{j,j},$$

obtem-se a equação de Kolmogorov (AVRAHAM *et al.*, 2004),

$$\frac{dp_{i,j}(t)}{dt} = \sum_k q_{k,j} p_{i,k}(t), \quad (2.40)$$

ou na forma matricial,

$$\frac{d\mathbf{P}(t)}{dt} = \mathbf{Q}\mathbf{P}(t), \quad (2.41)$$

cuja solução é

$$\mathbf{P}(t) = e^{\mathbf{Q}t}. \quad (2.42)$$

A matriz \mathbf{Q} também é conhecida como gerador infinitesimal, ou matriz de transferência segundo Mülken e Blumen (2011), da cadeia de Markov de tempo contínuo.

Na caminhada aleatória de tempo contínuo em grafos, a probabilidade do caminhante de ir de um vértice a para um adjacente b no tempo ϵ é $\gamma\epsilon$ (no limite de $\epsilon \rightarrow 0$), com uma taxa de transição γ . De acordo Childs *et al.* (2003), dado um grafo com N vértices, a caminhada aleatória clássica é descrita pelo gerador infinitesimal, sendo uma matriz $N \times N$ com elementos definidos por

$$q_{a,b} = \begin{cases} \gamma, & \text{se } a \neq b \text{ e ocorrer ligação entre os vértices } a \text{ e } b, \\ 0, & \text{se } a \neq b \text{ e não ocorrer ligação entre os vértices } a \text{ e } b, \\ -k_a\gamma, & \text{se } a = b. \end{cases} \quad (2.43)$$

No caso simples, em que a taxa de transição γ é semelhante em toda rede, a matriz de transferência é relacionada com a matriz Laplaciano $\mathbf{Q} = -\gamma\mathbf{L}$ (MÜLKEN; BLUMEN, 2011). Então a solução equação (2.41) é escrita em termos da matriz Laplaciano, tornando-se

$$\mathbf{P}(t) = e^{-\gamma\mathbf{L}t}. \quad (2.44)$$

Segundo Li *et al.* (2020), o transporte em redes pode ser analisado através vetores estado no espaço N -dimensional, em que cada nó tem um estado associado no tempo t . Então, cada excitação no vértice a assume um estado $|a\rangle$ ortogonal e completo (ou seja $\langle b|a\rangle = \delta_{b,a}$ e $\sum_a |a\rangle\langle a| = \mathbf{1}$) (ANISHCHENKO, 2015; MÜLKEN; BLUMEN, 2011). De modo geral, cada vértice $a = 1, \dots, N$ tem um vetor ket $|a\rangle$, para caminhada clássica e quântica, representado pelas matrizes

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, |N\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.45)$$

A probabilidade de transição do caminhante ir do vértice a até b equivale aos elementos da relação (2.44) em termos de vetores estados

$$p_{a,b}(t) = \langle b|e^{-\gamma\mathbf{L}t}|a\rangle, \quad (2.46)$$

tendo a condição inicial $\langle b|a\rangle \equiv p_{a,b}(0) = \delta_{b,a}$ (quando $\delta_{b,a} = 1$, então $a = b$ e $\delta_{b,a} = 0$ em outros casos) (MÜLKEN; BLUMEN, 2011). Com isso, podemos afirmar que em um tempo t qualquer, o caminhante estará inicialmente no estado $|a;t\rangle$, de maneira que a sobreposição desse estado ao vértice de chegada b será $\langle b|a;t\rangle \equiv p_{a,b}(t)$.

A equação (2.46) pode ser escrita em termos de seus autovalores λ_n e autovetores ortonormalizados $|w_n\rangle$, já que a matriz Laplaciano é uma matriz simétrica e real, então a sua transposta conjugada \mathbf{L}^\dagger é igual a \mathbf{L} . Portanto, tem-se que $(e^{-\gamma\mathbf{L}t})^\dagger = e^{-\gamma\mathbf{L}t}$, e a probabilidade de transição

$$p_{a,b}(t) = \sum_{n=1}^N e^{-\gamma\lambda_n t} \langle b|w_n\rangle \langle w_n|a\rangle, \quad (2.47)$$

por simplicidade, vamos assumir que a taxa de transição é $\gamma \equiv 1$ (MÜLKEN *et al.*, 2006), então

$$p_{a,b}(t) = \sum_{n=1}^N e^{-\lambda_n t} \langle b|w_n\rangle \langle w_n|a\rangle. \quad (2.48)$$

No limite ao longo do tempo $\lim_{t \rightarrow \infty} p_{a,b}(t)$, a soma dos termos exponenciais da equação (2.47) decaem rapidamente para zero (MÜLKEN; BLUMEN, 2011). Porém, o único valor que haverá probabilidade existente é no autovalor $\lambda_1 = 0$, e seu autovetor respectivo pode ser escrito como $|w_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l |l\rangle$. Uma vez que os autoestados $|l\rangle$, formam uma base ortonormalizada e completa, em que temos $\langle b|w_1\rangle = \langle w_1|a\rangle = 1/\sqrt{N}$ (MÜLKEN *et al.*, 2006). Então, teremos

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} p_{a,b}(t) &= \lim_{t \rightarrow \infty} \left[\sum_{n=1}^N e^{-\lambda_n t} \langle b|w_n\rangle \langle w_n|a\rangle \right] \\ \lim_{t \rightarrow \infty} p_{a,b}(t) &= \langle b|w_1\rangle \langle w_1|a\rangle \\ \lim_{t \rightarrow \infty} p_{a,b}(t) &= \frac{1}{N}. \end{aligned} \quad (2.49)$$

A equação (2.49) mostra que a matriz de transferência tem relação direta na matriz Laplaciano, na qual a caminha decai ao longo do tempo para o valor de equipartição $1/N$ (MÜLKEN; BLUMEN, 2011).

Uma rede é dita eficiente quando uma excitação espalha-se rapidamente em todos os vértices, ou seja, quando um caminhante visita todos os vértices após um curto espaço de tempo. Tal eficiência, pode ser determinada através da densidade de estados, que contém informações essenciais sobre o sistema e permite analisar características dependentes da estrutura da rede. Uma dessas características é a probabilidade média de retorno, isto é, a probabilidade de retornar ou permanecer no nó inicialmente excitado após o tempo t (ANISHCHENKO, 2015). Para a probabilidade transição clássica, tem-se que

$$\bar{p}(t) = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^N p_{a,a}(t), \quad (2.50)$$

então a equação (2.47) será

$$\bar{p}(t) = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^N \left[\sum_{n=1}^N e^{-\lambda_n t} \langle a|w_n\rangle \langle w_n|a\rangle \right].$$

A relação entre a matriz de transferência e a Laplaciano torna-se $\mathbf{Q} = -\mathbf{L}$ (MÜLKEN *et al.*, 2006). Assim,

$$\begin{aligned} \bar{p}(t) &= \frac{1}{N} \sum_{a=1}^N \left[\sum_{n=1}^N e^{-\lambda_n t} \langle w_n|a\rangle \langle a|w_n\rangle \right] \\ \bar{p}(t) &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{-\lambda_n t} \langle w_n| \left[\sum_{a=1}^N |a\rangle \langle a| \right] |w_n\rangle, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{p}(t) &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{-\lambda_n t} \langle w_n | w_n \rangle \\ \bar{p}(t) &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{-\lambda_n t}.\end{aligned}\tag{2.51}$$

Quando $\bar{p}(t)$ diminui rapidamente, significa que ocorre um aumento rápido da probabilidade do caminhante está em qualquer outro vértice, exceto no vértice a inicialmente excitado. Portanto, o transporte clássico é mais eficiente fora do vértice inicial a , onde ocorre o decaimento mais rápido de $\bar{p}(t)$ (ANISHCHENKO, 2015). Tal decaimento, no limite ao longo do tempo, resulta em uma probabilidade de retorno clássico $\bar{p}(t) = 1/N$, conforme discutido na equação (2.49) (MÜLKEN; BLUMEN, 2011).

2.6 Caminhadas Quânticas de Tempo Contínuo

As caminhadas quânticas de tempo contínuo é definida de maneira análoga as caminhadas aleatórias de tempo contínuo em grafos, como é proposto em Farhi e Gutmann (1998). Nesta abordagem, as caminhadas quânticas são divididas por estados $|a\rangle$ ortonormais e completos, definidos no espaço N -dimensional de Hilbert; de modo que a é um vértice no grafo G .

A dinâmica de evolução do tempo nas caminhadas quânticas, ocorre através Hamiltoniano do sistema. Diante disso, a evolução do tempo do estado $|a\rangle$ é dado pela equação de Schrödinger

$$i \frac{d|a\rangle}{dt} = \mathbf{H}|a\rangle,\tag{2.52}$$

considerando $m \equiv 1$ e $\hbar \equiv 1$ (XU, 2008). No caso do caminhante está no estado inicial $|a\rangle$ no tempo t_0 , a evolução temporal do estado $|a\rangle$ é $|a;t\rangle = U(t, t_0)|a\rangle$, sendo $U(t, t_0) = e^{-i\mathbf{H}t}$ o operador evolução temporal na mecânica quântica (SAKURAI; NAPOLITANO, 2020). Então, a amplitude de transição $\alpha_{a,b}(t)$ do estado $|a\rangle$ no tempo 0 até o estado $|b\rangle$ no tempo t é

$$\alpha_{a,b}(t) = \langle b|a;t\rangle = \langle b|e^{-i\mathbf{H}t}|a\rangle,\tag{2.53}$$

substituindo na relação (2.52), teremos

$$\frac{d\alpha_{a,b}(t)}{dt} = -i \sum_l H_{b,l} \alpha_{l,a}(t).\tag{2.54}$$

A equação (2.54) tem similaridade com a relação (2.44), porém com a introdução de um termo imaginário. Com isso, a solução da equação (2.54) é

$$\alpha_{a,b}(t) = \langle b|e^{-i\mathbf{H}t}|a\rangle = \langle b|e^{-i\gamma\mathbf{L}t}|a\rangle,\tag{2.55}$$

em que é observado a relação entre o Hamiltoniano \mathbf{H} e a matriz Laplaciano \mathbf{L} é $\mathbf{H} = \gamma\mathbf{L}$, e para $\gamma \equiv 1$ obtém-se a relação entre as matrizes $\mathbf{H} = -\mathbf{Q} = \mathbf{L}$ (MÜLKEN; BLUMEN, 2011).

De maneira similar ao caso clássico, as caminhadas quânticas tem uma probabilidade de transição quântica dada por $\pi_{a,b}(t)$. De acordo com Anishchenko (2015), a relação entre

$\pi_{a,b}(t)$ e $\alpha_{a,b}(t)$ é $\pi_{a,b} = |\alpha_{a,b}(t)|^2$. Assim, utilizando a solução da relação (2.55), obtemos a probabilidade de transição quântica:

$$\pi_{a,b}(t) = |\alpha_{a,b}(t)|^2 = \left| \sum_{n=1}^N e^{-i\lambda_n t} \langle b|w_n\rangle \langle w_n|a\rangle \right|^2. \quad (2.56)$$

Como enunciado na caminhada clássica de tempo contínuo, a maneira de determinar a eficiência de uma excitação que se desloca na rede, é feita através da probabilidade média de retorno (ANISHCHENKO, 2015). Dessa forma, a probabilidade média de retorno quântico é uma expressão similar a equação (2.50), descrita na seguinte forma

$$\bar{\pi}(t) = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^N \pi_{a,a}(t), \quad (2.57)$$

substituindo a relação (2.56), teremos

$$\bar{\pi}(t) = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^N \left| \sum_{n=1}^N e^{-i\lambda_n t} \langle a|w_n\rangle \langle w_n|a\rangle \right|^2. \quad (2.58)$$

Na ocorrência de degenerescência de autovalores, podemos utilizar a desigualdade de Cauchy-Schwarz

$$\left| \sum_{a=1}^N u_a v_a \right|^2 \leq \sum_{a=1}^N |u_a|^2 \sum_{a=1}^N |v_a|^2, \quad (2.59)$$

conforme descrevem Muelken (2007), Galiceanu e Strunz (2016). Dessa forma, reescreve-se a equação (2.58) como

$$\bar{\pi}(t) = \frac{1}{N^2} \sum_{a=1}^N |\alpha_{aa}|^2 \sum_{a=1}^N 1 \geq \left| \frac{1}{N} \sum_{a=1}^N \alpha_{aa} \right|^2,$$

e então obtemos o limite inferior de $\bar{\pi}(t)$ dado por

$$\bar{\pi}(t) \geq \left| \frac{1}{N} \sum_{a=1}^N e^{-i\lambda_n t} \right|^2 = |\bar{\alpha}(t)|^2. \quad (2.60)$$

Observa-se que a equação (2.60), tem analogia ao caso clássico, de modo que o limite inferior $|\bar{\alpha}(t)|^2$ depende apenas dos autovalores e não dos auto estados de \mathbf{H} (MUELKEN, 2007).

No limite ao longo do tempo, temos que $\pi_{a,b}$, $\bar{\pi}$ oscilam em torno de um valor médio (MÜLKEN; BLUMEN, 2011). Para probabilidade de transição quântica, tal valor é obtido pela expressão

$$\chi_{a,b} \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \pi_{a,b}(t) dt. \quad (2.61)$$

A equação (2.61) é desenvolvida mediante expansão da relação (2.56) em termos do complexo conjugado. Diante disso, definindo

$$\begin{aligned}
e^{i\lambda_n^* t} &\rightarrow e^{i\lambda_m t} \\
\langle b|w_n \rangle^* &\rightarrow \langle w_m|b \rangle \\
\langle w_n|a \rangle^* &\rightarrow \langle a|w_m \rangle,
\end{aligned}$$

obtemos que

$$\pi_{a,b} = \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^N e^{-i(\lambda_n - \lambda_m)t} \langle b|w_n \rangle \langle w_n|a \rangle \langle a|w_m \rangle \langle w_m|b \rangle, \quad (2.62)$$

substituindo (2.62) em (2.61), resulta

$$\chi_{a,b} = \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^N \langle b|w_n \rangle \langle w_n|a \rangle \langle a|w_m \rangle \langle w_m|b \rangle \underbrace{\lim_{T \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{T} \int_0^T e^{-i(\lambda_n - \lambda_m)t} dt \right)}_{\delta_{\lambda_n, \lambda_m}}.$$

Portanto, o valor médio da probabilidade de transição quântica é

$$\chi_{a,b} = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \delta_{\lambda_n, \lambda_m} \langle b|w_n \rangle \langle w_n|a \rangle \langle a|w_m \rangle \langle w_m|b \rangle, \quad (2.63)$$

sendo $\delta_{\lambda_n, \lambda_m} = 1$ se $\lambda_n = \lambda_m$ e $\delta_{\lambda_n, \lambda_m} = 0$ caso contrário (AGLIARI *et al.*, 2008). Na probabilidade média de retorno quântico, o valor médio será

$$\bar{\chi} \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \bar{\pi}(t) dt. \quad (2.64)$$

De forma análoga ao valor médio χ_{ab} , a expressão para $\bar{\chi}$ é obtida substituindo a equação (2.58) em (2.64), resultando em:

$$\bar{\chi} = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^N \left[\sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \delta_{\lambda_n, \lambda_m} |\langle w_n|a \rangle|^2 |\langle w_m|a \rangle|^2 \right]. \quad (2.65)$$

No caso degenerado, podemos obter novamente uma expressão que independe dos autovetores substituindo a equação (2.60) em (2.64) (MÜLKEN; BLUMEN, 2011). Assim, o limite inferior de $\bar{\chi}$ será

$$\bar{\chi} \geq \frac{1}{N^2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \delta_{\lambda_n, \lambda_m} \equiv \bar{\chi}^*. \quad (2.66)$$

O transporte quântico possui maior eficiência quando o valor médio $\bar{\chi}$ é igual a 0, e será ineficiente caso resultar em 1. O valor de $\bar{\chi}^*$ fornece uma boa aproximação para $\bar{\chi}$ em duas situações extremas (KULVELIS *et al.*, 2015). A primeira corresponde quando λ é o único valor altamente degenerado da estrutura, como ocorre em redes estrela (MACIEL *et al.*, 2018). A segunda situação decorre do caso em que todos os autovalores são não-degenerados, conforme acontece em cadeias lineares extremamente longas (GALICEANU; STRUNZ, 2016). Nesse último caso, como todos os autovalores são distintos, a equação (2.66) produz $\bar{\chi} = \bar{\chi}^* = 1/N$.

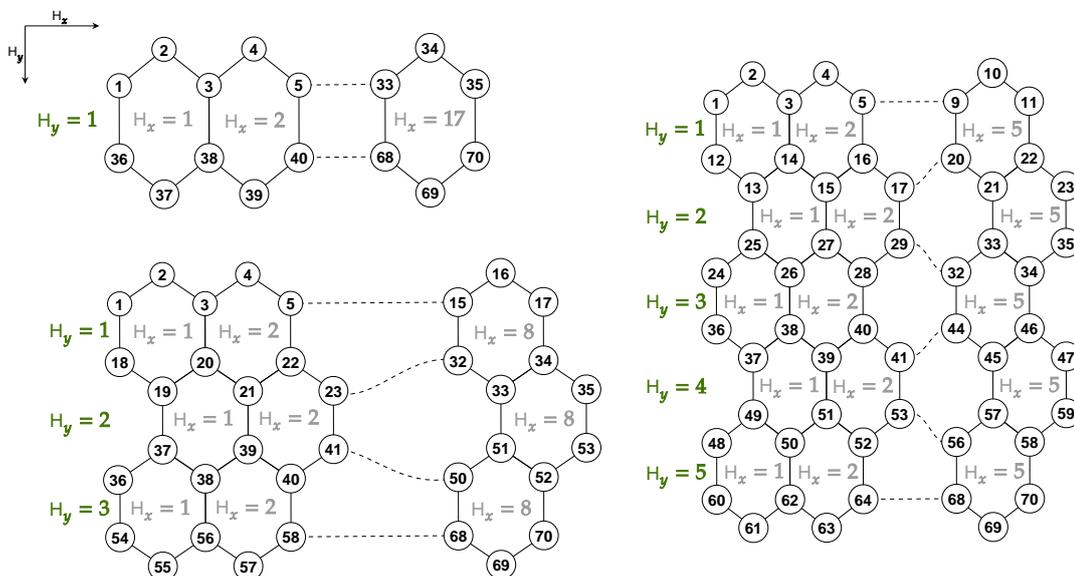
3 PROCEDIMENTOS

Neste trabalho foram analisados as probabilidades médias de retorno clássica e quântica para as folhas de grafeno com 70 vértices e para os fulerenos C_{60} e C_{70} . Para isso, utilizamos gráficos na escala logarítmica com tempo variando de 0 a 1000 e um intervalo de 0, 1, que auxiliaram na visualização do comportamento da caminhada ao longo do tempo. Além disso, encontramos as probabilidades de transição entre todos os vértices de cada estrutura, em que foram representadas através de gráficos de contorno com um tempo fixo t . Por fim, determinamos os valores médios de $\bar{\pi}(t)$ com intuito de avaliar qual rede tem um transporte eficiente e comparamos sua proximidade com seu limite inferior.

A rede do grafeno foi construída em termos do número de hexágonos distribuídos ao longo das direções H_x e H_y , desse modo foram escolhidas três estruturas cujas dimensões são $(H_x, H_y)=(17,1)$, $(8,3)$ e $(5,5)$ como mostrado na Figura 17. Os vértices dos hexágonos ficaram enumerados em ordem crescente, de modo que uma parte deles iniciaram na primeira linha de arestas na direção y e avançaram ao longo de x até o último vértice dessa linha. Enquanto vértices restantes, foram ordenados nas linhas seguintes e seguiram o mesmo processo do início, porém o primeiro vértice prosseguiu a contagem da linha anterior. Diante disso, cada face hexagonal H_x possui duas linhas ao longo de y , em que o número de vértices ao longo de x será $2H_x + 1$ na primeira e última linha, e para $H_y > 1$ teremos $2H_x + 2$ nas linhas interiores da rede. Assim, o número total de vértices V_G e arestas E_G para uma folha de grafeno com H_x hexágonos ao longo do eixo x e H_y hexágonos ao longo do eixo y são dados por

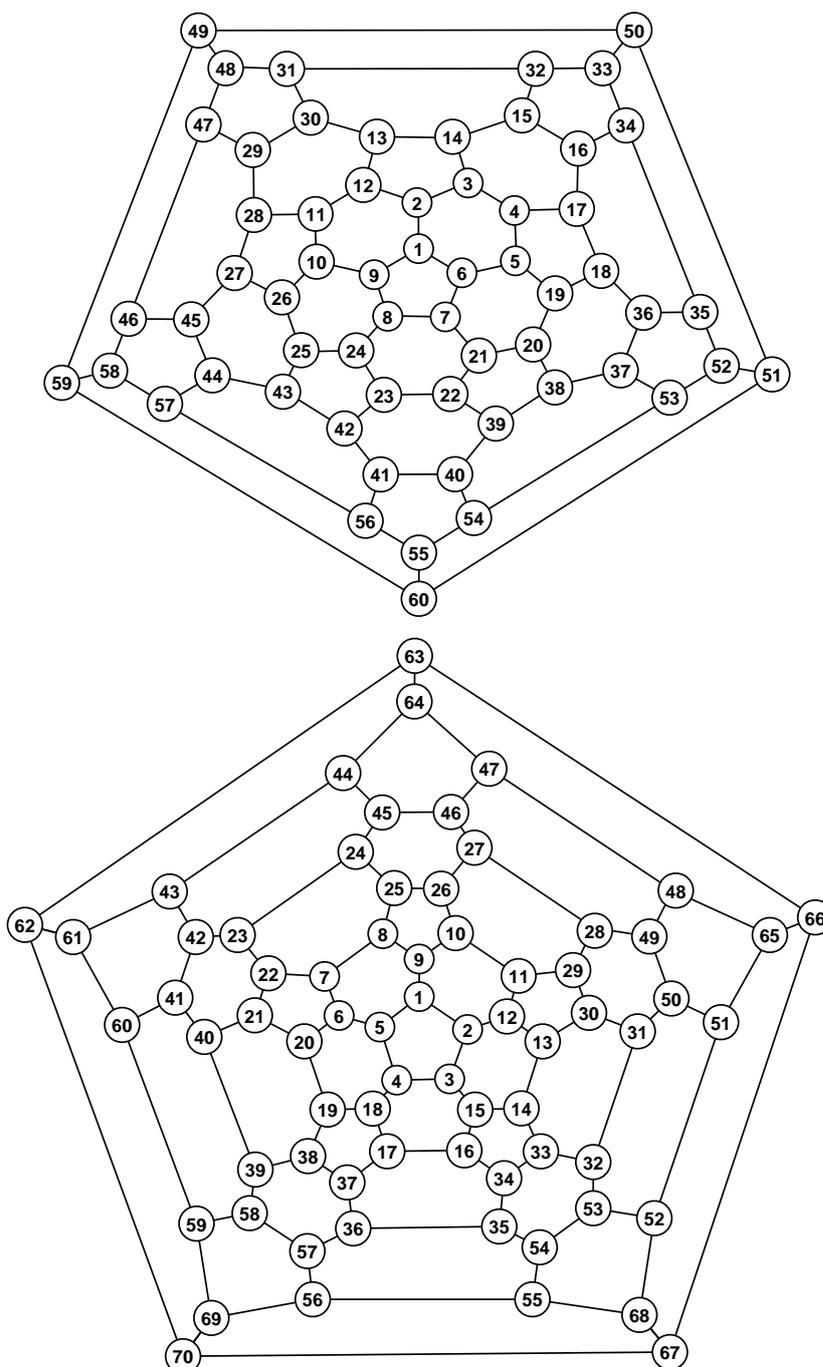
$$V_G = 2(H_x + H_y + H_x H_y), \quad E_G = V_G + H_x H_y - 1. \quad (3.1)$$

Figura 17 – Representação das folhas de grafeno enumeradas, no qual à esquerda tem-se uma rede com dimensão $(H_x, H_y)=(17,1)$ na parte superior e na região inferior a estrutura com $(H_x, H_y)=(8,3)$. Ao lado direito, é apresentada a folha de grafeno de tamanho $(H_x, H_y)=(5,5)$.



Os fulerenos C_{60} e C_{70} foram enumerados como descrito em Silant'ev (2017a) e Silant'ev (2017b), que através do diagrama de Schlegel, as estruturas foram representadas na forma bidimensional conforme mostra a Figura 18.

Figura 18 – Diagrama de Schlegel para os fulerenos, na parte superior é apresentada a posição dos átomos de carbono para rede C_{60} e na parte inferior para C_{70} .

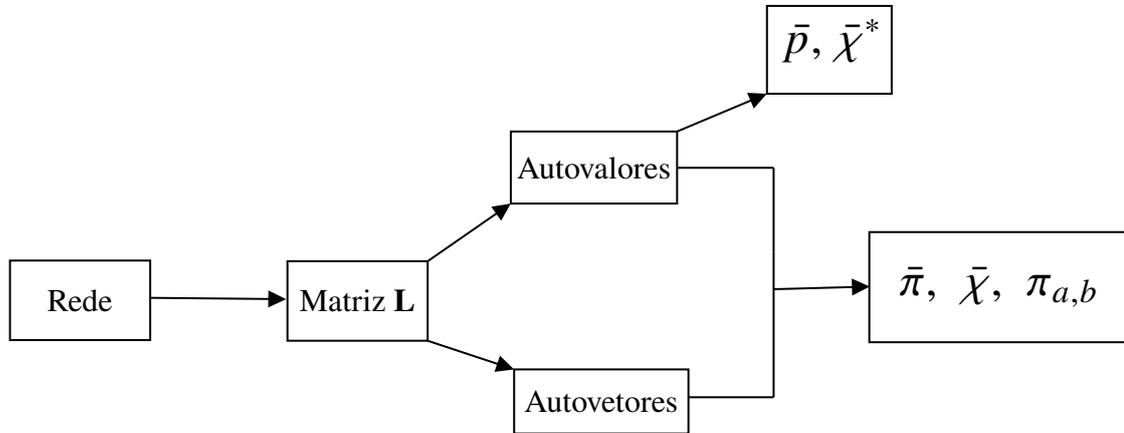


Fonte: Adaptado de Silant'ev (2017b) e Silant'ev (2017a).

A construção das redes e as medidas de probabilidade clássica e quântica foram implementadas na linguagem de programação Python, com auxílio da IDE Google Colab. Dessa forma,

as construções dos resultados foram realizadas como esquematizado na Figura 19.

Figura 19 – Representação esquemática das etapas implementadas para obtenção dos parâmetros de probabilidade.



Em cada rede foi construída a matriz Laplaciano utilizando as condições definidas na equação (2.6), e assim foram encontrados seus autovalores e autovetores. Então, para avaliar como se comporta o espalhamento do caminhante nas estruturas, calcularam-se as seguintes medidas:

- A probabilidade média de retorno clássico $\bar{p}(t)$ (equação (2.51));
- A probabilidade média de retorno quântico $\bar{\pi}(t)$ (equação (2.58));
- A probabilidade de transição quântica $\pi_{a,b}$ (equação (2.56));
- O valor médio $\bar{\chi}$ (equação (2.65));
- O limite inferior $\bar{\chi}^*$ (equação (2.66)).

Os algoritmos elaborados utilizaram 4 bibliotecas, o Matplotlib foi responsável pela visualização dos gráficos; o Numpy foi utilizado para construção da matriz Laplaciano e nos cálculos matemáticos com vetores e matrizes; o Pandas teve grande importância em organizar os resultados e manipulá-los em arquivos csv; a biblioteca Networkx que auxiliou na construção de todas as redes citadas anteriormente.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

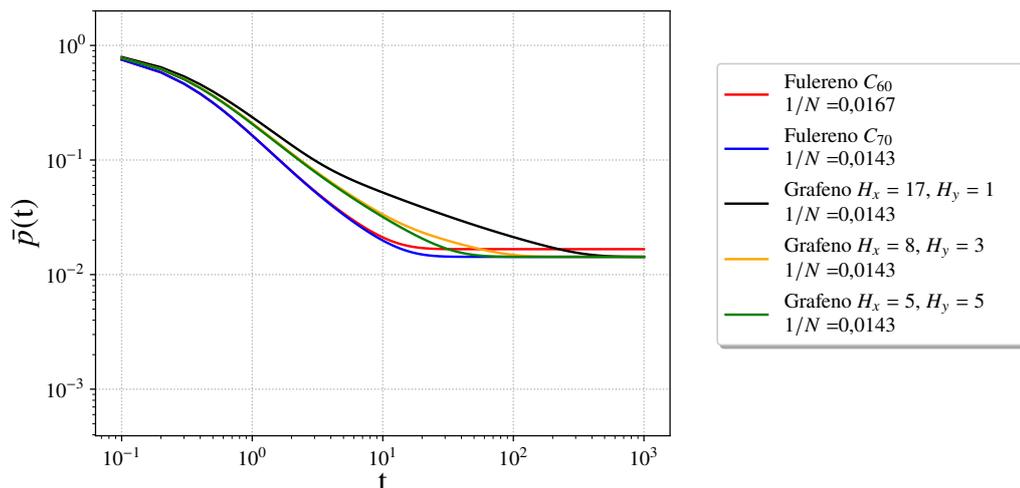
4.1 Probabilidade Média de Retorno Clássico $\bar{p}(t)$

Na Figura 20 é mostrado o comportamento da probabilidade média de retorno clássico $\bar{p}(t)$ para as folhas de grafeno e fulereno. Em tempos muito longos, as curvas decaíram até chegarem a um valor de equipartição $1/N$, de modo que em estruturas com $N = 60$ e $N = 70$ foram obtidos 0,0167 e 0,0143, respectivamente.

O comportamento das curvas para as redes de grafeno tiveram diferenças ao longo do tempo devido a distribuição de suas faces hexagonais nas direções H_x e H_y . Em vista disso, a rede com dimensão $(H_x, H_y) = (17, 1)$ decaiu lentamente ao seu valor de equipartição, por conta da menor quantidade de vértices de grau três. Quando reduzimos a quantidade de faces na direção H_x , como ocorre nas folhas de dimensão $(8, 3)$ e $(5, 5)$, as curvas decaíram rapidamente. Dentre essas, a rede $(H_x, H_y) = (5, 5)$ se destacou por realizar a caminhada em menor tempo.

No caso das estruturas de fulereno, suas curvas sofreram um decaimento mais rápido do que as folhas grafeno. Isso ocorreu pois essas redes possuem todos os vértices de grau três. Como fulereno C_{70} possui a maior quantidade de vértices N comparado a C_{60} , menor foram as chances do caminhante se manter em seu vértice de origem. Além disso, por ter todos os vértices com três ligações, a probabilidade média de retorno clássica decaiu mais rapidamente que todas as redes. Portanto, a rede de C_{70} forneceu um melhor transporte para o caminhante.

Figura 20 – Gráfico da probabilidade média de retorno $\bar{p}(t)$ para uma caminhada aleatória clássica. Observa-se que no limite ao longo do tempo, a probabilidade decai a um valor de $1/N$, em que $N = 70$ para as folhas de grafeno com dimensões $(17,1)$, $(8,3)$, $(5,5)$ e o fulereno C_{70} , e $N = 60$ para o fulereno C_{60} .



4.2 Probabilidade Média de Retorno Quântico $\bar{\pi}(t)$

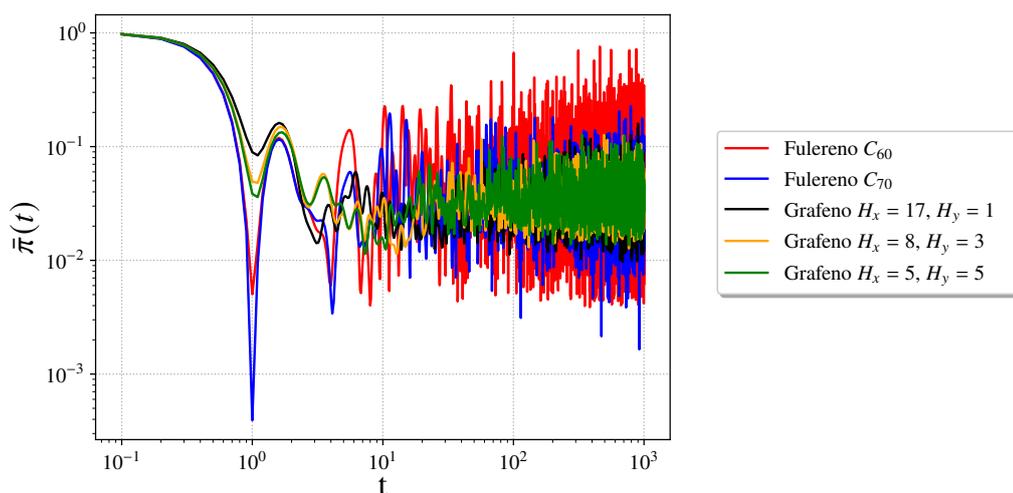
As probabilidades de médias de retorno quântico das folhas de grafeno e fulereno, apresentaram comportamento oscilatório a partir de $t = 10$, conforme é mostrado na Figura 21.

De modo análogo ao caso clássico, cada curva tende a um valor de equilíbrio $\bar{\chi}$ ao longo do tempo que será discutido posteriormente.

O desempenho da caminhada quântica é influenciado pela simetria da estrutura (KROVI; BRUN, 2006). Desse modo, a probabilidade média de retorno em C_{60} teve uma oscilação mais acentuada dentre todas as redes, por conta de sua maior simetria. Porém, no caso do fulereno C_{70} sua maior quantidade de vértices resultou na assimetria da estrutura. Com isso, obtemos uma probabilidade média de retorno menor, ocasionando na melhora do transporte quântico.

A probabilidade média para as folhas de grafeno adquiriram estabilidade ao longo do tempo, de modo que a cada redução de H_x gerou decaimentos lentos. Dessa forma, o grafeno (17, 1) sugeriu um melhor transporte, devido ao maior decaimento de $\bar{\pi}$ como ocorre em cadeias lineares. Por outro lado, quando $H_x = H_y$ o espalhamento do caminhante foi o mais lento de todas as estruturas.

Figura 21 – Gráfico da probabilidade média de retorno quântico $\bar{\pi}(t)$ das redes de grafeno e fulereno. Constata-se que nas curvas dos fulerenos as oscilações reduzem quando maior é o número de vértices na rede, enquanto no grafeno o aumento de H_y resulta na redução de desempenho no transporte.



4.3 Probabilidade de Transição Quântica $\pi_{a,b}(t)$

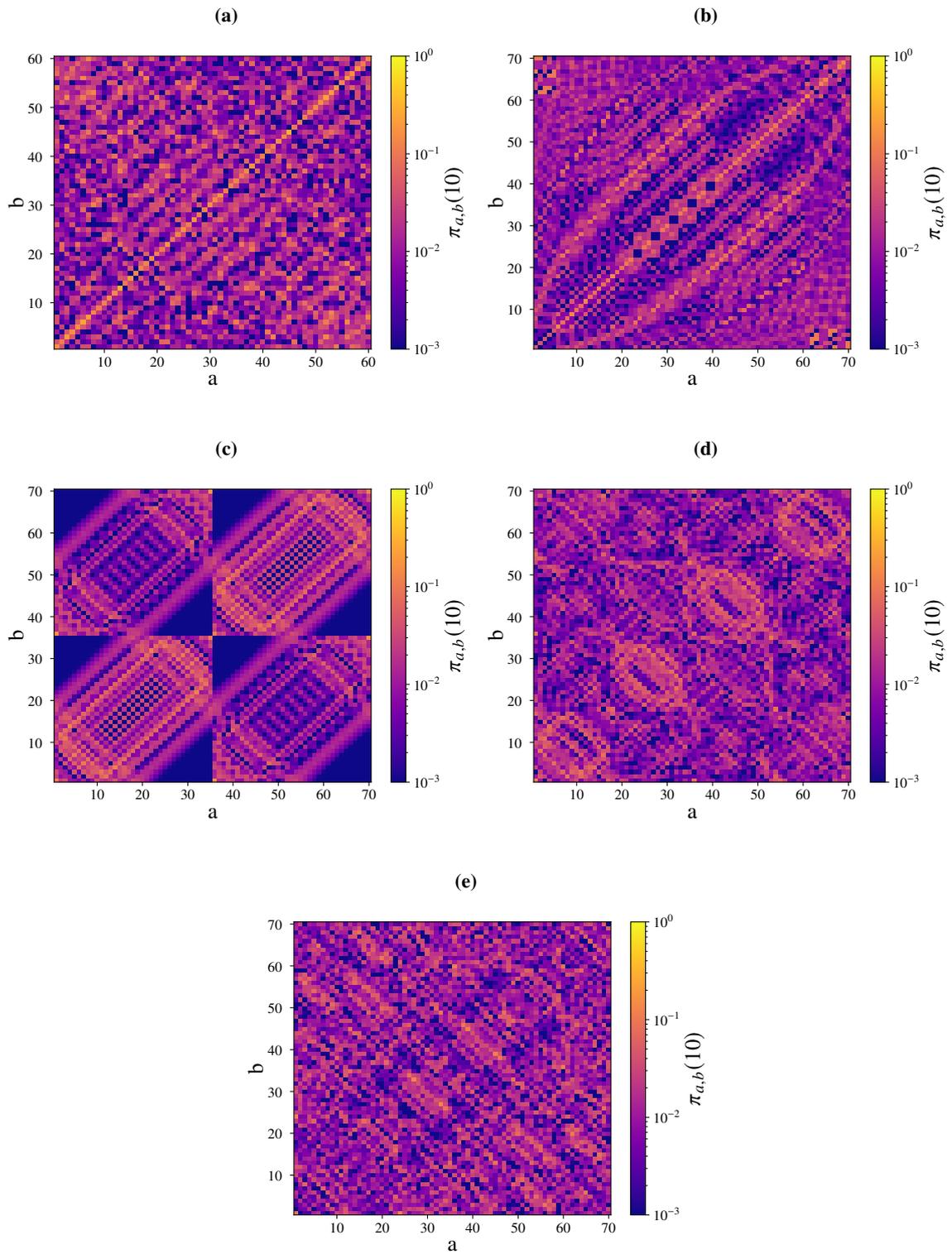
Na análise da probabilidade de transição quântica $\pi_{a,b}(t)$ em cada rede, foi necessário determinar o menor valor de tempo t para o caminhante partir de um vértice a e chegar até b . Diante disso, foi escolhido o valor de $t = 10$, pelo fato das curvas de $\bar{\pi}$ começarem a adquirir estabilidade nas oscilações. Com isso, foram obtidos os gráficos de contorno para probabilidade de transição quântica $\pi_{a,b}(10)$, conforme é exibido na Figura 22.

Nas Figuras 22(a) e 22(b) são mostradas todas as possíveis probabilidades de transição dos fulerenos C_{60} e C_{70} , respectivamente. Para ambas as redes, notou-se altas probabilidades do caminhante se localizar no vértice inicial, porém em C_{60} esta característica é mais evidente por ter valores variando entre 0,1 e 0,2. Este aspecto reforça que C_{70} tem melhor transporte

quântico como analisado na probabilidade média de retorno $\bar{\pi}$. Porém, seu gráfico da Figura 22(b) demonstrou pontos com altas probabilidades localizados nas transições de vértices entre anéis pentagonais internos e externos, como o caso de $\pi_{3,63}(10) \approx 0,104$. E ainda, em sua região antidiagonal, apresentou 5 zonas escuras com baixas probabilidades de transição $\pi_{a,a}$ para os vértices 23, 24, 27, 28, 31, 32, 35, 36, 39 e 40. Essas zonas, também corresponderam a probabilidade de transição $\pi_{a,b}$ entre os vértices 23 e 24, 27 e 28, 31 e 32, 35 e 36, 39 e 40. Cada vértice possui mais dois vizinhos, no qual a probabilidade de transição entre eles é alta, por exemplo no vértice 40 seus vizinhos 21 e 41 tiveram o valor de $\pi_{21,41}(10) \approx 0,091$ que se encontra na faixa superior clara paralela a região antidiagonal.

As probabilidades de transição para as redes de grafeno mostraram características particulares em $t = 10$, conforme mostra as Figuras 22(c), 22(d) e 22(e). A rede de dimensão (17,1) o caminhante não teve tempo suficiente para se espalhar por toda rede, assim observa-se regiões localizadas em um bloco 2×2 . A estrutura de dimensão (8,3) mostrou no gráfico da Figura 22(d) efeitos de localização através dos 4 blocos de cores claras na região antidiagonal, e se espalha nas transições de padrão roxo escuro. Já a rede de grafeno (5,5), teve uma mistura de ondas de interferência, que resultou em um espalhamento mais lento. Essas análises se tornam mais visíveis quando observamos as maiores probabilidades, que para as três redes variam entre 0,1 e 0,2. Neste intervalo, foi encontrado 16 pares de vértices para rede de grafeno (17,1), 4 pares para rede de dimensão (8,3) e 10 pares para última rede. O valor máximo para as três estruturas mostram efeitos de localização mais fortes, no qual ocorre na Figura 22(c) em $\pi_{1,36}(10) = \pi_{35,70}(10) \approx 0,167$, na Figura 22(d) quando $\pi_{1,1} = \pi_{54,54} \approx 0,114$ e no gráfico da Figura 22(e) com $\pi_{27,33} \approx 0,130$.

Figura 22 – Gráficos de contorno da probabilidade de transição $\pi_{a,b}(10)$. Em (a) e (b) temos o comportamento da caminhada dos fullerenos C_{60} e C_{70} , respectivamente. Temos ainda, em (c), (d) e (e) as respectivas transições do caminhante nas estruturas de grafeno com dimensões (17,1), (8,3) e (5,5).

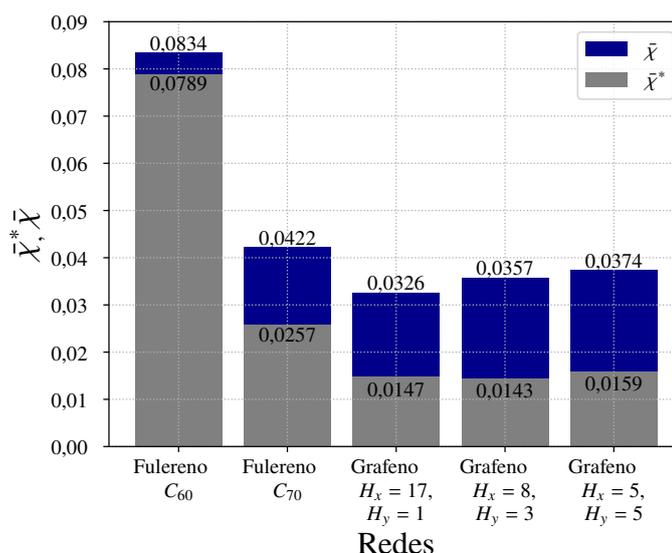


4.4 Eficiência de $\bar{\chi}$

Para determinar a eficácia do transporte para cada rede, foram encontrados o valor médio $\bar{\chi}$ e o limite inferior $\bar{\chi}^*$, como exibidos na Figura 23. O fulereno C_{60} possui $\bar{\chi} \approx 0,0834$, sendo maior valor médio. Enquanto no fulereno C_{70} , foi encontrado $\bar{\chi} \approx 0,0422$, demonstrando uma alta eficiência no transporte para este tipo de rede. Em relação as folhas de grafeno, os valores médios obtidos para as dimensões (17,1), (8,3) e (5,5) foram $\bar{\chi} \approx 0,0326$, $\bar{\chi} \approx 0,0357$ e $\bar{\chi} \approx 0,0374$, respectivamente. Dessa forma, o grafeno (17,1) possui o transporte mais eficiente e quando $H_x = H_y$ a rede se torna ineficiente.

De modo geral, foi observado que o fulereno C_{60} teve menor eficiência dentre todas as estruturas, enquanto o grafeno (17,1) a maior. Porém essa rede de dimensão (17,1), mesmo que o arranjo de hexágonos seja estruturado linearmente, é menos eficiente do que uma linha com valor médio $\bar{\chi} = 1/N \approx 0,014$ (MÜLKEN; BLUMEN, 2011).

Figura 23 – Representação gráfica do valor médio $\bar{\chi}$ e seu limite inferior $\bar{\chi}^*$ obtidos para as folhas de grafeno e fulerenos.



Os limites inferiores $\bar{\chi}^*$ são apresentados pelas barras de cor cinza da Figura 23, vemos que essa aproximação de $\bar{\chi}$ não é válida para as estruturas com $N = 70$, em que os erros relativos percentuais $(|\bar{\chi} - \bar{\chi}^*|/\bar{\chi}) \cdot 100\%$ obtidos foram acima de 30%. Porém quando $N = 60$, obtemos que $\bar{\chi}^*$ é válido na ordem de magnitude -2 e o erro relativo percentual calculado foi 5,39%.

Na Figura 24 é apresentado o espectro de autovalores de cada rede, em que as curvas mais contínuas determinam menor quantidade de autovalores degenerados, resultando em um melhor transporte. Em contrapartida, as curvas que λ é constante são regiões de maior degenerescência.

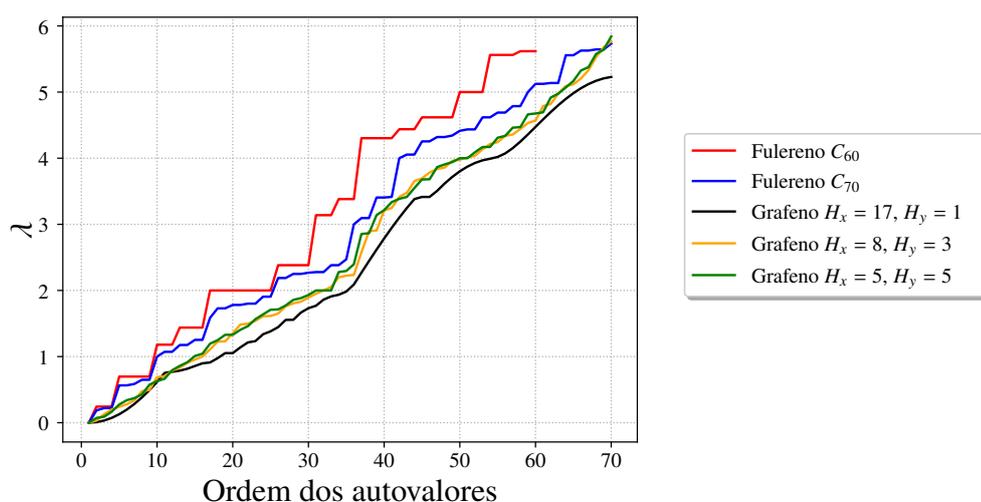
Com o espectro de autovalores da Figura 24, encontramos que o fulereno C_{60} é altamente degenerado devido a sua maior simetria, em que $\lambda = 2$ é o autovalor mais degenerado tendo 9 ocorrências. Além disso, foi encontrado 6 autovalores repetidos 3 vezes, 3 autovalores repetidos 4

vezes e 4 autovalores repetidos 5 vezes. Por outro lado, a rede C_{70} é constituída por 28 autovalores duplamente degenerados e 14 autovalores não-degenerados.

As folhas de grafeno foram as estruturas que obtiveram maior quantidade de autovalores não-degenerados. O grafeno (17,1) possui apenas o autovalor $\lambda \approx 3,41$ duplamente degenerado. Já a rede (8,3) teve todos os autovalores não-degenerados. E para folha (5,5), os autovalores $\lambda = 2$ se repetiu 4 vezes e $\lambda = 4$ teve dupla degenerescência.

As quantidades de autovalores, influenciaram no comportamento dos resultados de $\bar{\chi}$ e $\bar{\chi}^*$. Nas redes $N = 70$, por conta da menor ocorrência de autovalores degenerados, os valores de $\bar{\chi}$ e $\bar{\chi}^*$ não foram próximos e são menores do que no fullereno C_{60} . Vale ressaltar, que o grafeno (8,3) teve características similares a de uma cadeia linear, tendo todos seus autovalores distintos e $\bar{\chi}^* = 1/N$. Porém, como ele possui maior quantidade de vértices de grau 3 comparado ao grafeno (17,1), o valor de $\bar{\chi}$ foi maior e se diferiu de $\bar{\chi}^*$. As altas degenerescências de C_{60} , causaram o seu transporte ineficiente, e também, seu erro relativo percentual menor.

Figura 24 – Espectro de autovalores para as folhas de grafeno e os fulerenos. As curvas mais contínuas representam estruturas com menor ocorrência de autovalores degenerados e as regiões em que λ é constante são as degenerescências.



5 CONCLUSÃO

Neste trabalho foi analisado o comportamento das caminhadas quânticas de tempo contínuo nas redes favo de mel do grafeno, com dimensões $(H_x, H_y) = (17, 1)$, $(8, 3)$ e $(5, 5)$, e do fulereno C_{60} e C_{70} . Investigou-se as probabilidades médias de retorno clássico e quântico, e o valor médio ao longo do tempo $\bar{\chi}$. Além disso, a probabilidade de transição quântica $\pi_{a,b}(t)$ foi encontrada, afim de fornecer o comportamento da caminhada entre cada vértice no tempo $t = 10$.

Foi observado que classicamente a probabilidade de retorno de C_{70} decaiu mais rapidamente, acarretando em um melhor transporte clássico. Tal fato ocorreu devido a seu maior valor de N do que o C_{60} , e a maior quantidade de vértices com três ligações comparado as redes bidimensionais. No caso das redes de grafeno, constatou-se quanto maior o valor de H_x o decaimento de $\bar{p}(t)$ era mais lento e o número de vértices de grau três é menor. Com isso, o grafeno $(17, 1)$ teve o pior transporte clássico.

Na probabilidade média de retorno quântico $\bar{\pi}(t)$, o comportamento oscilatório das redes de grafeno foram mais reduzidos, sugerindo um melhor transporte. Os decaimentos ao longo do tempo, se tornaram mais lentos a medida que diminuimos o parâmetro H_x . Para os fulerenos, descobrimos que C_{70} possui o melhor transporte quântico, pois sua probabilidade média de retorno quântico é menor do que a estrutura C_{60} . Isso ocorre em razão da quebra de simetria de C_{60} para C_{70} .

Além disso, as probabilidades de transição $\pi_{a,b}(10)$ das estruturas C_{60} , C_{70} e o grafeno $(8, 3)$ apresentaram efeitos de localização na região antidiagonal. Entretanto, C_{70} teve 5 zonas com baixas probabilidades que correspondem a vértices vizinhos e mais duas regiões de localização de mais dois outros vizinhos desses vértices. O grafeno $(17, 1)$ exibiu regiões de localização em um bloco 2×2 , tal fato ocorre devido ao tempo $t = 10$ não ser suficiente para o caminhante se espalhar por toda rede. Já o grafeno $(5, 5)$ teve uma mistura de ondas de interferência, tornado o espalhamento mais lento.

A eficiência de $\bar{\chi}$ reforçou o que foi analisado em $\bar{\pi}(t)$, em que as redes de grafeno tiveram o melhor transporte quântico. E ainda, a medida que H_x aumenta o transporte é mais eficiente. Em contra partida, os fulerenos apresentaram os maiores valores de $\bar{\chi}$, contudo C_{60} se destaca por ter o transporte ineficiente. O limite inferior $\bar{\chi}^*$ foi válido apenas em C_{60} , devido a alta quantidade de autovalores degenerados. Em suma, o grafeno $(17, 1)$ teve o transporte quântico mais eficiente e o fulereno C_{60} o transporte mais ineficiente.

REFERÊNCIAS

- AGLIARI, E. *et al.* Dynamics of continuous-time quantum walks in restricted geometries. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, IOP Publishing, Bristol, v. 41, n. 44, p. 445301, oct 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/1751-8113/41/44/445301>>. Acesso em: 20 dez. 2020.
- AHARONOV, Y. *et al.* Quantum random walks. **Physical Review A**, American Physical Society, College Park, v. 48, n. 2, p. 1687–1690, aug. 1993.
- AMER, M. S. **Raman Spectroscopy, Fullerenes and Nanotechnology**. 1. ed. Cambridge: Royal Society of Chemistry, 2010.
- ANISHCHENKO, A. **Efficiency of continuous-time quantum walks: from networks with disorder to deterministic fractals**. Tese (PhD Tesis) — Faculty of Mathematics and Physics, Albert Ludwig University of Freiburg, Freiburg, 2015.
- AVRAHAM, D. ben *et al.* One-dimensional continuous-time quantum walks. **Quantum Information Processing**, Springer Science and Business Media LLC, New York, v. 3, n. 1-5, p. 295–308, out 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11128-004-9420-8>>. Acesso em: 2 dez. 2020.
- BENSON, A. R. *et al.* The spacey random walk: A stochastic process for higher-order data. **SIAM Review**, Society for Industrial & Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, v. 59, n. 2, p. 321–345, jan 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1137/16m1074023>>. Acesso em: 10 nov. 2020.
- BLANCHARD, P.; VOLCHENKOV, D. **Random Walks and Diffusions on Graphs and Databases: An Introduction**. 1. ed. Berlin: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2011.
- BÖHM, J. *et al.* Microwave experiments simulating quantum search and directed transport in artificial graphene. **Physical Review Letters**, American Physical Society (APS), v. 114, n. 11, mar 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.110501>>. Acesso em: 30 set. 2021.
- BOUGROURA, H. *et al.* Quantum-walk transport properties on graphene structures. **Physical Review A**, American Physical Society (APS), College Park, v. 94, n. 6, dec 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.94.062331>>. Acesso em: 15 out. 2021.
- BRÉMAUD, P. **Discrete Probability Models and Methods: Probability on Graphs and Trees, Markov Chains and Random Fields, Entropy and Coding**. 1. ed. Gewerbestrasse: Springer, 2017.
- BROWN, R. XXVII. a brief account of microscopical observations made in the months of june, july and august 1827, on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies. **The Philosophical Magazine**, Taylor & Francis, London, v. 4, n. 21, p. 161–173, 1828. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/14786442808674769>>. Acesso em: 2 abr. 2020.
- CASQUILHO, J.; TEIXEIRA, P. **Introdução A Física Estatística**. 1. ed. São Paulo: LIVRARIA DA FÍSICA, 2012.
- CHARTRAND, G.; ZHANG, P. **Chromatic Graph Theory**. 1. ed. New York: CRC Press, 2020.

CHILDS, A. M. Universal computation by quantum walk. **Physical Review Letters**, American Physical Society (APS), College Park, v. 102, n. 18, Maio 2009. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.180501>>. Acesso em: 20 abr. 2020.

CHILDS, A. M. *et al.* Exponential algorithmic speedup by a quantum walk. In: **Proceedings of the thirty-fifth ACM symposium on Theory of computing - STOC '03**. New York: ACM Press, 2003. Disponível em: <<https://doi.org/10.1145%2F780542.780552>>. Acesso em: 3 dez. 2020.

DINADAYALANE, T. C.; LESZCZYNSKI, J. Remarkable diversity of carbon-carbon bonds: structures and properties of fullerenes, carbon nanotubes, and graphene. **Structural Chemistry**, Springer Science and Business Media LLC, New York, v. 21, n. 6, p. 1155–1169, nov 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007%2Fs11224-010-9670-2>>. Acesso em: 15 ago. 2021.

DOBROW, R. P. **Introduction to Stochastic Processes with R**. 1. ed. New Jersey: Wiley, 2016.

FARHI, E.; GUTMANN, S. Quantum computation and decision trees. **Physical Review A**, American Physical Society (APS), College Park, v. 58, n. 2, p. 915–928, aug 1998. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103%2Fphysreva.58.915>>. Acesso em: 30 nov. 2020.

FEYNMAN, R. P. Simulating physics with computers. **International Journal of Theoretical Physics**, Springer Science and Business Media LLC, New York, v. 21, n. 6-7, p. 467–488, jun 1982. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007%2Fb02650179>>. Acesso em: 30 maio 2020.

FOWLER, P. W.; MANOLOPOULOS, D. **An Atlas of Fullerenes**. 1. ed. New York: Dover Publications, 2006.

GALICEANU, M.; STRUNZ, W. T. Continuous-time quantum walks on multilayer dendrimer networks. **Physical Review E**, American Physical Society (APS), College Park, v. 94, n. 2, aug 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103%2Fphysreve.94.022307>>. Acesso em: 20 jan. 2021.

GAVRILENKO, V. I. **Optics of Nanomaterials**. 2. ed. Singapore: Jenny Stanford Publishing, 2020.

GEIM, A.; NOVOSELOV, K. The rise of graphene. **Nature materials**, v. 6, p. 183–91, Março 2007.

GRATTAN-GUINNESS, I. **Companion Encyclopedia of the History and Philosophy of the Mathematical Sciences**. 1. ed. Abingdon: Routledge, 1994.

GRIMMETT, G.; WELSH, D. **Probability: An Introduction**. 2. ed. New York: Oxford University Press, 2014.

GROSS, J. L. *et al.* **Handbook of Graph Theory**. 2. ed. New York: CRC Press, 2014.

GROVER, L. K. Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack. **Physical Review Letters**, American Physical Society (APS), College Park, v. 79, n. 2, p. 325–328, jul 1997. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103%2Fphysrevlett.79.325>>. Acesso em: 10 jun. 2020.

HILLIER, F. S.; LIEBERMAN, G. J. **Introduction to Operations Research**. 10. ed. New York: McGraw-Hill Education, 2015.

HOMAEIGO HAR, S.; ELBAHRI, M. Graphene membranes for water desalination. **NPG Asia Materials**, Springer Science and Business Media LLC, New York, v. 9, n. 8, p. e427–e427, aug 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038%2Fam.2017.135>>. Acesso em: 15 ago. 2021.

HU, Y. *et al.* Carbon nanostructures for advanced composites. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, Bristol, v. 69, n. 6, p. 1847–1895, may 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088%2F0034-4885%2F69%2F6%2F05>>. Acesso em: 18 out. 2021.

HURMACH, V. V. *et al.* C60 fullerene against SARS-CoV-2 coronavirus: an in silico insight. **Scientific Reports**, Springer Science and Business Media LLC, New York, v. 11, n. 1, sep 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038%2Fsr41598-021-97268-6>>. Acesso em: 30 dez. 2021.

IBE, O. C. **Markov Processes for Stochastic Modeling**. 1. ed. Burlington: Academic Press, 2009.

ISMAIL, A. F.; GOH, P. S. **Carbon-Based Polymer Nanocomposites for Environmental and Energy Applications**. 1. ed. Amsterdam: Elsevier, 2018.

KARLIN, S.; TAYLOR, H. M. **An Introduction to Stochastic Modeling**. 3. ed. San Diego: Academic Press, 1998.

KING, R. B. **Applications of Graph Theory and Topology in Inorganic Cluster and Coordination Chemistry**. 1. ed. Florida: CRC Press, 1992.

KNIGHT, P. L. *et al.* Optical cavity implementations of the quantum walk. **Optics Communications**, Elsevier BV, Amsterdam, v. 227, n. 1-3, p. 147–157, nov 2003. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.optcom.2003.09.024>>. Acesso em: 20 ago. 2020.

KROTO, H. W. *et al.* C60: Buckminsterfullerene. **Nature**, Springer Science and Business Media LLC, New York, v. 318, n. 6042, p. 162–163, nov 1985. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038%2F318162a0>>. Acesso em: 20 dez. 2020.

KROVI, H.; BRUN, T. A. Hitting time for quantum walks on the hypercube. **Physical Review A**, American Physical Society (APS), College Park, v. 73, n. 3, mar 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103%2Fphysreva.73.032341>>. Acesso em: 2 ago. 2021.

KUBOZONO, Y. **Physics and Chemistry of Carbon-Based Materials: Basics and Applications**. 1. ed. Singapore: Springer, 2019.

KULVELIS, N. *et al.* Universality at breakdown of quantum transport on complex networks. **Physical Review Letters**, American Physical Society (APS), College Park, v. 115, n. 12, sept. 2015. ISSN 1079-7114.

LAGOW, R. J. *et al.* Synthesis of linear acetylenic carbon: The “sp” carbon allotrope. **Science**, American Association for the Advancement of Science (AAAS), Washington, v. 267, n. 5196, p. 362–367, jan 1995. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126%2Fscience.267.5196.362>>. Acesso em: 2 abr. 2020.

LEONEL, E. **Fundamentos da física estatística**. 1. ed. São Paulo: Blucher, 2015.

LI, X. *et al.* Quantum transport on large-scale sparse regular networks by using continuous-time quantum walk. **Quantum Information Processing**, Springer Science and Business Media LLC, New York, v. 19, n. 8, jul 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007%2Fs11128-020-02731-4>>. Acesso em: 2 jan. 2021.

- LIN, Y.-M. *et al.* 100-GHz transistors from wafer-scale epitaxial graphene. **Science**, American Association for the Advancement of Science (AAAS), Washington, v. 327, n. 5966, p. 662–662, feb 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126%2Fscience.1184289>>. Acesso em: 5 out. 2020.
- LIPSCHUTZ, S.; LIPSON, M. **Schaum's Outline of Discrete Mathematics**. 3. ed. New York: McGraw-Hill, 2009.
- LIU, A. **S.M.A.R.T. Circle Projects**. 1. ed. Cham: Springer, 2018.
- MACIEL, C. M. *et al.* Quantum transport on modified multilayered spiderwebs. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, IOP Publishing, Bristol, v. 51, n. 49, p. 495301, nov 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088%2F1751-8121%2Faae8ab>>. Acesso em: 10 jun. 2020.
- MOHAN, S. V. *et al.* **Microbial Electrochemical Technology: Sustainable Platform for Fuels, Chemicals and Remediation**. 1. ed. Amsterdam: Elsevier, 2018. (Biomass, Biofuels and Biochemicals).
- MONDAL, K. *et al.* Carbon nanostructures for energy and sensing applications. **Journal of Nanotechnology**, Hindawi Limited, v. 2019, p. 1–3, may 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1155%2F2019%2F1454327>>. Acesso em: 15 out. 2021.
- MONTEIRO, L. H. A. **Sistemas dinâmicos**. 2. ed. São Paulo: Livraria da Física, 2006.
- MUELKEN, O. Inefficient quantum walks on networks: the role of the density of states. **arXiv preprint arXiv:0710.3453**, 2007.
- MÜLKEN, O. *et al.* Coherent exciton transport in dendrimers and continuous-time quantum walks. **The Journal of Chemical Physics**, AIP Publishing, New York, v. 124, n. 12, p. 124905, mar 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063%2F1.2179427>>. Acesso em: 5 mar. 2020.
- MÜLKEN, O.; BLUMEN, A. Continuous-time quantum walks: Models for coherent transport on complex networks. **Physics Reports**, Elsevier BV, Amsterdam, v. 502, n. 2-3, p. 37–87, may 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.physrep.2011.01.002>>. Acesso em: 2 jan. 2021.
- NETTO, P. O. B.; JURKIEWICZ, S. **Grafos: introdução e prática**. 2. ed. São Paulo: Editora Blucher, 2017.
- NEWMAN, M. **Networks**. 2. ed. New York: Oxford University Press, 2018.
- NOVOSELOV, K. S. *et al.* Electric field effect in atomically thin carbon films. **Science**, American Association for the Advancement of Science (AAAS), Washington, v. 306, n. 5696, p. 666–669, oct 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126%2Fscience.1102896>>. Acesso em: 01 ago. 2021.
- O'KEEFFE, M.; HYDE, B. G. **Crystal Structures: Patterns and Symmetry**. 1. ed. New York: Dover Publications, 2020.
- OLOFSSON, P.; ANDERSSON, M. **Probability, Statistics, and Stochastic Processes**. 2. ed. New Jersey: Wiley, 2012.

- PEARSON, K. The problem of the random walk. **Nature**, Springer Science and Business Media LLC, London, v. 72, n. 1865, p. 294–294, jul 1905. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038%2F072294b0>>. Acesso em: 20 out. 2020.
- PINHEIRO, J. I. D. *et al.* **Estatística básica: a arte de trabalhar com dados**. 1. ed. Rio de Janeiro: Elsevier, 2009.
- PINSKY, M. A.; KARLIN, S. **An Introduction to Stochastic Modeling**. 4. ed. Burlington: Academic Press, 2011.
- PORCELLO, E.; BANKS, A. **Learning GraphQL: Declarative Data Fetching for Modern Web Apps**. 1. ed. Sebastopol: O'Reilly Media, 2018.
- POZRIKIDIS, C. **An Introduction to Grids, Graphs, and Networks**. New York: Oxford University Press, 2014.
- PROCTOR, J. E. *et al.* **An Introduction to Graphene and Carbon Nanotubes**. 1. ed. New York: CRC Press, 2017.
- PUTZ, M. V. **New Frontiers in Nanochemistry**. 1. ed. New York: Apple Academic Press, 2020.
- RASHID, M. **Geochemistry of Marine Humic Compounds**. 1. ed. New York: Springer, 1985.
- RODRIGUES, R. de C. M.; CARVALHO, S. V. de. UM MODELO MARKOVIANO DE DECISÃO PARA A OTIMIZAÇÃO DE UM SISTEMA DE MANUTENÇÃO COM TEMPOS DE REPARO COXIANOS E FASES NÃO OBSERVÁVEIS. **Pesquisa Operacional**, Scielo, Rio de Janeiro, v. 21, n. 2, p. 159 – 178, jul. 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1590/S0101-74382001000200003>>. Acesso em: 11 fev. 2021.
- ROSEN, K. H. **Discrete Mathematics and its Applications**. 8. ed. New York: Mc Graw Hill, 2019.
- RYCROFT, C. H.; BAZANT, M. Z. **Lecture 1: Introduction to Random Walks and Diffusion**. Cambridge: MIT, Department of Mathematic, 2005.
- SACHDEV, P. L.; VENKATACHALAPPA, M. **Recent Advances in Fluid Mechanics**. 1. ed. Amsterdam: CRC Press, 1998.
- SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. **Modern Quantum Mechanics**. 3. ed. New York: Cambridge University Press, 2020.
- SARKAR, B. K.; CHAKRABORTY, S. K. **Combinatorics and Graph Theory**. 1. ed. Delhi: PHI Learning Private Limited, 2016.
- SCALAS, E. The application of continuous-time random walks in finance and economics. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier BV, Amsterdam, v. 362, n. 2, p. 225–239, apr 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.physa.2005.11.024>>. Acesso em: 3 set. 2020.
- SCHNITZER, M. J. Theory of continuum random walks and application to chemotaxis. **Physical Review E**, American Physical Society (APS), College Park, v. 48, n. 4, p. 2553–2568, oct 1993. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103%2Fphysreve.48.2553>>. Acesso em: 20 set. 2020.

SEPHTON, B. *et al.* A versatile quantum walk resonator with bright classical light. **PLOS ONE**, Public Library of Science (PLoS), San Francisco, v. 14, n. 4, p. e0214891, apr 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1371/journal.pone.0214891>>. Acesso em: 5 out. 2020.

SHEKIN, T. J. **Markov Chains and Decision Processes for Engineers and Managers**. 1. ed. Florida: CRC Press, 2011.

SHOR, P. Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring. In: **Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science**. IEEE Comput. Soc. Press, 1994. Disponível em: <<https://doi.org/10.1109/fscs.1994.365700>>. Acesso em: 10 jun. 2020.

SILANT'EV, A. V. Energy spectrum and optical absorption spectrum of fullerene C_{70} within the hubbard model. **Russian Physics Journal**, Springer Science and Business Media LLC, New York, v. 60, n. 6, p. 978–989, oct 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11182-017-1167-7>>. Acesso em: 20 fev. 2021.

SILANT'EV, A. V. Energy spectrum and optical properties of C_{60} fullerene within the hubbard model. **Physics of Metals and Metallography**, Pleiades Publishing, Ltd., Moscow, v. 118, n. 1, p. 1–9, jan 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1134/S0031918X16100112>>. Acesso em: 20 fev. 2021.

SPRING, J. B. *et al.* Boson sampling on a photonic chip. **Science**, American Association for the Advancement of Science (AAAS), v. 339, n. 6121, p. 798–801, dec 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126/science.1231692>>. Acesso em: 30 set. 2021.

STEWART, W. J. **Probability, Markov chains, queues and simulation: the mathematical basis of performance modeling**. 1. ed. New Jersey: Princeton University Press, 2009.

SZWARCFITER, J. L. **Grafos e algoritmos computacionais**. 2. ed. Rio de Janeiro: Campus, 1986.

TANG, H. *et al.* Experimental two-dimensional quantum walk on a photonic chip. **Science Advances**, American Association for the Advancement of Science (AAAS), v. 4, n. 5, may 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126/sciadv.aat3174>>.

TORRES, L. E. F. F. *et al.* **Introduction to Graphene-Based Nanomaterials: Introduction to Graphene-Based Nanomaterials**. 2. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2020.

VASCONCELOS, D. S. **Coloração em grafos e aplicações**. Dissertação (Mestrado Profissional em Matemática) — Programa de Pós-Graduação em Matemática, Universidade Federal de Sergipe, São Cristóvão, 2018.

WANG, B. *et al.* When brownian diffusion is not gaussian. **Nature Materials**, Springer Science and Business Media LLC, v. 11, n. 6, p. 481–485, may 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nmat3308>>. Acesso em: 10 nov. 2021.

WANG, Y. *et al.* Graphene and graphene oxide: biofunctionalization and applications in biotechnology. **Trends in Biotechnology**, Elsevier BV, v. 29, n. 5, p. 205–212, may 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.tibtech.2011.01.008>>. Acesso em: 30 set. 2021.

WONG, H.-S. P.; AKINWANDE, D. **Carbon nanotube and graphene device physics**. 1. ed. New York: Cambridge University Press, 2011.

XU, X.-P. Continuous-time quantum walks on one-dimensional regular networks. **Physical Review E**, American Physical Society (APS), College Park, v. 77, n. 6, jun 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.77.061127>>. Acesso em: 20 jan. 2021.

YAHYA, N. **Carbon and Oxide Nanostructures Synthesis, Characterisation and Applications**. 1. ed. Berlin: Springer Berlin Heidelberg, 2010.

YAN, Z. *et al.* Strongly correlated quantum walks with a 12-qubit superconducting processor. **Science**, American Association for the Advancement of Science (AAAS), v. 364, n. 6442, p. 753–756, may 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126/science.aaw1611>>.

YANG, C. Y. *et al.* **Nanocarbon Electronics**. 1. ed. Singapore: Jenny Stanford Publishing, 2020.

YANG, G. *et al.* Structure of graphene and its disorders: a review. **Science and Technology of Advanced Materials**, Informa UK Limited, v. 19, n. 1, p. 613–648, aug 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/14686996.2018.1494493>>. Acesso em: 20 fev. 2021.

YASUDA, E. *et al.* **Carbon Alloys: Novel Concepts to Develop Carbon Science and Technology**. 1. ed. Kidlington: Elsevier, 2003.

YILDIZ, G. *et al.* Graphene and graphene oxide for bio-sensing: General properties and the effects of graphene ripples. **Acta Biomaterialia**, Elsevier BV, Amsterdam, v. 131, p. 62–79, sep 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.actbio.2021.06.047>>. Acesso em: 30 ago. 2021.

YOUNG, S. M. *et al.* **General Chemistry: Atoms First**. 1. ed. Boston: Cengage Learning, 2018.

ZHANG, X.-H. *et al.* High-performance and electrically stable c60 organic field-effect transistors. **Applied Physics Letters**, AIP Publishing, New York, v. 91, n. 9, p. 092114, aug 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.2778472>>. Acesso em: 15 out. 2020.