

Transporte quântico em redes hexagonais

Geyson Maquiné Batalha^{1*}, Mircea Daniel Galiceanu²

¹²Universidade Federal do Amazonas, Departamento de Física, Programa de Pós-graduação em Física, Av. Rodrigo Otávio Jordão Ramos, 6200, Coroado I, 69067-005, Manaus AM, Brasil.

*geyson.maquine@gmail.com

Palavras-Chave: Caminhada quântica, Tempo contínuo, fullereno, grafeno.

Introdução

O estudo das propriedades de transporte em materiais nanoestruturados é um tema central na física, química e ciência da computação. Fenômenos clássicos de transporte são frequentemente descritos por caminhadas aleatórias, mas em diversos sistemas os efeitos quânticos tornam-se relevantes. Nesse contexto, as caminhadas quânticas (QWs) constituem um modelo fundamental para descrever a dinâmica em redes complexas e têm papel essencial em algoritmos de busca e computação quântica. Neste trabalho, utilizamos o formalismo da caminhada quântica em tempo contínuo (CTQW) para investigar o transporte em redes hexagonais. O carbono, um dos elementos mais abundantes da Terra, forma estruturas com simetria hexagonal, como o grafeno, cujas propriedades excepcionais derivam de sua geometria bidimensional⁴. Entre os diversos alótropos, analisamos o grafeno e o fullereno, ambos com representações planares bem definidas e conectividade trivalente semelhante¹. A eficiência de transporte é quantificada pela probabilidade média de retorno e sua média temporal de longo prazo, grandezas determinadas pelas propriedades espectrais da matriz de conectividade. Nosso objetivo é compreender a dinâmica do caminhante quântico nessas redes e avaliar sua eficiência de transporte.

Métodos

Redes favo de mel

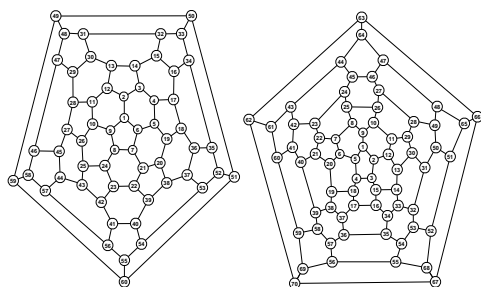


Figura 1: Diagrama de Schlegel para os fulerenos, a esquerda é apresentada a posição dos átomos de carbono para rede C_{60} e na direita para C_{70} .

Os fulerenos, ou *buckyballs*, são estruturas esféricas

ocas consideradas, do ponto de vista físico, objetos finitos de dimensão zero. Os alótropos mais conhecidos são C_{60} e C_{70} , compostos por faces hexagonais e pentagonais, em que cada átomo (nó) realiza três ligações. A proporção entre os tipos de faces é obtida pela fórmula de Euler para poliedros², $N + F - E = 2$, onde N , F e E representam, respectivamente, o número de nós, faces e arestas. Dessa relação resulta que todo fullereno possui exatamente 12 pentágonos e $N/2 - 10$ hexágonos. A representação planar dessas estruturas é dada pelos diagramas de Schlegel, mostrados na Figura 1, com a numeração dos nós indicada para facilitar a interpretação dos resultados.

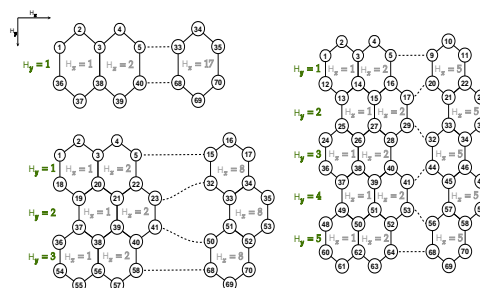


Figura 2: Representação das folhas de grafeno enumeradas, no qual à esquerda tem-se uma rede com dimensão $(H_x, H_y)=(17,1)$ na parte superior e na região inferior a estrutura com $(H_x, H_y)=(8,3)$. Ao lado direito, é apresentado a folha de grafeno de tamanho $(H_x, H_y)=(5,5)$.

O grafeno é um alótropo bidimensional do carbono, formado por uma única camada de átomos organizados em uma rede hexagonal tipo favo de mel. Embora seja a base de todos os demais alótropos de carbono, sua isolamento em folha única ocorreu apenas recentemente⁴. Neste trabalho, a rede de grafeno é definida pelo número de hexágonos nas direções H_x e H_y . Foram consideradas três estruturas com dimensões $(H_x, H_y) = (17,1)$, $(8,3)$ e $(5,5)$, ilustradas na Figura 2. Os vértices são numerados sequencialmente: primeiro ao longo das linhas na direção x , começando na borda y , e depois nas linhas seguintes, dando continuidade à contagem anterior. O número total de vértices N_G e de arestas E_G para uma folha com H_x e H_y hexágonos é dado por: $N_G = 2(H_x + H_y + H_x H_y)$, $E_G = N_G + H_x H_y - 1$.

Modelo teórico

O principal objetivo deste trabalho é investigar o transporte quântico em redes hexagonais pelo modelo de CTQW, comparando-o ao caso clássico (CTRW) para evidenciar suas diferenças dinâmicas. Uma rede é composta por N nós conectados, formando um grafo conexo $G = (V, E)$, em que cada vértice está associado a um estado $|i\rangle$ representando uma excitação no nó i . A dinâmica de ambas as caminhadas é regida pela matriz de conectividade \mathbf{A} , cujos elementos diagonais são os graus dos nós, $A_{ii} = k_i$, e os elementos fora da diagonal são $A_{ij} = -1$ se os nós i e j estão conectados, e $A_{ij} = 0$ caso contrário. Essa matriz real e simétrica de dimensão $N \times N$ possui autovalor fundamental $\lambda_1 = 0$, sendo os demais positivos e ordenados crescentemente³.

A eficiência global do transporte, consiste em determinar a probabilidade média de permanecer ou retornar ao nó i inicialmente excitado durante um tempo t . Para CTRW e CTQW as probabilidades médias de retorno, serão respectivamente: $\bar{p}(t) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{-\lambda_n t}$, $\bar{\pi}(t) = \frac{1}{N} \left| \sum_{n=1}^N e^{-j\lambda_n t} \langle i|w_n\rangle \langle w_n|i\rangle \right|^2$.

O decaimento de $\bar{p}(t)$ e $\bar{\pi}(t)$ expressa o velocidade de espalhamento do caminhante na rede, ou seja, quanto menor decaimento menor é a propagação. Além disso, no caso clássico a probabilidade converge a uma equipartição de $1/N$ em tempos muito longos. Porém, no caso quântico temos um padrão oscilatório que possui um valor médio assintótico ao longo do tempo sendo:¹ $\chi \equiv \frac{1}{N^2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \delta_{\lambda_n, \lambda_m} \leq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \delta_{\lambda_n, \lambda_m} |\langle w_n|i\rangle|^2 |\langle w_m|i\rangle|^2 \right] \equiv \bar{\chi}$. Nesta equação, ao lado direito temos o valor exato do valor médio assintótico e na parte esquerda temos o limite inferior que é uma expressão que independe dos autovalores¹. O transporte quântico possui maior eficiência quando $\bar{\chi}$ e χ são iguais igual a 0, e será ineficiente caso resultarem em 1.

Resultados e Discussão

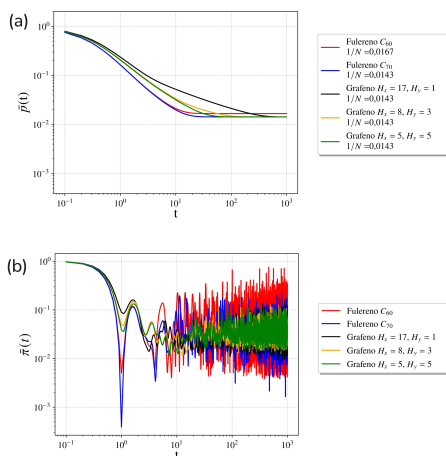


Figura 3: (a) Gráfico da probabilidade média de retorno $\bar{p}(t)$ para uma caminhada aleatória clássica. (B) Gráfico da probabilidade média de retorno quântico $\bar{\pi}(t)$ das redes de grafeno e fulereno.

A Figura 3(a) mostra a probabilidade média de retorno clássica $\bar{p}(t)$ para redes de grafeno e fulereno. Em tem-

pos longos, as curvas decaem até o valor de equipartição $1/N$. Nos fulerenos C_{60} e C_{70} , esse equilíbrio é atingido rapidamente devido à alta conectividade (nós trivalentes), e o decaimento intermediário segue uma lei de potência com expoente $-1,0$. Nas redes de grafeno, o tempo para o equilíbrio depende da geometria, sendo maior em estruturas mais lineares. O decaimento segue a mesma lei de potência para folhas quase quadradas, mas em geometrias alongadas ocorre um segundo regime mais lento, com expoente próximo de $-0,5$, característico de cadeias lineares³.

A probabilidade média de retorno quântico exibe oscilações a partir de $t = 10$, mais intensas nos fulerenos e menos pronunciadas no grafeno, conforme a Figura 3. Quanto à eficiência de transporte, o fulereno C_{70} ($\chi_{C_{70}} \approx 0,025$) mostrou-se mais eficiente que o C_{60} ($\chi_{C_{60}} \approx 0,078$), por apresentar menor valor médio assintótico, embora ainda inferior ao de uma cadeia linear. Nas redes de grafeno, a eficiência quântica aumenta com o tamanho da folha e é maior em topologias mais lineares, sendo reduzida em geometrias quadradas com número ímpar de hexágonos em uma das direções.

Conclusões

Neste trabalho, analisou-se o comportamento do transporte quântico nas redes de grafeno e nos fulerenos C_{60} e C_{70} . Em ambas as redes, observou-se que a estrutura topológica está diretamente relacionada à eficiência de propagação do caminhante quântico. No caso do grafeno, quanto maior o número de hexágonos em uma direção, mais eficiente é o transporte, devido à propagação quase unidimensional. Por outro lado, redes mais simétricas ($H_x \approx H_y$) apresentam maiores probabilidades de retorno. Já para os fulerenos, observa-se que o C_{60} , por sua alta simetria e conseqüente degenerescência espectral, promove forte localização e retornos periódicos ao nó inicial do caminhante, resultando em baixa eficiência de transporte. Em contraste, o C_{70} , cuja simetria é quebrada por sua geometria elipsoidal, apresenta espectro menos degenerado e, portanto, transporte mais eficiente.

Agradecimentos

CAPES pelo suporte financeiro e o Programa de Pós-graduação em Física - UFAM.

Referências

- [1] Batalha, G. M.; Volta, A.; Strunz, W. T.; Galiceanu, M. Quantum transport on honeycomb networks. *Scientific Reports*, 12(1). 2022.
- [2] Fowler, P. W.; Manolopoulos, D. E. *An Atlas of Fullerenes*. Dover Publications, Mineola, New York, reprint edition. Originally published by Oxford University Press in 1995. 2007.
- [3] Mülken, O.; Blumen, A. Continuous-time quantum walks: Models for coherent transport on complex networks. *Physics Reports*, 502(2-3):37–87. 2011.
- [4] Novoselov, K. S.; Geim, A. K.; Morozov, S. V.; Jiang, D.; Zhang, Y.; Dubonos, S. V.; Grigorieva, I. V.; Firsov, A. A. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306(5696):666–669. 2004.