



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
CURSO DE BACHARELADO EM FÍSICA**

LEIDIANE DE JESUS LOPES

**REDES LIVRES DE ESCALA DE OSCILADORES HARMÔNICOS ACOPLADOS:
APLICAÇÃO PARA TEORIA QUÂNTICA DE CAMPOS**

**MANAUS
2025**

LEIDIANE DE JESUS LOPES

**REDES LIVRES DE ESCALA DE OSCILADORES HARMÔNICOS ACOPLADOS:
APLICAÇÃO PARA TEORIA QUÂNTICA DE CAMPOS**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Física da Universidade Federal do Amazonas (UFAM), como requisito para obtenção do título de bacharela em Física.

Orientador: Dr. Mircea Daniel Galiceanu.

**MANAUS
2025**

Ficha Catalográfica

Elaborada automaticamente de acordo com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

- L864r Lopes, Leidiane de Jesus
Redes livre de escala de osciladores harmônicos acoplados: aplicação para teoria quântica de campos / Leidiane de Jesus Lopes. - 2025.
50 f. : il., color. ; 31 cm.
- Orientador(a): Mircea Daniel Galiceanu.
Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) - Universidade Federal do Amazonas, Instituto de Ciências Exatas, Curso de Física, Manaus, 2025.
1. Redes Livre de Escala. 2. Redes Complexas. 3. Oscilador Harmônico. 4. Teoria Quântica de Campos. I. Galiceanu, Mircea Daniel. II. Universidade Federal do Amazonas. Instituto de Ciências Exatas. Curso de Física. III. Título
-

AGRADECIMENTOS

Agradeço, primeiramente, aos meus pais Manoel e Maria, pelo apoio constante, incentivo e abdição. Expresso também minha gratidão ao meu orientador Dr. Mircea Galiceanu pela paciência e confiança, e a todos os professores do Departamento de Física pelo acolhimento, suporte e fomento durante o curso. Agradeço também aos membros da banca examinadora, Dr. Carlos Fábio e Me. Geyson Maquiné pelas arguições que aprimoraram este trabalho. Aos amigos, singularmente, Karina Comape, Caio Guilherme, Paulo José, Kelen Erika e Willyan Corrêa, que acompanharam essa trajetória, deixo meu sincero reconhecimento pelo apoio, pelas discussões e preceitos velados que elevaram minha formação além da academia. Grata omnibus

RESUMO

Investiga-se o transporte de excitações em campos quânticos discretizados, utilizando o formalismo de Redes Complexas para modelar a geometria do espaço. O objetivo central é analisar como a propagação de um campo bosônico, descrito como uma rede de osciladores harmônicos acoplados, difere da difusão clássica quando o espaço é representado por topologias não triviais. Com isso em vista, implementamos a Caminhada Quântica de Tempo Contínuo (CTQW) em redes do tipo Barabási–Albert e comparamos os resultados com a difusão clássica (CTRW) na mesma estrutura. A análise concentra-se na probabilidade de retorno temporal, revelando uma diferença entre os regimes clássico e quântico. Enquanto o caminhante clássico explora toda a rede, o caminhante quântico tende a permanecer parcialmente localizado em regiões de alta conectividade. Para tanto, identificamos a origem espectral dessa localização topológica, de maneira a caracterizar a Densidade de Estados (DOS) e do *Inverse Participation Ratio* (IPR), mostrando que os modos associados a autovalores altos geram aprisionamento quântico. Como análise suplementar, examinamos a consistência desses fenômenos ao variar a conectividade inicial da rede (m) e o tamanho do sistema (N). Observamos uma transição contínua, de modo que redes pouco conectadas exibem forte localização e transporte ineficiente, enquanto redes mais densas aproximam-se de um regime de estado estendido parcial, com comportamento mais espalhado e menor aprisionamento. Os resultados sugerem que a topologia do espaço discreto atua como um potencial efetivo para excitações bosônicas, de modo que redes esparsas geram regimes de aprisionamento quântico de longo alcance mesmo para sistemas grandes ($N = 2000$), enquanto conectividades maiores induzem espalhamento progressivo e transporte mais eficiente. A análise assintótica revela que a probabilidade média de retorno tende a um valor finito em topologias irregulares, estabelecendo um mecanismo de confinamento topológico análogo à geração de massa efetiva. À vista disso, a dinâmica quântica mostra-se intensamente dependente da geometria discreta, impondo restrições à coerência e à propagação de campos em modelos não contínuos de espaço-tempo.

Palavras-chaves: Redes Livres de Escala. Transporte Quântico. Osciladores Acoplados. Teoria Quântica de Campos.

ABSTRACT

We investigate the transport of excitations in discretized quantum fields, employing the Complex Networks formalism to model spatial geometry. The central objective is to analyze how the propagation of a bosonic field, described as a network of coupled harmonic oscillators, differs from classical diffusion when space is represented by non-trivial topologies. To this end, we implemented the Continuous-Time Quantum Walk (CTQW) on Barabási–Albert networks and compared the results with classical diffusion (CTRW) on the same structure. The analysis focuses on the temporal return probability, revealing a distinct difference between the classical and quantum regimes. While the classical walker explores the entire network, the quantum walker tends to remain partially localized in regions of high connectivity. To this end, we identified the spectral origin of this topological localization by characterizing the Density of States (DOS) and the Inverse Participation Ratio (IPR), demonstrating that modes associated with high eigenvalues generate quantum trapping. As a supplementary analysis, we examined the consistency of these phenomena by varying the initial network connectivity (m) and the system size (N). We observed a continuous transition, where sparsely connected networks exhibit strong localization and inefficient transport, while denser networks approach a regime of partial delocalization, featuring enhanced spreading behavior and reduced trapping. The results suggest that the topology of discrete space acts as an effective potential for bosonic excitations, such that sparse networks generate long-range quantum trapping regimes even for large systems ($N = 2000$), whereas higher connectivities induce progressive spreading and more efficient transport. Asymptotic analysis reveals that the average return probability tends toward a finite value in irregular topologies, establishing a topological confinement mechanism analogous to effective mass generation. In view of this, quantum dynamics proves to be intensely dependent on discrete geometry, imposing restrictions on coherence and field propagation in non-continuous spacetime models.

Keywords: Scale-Free Networks. Quantum Transport. Coupled Oscillators. Quantum Field Theory.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Mapa das Pontes de Königsberg	16
Figura 2 – Procedimento de reconexão aleatória que interpola entre uma rede regular ($p = 0$), uma rede de mundo pequeno e uma rede completamente aleatória ($p = 1$).	17
Figura 3 – Comparação estrutural de redes complexas com diferentes densidades de arestas: a) estrutura arborescente gerada com $m = 1$; b) rede intermediária com $m = 2$; e c) malha densamente conectada com $N = 100$. A estrutura destaca a formação de <i>hubs</i> conforme a conectividade aumenta. Simulação e renderização 3D desenvolvidas com as bibliotecas NetworkX e PyVista.	18
Figura 4 – Representação esquemática de um campo escalar em 1D discretizado como uma cadeia de N osciladores harmônicos acoplados com condições periódicas de contorno. Cada massa m representa o valor do campo no ponto j	19
Figura 5 – Fluxograma metodológico detalhando a sequência de modelagem. Da geração topológica à discretização e obtenção do Hamiltoniano, culminando na análise dinâmica e espectral via médias de ensemble.	39
Figura 6 – Dinâmica temporal da probabilidade média de retorno para $N = 500$. As curvas espessas representam CTQW e as finas CTRW. Redes com diâmetro grande ($m = 1, D \approx 15$) retêm amplitude por longos tempos, ao passo que redes mais compactas ($m = 4, D \approx 5$) apresentam decaimento rápido e valores próximos ao limite difusivo ($1/N$).	40
Figura 7 – Distribuição de probabilidade de grau $P(k)$ para redes com $N = 500$	43
Figura 8 – Distribuição de probabilidade de grau $P(k)$ para as redes geradas com $N = 900$	44
Figura 9 – Densidade de estados normalizada para redes com $N = 500$ e variação de m	45
Figura 10 – Razão de Participação Inversa (IPR) dos modos normais para redes com $N = 500$. O gráfico compara o grau de localização dos autovetores em função do índice do modo para diferentes conectividades m . A linha tracejada indica o limite teórico de dispersão total ($1/N$).	46
Figura 11 – Razão de Participação Inversa (IPR) dos modos normais para redes com $N = 900$. O gráfico compara o grau de localização dos autovetores em função do índice do modo para diferentes conectividades m . A linha tracejada indica o limite teórico de espalhamento total ($1/N$).	47

Figura 12 – Comparação da probabilidade de retorno local $\pi_{ii}(t)$ entre o nó central (<i>Hub</i> , roxo) e um nó periférico (<i>Leaf</i> , verde) para redes grandes com $N = 900$. (a) Para $m = 1$, observa-se localização forte e global, com ambos permanecendo altos. (b) Para $m = 2$, surge localização seletiva: o <i>Leaf</i> decai enquanto o <i>Hub</i> permanece saturado em ≈ 1 , atuando como armadilha dinâmica. (c) Para $m = 4$, a alta conectividade permite o espalhamento completo, com ambas as curvas decaindo para valores residuais.	48
Figura 13 – Eficiência assintótica do transporte quântico em função da topologia. As barras representam a probabilidade média de retorno de longo prazo ($\bar{\chi}$) e seu limite inferior teórico ($\bar{\chi}^*$). A altura total da barra quantifica a ineficiência. A porção azul escura ($\bar{\chi} - \bar{\chi}^*$) isola a contribuição da localização dos autovetores, demonstrando que este é o fator dominante na supressão do transporte.	51
Figura 14 – Dinâmica de transporte comparativa para $N = 200, 500$ e 2000 . Observa-se uma notável sobreposição das curvas para um mesmo valor de conectividade m	52
Figura 15 – Comparação da eficiência de transporte assintótica ($\bar{\chi}$) e do limite de degenerescência ($\bar{\chi}^*$). A localização dinâmica permanece constante para $m = 1$ mesmo ao quadruplicar a dimensão do sistema (de $N = 500$ para $N = 2000$), enquanto para $m = 4$ observa-se comportamento distinto.	53
Figura 16 – Localização dos modos de energia para $N = 2000$. Para $m = 1$, os modos de alta energia exibem valores de IPR próximos da unidade, indicando confinamento total nos vértices isolados.	54

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
1.1	Campos e a Discretização do Espaço	10
1.2	Redes e Redes Livre de Escala no Modelo de Barabási–Albert	11
1.3	Análise Espectral	13
1.4	Justificativa	13
1.5	Objetivo Geral	15
1.5.1	Objetivos Específicos	15
2	REVISÃO LITERÁRIA	16
2.1	Pontes de Königsberg	16
2.2	Modelo de Mundo Pequeno	17
2.3	Modelo Livre de Escala	18
2.4	A Rede como Base para o Campo Quântico	19
2.5	Teoria dos Grafos	20
2.5.1	O Modelo de Barabási–Albert	20
2.5.2	Distribuição de Graus	21
2.5.3	Lei de Potência	22
2.5.4	Propriedades	22
2.6	Caminhadas Aleatórias Clássicas	22
2.6.1	Solução e Probabilidade de Transição	23
2.6.2	Probabilidade Média de Retorno	24
2.7	Oscilador Harmônico Clássico e Quantização Canônica	24
2.7.1	Rede Discreta de Osciladores	25
2.7.2	Modos Normais	26
2.7.3	Relações canônicas	27
2.8	Expansão do Campo em Modos Normais	28
2.8.1	Propagadores e Correlações	28
2.8.2	Função de Green retardada	29
2.8.3	Função Espectral e LDOS	29
2.9	O Modelo Tight-Binding Fotônico	30
2.9.1	Probabilidades de Transição e Eficiência	30
2.9.2	Integração temporal e degenerescências	31
2.9.3	Relação com IPR	32
2.9.4	Função de Green expressa via matriz dinâmica M	33
2.9.5	Substituição de integrais por somas espectrais	33
2.10	Métricas Estatísticas da Topologia	33
2.10.1	Grau Médio ($\langle k \rangle$)	33

2.10.2	Diâmetro (D)	34
2.10.3	Comprimento Médio do Caminho	34
2.10.4	Densidade de Ligações (δ)	34
2.10.5	Assortatividade (r)	34
2.11	Modos Normais	34
2.11.1	O Caminhante como Excitação Coletiva	35
2.11.2	Armadilhas Topológicas e Eficiência de Transporte	36
2.11.3	A Dinâmica das Interferências	36
2.11.4	Considerações Finais	37
3	METODOLOGIA	38
3.1	Construção das Redes	38
3.2	Implementação Computacional e Protocolo de Análise	38
3.2.1	Fluxograma: Lógica de Modelagem	39
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	40
4.1	Análise da Dinâmica de Retorno	40
4.1.1	Comparação entre a Dinâmica Quântica e Clássica	42
4.2	Métricas Estatísticas	43
4.3	Densidade de Estados	45
4.4	Análise da Localização dos Modos via IPR	45
4.4.1	Análise do Comportamento Dinâmico	47
4.4.1.1	Regime arborizado ($m = 1$).	48
4.4.1.2	Regime intermediário ($m = 2$).	49
4.4.1.3	Regime denso ($m = 4$).	49
4.5	Eficiência do Transporte Quântico	49
4.6	Invariância de Escala e Quebra de Autossimilaridade	51
4.6.1	Dinâmica Temporal da Probabilidade de Retorno	51
4.7	Análise da Eficiência de Transporte para $N = 2000$	52
4.8	Análise de IPR	53
5	CONCLUSÃO	56
	REFERÊNCIAS	58

1 INTRODUÇÃO

1.1 Campos e a Discretização do Espaço

A construção da física elementar descreve o espaço não apenas como um conjunto de partículas pontuais e independentes, mas sim como um sistema composto por campos contínuos. Nesse sentido, tais campos, ao atribuírem uma quantidade física a cada ponto do espaço, constituem objetos dotados de um número infinito de graus de liberdade. Dessa forma, a Teoria Quântica de Campos é o preparo teórico que descreve a dinâmica, a quantização e as interações dessas entidades, sendo considerada o ramo da física moderna mais bem sucedido (PESKIN; SCHROEDER, 1995; ZEE, 2010; RYDER, 1996; WEINBERG, 1996).

Sob esse prisma, as partículas elementares deixam de ser vistas como entidades isoladas, passando a ser interpretadas como excitações quantizadas dos campos. O fóton corresponde ao quantum do campo eletromagnético, ao passo que glúons são quanta do campo de interação forte, e elétrons, múons e quarks representam excitações de campos fermiônicos. Tal interpretação fornece um quadro no qual os processos físicos são compreendidos não mais como simples colisões entre objetos materiais, mas como interações entre campos que vibram, se propagam e se excitam no espaço. (ZEE, 2010; WEINBERG, 1996). Nesse contexto, um dos pilares centrais da teoria reside na decomposição de um campo em seus modos normais de oscilação, onde cada modo se comporta como um oscilador harmônico. Consequentemente, a quantização canônica desses modos os transforma em uma coleção de osciladores harmônicos quânticos, sendo cada qual associado a um conjunto de operadores de criação e aniquilação (PESKIN; SCHROEDER, 1995; SCHWARTZ, 2014).

Em suma, esse procedimento retorna uma conexão intrínseca entre campos contínuos e sistemas de infinitos osciladores acoplados (PEREIRA; MIRANDA, 2002). A formulação tradicional é embasada no espaço contínuo \mathbb{R}^3 , porém as versões discretizadas da teoria também são abrangentes em diversos nichos da física teórica. Entre essas abordagens, destaca-se a *lattice field theory* (QCD), introduzida por Wilson na década de 1970, a qual se consolidou como o utensílio para simulações da cromodinâmica quântica em redes discretas (WILSON, 1974; ROTHE, 2012). Dito isto, ao se discretizar o espaço em uma rede, o campo contínuo é substituído por um conjunto finito de graus de liberdade. Cada ponto da rede passa a comportar-se como um oscilador, cujos acoplamentos são estritamente determinados pelos vínculos topológicos existentes entre tais pontos.

Essa discretização viabiliza diversos tipos de investigação, abrangendo desde modelos de gravidade quântica discreta, como grafos dinâmicos, *spin networks* e *causal sets* (ROVELLI, 2004; SURYA, 2019), até simuladores quânticos baseados em guias de onda e cavidades acopladas (OZAWA *et al.*, 2019), além de incluir sistemas quânticos definidos sobre topologias não regulares inspiradas em redes complexas (MUKAI; HATANO, 2020). Assim, a discretização não precisa limitar-se a uma geometria homogênea. Em vez de uma estrutura regular, o espaço

pode ser representado por um grafo arbitrário, cuja conectividade determina quais graus de liberdade interagem.

Nessa perspectiva, a topologia da rede pode induzir fenômenos como aprisionamento topológico de modos, localização dinâmica, formação de barreiras geodésicas discretas e até a manifestação de regiões curvas. Ao adotarmos esta perspectiva de variedades discretas, ligeiramente levantadas (MÜLKEN; BLUMEN, 2011; DOROGOVTSEV *et al.*, 2008), deparamo-nos com uma questão: de que maneira a propagação de excitações quânticas é afetada quando o espaço deixa de ser contínuo, regular ou homogêneo, passando a ser representado por uma rede complexa com conectividade heterogênea (BARRAT *et al.*, 2008)? A resposta a essa indagação torna-se relevante no tratamento de campos bosônicos, cuja dinâmica é, por natureza, ondulatória. Nesse cenário, quando definidos sobre uma topologia irregular, seus modos de vibração tornam-se suscetíveis a efeitos de interferência e acoplamento não triviais, fenômenos estes que seriam impossíveis em geometrias regulares.

Para compreender tais fenômenos de maneira elucidativa, recorre-se ao modelo de osciladores harmônicos acoplados. Nesse modelo, cada nó da rede passa a representar um oscilador, enquanto cada aresta corresponde a um termo de acoplamento no Hamiltoniano. A subsequente diagonalização desse Hamiltoniano fornece os modos normais do sistema, em estrita analogia com as formulações canônicas da teoria de campos (SCHWARTZ, 2014). Dessa maneira, o espaço contínuo é reinterpretado como uma estrutura discreta, cuja geometria determina o comportamento dinâmico dos modos, regida por uma rede livre de escala.

1.2 Redes e Redes Livre de Escala no Modelo de Barabási–Albert

A teoria das redes complexas tem sido aplicada com grande sucesso em diversas áreas, como matemática, física, química, biologia, sociologia e ciências da computação. Estudos de redes reais (DOROGOVTSEV; MENDES, 2003); (NEWMAN, 2010); (ESTRADA, 2016) geraram modelos importantes, como a internet (ALBERT *et al.*, 1999; HUBERMAN; ADAMIC, 1999), redes de citações científicas (NEWMAN, 2001), redes neurais (NEWMAN, 2010), redes de reações metabólicas (JEONG *et al.*, 2000), redes ecológicas (BELLENGERI; BODINI, 2016) e redes de transporte (BONA *et al.*, 2016). Esses modelos descrevem grafos com estrutura topológica não trivial, compostos por nós interligados por ligações, onde os nós representam entidades e as ligações existem quando as unidades interagem ou compartilham propriedades.

Existem três principais modelos de redes complexas: redes aleatórias (ERDŐS; RÉNYI, 1959), redes de mundo pequeno (WATTS; STROGATZ, 1998) e redes livres de escala (BARABÁSI; ALBERT, 1999; MACIEL *et al.*, 2020). Nos últimos anos, novos modelos teóricos de redes complexas surgiram, como as redes multiplex (COZZO *et al.*, 2018) ou redes multicamadas (KIVELA *et al.*, 2014); (GALICEANU; STRUNZ, 2016). A teoria constitui uma modelagem de sistemas compostos por conjuntos de elementos interconectados. Em contraposição às redes regulares, nas quais a conectividade dos vértices é uniforme, ou às redes aleatórias clássicas de

Erdős-Rényi (ERDŐS; RÉNYI, 1960), onde as ligações se distribuem de maneira independente e homogênea, a maioria dos sistemas reais exhibe padrões de conectividade heterogêneos.

Dentro desse universo, uma classe é relevante para o estudo de fenômenos de transporte e dinâmica é a das redes livre de escala. Essa rede demonstra que, embora a vasta maioria dos vértices possua um número reduzido de vínculos, existe uma pequena fração de nós que apresenta uma conectividade alta. Esses vértices, denominados *hubs*, influenciam na dinâmica do sistema, determinando processos de difusão, percolação, sincronização e, o transporte quântico de excitações.

Para modelar essas topologias, utilizamos o modelo de Barabási–Albert (BARABÁSI; ALBERT, 1999), construído sobre o mecanismo de anexação preferencial. Neste quadro, a rede é construída de tal forma que a cada etapa um novo nó é adicionado, conectando-se a m vértices já existentes com probabilidade proporcional ao grau desses vértices. Tal processo reproduz uma dinâmica de crescimento não uniforme, semelhante a mecanismos naturais em sistemas físicos, em que vértices mais conectados tendem a atrair ainda mais conexões.

Neste modelo, pela análise da propagação de excitações em redes complexas, podemos distinguir entre comportamentos dinâmicos de natureza seja clássica, seja quântica. No regime clássico, tais processos são intrinsecamente estocásticos e sua evolução é descrita por cadeias de Markov (STEWART, 2009), estes processos difusivos, descritos pelas *Continuous-Time Random Walks* (CTRW), fornecem um quadro estocástico no qual a ocupação tende, com o tempo, a um estado estacionário uniforme, indicando a equipartição esperada em grafos conexos de grande dimensão (WEISS, 1994; MÜLKEN; BLUMEN, 2011; NEWMAN, 2010). Já no regime quântico, as caminhadas assumem um caráter ondulatório, pois a propagação ocorre por amplitudes de probabilidade sujeitas a interferência.

O formalismo das *Continuous-Time Quantum Walks* (CTQW) introduz uma dinâmica extremamente distinta. Como demonstrado por Farhi e Gutmann (FARHI; GUTMANN, 1998), a evolução unitária preserva a coerência e permite interferência entre amplitudes, tornando a propagação sensível a detalhes da estrutura espectral do grafo. Assim, enquanto a CTRW tende a suavizar irregularidades topológicas por meio da difusão, a CTQW amplifica tais heterogeneidades, revelando efeitos como localização espectral e aprisionamento dinâmico, cuja intensidade depende diretamente da geometria livre de escala das redes de Barabási–Albert.

A literatura indica que topologias altamente heterogêneas favorecem os modos localizados, particularmente aqueles associados aos nós de alta conectividade (AGLIARI, 2008; GALICEANU, 2016). A interferência destrutiva, somada à concentração espectral em autovalores extremos, gera um aprisionamento dinâmico da função de onda em sub-regiões da rede, reduzindo a eficiência da propagação quântica quando comparada à difusão clássica.

A análise da dinâmica de excitações em redes complexas exige um conjunto estudos que conectem, de forma coerente, a estrutura topológica do grafo. Para tanto, a investigação é conduzida através de quatro classes principais de análises: o transporte clássico e quântico via caminhadas no grafo, a probabilidade média de retorno, as análises espectrais baseadas na

densidade de estados (DOS) e as medidas de localização obtidas a partir do *Inverse Participation Ratio* (IPR).

1.3 Análise Espectral

A densidade de estados (DOS) é um instrumento que aplica-se na física da matéria condensada e em sistemas quânticos. Em termos gerais, ela descreve como os modos espectrais se distribuem ao longo do espectro. Dessa forma, a densidade indica quantos modos estão disponíveis em uma determinada faixa de energia.

No nosso contexto de redes, essa interpretação permanece, visto que a DOS revela de que maneira a topologia influencia a distribuição dos modos normais associados ao Laplaciano ou à matriz de adjacência. Regiões densas do espectro correspondem a conjuntos de autovalores próximos entre si, favorecendo padrões de interferência mais complexos. Por outro lado, lacunas espectrais (*gaps*) podem impedir a propagação em certos intervalos de energia, enquanto picos acentuados costumam indicar a presença de modos confinados em subestruturas específicas da rede (DOROGOVTSEV *et al.*, 2008).

Para avaliar de maneira quantitativa o grau de localização espacial desses modos, recorre-se ao *Inverse Participation Ratio* (MÜLKEN; BLUMEN, 2011). Valores elevados de IPR caracterizam estados confinados a poucos nós, enquanto valores baixos correspondem a estados de dispersão, que se espalham por porções amplas da rede. Nas redes livres de escala, observa-se que os autovetores associados aos autovalores extremos tendem a concentrar sua amplitude nos *hubs* (GOH *et al.*, 2001).

Ao reunir de forma sistemática as análises dinâmicas, espectrais e de localização, torna-se possível analisar o transporte na rede de maneira integrada, ao passo que se permite compreender como propriedades topológicas de larga escala, combinadas a heterogeneidades, moldam a propagação de excitações bosônicas. Por fim, evidencia-se que a topologia da rede pode atuar como um potencial, induzindo regimes de aprisionamento cuja origem é intrinsecamente espectral.

1.4 Justificativa

A rede de Barabási-Albert reproduz a estrutura de topologia real devido a heterogeneidade estrutural e a presença de *hubs*, rompendo a simetria translacional presente nos modelos contínuos tradicionais. Modelar um campo escalar sobre esse tipo de rede permite investigar de forma direta como a arquitetura topológica determina a localização dos modos, a propagação da informação quântica e a eficiência global do transporte. A ausência de potenciais externos torna evidente o fenômeno de aprisionamento topológico.

Além disso, esse cenário permite uma análise elementar dos mecanismos de propagação, isto é, identificar regiões de confinamento, caminhos preferenciais, armadilhas criadas pela topologia e a razão física por trás desses comportamentos. O estudo de campos quânticos definidos sobre redes complexas levanta uma série de questões. Em primeiro lugar, campos são

entidades distribuídas no espaço e, quando o espaço deixa de ser contínuo e passa a ser modelado por uma rede, surge a pergunta: Como as distribuições de vibração do campo dão origem às excitações quânticas? Através dos modos.

No modelo de osciladores harmônicos acoplados, cada excitação corresponde a um modo vibracional da rede. Modos de baixa energia comportam-se como partículas leves e estendidas, ao passo que modos de alta energia tendem a se localizar fortemente nos *hubs*, atuando como regiões de confinamento (poço potencial). Assim, os modos normais carregam toda a informação dinâmica e estrutural do campo, é por isso que eles são o nosso interesse. E isto nos leva aos seguintes questionamentos:

1. Como esses modos se distribuem ao longo da rede?
2. Quais padrões de vibração surgem em uma topologia heterogênea?
3. Como a informação quântica se propaga nesse campo discreto?
4. Quais efeitos o caminhante quântico sofre ao interagir com modos localizados, regiões de confinamento ou vales espectrais?
5. De que maneira essas estruturas determinam o regime de transporte, é difusivo, coerente, aprisionado ou misto?

Por fim, uma vez compreendida toda a dinâmica vibracional e propagativa, resta avaliar a eficiência de transporte obtida. Até que ponto a estrutura da rede favorece ou restringe a disseminação de informação quântica? Se a estrutura se limita em uma geometria complexa e não homogênea, analisamos a evolução da função de estado sob a topologia escolhida e dos modos vibracionais que ela induz.

Assim, a ideia é mapear a forma como o transporte quântico ocorre, porém em um prisma elementar. Em física teórica, essas redes funcionam como discretizações irregulares do espaço-tempo, possibilitando investigar modos localizados, geração de massas efetivas e efeitos estritamente topológicos em teorias quânticas de campos.

No contexto da computação quântica, muitos dispositivos experimentais apresentam conectividade não uniforme entre qubits, assim, a análise da caminhada quântica em grafos complexos ajuda a identificar gargalos, limites de coerência e condições que favorecem ou prejudicam o fluxo de informação. Em sistemas biológicos, como complexos fotossintéticos e redes moleculares, a transferência de energia ocorre em arquiteturas naturalmente heterogêneas, onde fenômenos de aprisionamento, eficiência e caminhos preferenciais podem ser entendidos a partir de métricas espectrais e da dinâmica quântica.

1.5 Objetivo Geral

Investigar a dinâmica de transporte de um campo escalar na rede Barabási- Albert, analisando como a topologia induz localização e afeta a propagação sob uma perspectiva intrinsecamente fundamental.

1.5.1 Objetivos Específicos

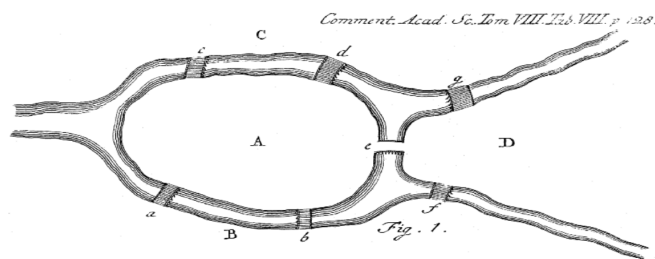
1. Construir o modelo discreto do campo escalar a partir da discretização topológica, utilizando redes Barabási–Albert como aproximação de geometrias heterogêneas.
2. Estabelecer o mapeamento entre o modelo em rede e o formalismo da Teoria Quântica de Campos, interpretando o sistema como um conjunto de osciladores harmônicos acoplados.
3. Analisar estatisticamente as redes geradas por meio de métricas topológicas (grau médio, distribuição de grau, diâmetro, assortatividade), identificando estruturas relevantes para o transporte.
4. Diagonalizar o Hamiltoniano e analisar o comportamento elementar dos modos normais, investigando a relação entre autovalores, curvatura discreta e localização dos autovetores.
5. Comparar a dinâmica clássica (CTRW) e quântica (CTQW) sobre a mesma topologia, explorando diferenças entre difusão, coerência e interferência.
6. Calcular e interpretar métricas espectrais (DOS e IPR) para identificar regiões de aprisionamento, espalhamento e formação de modos localizados em *hubs*.
7. Avaliar a eficiência assintótica de transporte via probabilidade média de retorno e comparar com limites teóricos estabelecidos pela degenerescência do espectro.
8. Relacionar os resultados obtidos com interpretações físicas presentes na literatura, destacando conexões com modelos discretizados de Teoria Quântica de Campos.

2 REVISÃO LITERÁRIA

2.1 Pontes de Königsberg

O problema das Pontes de Königsberg foi resolvido em 1736 por Leonhard Euler (1707-1783). A cidade prussiana de Königsberg era dividida pelo rio Pregel em quatro regiões, interligadas por sete pontes. A questão que intrigava os moradores era se seria possível caminhar pela cidade atravessando cada ponte exatamente uma única vez. Em 1736, Euler respondeu de maneira definitiva a esse problema em seu trabalho *Solutio Problematis ad Geometriam Situs Pertinentis* (EULER, 1736), considerado o primeiro tratado formal da chamada Geometria da Posição. Euler representou as ilhas como vértices e as pontes como arestas, demonstrando ser impossível atravessar todas sem repetir caminhos, e com isso fundou o primeiro problema de grafo e, portanto, a base por trás do estudo das redes, a Teoria dos Grafos.

Figura 1 – Mapa das Pontes de Königsberg



Fonte: Adaptado de (EULER, 1736).

O desenvolvimento da Teoria dos Grafos, tal como conhecida atualmente é vinculada ao trabalho de Leonhard Euler no século XVIII. Seu estudo sobre o famoso Problema das Sete Pontes de Königsberg supracitado inaugurou uma nova visão na matemática, a análise estrutural de relações e conexões independentes das quantidades geométricas como ângulos, distâncias ou coordenadas.

Após o trabalho de Euler, a teoria dos grafos permaneceu sólida até o século XIX, quando ressurgiu com vigor através dos trabalhos do matemático britânico Arthur Cayley (1821-1895). A partir de 1857, Cayley publicou investigações sobre estruturas que hoje reconhecemos como árvores (CAYLEY, 1857) e, posteriormente, em 1889, consolidou resultados de enumeração incluindo a famosa fórmula n^{n-2} para o número de árvores etiquetadas em n vértices (CAYLEY, 1889). Nesse trabalho, ele analisou diagramas que representavam a ordem de aplicação de operadores diferenciais, onde raízes e ramificações formavam códigos de uma estrutura hierárquica. A estrutura de grafos tornou-se eventualmente uma base rigorosa para processos estocásticos.

Joseph-Louis Lagrange (1736–1813), mais conhecido por suas contribuições à mecânica e à análise matemática, forneceu uma base para a representação de redes. Em seus estudos sobre equações diferenciais e funções multivariadas, Lagrange desenvolveu métodos de resolução de

sistemas lineares e análise combinatória de permutações e arranjos, na qual estrutura a contagem de caminhos nos grafos (LAGRANGE, 1772; LAGRANGE, 1788).

Mais adiante, Andrei Kolmogorov, em 1931, formalizou a analiticidade da teoria das probabilidades que deu suporte à análise de processos markovianos contínuos e suas equações de evolução (KOLMOGOROV, 1931). Esses avanços estabeleceram a descrição da evolução probabilística de sistemas dinâmicos discretos e contínuos, que fundamentou a introdução da aleatoriedade na própria estrutura da rede.

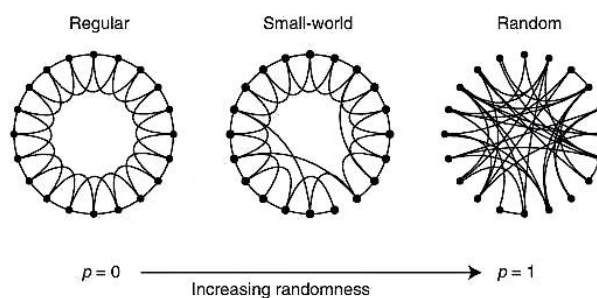
Durante a maior parte do século XX, a ciência das redes foi dominada pelo paradigma do modelo aleatório de Erdős-Rényi (ERDŐS; RÉNYI, 1960). Nessa abordagem, as conexões entre nós são atribuídas ao acaso, uma suposição que parecia razoável para descrever sistemas onde a complexidade era limitada. Contudo, à medida que a capacidade computacional aumentou e grandes estruturas começaram a ser mapeadas, tornou-se evidente que o modelo aleatório falhava em capturar a topologia real desses sistemas. No final dos anos 1980 e início da década de 1990, pesquisadores obtiveram as bases de dados brutos sobre redes de colaboração científica e, posteriormente, à *World Wide Web*.

Ainda em 1955, o economista e psicólogo Herbert Simon propôs um modelo para explicar distribuições altamente assimétricas observadas em economia, linguística e urbanismo. Simon introduziu um mecanismo dinâmico onde elementos com maior frequência acumulavam novos incrementos de maneira proporcional ao que já possuíam, mostrando que esse processo gera naturalmente uma distribuição do tipo lei de potência (SIMON, 1955).

2.2 Modelo de Mundo Pequeno

Ainda que modelos teóricos de crescimento preferencial, como o de Price, já existissem na literatura, foi apenas na década de 1990 que a ciência das redes sofreu uma revolução impulsionada por dados.

Figura 2 – Procedimento de reconexão aleatória que interpola entre uma rede regular ($p = 0$), uma rede de mundo pequeno e uma rede completamente aleatória ($p = 1$).



Fonte: Reprodução original de (WATTS; STROGATZ, 1998).

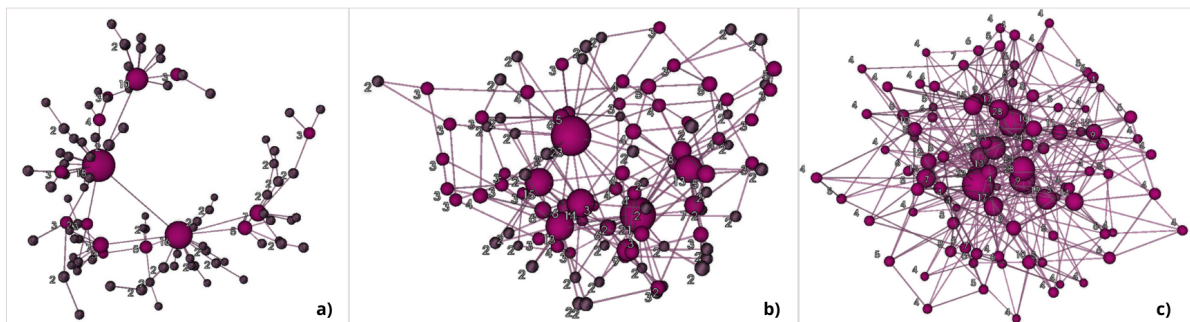
Com a popularização da *World Wide Web* e o aumento da capacidade computacional, cientistas passaram a ter acesso, pela primeira vez, a mapas detalhados de grandes sistemas reais,

desde redes sociais até redes neuronais. A análise desses dados revelou propriedades topológicas complexas, tais como alto coeficiente de agrupamento e curtos comprimentos médios de caminho, que não eram previstas pelo modelo aleatório de Erdős-Rényi. Foi nesse cenário conflituoso que Duncan Watts e Steven Strogatz propuseram, em 1998, o modelo de *pequeno mundo* (WATTS; STROGATZ, 1998). O trabalho demonstrou que as redes naturais não residem nos extremos de ordem total ou desordem total, mas sim em um regime intermediário que combina alto coeficiente de agrupamento com pequenos caminhos médios.

2.3 Modelo Livre de Escala

Apesar de seu sucesso em explicar o efeito de pequeno mundo, o modelo de Watts-Strogatz apresentava uma limitação, visto que gerava uma distribuição de graus homogênea, incapaz de reproduzir a presença de *hubs* que começavam a ser observados nos mapas da Internet e em sistemas biológicos. Essa lacuna foi descoberta e sintetizada por Barabási e Albert.

Figura 3 – Comparação estrutural de redes complexas com diferentes densidades de arestas: a) estrutura arborescente gerada com $m = 1$; b) rede intermediária com $m = 2$; e c) malha densamente conectada com $N = 100$. A estrutura destaca a formação de *hubs* conforme a conectividade aumenta. Simulação e renderização 3D desenvolvidas com as bibliotecas NetworkX e PyVista.



Fonte: Elaboração própria (2025).

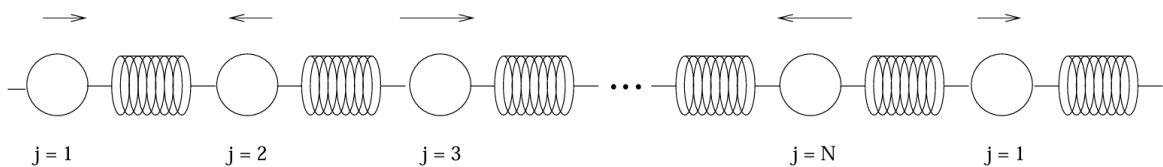
O modelo BA surge, portanto, da convergência de três vias cronológicas, a evidência de leis de potência em grandes redes, antecipada por Simon e Price e, a nova perspectiva topológica inaugurada por Watts e Strogatz. Barabási e Albert compreenderam que a topologia heterogênea das redes reais não era um acidente estático, mas o resultado de uma dinâmica de crescimento em que novos nós tendem a se conectar aos já bem conectados. Conforme a **Figura 3**, vemos como a conectividade (m) altera a topologia da rede de forma drástica, mesmo mantendo o número de vértices (N). Ao estudar esses elementos, o modelo BA ofereceu a primeira descrição física para a complexidade em redes livres de escala (BARABÁSI; ALBERT, 1999).

2.4 A Rede como Base para o Campo Quântico

A escolha do modelo Barabási–Albert como suporte para a dinâmica quântica motivada-se por considerações estruturais da TQC. Na formulação padrão, os campos são definidos sobre variedades contínuas regido pelo espaço euclidiano \mathbb{R}^d ou o espaço-tempo de Minkowski, assumidos como homogêneos, isotrópicos e dotados de uma métrica suave (PESKIN; SCHROEDER, 1995; ZEE, 2010). Essa hipótese, ainda que adequada para a descrição de campos, limita a investigação de fenômenos nos quais a geometria é irregular, como ocorre em sistemas desordenados e meios fractais.

Uma ponte conceitual entre a TQC contínua e modelos discretizados surge a partir da quantização canônica do campo. Nesse sentido, o campo escalar $\phi(\mathbf{x})$ é decomposto em modos locais que se comportam como osciladores harmônicos acoplados, onde cada grau de liberdade representa a amplitude do campo em uma posição discreta do espaço (MANDL; SHAW, 2010; ZEE, 2010). Essas formulações foram inspiradas em discretizações de redes e campos (WILSON, 1974; MONTVAY; MÜNSTER, 1994; ROTHE, 2012) em que esses osciladores são posicionados nos vértices de uma malha regular, e suas interações são definidas pelas arestas que conectam apenas vizinhos próximos.

Figura 4 – Representação esquemática de um campo escalar em 1D discretizado como uma cadeia de N osciladores harmônicos acoplados com condições periódicas de contorno. Cada massa m representa o valor do campo no ponto j .



Fonte: Reprodução original (PEREIRA; MIRANDA, 2002).

Entretanto, ao substituir rede uniforme por uma rede complexa, a própria topologia passa a definir o meio das excitações quânticas. Em uma rede do tipo Barabási–Albert, cada vértice é interpretado como um ponto discreto do espaço associado a um oscilador harmônico, enquanto as arestas determinam os termos de acoplamento cinético no Hamiltoniano. No sentido de campo, o que temos é um infinito número de osciladores harmônicos quânticos, onde cada modo normal é um oscilador independente, vide **Figura 4**.

Nesse cenário, o operador de Laplace discreto, que em malhas regulares coincide com o operador de diferenças finitas, é generalizado para o Laplaciano de grafo, cuja estrutura remete a heterogeneidade da conectividade. Esse operador controla tanto o padrão de propagação quanto a distribuição espectral das excitações no espaço discretizado (RAMMAL, 1983; BURIONI; CASSI, 1999).

A rede Barabási–Albert distingue-se por sua distribuição de graus em lei de potência, $P(k) \sim k^{-3}$ (BARABÁSI; ALBERT, 1999). Essa estrutura heterogênea, dominada por *hubs*,

introduz uma paisagem de acoplamentos não uniforme que atua como um potencial anisotrópico. Os *hubs*, devido à sua elevada conectividade, funcionam como regiões de forte acoplamento capazes de aprisionar ou canalizar a função de onda do campo, modificando a dinâmica de propagação em comparação com o comportamento observado em meios homogêneos.

Dessa forma, a propagação quântica em uma rede BA pode ser interpretada como a dinâmica de uma partícula em um espaço-tempo discreto, curvo e desordenado. A dimensão espectral do grafo, definida a partir do comportamento assintótico do retorno de caminhadas quânticas ou aleatórias, nos mostra o comportamento da geometria do sistema (BURIONI; CASSI, 2000). Essa dimensão difere do valor euclidiano e envolve propriedades como difusão, transporte e localização.

Por conseguinte, a análise do transporte do campo, seja pela densidade de estados, seja pelo índice de participação inversa (IPR) ou por medidas de propagação, aparece na literatura como uma forma de unificar a noção de como estruturas livres de escala influenciam a relação entre topologia, dinâmica e comportamento quântico. Estudos mostram que a heterogeneidade e a hierarquia inerentes às redes BA induzem padrões de localização e espalhamento, funcionando como um análogo discreto das modificações que campos sofrem em geometrias irregulares. Assim, analisar esses efeitos permite situar o transporte quântico em um panorama mais amplo, onde propriedades estruturais do grafo nos mostram informações para além dos elementos dinâmicos do próprio campo.

2.5 Teoria dos Grafos

2.5.1 O Modelo de Barabási–Albert

O modelo de Barabási–Albert descreve uma família de grafos aleatórios dinâmicos que evoluem através dos mecanismos de crescimento e ligação preferencial. Vamos ver a construção clássica do grafo de BA conforme (BOLLOBÁS *et al.*, 2001).

Seja G_t o grafo no instante t . No tempo $t = 0$, inicia-se com um grafo semente conexo com um número pequeno de vértices. A cada passo temporal $t \geq 1$, um novo vértice j é adicionado ao grafo com m arestas. As m arestas do novo vértice conectam-se a vértices i já existentes com probabilidade proporcional ao grau $k_i(t)$ destes. A probabilidade $\Pi(i)$ de que uma nova aresta se conecte ao vértice i é dada por:

$$\Pi(i) = \frac{k_i(t)}{\sum_j k_j(t)}. \quad (2.1)$$

Como cada novo vértice insere m arestas, para tempos longos onde o número total de vértices é t , temos a aproximação:

$$\sum_j k_j(t) \approx 2mt.$$

Logo, a probabilidade simplificada é:

$$\Pi(i) \approx \frac{k_i(t)}{2mt}. \quad (2.2)$$

2.5.2 Distribuição de Graus

Seja $N_k(t)$ o número esperado de vértices com grau k no tempo t . A evolução de $N_k(t)$ para $N_k(t+1)$ depende do fluxo de entrada e saída de vértices nessa classe de grau. Existem dois processos ocorrendo no passo $t \rightarrow t+1$, um novo vértice entra na rede com grau inicial m . Isso incrementa N_m em 1 e vértices com grau $k-1$ podem ganhar uma aresta e passar para o grau k e por fim, vértices com grau k podem ganhar uma aresta e passar para o grau $k+1$.

A probabilidade de um vértice específico de grau k receber uma nova aresta é $\frac{k}{2mt}$. Como há m novas arestas sendo distribuídas simultaneamente, a probabilidade total de algum vértice de grau k receber uma aresta é:

$$m \times \frac{k}{2mt} \times N_k(t) = \frac{kN_k(t)}{2t}.$$

Podemos então escrever a equação de balanço média,

$$N_k(t+1) - N_k(t) = \underbrace{\frac{(k-1)N_{k-1}(t)}{2t}}_{\text{fluxo vindo de } k-1} - \underbrace{\frac{kN_k(t)}{2t}}_{\text{fluxo saindo para } k+1} + \delta_{k,m}. \quad (2.3)$$

Assumimos que, para t grande, a distribuição de graus atinge um estado estacionário onde o número de nós com grau k cresce linearmente com o tempo total t . Ou seja,

$$N_k(t) \approx p_k \cdot t.$$

Substituindo $N_k(t+1) \approx p_k(t+1)$ e $N_k(t) \approx p_k t$ no lado esquerdo da Equação (2.3):

$$N_k(t+1) - N_k(t) \approx p_k(t+1) - p_k t = p_k,$$

daí,

$$p_k = \frac{(k-1)p_{k-1}}{2} - \frac{kp_k}{2} + \delta_{k,m}. \quad (2.4)$$

Isolando p_k ,

$$2p_k = (k-1)p_{k-1} - kp_k + 2\delta_{k,m}.$$

Agrupando os termos com p_k , temos

$$(k+2)p_k = (k-1)p_{k-1} + 2\delta_{k,m}. \quad (2.5)$$

Para $k=m$, como não existem nós com grau menor que m , temos $p_{m-1} = 0$. A Equação (2.5) torna-se:

$$(m+2)p_m = 2 \implies p_m = \frac{2}{m+2}.$$

Para $k > m$, temos $\delta_{k,m} = 0$. A equação torna-se:

$$p_k = \frac{k-1}{k+2} p_{k-1}.$$

A solução geral pode ser obtida expandindo a recorrência como um produto,

$$p_k = p_m \prod_{j=m+1}^k \frac{j-1}{j+2}.$$

Substituindo o valor encontrado para p_m ,

$$p_k = \frac{2}{m+2} \cdot \left(\frac{m}{m+3} \cdot \frac{m+1}{m+4} \cdot \frac{m+2}{m+5} \cdots \frac{k-1}{k+2} \right).$$

Obtemos, portanto

$$p_k = \frac{2m(m+1)}{k(k+1)(k+2)} \quad \text{para } k \geq m. \quad (2.6)$$

2.5.3 Lei de Potência

Para $k \gg m$, o denominador $k(k+1)(k+2)$ é dominado por k^3 , assim,

$$p_k \approx \frac{2m(m+1)}{k^3} \sim k^{-3}. \quad (2.7)$$

Portanto, mostramos que o modelo BA gera uma rede livre de escala com expoente de grau:

$$\gamma = 3.$$

2.5.4 Propriedades

Devido à lei de potência $P(k) \sim k^{-3}$, o grafo exibe forte heterogeneidade. Vértices mais antigos tendem a ter graus muito maiores. É não-direcionado, no qual cada nova aresta conecta dois vértices sem orientação. O grau esperado de um vértice inserido no tempo t_i cresce com a raiz quadrada do tempo atual t ,

$$\mathbb{E}[k_i(t)] \approx m \left(\frac{t}{t_i} \right)^{1/2}.$$

Isso leva à formação dos *hubs*.

2.6 Caminhadas Aleatórias Clássicas

Seja $p_j(t)$ a probabilidade de encontrar o caminhante no nó j no instante t . A conservação de probabilidade exige que a taxa de variação de $p_j(t)$ seja dada pelo fluxo de probabilidade que entra no nó j vindo dos vizinhos, menos o fluxo que sai de j para os vizinhos:

$$\frac{d}{dt} p_j(t) = \sum_k (T_{jk} p_k(t) - T_{kj} p_j(t)), \quad (2.8)$$

onde T_{jk} representa a taxa de transição do nó k para o nó j .

Para uma rede não direcionada – conforme as propriedades naturais do grafo já ditas 2.5.4 – com taxa de difusão uniforme γ , a taxa de transição é dada pela matriz de adjacência. Adotamos

esta matriz, pois cada aresta é tratada como um meio para salto com taxa uniforme γ , o que conduz ao gerador $-\gamma L$ da difusão contínua.

$$T_{jk} = \gamma A_{jk}, \quad (2.9)$$

o termo de saída depende do grau do nó j ,

$$\frac{d}{dt}p_j(t) = \gamma \sum_k A_{jk}p_k(t) - \gamma k_j p_j(t). \quad (2.10)$$

Podemos reescrever a equação acima na forma matricial. Definindo o vetor de estado $\mathbf{P}(t) = (p_1(t), \dots, p_N(t))^T$,

$$\frac{d}{dt}\mathbf{P}(t) = -\gamma(D - A)\mathbf{P}(t), \quad (2.11)$$

onde D é a matriz diagonal de graus e A é a matriz de adjacência. Reconhecemos o operador Laplaciano da rede,

$$\mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{A}. \quad (2.12)$$

Portanto, a equação de difusão clássica é:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{P}(t) = -\gamma\mathbf{L}\mathbf{P}(t). \quad (2.13)$$

2.6.1 Solução e Probabilidade de Transição

A solução formal da Eq. (2.13) para um estado inicial $\mathbf{P}(0)$ é

$$\mathbf{P}(t) = e^{-\gamma\mathbf{L}t}\mathbf{P}(0). \quad (2.14)$$

A probabilidade de transição clássica $p_{i \rightarrow j}(t)$, i.e., a probabilidade de encontrar a partícula em j dado que ela começou em i , é o elemento de matriz do operador de evolução:

$$p_{i \rightarrow j}(t) = \langle j | e^{-\gamma\mathbf{L}t} | i \rangle. \quad (2.15)$$

Como \mathbf{L} é real e simétrico, ele possui autovalores reais $0 = \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_N$ e autovetores ortonormais $|v_n\rangle$. Inserindo a relação de completude, temos

$$\sum_n |v_n\rangle\langle v_n| = \mathbf{I}. \quad (2.16)$$

Portanto, obtemos,

$$\begin{aligned} p_{i \rightarrow j}(t) &= \langle j | e^{-\gamma\mathbf{L}t} \left(\sum_{n=1}^N |v_n\rangle\langle v_n| \right) | i \rangle \\ &= \sum_{n=1}^N e^{-\gamma\lambda_n t} \langle j | v_n \rangle \langle v_n | i \rangle. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Denotando a k -ésima componente do n -ésimo autovetor como v_{nk} , temos,

$$p_{i \rightarrow j}(t) = \sum_{n=1}^N v_{nj} v_{ni} e^{-\gamma\lambda_n t}. \quad (2.18)$$

2.6.2 Probabilidade Média de Retorno

A probabilidade média de retorno $\bar{p}(t)$ quantifica a tendência de um caminhante retornar ao nó de origem, considerando a média sobre todos os nós da rede,

$$\bar{p}(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N p_{i \rightarrow i}(t). \quad (2.19)$$

Substituindo a expressão da probabilidade de transição com $j = i$:

$$\bar{p}(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\sum_{n=1}^N v_{ni}^2 e^{-\gamma \lambda_n t} \right). \quad (2.20)$$

Trocando a ordem dos somatórios e utilizando a condição de normalização dos autovetores,

$$\bar{p}(t) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{-\gamma \lambda_n t} \underbrace{\left(\sum_{i=1}^N v_{ni}^2 \right)}_{=1}. \quad (2.21)$$

Chegamos à expressão final compacta que depende apenas do espectro de autovalores,

$$\bar{p}(t) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{-\gamma \lambda_n t}. \quad (2.22)$$

Esta equação demonstra que o transporte clássico é uma superposição de decaimentos exponenciais. Para tempos longos ($t \rightarrow \infty$), todos os termos com $\lambda_n > 0$ decaem a zero. O único termo que sobrevive é o associado ao autovalor nulo $\lambda_1 = 0$, resultando em:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \bar{p}(t) = \frac{1}{N} e^{-0} = \frac{1}{N}. \quad (2.23)$$

No limite clássico, o caminhante tem probabilidade igual de estar em qualquer nó da rede, independente da sua condição inicial.

2.7 Oscilador Harmônico Clássico e Quantização Canônica

A análise inicia-se pelo oscilador harmônico de um único modo, visto que ele constitui o bloco fundamental para a quantização tanto em sistemas de muitos corpos quanto em campos discretizados. A Lagrangiana clássica para uma partícula de massa m e constante elástica κ é dada por:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - \frac{1}{2} \kappa q^2, \quad \text{com } \omega^2 = \frac{\kappa}{m}. \quad (2.24)$$

O momento canônico conjugado é definido como:

$$p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} = m \dot{q}. \quad (2.25)$$

Consequentemente, o Hamiltoniano clássico assume a forma:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2. \quad (2.26)$$

Na quantização canônica, as variáveis tornam-se operadores que obedecem à relação de comutação:

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (2.27)$$

Introduzimos os operadores de criação (a^\dagger) e aniquilação (a) por:

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger + a), \quad (2.28)$$

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a^\dagger - a), \quad (2.29)$$

e assumimos o comutador canônico,

$$[a, a^\dagger] = 1. \quad (2.30)$$

Forma do Hamiltoniano em termos de a, a^\dagger . Substituindo \hat{q} e \hat{p} em H :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2 = \frac{\hbar\omega}{4}\left((a^\dagger - a)^2 + (a^\dagger + a)^2\right). \quad (2.31)$$

Expandindo os termos quadráticos, notamos que as contribuições de a^2 e $(a^\dagger)^2$ se cancelam, restando os termos cruzados. Utilizando a relação de comutação fundamental $[a, a^\dagger] = 1$, reescrevemos o termo $aa^\dagger = a^\dagger a + 1$. Agrupando os resultados, obtemos a forma diagonalizada:

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right). \quad (2.32)$$

2.7.1 Rede Discreta de Osciladores

Generalizamos o sistema para uma rede discreta de N osciladores acoplados. Cada nó i da rede abriga um oscilador, descrito pelos operadores de campo $\hat{\phi}_i$ e momento $\hat{\pi}_i$, que satisfazem as relações de comutação canônicas:

$$[\hat{\phi}_i, \hat{\pi}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{\phi}_i, \hat{\phi}_j] = [\hat{\pi}_i, \hat{\pi}_j] = 0. \quad (2.33)$$

O Hamiltoniano quadrático geral para o campo real discreto é dado por:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\pi}_i^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \hat{\phi}_i M_{ij} \hat{\phi}_j, \quad (2.34)$$

onde M é uma matriz real, simétrica e positiva definida. A escolha desta matriz define a física do campo livre, onde o termo diagonal (m^2I) associa-se à frequência natural de cada sítio, enquanto o termo contendo o Laplaciano L representa a energia cinética discretizada, análoga ao operador ∇^2 no espaço contínuo. É este termo que permite a propagação da excitação entre sítios vizinhos. As escolhas usuais para M são:

$$M = m^2I + JL, \quad (2.35)$$

$$\text{ou } M = m^2I - JA. \quad (2.36)$$

A dinâmica temporal dos operadores é obtida através da Equação de Movimento de Heisenberg, $\frac{d\hat{O}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{O}]$. Calculando os comutadores do Hamiltoniano (Eq. 2.34) com os operadores de campo e momento canônico, obtemos o sistema acoplado de equações diferenciais lineares:

$$\ddot{\hat{\phi}}_i(t) + \sum_j M_{ij} \hat{\phi}_j(t) = 0. \quad (2.37)$$

2.7.2 Modos Normais

Como as variáveis locais $\hat{\phi}_i$ estão acopladas pela matriz M , a diagonalização espectral é necessária para desacoplar o sistema.¹

Definimos os autovalores ω_a^2 e autovetores $v^{(a)}$ de M :

$$Mv^{(a)} = \omega_a^2 v^{(a)}, \quad a = 1, \dots, N, \quad (2.38)$$

com a condição de ortonormalidade:

$$\sum_{i=1}^N v_i^{(a)} v_i^{(b)} = \delta_{ab}. \quad (2.39)$$

A transformação para as coordenadas dos modos normais (Q_a) e seus momentos (Π_a) é dada por:

$$Q_a(t) = \sum_{i=1}^N v_i^{(a)} \hat{\phi}_i(t), \quad (2.40)$$

$$\Pi_a(t) = \sum_{i=1}^N v_i^{(a)} \hat{\pi}_i(t). \quad (2.41)$$

¹ Os modos normais representam os movimentos coletivos elementares, onde todos os sítios da rede oscilam com a mesma frequência natural ω_a e fase fixa. No contexto da Teoria Quântica de Campos, essa decomposição espectral é o passo que desacopla o Hamiltoniano de interação (Eq. 2.34) em um conjunto de osciladores harmônicos independentes, permitindo a identificação das excitações elementares do campo livre. Diferente de meios contínuos homogêneos, aqui a estrutura espacial desses modos é inteiramente ditada pela topologia da rede complexa (autovetores do Laplaciano). O conceito é análogo à teoria de fônons em redes cristalinas. Para um tratamento detalhado, consulte: KITTEL (KITTEL, 2005), Cap. 4; e ASHCROFT & MERMIN (ASHCROFT; MERMIN, 1976), Cap. 22.

2.7.3 Relações canônicas

Para garantir que a transformação para as coordenadas normais preserva a estrutura quântica do sistema, é necessário verificar se os novos operadores Q_a e Π_a satisfazem as relações de comutação fundamentais. Isso confirma que a transformação é canônica.²

Calculamos o comutador entre a coordenada e o momento do modo normal, expandindo-os em termos dos operadores locais $\hat{\phi}_i$ e $\hat{\pi}_j$. Pela linearidade do comutador, temos,

$$\begin{aligned} [Q_a, \Pi_b] &= \left[\sum_{i=1}^N v_i^{(a)} \hat{\phi}_i, \sum_{j=1}^N v_j^{(b)} \hat{\pi}_j \right] \\ &= \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N v_i^{(a)} v_j^{(b)} [\hat{\phi}_i, \hat{\pi}_j]. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Utilizando a relação de comutação canônica local $[\hat{\phi}_i, \hat{\pi}_j] = i\hbar\delta_{ij}$, a expressão torna-se:

$$[Q_a, \Pi_b] = i\hbar \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N v_i^{(a)} v_j^{(b)} \delta_{ij}. \quad (2.43)$$

A presença do delta de Kronecker δ_{ij} permite contrair a soma dupla para uma soma simples (onde $j = i$). Finalmente, invocando a condição de ortonormalidade dos autovetores da rede ($\sum_i v_i^{(a)} v_i^{(b)} = \delta_{ab}$), recuperamos a relação fundamental,

$$[Q_a, \Pi_b] = i\hbar \sum_{i=1}^N v_i^{(a)} v_i^{(b)} = i\hbar\delta_{ab}. \quad (2.44)$$

Portanto, os modos normais constituem um conjunto de variáveis canônicas independentes. O Hamiltoniano, expresso nesta base, diagonaliza-se como uma soma de osciladores desacoplados,

$$\hat{H} = \sum_a \left(\frac{\Pi_a^2}{2} + \frac{1}{2} \omega_a^2 Q_a^2 \right). \quad (2.45)$$

Para quantizar o sistema em termos de excitações elementares, introduzimos os operadores de criação (b_a^\dagger) e aniquilação (b_a) definidos analogamente ao caso de um único corpo,

$$Q_a = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_a}} (b_a^\dagger + b_a), \quad (2.46)$$

$$\Pi_a = i\sqrt{\frac{\hbar\omega_a}{2}} (b_a^\dagger - b_a), \quad (2.47)$$

$$[b_a, b_b^\dagger] = \delta_{ab}. \quad (2.48)$$

² A preservação das relações de comutação é um critério básico para fazer uma transformação canônica no formalismo quântico. Em termos conceituais, isso garante que a estrutura algébrica da teoria permaneça invariável sob a transformação. Tal fato é o análogo direto, no limite clássico, da preservação dos Parênteses de Poisson, que assegura a invariância da geometria simplética do espaço de fases. Para a formalização matemática rigorosa, consulte: NIVALDO (LEMOs, 2007), Cap. 6; e GOLDSTEIN (GOLDSTEIN *et al.*, 2002), Cap. 9.

Substituindo estas expressões na forma quadrática do Hamiltoniano, os termos proporcionais a $(b_a^\dagger)^2$ e $(b_a)^2$ se cancelam devido aos sinais opostos nas expansões de Q^2 e Π^2 , restando apenas os termos cruzados:

$$\hat{H} = \sum_a \frac{\hbar\omega_a}{2} (b_a^\dagger b_a + b_a b_a^\dagger). \quad (2.49)$$

Após a aplicação do comutador $[b_a, b_a^\dagger] = 1$ para reordenar os operadores, obtém-se a forma diagonalizada final, evidenciando a energia de ponto zero:

$$\hat{H} = \sum_a \hbar\omega_a \left(b_a^\dagger b_a + \frac{1}{2} \right). \quad (2.50)$$

2.8 Expansão do Campo em Modos Normais

Invertendo a transformação unitária, obtemos a expansão do campo:

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_i(t) &= \sum_{a=1}^N v_i^{(a)} Q_a(t) \\ &= \sum_{a=1}^N v_i^{(a)} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_a}} \left(b_a e^{-i\omega_a t} + b_a^\dagger e^{i\omega_a t} \right), \end{aligned} \quad (2.51)$$

$$\begin{aligned} \hat{\pi}_i(t) &= \sum_{a=1}^N v_i^{(a)} \Pi_a(t) \\ &= i \sum_{a=1}^N v_i^{(a)} \sqrt{\frac{\hbar\omega_a}{2}} \left(b_a^\dagger e^{i\omega_a t} - b_a e^{-i\omega_a t} \right). \end{aligned} \quad (2.52)$$

A expansão evidencia que a evolução temporal de $\hat{\phi}_i(t)$ é uma superposição das frequências normais ω_a , ponderadas pela geometria dos autovetores $v_i^{(a)}$.

2.8.1 Propagadores e Correlações

Para a análise da dinâmica, utilizamos a correlação de vácuo. Esta função descreve a amplitude de probabilidade de propagação de uma excitação elementar criada no sítio j no instante inicial e aniquilada no sítio i em um tempo posterior. É a medida de como a geometria da rede permite que a informação quântica viaje de um ponto a outro:

$$G_{ij}^{(1)}(t) \equiv \langle 0 | \hat{\phi}_i(t) \hat{\phi}_j(0) | 0 \rangle. \quad (2.53)$$

Substituindo as expansões modais e usando $\langle 0 | b_a b_b^\dagger | 0 \rangle = \delta_{ab}$, obtemos,

$$G_{ij}^{(1)}(t) = \sum_{a=1}^N \frac{\hbar}{2\omega_a} v_i^{(a)} v_j^{(a)} e^{-i\omega_a t}. \quad (2.54)$$

Note que a propagação não ocorre de forma direta ou localizada, ela é uma superposição ponderada de todos os modos normais do sistema. A geometria da rede entra na dinâmica através dos autovetores, que ditam o quão bem cada modo conecta os sítios de origem e destino.

2.8.2 Função de Green retardada

Enquanto a correlação anterior media flutuações estatísticas, a Função de Green Retardada representa a resposta causal do sistema a uma perturbação externa. A introdução da função degrau ($\Theta(t)$) impõe a causalidade, garantindo que o efeito no sítio i só ocorra após a perturbação no sítio j . O comutador envolvido quantifica a influência mútua entre os graus de liberdade da rede, se ele for nulo, os sítios são desconectados. Definimos:

$$G_{ij}^R(t) \equiv -i\Theta(t)\langle[\hat{\phi}_i(t), \hat{\phi}_j(0)]\rangle. \quad (2.55)$$

Usando as expansões em b_a, b_a^\dagger e o comutador $[b_a, b_b^\dagger] = \delta_{ab}$, temos:

$$\langle[\hat{\phi}_i(t), \hat{\phi}_j(0)]\rangle = \sum_a v_i^{(a)} v_j^{(a)} \frac{\hbar}{\omega_a} \text{sen}(\omega_a t). \quad (2.56)$$

Logo, a função de Green assume a forma:

$$G_{ij}^R(t) = -i\Theta(t) \sum_{a=1}^N v_i^{(a)} v_j^{(a)} \frac{\hbar}{\omega_a} \text{sen}(\omega_a t). \quad (2.57)$$

O resultado final revela que a resposta do campo é puramente oscilatória e não local. A perturbação se propaga pela rede como uma soma de ondas senoidais, onde cada componente vibra com uma frequência natural ω_a determinada exclusivamente pela topologia da rede.

Para analisar como a rede responde a diferentes energias de excitação, passamos para o domínio da frequência via Transformada de Fourier,

$$G_{ij}^R(\Omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G_{ij}^R(t) e^{i\Omega t} dt = \sum_a v_i^{(a)} v_j^{(a)} \frac{\hbar}{(\Omega + i0^+)^2 - \omega_a^2}. \quad (2.58)$$

A expressão final exhibe polos sempre que a frequência externa coincide com as frequências naturais da rede ($\Omega = \pm\omega_a$). Isso significa que o sistema entra em ressonância nessas frequências. O termo infinitesimal $i0^+$ é o prescritor de causalidade, garantindo que, ao invertermos a transformada, recuperemos uma propagação.

2.8.3 Função Espectral e LDOS

A Função Espectral $A_{ij}(\Omega)$ é uma quantidade elementar em sistemas de muitos corpos, pois determina a densidade de estados disponíveis para excitações e está relacionada à taxa de absorção ou emissão de energia pelo sistema. Definimo-la a partir da parte imaginária do propagador,

$$A_{ij}(\Omega) \equiv -2 \Im G_{ij}^R(\Omega). \quad (2.59)$$

Usamos a identidade de distribuição $\Im\left(\frac{1}{x-i0^+}\right) = -\pi\delta(x)$ para converter os polos em picos de ressonância,

$$\Im\left(\frac{1}{\Omega + i0^+ - \omega}\right) = -\pi\delta(\Omega - \omega), \quad (2.60)$$

e a fatoração algébrica do denominador $(\Omega + i0^+)^2 - \omega_a^2$, para obter a forma espectral final:

$$A_{ij}(\Omega) = 2\pi\hbar \sum_a v_i^{(a)} v_j^{(a)} \frac{1}{2\omega_a} [\delta(\Omega - \omega_a) - \delta(\Omega + \omega_a)]. \quad (2.61)$$

Enquanto a função espectral geral conecta dois pontos distintos, a Densidade Local de Estados (LDOS) foca na resposta de um único sítio. Ela mede o peso estatístico que cada modo normal exerce sobre o nó i . Se um modo $v^{(a)}$ for localizado, ele terá uma grande amplitude $|v_i^{(a)}|^2$ nesse sítio, contribuindo para a LDOS local,

$$\rho_i(\Omega) \equiv -\frac{1}{\pi\hbar} \Im G_{ii}^R(\Omega) = \sum_a |v_i^{(a)}|^2 \frac{1}{2\omega_a} [\delta(\Omega - \omega_a) - \delta(\Omega + \omega_a)]. \quad (2.62)$$

Finalmente, ao somarmos as contribuições de todos os nós, obtemos a Densidade de Estados Global (DOS). Esta métrica ignora a distribuição espacial e foca puramente na contagem de níveis de energia disponíveis. A forma da DOS (seus *gaps* e picos) funciona como um registro da topologia da rede,

$$\rho(\Omega) = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^N [\delta(\Omega - \omega_a) + \delta(\Omega + \omega_a)] \approx \frac{2}{N} \sum_{a:\omega_a>0} \delta(\Omega - \omega_a). \quad (2.63)$$

2.9 O Modelo Tight-Binding Fotônico

Para analisar o transporte de uma única excitação, nos limitamos ao subespaço de um fóton $\{|j\rangle \equiv a_j^\dagger |0\rangle\}$. O Hamiltoniano efetivo de tight-binding é:

$$\hat{H}_{\text{tb}} = \sum_i \omega_{0,i} a_i^\dagger a_i - \sum_{i \neq j} J_{ij} a_i^\dagger a_j. \quad (2.64)$$

Assumindo homogeneidade ($\omega_{0,i} = \omega_0$) e acoplamento proporcional à adjacência ($J_{ij} = JA_{ij}$), a forma matricial na base de posição é

$$H = \omega_0 I - JA. \quad (2.65)$$

No regime linear de baixas energias, os autovetores que diagonalizam M e H coincidem sempre que ambos forem funções de L , o que permite identificar $\omega_a \leftrightarrow \lambda_a$.

2.9.1 Probabilidades de Transição e Eficiência

A dinâmica da excitação na rede é regida pela amplitude de transição quântica. Em termos simples, a $\alpha_{i \rightarrow j}(t)$ representa a amplitude de probabilidade de uma partícula, inicialmente localizada no sítio i , ser detectada no sítio j após um tempo t . A amplitude de transição $|i\rangle \rightarrow |j\rangle$ é

$$\alpha_{i \rightarrow j}(t) = \langle j | e^{-iHt} | i \rangle = \sum_{a=1}^N u_j^{(a)} u_i^{(a)} e^{-i\lambda_a t}, \quad (2.66)$$

onde $\{u^{(a)}\}$ são os autovetores de H e λ_a seus autovalores. A probabilidade correspondente é

$$\pi_{i \rightarrow j}(t) = |\alpha_{i \rightarrow j}(t)|^2. \quad (2.67)$$

Como o sistema é finito e a evolução é unitária, a probabilidade não decai para um valor estacionário fixo, mas oscila perpetuamente. Para quantificar a eficiência do transporte ou o grau de confinamento, definimos o valor médio de longo tempo,

$$\chi_{i \rightarrow j} \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \pi_{i \rightarrow j}(t) dt. \quad (2.68)$$

2.9.2 Integração temporal e degenerescências

Expandindo explicitamente a probabilidade,

$$\pi_{i \rightarrow j}(t) = \sum_{a,b} u_j^{(a)} u_i^{(a)} u_j^{(b)} u_i^{(b)} e^{-i(\lambda_a - \lambda_b)t}. \quad (2.69)$$

A expressão acima revela que a probabilidade é uma soma de termos oscilatórios. Ao tomarmos a média temporal, os termos rápidos se cancelam,

$$\chi_{i \rightarrow j} = \sum_{a,b} u_j^{(a)} u_i^{(a)} u_j^{(b)} u_i^{(b)} \left(\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T e^{-i(\lambda_a - \lambda_b)t} dt \right). \quad (2.70)$$

A integral temporal atua como um filtro de frequências, resultando em

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T e^{-i(\lambda_a - \lambda_b)t} dt = \delta_{\lambda_a, \lambda_b}, \quad (2.71)$$

pois a exponencial oscila e a média tende a zero exceto quando $\lambda_a = \lambda_b$. Isso implica que a eficiência de transporte é determinada pelas degenerescências do espectro.

Portanto,

$$\chi_{i \rightarrow j} = \sum_{a,b: \lambda_a = \lambda_b} u_j^{(a)} u_i^{(a)} u_j^{(b)} u_i^{(b)}. \quad (2.72)$$

No caso não degenerado, isso se reduz a

$$\chi_{i \rightarrow j} = \sum_{a=1}^N |u_j^{(a)}|^2 |u_i^{(a)}|^2. \quad (2.73)$$

Para estabelecer um limite inferior para o aprisionamento, definimos a amplitude média de retorno, que foca apenas na coerência global dos autovalores,

$$\begin{aligned} \bar{\alpha}(t) &\equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \alpha_{i \rightarrow i}(t) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{-i\lambda_n t} \left(\sum_{i=1}^N |u_i^{(n)}|^2 \right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{-i\lambda_n t}, \end{aligned} \quad (2.74)$$

pois os autovetores são normalizados.

A probabilidade média de retorno satisfaz

$$\bar{\pi}(t) = \frac{1}{N} \sum_i \pi_{i \rightarrow i}(t) \geq |\bar{\alpha}(t)|^2, \quad (2.75)$$

pela desigualdade de Cauchy–Schwarz.

Tomando a média temporal, obtemos o limite inferior $\bar{\chi}^*$, que representa o retorno mínimo imposto puramente pela degenerescência espectral,

$$\bar{\chi} \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \bar{\pi}(t) dt \geq \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T |\bar{\alpha}(t)|^2 dt \equiv \bar{\chi}^*. \quad (2.76)$$

Mas

$$|\bar{\alpha}(t)|^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{n,m} e^{-i(\lambda_n - \lambda_m)t}, \quad (2.77)$$

e portanto,

$$\bar{\chi}^* = \frac{1}{N^2} \sum_{n,m} \delta_{\lambda_n, \lambda_m} = \frac{1}{N^2} \sum_{\epsilon} g(\epsilon)^2, \quad (2.78)$$

onde $g(\epsilon)$ é a degenerescência do autovalor ϵ . Se o espectro for não degenerado, $\bar{\chi}^* = 1/N$.

2.9.3 Relação com IPR

Conectamos agora a dinâmica temporal com a estrutura espacial. Começando pela definição,

$$\chi_{i \rightarrow i} = \sum_{a,b: \lambda_a = \lambda_b} u_i^{(a)} u_i^{(a)} u_i^{(b)} u_i^{(b)}. \quad (2.79)$$

Somando sobre i :

$$\sum_{i=1}^N \chi_{i \rightarrow i} = \sum_{a,b: \lambda_a = \lambda_b} \left(\sum_i |u_i^{(a)}|^2 |u_i^{(b)}|^2 \right). \quad (2.80)$$

No caso não degenerado ($a = b$), recuperamos a soma dos IPRs,

$$\sum_{i=1}^N \chi_{i \rightarrow i} = \sum_{a=1}^N \sum_{i=1}^N |u_i^{(a)}|^4 = \sum_{a=1}^N \text{IPR}_a. \quad (2.81)$$

Logo, a eficiência média é dada por:

$$\bar{\chi} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \chi_{i \rightarrow i} = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^N \text{IPR}_a, \quad (2.82)$$

mostrando a conexão direta entre a média temporal de retorno e a localização dos modos. Se a rede possui modos com alto IPR, a partícula tenderá a ficar aprisionada, elevando $\bar{\chi}$.

2.9.4 Função de Green expressa via matriz dinâmica M

Formulamos em termos da função de Green para conectar a estrutura espectral da matriz dinâmica M com as propriedades de propagação e resposta do sistema. A função de Green retardada $G^R(\Omega)$ é definida como a resposta causal do sistema a uma perturbação delta impulsiva.

$$G^R(\Omega) = \hbar [(\Omega + i0^+)^2 I - M]^{-1}. \quad (2.83)$$

Componentes:

$$G_{ij}^R(\Omega) = \hbar \sum_a v_i^{(a)} v_j^{(a)} \frac{1}{(\Omega + i0^+)^2 - \omega_a^2}. \quad (2.84)$$

2.9.5 Substituição de integrais por somas espectrais

Para conectar nosso modelo com a formulação padrão da TQC, observamos a estrutura do propagador. Em teorias definidas no contínuo ou em redes regulares infinitas, a invariância translacional permite o uso do espaço de momentos k , resultando em integrais do tipo

$$\int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{\Omega^2 - \omega(k)^2}. \quad (2.85)$$

No entanto, em redes complexas finitas e desordenadas, a simetria de translação é quebrada e o vetor de onda k não está definido. A descrição exata passa a ser uma soma discreta sobre os autovalores ω_a do Laplaciano, substituindo a integral contínua por uma soma espectral, temos,

$$\frac{1}{N} \sum_{a=1}^N \frac{1}{\Omega^2 - \omega_a^2}. \quad (2.86)$$

Convertemos a soma discreta de volta para uma integral, agora ponderada pela Densidade de Estados (DOS) $\rho(\omega)$.

$$\frac{1}{N} \sum_{a=1}^N f(\omega_a) \approx \int d\omega \rho(\omega) f(\omega). \quad (2.87)$$

2.10 Métricas Estatísticas da Topologia

Para relacionar a estrutura das redes geradas com a eficiência do transporte quântico, utilizamos um conjunto de medidas estatísticas.

2.10.1 Grau Médio ($\langle k \rangle$)

O grau de um nó k_i é o número de conexões que ele possui. O grau médio da rede é a média aritmética dos graus de todos os N nós,

$$\langle k \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N k_i = \frac{2E}{N}, \quad (2.88)$$

onde E é o número total de arestas.

2.10.2 Diâmetro (D)

A distância geodésica d_{ij} entre dois nós i e j é definida como o número mínimo de arestas necessárias para conectar esses nós. O Diâmetro da rede é a maior distância geodésica encontrada entre qualquer par de nós,

$$D = \max_{i,j} \{d_{ij}\}. \quad (2.89)$$

2.10.3 Comprimento Médio do Caminho

É a média de todas as distâncias geodésicas entre pares de nós distintos,

$$L_{avg} = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i \neq j} d_{ij}. \quad (2.90)$$

2.10.4 Densidade de Ligações (δ)

A densidade da rede mede o quão conectada ela está em relação a um grafo completo. É definida como a razão entre o número de arestas existentes (E) e o número máximo possível de arestas:

$$\delta = \frac{2E}{N(N-1)}. \quad (2.91)$$

Para redes livres de escala esparsas, como as estudadas aqui, $\delta \rightarrow 0$ quando $N \rightarrow \infty$.

2.10.5 Assortatividade (r)

Para medir a tendência de nós se conectarem a outros nós de grau similar, utilizamos o coeficiente de assortatividade, que é o coeficiente de correlação de Pearson entre os graus dos nós conectados por uma aresta,

$$r = \frac{\sum_{xy} xy(e_{xy} - a_x b_y)}{\sigma_a \sigma_b}, \quad (2.92)$$

onde e_{xy} é a fração de arestas que conectam um nó de grau x a um nó de grau y , e a_x e b_y são as distribuições das arestas de origem e destino. Se $r > 0$ os *hubs* se conectam com outros *hubs*. Se $r < 0$ Os *hubs* se conectam com nós de baixo grau.

2.11 Modos Normais

Cada nó da rede pode ser interpretado como um oscilador quântico, enquanto as arestas representam os acoplamentos entre esses osciladores. Nesse sentido, o Hamiltoniano do sistema codifica completamente a dinâmica coletiva da rede.

A diagonalização desse operador determinará as frequências naturais de vibração do sistema. Os autovalores E_k estão associados às frequências de oscilação ω_k , enquanto os autovetores $|\phi_k\rangle$ representam os *modos normais*, isto é, formas espaciais nos quais toda a rede oscila. Diferentemente de uma partícula clássica, que ocupa um único nó por vez, o caminhante quântico inicial é descrito como uma superposição coerente desses modos normais,

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_k c_k |\phi_k\rangle. \quad (2.93)$$

A evolução temporal do sistema resulta da interferência entre esses modos, uma vez que cada um acumula uma fase dinâmica $e^{-iE_k t}$. Dessa forma, a propagação da excitação ao longo da rede é diretamente determinada pela estrutura espectral do Laplaciano.

2.11.1 O Caminhante como Excitação Coletiva

O caminhante não se comporta como um vértice convencional, que realiza saltos estocásticos entre os nós da rede. Em vez disso, ele deve ser compreendido como uma **excitação de um campo** definido sobre toda a estrutura do grafo. Nesta visão, a topologia da rede atua como uma condição de contorno não trivial para esse campo, moldando seus modos normais e ditando as regras de propagação. Na caminhada aleatório clássica, o agente comporta-se como uma partícula pontual sujeita a uma evolução governada pela soma de probabilidades. Nesse regime, os *hubs* funcionam como atratores, devido ao grande número de caminhos que convergem para eles, é estatisticamente inevitável que a partícula seja capturada por essas regiões, resultando em um **estado estacionário** onde a probabilidade de ocupação é proporcional ao grau do nó ($P_i \propto k_i$).

Entretanto, no regime quântico, o caminhante assume a natureza de um pacote de onda regido pela superposição coerente de amplitudes complexas. A rede opera, então, como um interferômetro complexo, onde caminhos distintos podem apresentar fases opostas e se cancelar mutuamente. Nessa linha, os *hubs* alteram radicalmente sua função, visto que deixam de ser sumidouros de probabilidade e atuam como centros de espalhamento. Ao atingir um nó altamente conectado, a função de onda é fragmentada em múltiplas frentes que se propagam simultaneamente por todos os ramos disponíveis, permitindo uma exploração paralela da topologia.

Consequentemente, a eficiência do transporte passa a depender do confinamento imposto pela geometria. Em redes com topologia de árvore ($m = 1$), a simetria das ramificações favorece a degenerescência de autovalores, criando ondas estacionárias localizadas que aprisionam a probabilidade e geram altas taxas de retorno. Por outro lado, em redes densas ($m = 4$), a presença de laços quebra essa degenerescência e permite interferências construtivas que favorecem a deslocalização. Portanto, a dinâmica observada não é um simples processo de difusão, mas um fenômeno de propagação ondulatória onde a estrutura da rede define as frequências de ressonância permitidas para a evolução do sistema.

2.11.2 Armadilhas Topológicas e Eficiência de Transporte

A dinâmica do caminhante quântico sobre a rede não é uniforme, visto que ela é profundamente sensível às irregularidades locais da topologia. Diferente de um meio homogêneo onde a onda se propaga livremente, a rede apresenta barreiras e armadilhas que surgem da geometria das conexões, alterar estas conexões altera a forma do caminhante se deparar com essas singularidades. A eficiência do transporte, ou seja, a capacidade da excitação sair de sua origem e alcançar nós distantes, é determinada por uma competição entre a conectividade como um todo e, a formação de estados localizados.

Uma das principais armadilhas que o caminhante encontra são os modos de simetria. Em estruturas dendríticas ou do tipo estrela ($m = 1$), a presença de nós periféricos (folhas) conectados a um mesmo *hub* central cria uma simetria de permutação. A interferência quântica nesses arranjos pode ser perfeitamente destrutiva no nó central, impedindo que a probabilidade flua através dele. O caminhante, ao invés de usar o *hub* como uma ponte para o restante da rede, fica confinado em uma oscilação perpétua entre as folhas, preso em um local isolado do grafo, a própria estrutura impede o transporte.

Além dos estados de simetria, a existência de locais sem saída, i.e., os ramos longos sem conexões laterais, força o pacote de onda a refletir sobre si mesmo. Em redes com baixo grau de clusterização, a ausência de rotas alternativas obriga a onda a percorrer o mesmo caminho de volta para sair de um ramo. Durante esse retorno, a frente de onda que volta interfere com a que está chegando, criando padrões de onda estacionária que não transportam energia, resultando na estagnação da probabilidade de retorno, fisicamente, interferências.

Por outro lado, o aumento da densidade de conexões e a formação de laços ($m = 4$) desarmam essas armadilhas. A introdução de ciclos na rede oferece múltiplos caminhos para o caminhante viajar entre dois pontos. Neste sentido, se um caminho sofre interferência destrutiva, é provável que exista uma rota alternativa onde a interferência seja construtiva. A topologia rica em *loops* atua como uma rede de difração complexa que favorece o espalhamento, permitindo que a excitação escape das vizinhanças do nó inicial e explore o espaço de fases de maneira super-difusiva.

2.11.3 A Dinâmica das Interferências

A essência do transporte quântico reside no fato de que o caminhante não escolhe um único trajeto, mas explora todas as rotas possíveis simultaneamente. Durante essa propagação, a função de onda do caminhante sofre um processo contínuo de autointeração. Diferente de partículas clássicas que colidem e se espalham, as componentes da onda quântica atravessam umas às outras, somando-se ou cancelando-se dependendo de suas fases relativas.

Em redes com topologia esparsa e ramificada ($m = 1$), o fenômeno dominante é a interferência destrutiva por retroespalhamento. Quando a frente de onda atinge uma folha ou

um ramo longo, ela é refletida de volta. A onda refletida interage com a onda incidente que ainda está chegando. Se as fases dessas duas ondas forem opostas, ocorre um cancelamento mútuo da amplitude. Esse processo cria pontos nodais, que impedem o fluxo de energia. O caminhante, tentando avançar, é constantemente anulado por sua própria reflexão, resultando no aprisionamento observado nos **modos localizados**.

Por outro lado, em redes densas e ricas em ciclos ($m = 4$), a dinâmica é governada pela **interferência construtiva em múltiplos caminhos**. A presença de laços fechados permite que a onda se divida, contorne um obstáculo por rotas diferentes e se recombine mais adiante. Se os caminhos percorridos tiverem comprimentos compatíveis, as ondas chegam ao ponto de encontro em fase, reforçando a amplitude de probabilidade naquela direção. A multiplicidade de rotas corrige as falhas locais, dado que um caminho bloqueado por interferência destrutiva, é estatisticamente provável que exista uma rota alternativa onde a interferência seja construtiva, permitindo que o caminhante retorne ao ponto inicial de forma eficiente.

Portanto, a interação entre as ondas durante a evolução temporal não é aleatória. Ela é um processo determinístico de filtragem topológica. A rede decide, através de sua geometria, quais frequências e caminhos sobrevivem e quais são extintos. O sucesso do caminhante em atravessar a rede não depende da capacidade da estrutura de sustentar coerência de fase ao longo de grandes distâncias, transformando o caos das conexões em um canal ordenado de propagação.

2.11.4 Considerações Finais

Todos os desenvolvimentos analíticos apresentados ao longo deste trabalho são utilizados diretamente na implementação computacional. As expressões derivadas para os modos normais, propagadores, métricas espectrais e probabilidades de retorno constituem a base do código, garantindo que a simulação reproduza fielmente o comportamento previsto pelo modelo teórico.

As expressões para a métrica topológica entrarão para fazer a previsão do comportamento geral da rede. A formulação dos modos normais fornecerá as frequências e autovetores necessários para reconstruir a dinâmica temporal do caminhante. A estrutura espectral derivada analiticamente é empregada para calcular a evolução unitária, as amplitudes de transição, as probabilidades de retorno e a eficiência assintótica. De modo análogo, as expressões para a DOS e o IPR são utilizadas para avaliar propriedades topológicas e localizar regiões de espalhamento e aprisionamento.

3 METODOLOGIA

3.1 Construção das Redes

A primeira etapa do algoritmo consiste na geração da topologia utilizando o modelo de Barabási-Albert. O código recebe como parâmetros de entrada o tamanho da rede, variando $N \in \{200, 500, 900, 2000\}$, e a conectividade $m \in \{1, 2, 4\}$, cobrindo o espectro desde estruturas do tipo árvore até redes densamente conectadas. Após a geração de cada instância da rede, o algoritmo calcula as métricas estatísticas. O grau médio $\langle k \rangle$ é obtido pela média aritmética da conectividade dos nós, servindo como controle da topologia gerada.

A compactação da rede é avaliada pelo cálculo do diâmetro (D) e do comprimento médio do caminho (L_{avg}), utilizando algoritmos de excentricidade e caminhos mínimos, respectivamente. Somado a isso, a dissortatividade da rede é verificado através do coeficiente de assortatividade (r), calculado via correlação de Pearson dos graus. Uma vez modelada a topologia, constrói-se a Matriz Laplaciana $\mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{A}$, que representa o Hamiltoniano do sistema. Extrai-se a lista de graus de todos os nós para construir a distribuição de probabilidade $P(k)$. As métricas topológicas das redes geradas (grau médio, diâmetro, caminho médio e assortatividade) foram calculadas para cada par (N, m) a fim de modelar a estrutura global das redes utilizadas nas simulações. Os valores completos encontram-se no Apêndice, nas Tabelas 1 e 2.

3.2 Implementação Computacional e Protocolo de Análise

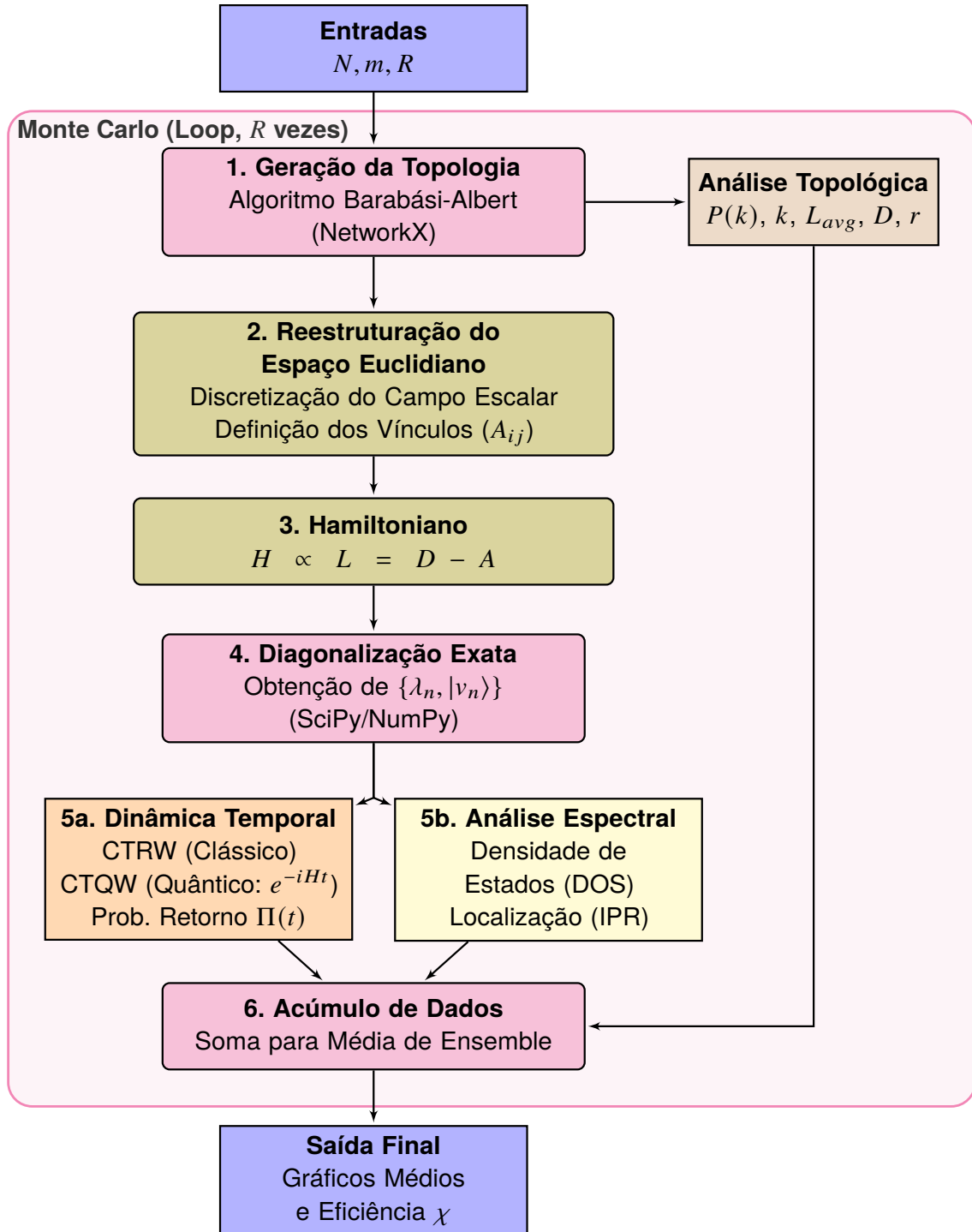
A metodologia adotada para investigar o transporte quântico segue um fluxo algorítmico estruturado, integrando a geração topológica com a resolução da dinâmica do campo. O protocolo inicia-se com a construção das redes complexas através do modelo de Barabási-Albert, implementado via biblioteca *NetworkX*. Para cada realização do ensemble, define-se a geometria do sistema a partir dos parâmetros de controle N , o número de sítios e m a conectividade, extraíndo-se a matriz Laplaciana \mathbf{L} . Esta matriz atua como o operador Hamiltoniano do sistema, ditando as regras de acoplamento entre os osciladores.

Optou-se pela decomposição espectral completa em detrimento da integração numérica direta das equações diferenciais, garantindo maior estabilidade e precisão para a avaliação de longos tempos de evolução. Com o conjunto completo do espectro, o algoritmo bifurca a análise em 3 frentes complementares, a simulação dinâmica, a análise espectral e as métricas topológicas.

Utilizamos a simulação de Monte Carlo, explorando o espaço de parâmetros através de múltiplas realizações independentes para cada configuração de tamanho de rede e conectividade. Com base nessa decomposição espectral, determinam-se propriedades estáticas cruciais, como a Densidade de Estados (DOS) e a localização dos modos via Índice de Participação Inversa (IPR). Simultaneamente, as dinâmicas clássica (CTRW) e quântica (CTQW) são reconstruídas para avaliar a probabilidade de retorno e a eficiência assintótica.

3.2.1 Fluxograma: Lógica de Modelagem

Figura 5 – Fluxograma metodológico detalhando a sequência de modelagem. Da geração topológica à discretização e obtenção do Hamiltoniano, culminando na análise dinâmica e espectral via médias de ensemble.



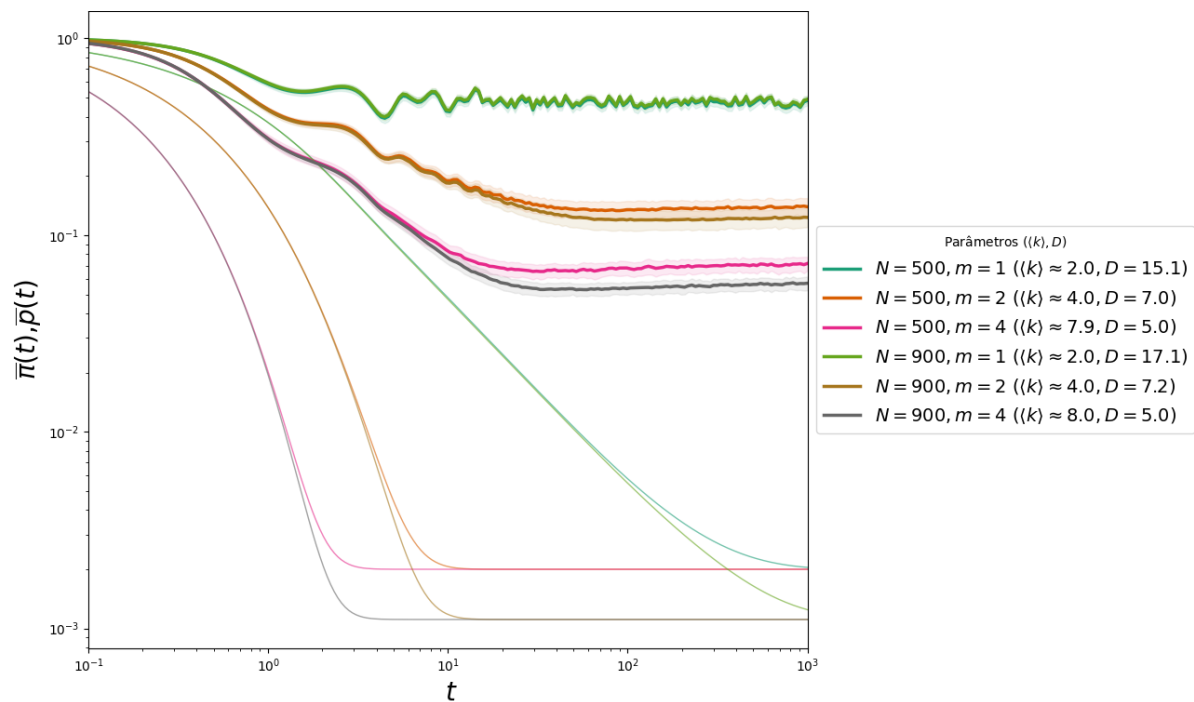
Fonte: Elaboração própria (2025).

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Análise da Dinâmica de Retorno

A dinâmica da probabilidade média de retorno depende fortemente da conectividade mínima m da rede de Barabási–Albert. A **Figura 6** ilustra esse comportamento para $N = 500$. Observa-se que o regime quântico apresenta saturação alta em redes pouco conectadas, enquanto redes mais compactas exibem decaimento pronunciado e valores compatíveis com o regime difusivo. Em termos simples, uma curva com saturação alta indica que a excitação tende a permanecer próxima do ponto inicial, revelando forte aprisionamento topológico. Por outro lado, quando a curva apresenta comportamento difusivo, a probabilidade média de retorno decai para valores próximos de $1/N$, mostrando que a informação se espalha pela rede de forma quase uniforme, sem ficar retida em regiões específicas.

Figura 6 – Dinâmica temporal da probabilidade média de retorno para $N = 500$. As curvas espessas representam CTQW e as finas CTRW. Redes com diâmetro grande ($m = 1, D \approx 15$) retêm amplitude por longos tempos, ao passo que redes mais compactas ($m = 4, D \approx 5$) apresentam decaimento rápido e valores próximos ao limite difusivo ($1/N$).



Fonte: Elaboração própria (2025).

No caso $m = 1$, a rede BA corresponde, por construção, a uma árvore livre de escala: cada novo nó liga-se a um único predecessor, impedindo a formação de ciclos. Essa estrutura gera um *hub* altamente conectado rodeado por cadeias lineares extensas. A literatura demonstra que a ausência de *loops* reduz drasticamente o número de trajetórias independentes entre dois vértices, diminuindo o potencial de interferência destrutiva. Como consequência, a amplitude

tende a permanecer confinada tanto no *hub* quanto nas folhas, resultando em curvas de retorno elevadas e oscilações persistentes, em acordo com os resultados numéricos obtidos.

Por outro lado, quando $m = 4$, a rede torna-se mais compacta, com maior número de ciclos e caminhos alternativos. Esse aumento de conectividade favorece interferência destrutiva entre trajetórias, levando à redução da probabilidade média de retorno e aproximando a dinâmica quântica do comportamento difusivo, caracterizado por valores próximos a $1/N$ e baixa amplitude residual após longos tempos. A árvore possui um conjunto de autovalores degenerados ou quase degenerados, acompanhados de autovetores bem localizados nos ramos periféricos. O espectro resultante produz um valor assintótico $\bar{\pi}_{ii}$. A comparação entre $N = 500$ e $N = 900$ mostra que o aumento do número de nós não diminui a probabilidade de retorno, pois a estrutura hierárquica e a ausência de ciclos permanecem inalteradas.

Para $m = 2$, a rede BA passa a incorporar ciclos esparsos e caminhos alternativos, reduzindo a extrema rigidez da topologia presente no caso $m = 1$. O que vemos é que a probabilidade de retorno apresenta um decaimento mais pronunciado nos tempos iniciais, seguido de flutuações em torno de um grau assintótico e maior que o limite difusivo. A presença de um pequeno número de *loops* permite alguma interferência destrutiva, mas continua insuficiente para eliminar os modos localizados. A dependência com o tamanho da rede N permanece fraca, uma vez que ao comparar N observa-se a manutenção da escala assintótica, mostrando que a contribuição dominante ao retorno provém de propriedades estruturais da BA e não do número total de vértices.

Quando $m = 4$, a rede torna-se mais densa, apresentando múltiplos caminhos independentes entre pares de vértices. A probabilidade de retorno quântico decresce e a condição assintótica aproxima-se de valores próximos de 10^{-2} , indicando espalhamento parcial. O espectro é mais disperso, com menor degenerescência e autovetores mais estendidos. A multiplicidade dos ciclos possibilita trajetórias com comprimentos semelhantes, favorecendo a interferência destrutiva que suprime a probabilidade de retorno. Contudo, mesmo para $m = 4$, a curva permanece acima do comportamento clássico, evidenciando que a rede continua a suportar modos fracamente localizados associados a *hubs* residuais. Nota-se que nas redes BA, independentemente de m , nunca apresentam dispersão total, pois a distribuição livre de escala inevitavelmente gera *hubs* capazes de aprisionar parte da amplitude.

A comparação de N nos mostra um leve decréscimo, coerente com a redução de degenerescência espectral em redes maiores, mas a diferença é mínima, indicando que os mecanismos de localização são inerentes à topologia. Em todos os regimes analisados, os gráficos obtidos são consistentes sobre CTQW. A localização em $m = 1$, a localização seletiva em $m = 2$ e a dispersão parcial em $m = 4$ nos mostram as propriedades espectrais e estruturais previstas para redes BA. A fraca dependência com o tamanho N confirma que o retorno quântico é dominado pela heterogeneidade da distribuição de graus e pela presença de *hubs*.

O parâmetro de conectividade m induz uma transição contínua entre três regimes dinâmicos distintos. Inicialmente, no regime de localização mais forte, as curvas associadas

exibem um comportamento de saturação. A probabilidade quântica permanece estagnada em um grau elevado ($\overline{\Pi}(t) > 0.4$) durante toda a evolução temporal, apresentando apenas flutuações rápidas em torno da média. A ausência de qualquer decaimento difusivo destaca o aprisionamento da função de onda em ramos sem saída.

À medida que a conectividade aumenta para um valor intermediário ($m = 2$), o sistema transita para um regime de refluxo coerente. Diferentemente do decaimento suave observado no caso clássico, a curva quântica passa a exibir uma estrutura não-monotônica pronunciada no intervalo $2 < t < 20$. O que vemos é uma onda que tenta se espalhar inicialmente, mas é refletida pelas primeiras estruturas cíclicas formadas em torno dos *hubs*, retornando à origem antes de saturar em um nível intermediário ($\overline{\chi} \approx 0.15$).

Por fim, nas redes mais densas ($m = 4$), a dinâmica aproxima-se do comportamento clássico, estabelecendo um regime de espalhamento. Nessa condição, a probabilidade decai rapidamente até $t \approx 10$, estabilizando-se em valores baixos (≈ 0.07). A supressão das grandes oscilações, anteriormente observadas, sugere que a alta densidade de conexões destrói as condições de fase necessárias para as interferências construtivas. Enquanto a caminhada clássica se difunde pela rede e tende ao valor uniforme $1/N$, a caminhada quântica preserva oscilações de longo alcance. A discrepância deve decorrer da interferência coerente e da estrutura heterogênea dos autovetores da rede (MÜLKEN; BLUMEN, 2011).

4.1.1 Comparação entre a Dinâmica Quântica e Clássica

A probabilidade de retorno $p_{ii}(t)$ para CTRW apresenta um comportamento monotonicamente decrescente, destacando a condição difusiva do processo estocástico. À medida que o tempo evolui, o caminhante clássico perde progressivamente a memória da posição inicial e a probabilidade tende ao limite uniforme $1/N$. O processo clássico é capaz de explorar toda a estrutura, pois não há fases ou interferência que restrinjam o espalhamento.

Por outro lado, a dinâmica quântica apresenta um comportamento distinto. A evolução unitária preserva coerência e permite que amplitudes provenientes de diferentes trajetórias interfiram entre si. As amplitudes refletidas pelos ramos terminais retornam ao *hub* e às folhas com fases correlacionadas, produzindo padrões persistentes de interferência construtiva. Como consequência, a probabilidade quântica de retorno não decai de forma monotônica, ela exibe oscilações de grande amplitude e permanece acima do regime clássico mesmo para tempos longos, destacando um estado de quase-localização.

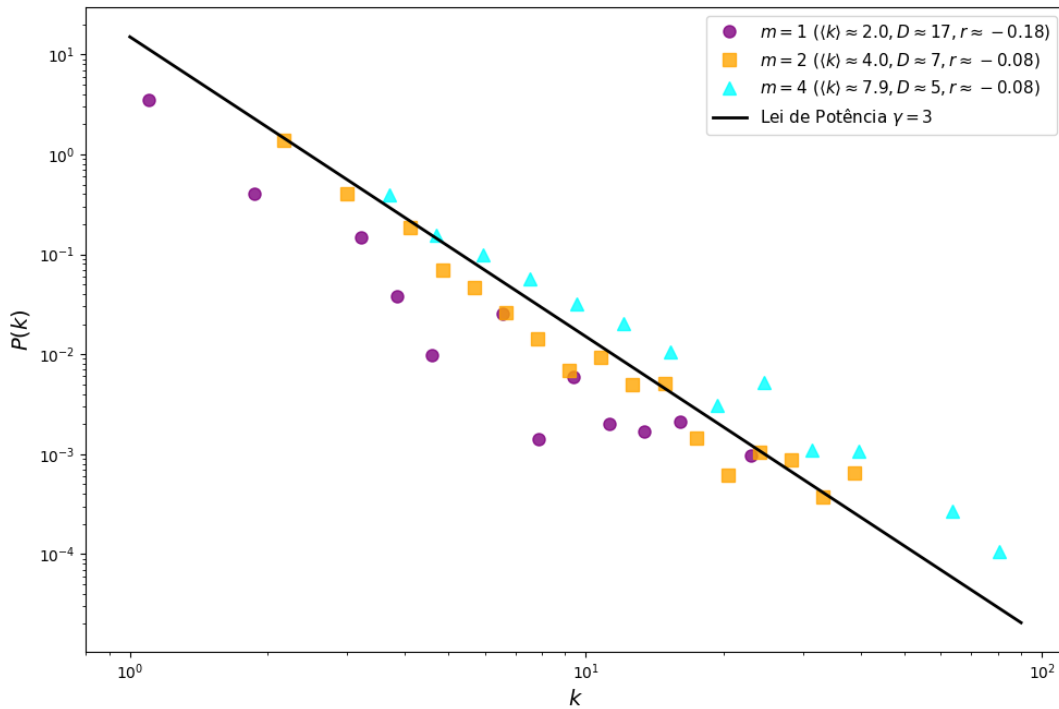
Enquanto o transporte clássico é eficiente mesmo em topologias pobres em caminhos independentes, o transporte quântico se mostra sensível à presença de ciclos e à multiplicidade de trajetórias. Nesta comparação, portanto, a coerência ao invés de favorecer o transporte em redes esparsas, parece torná-lo menos eficiente quando a topologia restringe a diversidade de caminhos possíveis.

4.2 Métricas Estatísticas

A distribuição $P(k)$ apresenta para ambos os tamanhos de rede, um decaimento linear previsto pela lei de potência $P(k) \sim k^{-3}$, haja vista **Figura 7**. A linha de referência com inclinação -3 mostra concordância com o comportamento empírico das curvas, e as oscilações nos pontos simulados situam-se dentro do regime de flutuações estatísticas para tamanhos finitos. A presença de tal alinhamento confirma que o mecanismo de anexação preferencial foi corretamente preservado, independentemente do valor de m ou de N .

Apesar da expansão do sistema de $N = 500$ para $N = 900$, as distribuições de grau mantêm o mesmo expoente e a mesma estrutura hierárquica. Ao aumentar o número de vértices não altera as propriedades da rede, mas apenas estende o suporte da distribuição para graus mais elevados, conforme a relação $k_{\max} \sim mN^{1/2}$. Nota-se que as redes com $N = 900$ apresentam *hubs* mais proeminentes que suas contrapartes com $N = 500$.

Figura 7 – Distribuição de probabilidade de grau $P(k)$ para redes com $N = 500$.



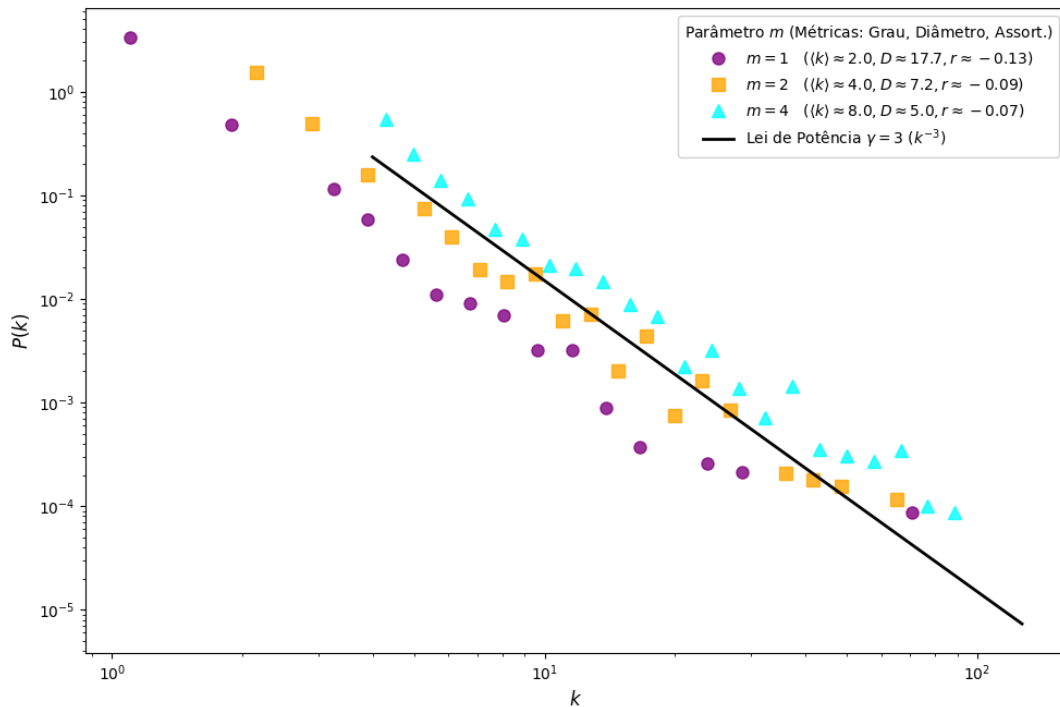
Fonte: Elaboração própria (2025).

A primeira métrica estrutural, o grau médio $\langle k \rangle$, exibe comportamento determinístico dado pela relação exata $\langle k \rangle = 2m$ e não há flutuações. Como $\langle k \rangle$ desloca o espectro Laplaciano para valores mais altos, seu crescimento linear com m mostra que as redes mais densas possuem uma banda espectral mais larga e maior espalhamento, afetando a interferência quântica e a taxa de espalhamento. Portanto, o aumento de $\langle k \rangle$ tem consequências diretas sobre o transporte quântico, reduzindo a saturação assintótica da probabilidade de retorno.

O diâmetro D das redes exibe queda ao aumentar m . Para $m = 1$, o diâmetro situa-se em torno de $D \sim 15\text{--}18$, ao passar para $m = 2$, observa-se uma redução para $D \sim 7$, e para $m = 4$ o diâmetro se estabiliza em torno de $D \sim 5$. A redução de D tende a favorecer a dispersão quântica, já que caminhos alternativos permitem interferência destrutiva. A distância média L_{avg} apresenta uma tendência igual à do diâmetro, diminuindo o comprimento médio dos caminhos geodésicos com o aumento da conectividade. Para $m = 1$, os valores situam-se em torno de $L_{\text{avg}} \approx 6.5\text{--}7.0$; para $m = 2$, caem para $L_{\text{avg}} \approx 4.0$; e para $m = 4$, aproximam-se de 3.0.

Os desvios-padrão aqui são mais pronunciados do que no caso do diâmetro, devido à maior sensibilidade dessa métrica às flutuações nos graus intermediários e na organização dos ramos periféricos. Contudo, a tendência de redução permanece inalterada.

Figura 8 – Distribuição de probabilidade de grau $P(k)$ para as redes geradas com $N = 900$.



Fonte: Elaboração própria (2025).

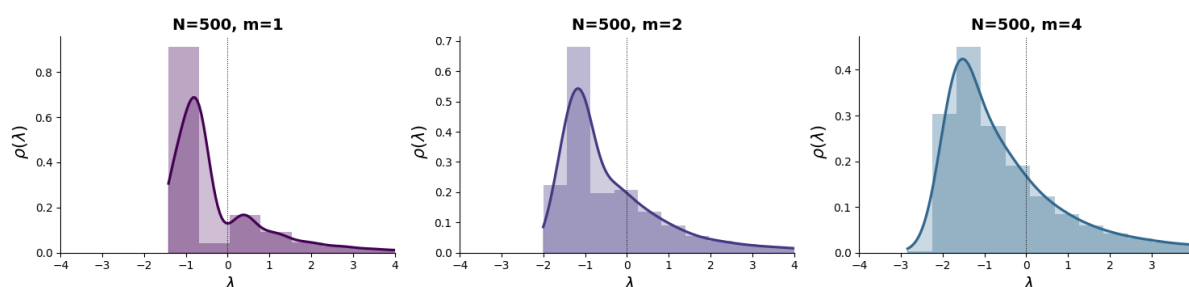
A assortatividade r mantém-se negativa nas quatro combinações (N, m) analisadas. Os valores exibidos, variando aproximadamente entre $r \approx -0.17$ para $m = 1$ e $r \approx -0.08$ para $m = 4$, mostra a presença de uma organização hierárquica. O erro-padrão indica a heterogeneidade inerente ao processo de crescimento estocástico.

O grau médio determina o deslocamento espectral, dado que o diâmetro e a distância média controlam a redundância de caminhos e a assortatividade negativa organiza a rede em torno de *hubs* que concentraram a dinâmica quântica. No conjunto, a coerência entre as distribuições $P(k)$ e as métricas estatísticas nos mostram que as redes geradas reproduzem as propriedades do modelo de Barabási–Albert, independentemente de N ou m .

4.3 Densidade de Estados

A densidade de estados foi obtida a partir dos autovalores do operador de Laplaciano calculados para cada realização, e posteriormente reescalada conforme a metodologia de Aguiar & Bar-Yam (AGUIAR; BAR-YAM, 2005).

Figura 9 – Densidade de estados normalizada para redes com $N = 500$ e variação de m .



Fonte: Elaboração própria (2025).

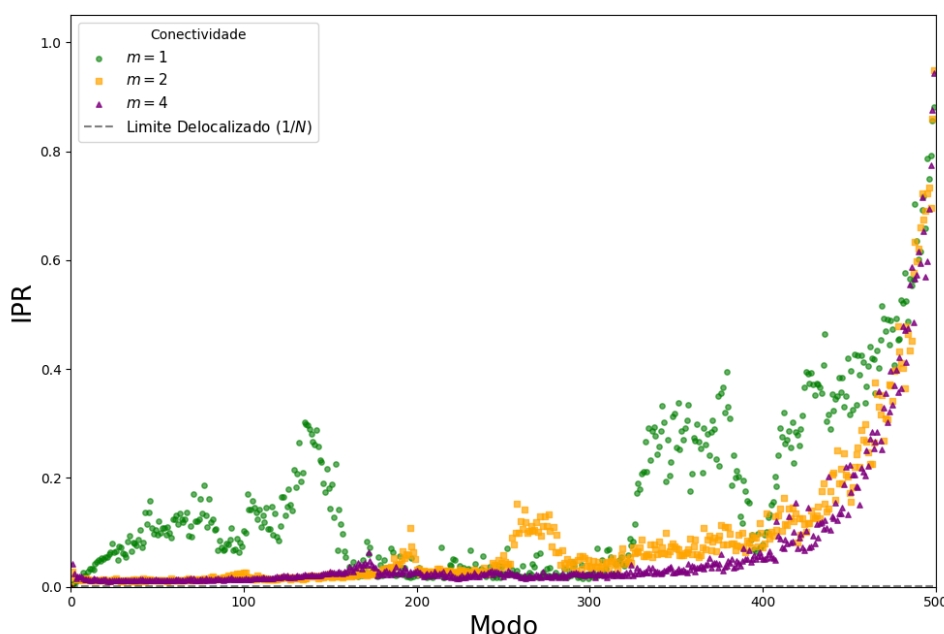
A análise espectral revela uma distinção entre as topologias. Para redes esparsas ($m = 1$), a DOS se fragmenta, visualizamos picos discretos e acentuados. Essas singularidades parecem estar associadas a uma alta degenerescência de autovalores, resultante de simetrias locais na rede devido à abundância de nós periféricos conectados a um mesmo *hub*. Desses autoestados degenerados, o que podemos ver é a formação de armadilhas topológicas que dificultam a propagação da caminhada quântica. Por outro lado, ao aumentarmos a conectividade para $m = 4$, observamos uma transição para um espectro contínuo e suave, assemelhando-se à distribuição de Wigner.

A introdução de ciclos na rede quebra as simetrias locais presentes no caso $m = 1$, levando as degenerescências e espalhando os autovalores. Essa suavização da DOS indica uma maior disponibilidade de estados estendidos, o que favorece o tunelamento quântico e, um transporte mais eficiente através da rede. Em síntese, a DOS apresentada mostra correspondência com a referência, uma vez que redes tipo árvore ($m = 1$) exibem picos e acúmulos espectrais inerentes aos modos localizados, as redes mais densas ($m = 4$) apresentam espectros mais suaves.

4.4 Análise da Localização dos Modos via IPR

A análise do IPR para as redes BA com $N = 500$ e $N = 900$ revela um comportamento espectral consistente com o diagnóstico de localização, dado que em ambos os tamanhos na **Figura 10**, observa-se que a maior parte dos autovetores apresenta valores de IPR próximos de $1/N$, correspondendo a modos estendidos que se distribuem sobre toda a rede, como previsto para topologias com elevada heterogeneidade de graus. Todavia, uma fração não desprezível dos modos exibe valores de IPR superiores, i.e., estados fortemente localizados.

Figura 10 – Razão de Participação Inversa (IPR) dos modos normais para redes com $N = 500$. O gráfico compara o grau de localização dos autovetores em função do índice do modo para diferentes conectividades m . A linha tracejada indica o limite teórico de dispersão total ($1/N$).



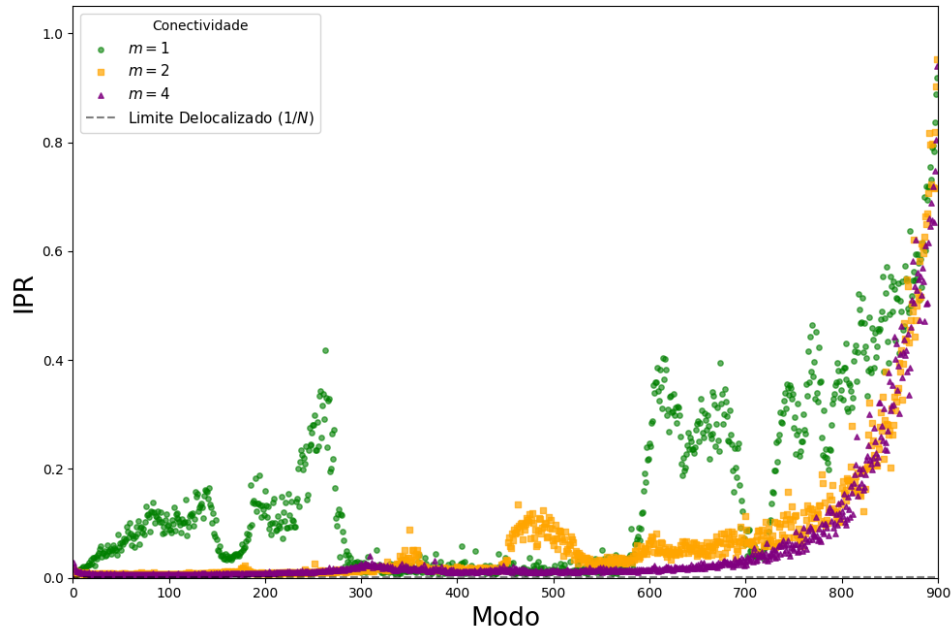
Fonte: Elaboração própria (2025).

A presença sistemática destes picos de localização constitui a condição clássica das redes, nas quais a estrutura hierárquica de conectividade, concentrada na presença de poucos vértices conectados, produz modos cuja amplitude está confinada ao redor de *hubs* ou de pequenas estruturas periféricas de baixa conectividade (GOH *et al.*, 2001). A comparação entre as conectividades $m = 1, 2$ e 4 evidencia uma transição no grau de localização. Para $m = 1$, a rede possui estrutura arborizada, i.e., ausência de ciclos, forte irregularidade e uma topologia dominada por singularidades, propriedades que amplifica o número de modos. Nesse regime, o IPR apresenta larga dispersão e numerosos picos bem acima da linha de referência $1/N$, indicando que a maior parte do espectro contém estados confinados.

À medida que a conectividade mínima aumenta para $m = 2$ e eventualmente para $m = 4$, observa-se uma redução da intensidade e da quantidade de modos. A presença de múltiplos caminhos alternativos e ciclos curtos produz um espectro mais suave e uma maior tendência à dispersão, o que se manifesta em uma aproximação mais uniforme dos valores de IPR em torno de $1/N$. Nota-se que essa tendência é consistente com o comportamento observado na densidade de estados, que, para valores crescentes de m , apresenta menor acentuação dos picos espectrais, pondo em evidência a diminuição de estados confinados e o aumento da coerência.

Outro aspecto que confirma a coerência dos resultados é a fraca dependência do IPR com o tamanho da rede. Ao comparar os casos $N = 500$ e $N = 900$, a estrutura geral da distribuição do IPR é preservada, variando apenas a escala da linha $1/N$ e a posição relativa dos modos com maior energia, que se tornam levemente mais localizados à medida que o tamanho aumenta, em

Figura 11 – Razão de Participação Inversa (IPR) dos modos normais para redes com $N = 900$. O gráfico compara o grau de localização dos autovetores em função do índice do modo para diferentes conectividades m . A linha tracejada indica o limite teórico de espalhamento total ($1/N$).



Fonte: Elaboração própria (2025).

concordância com o aumento do grau máximo de redes BA maiores.

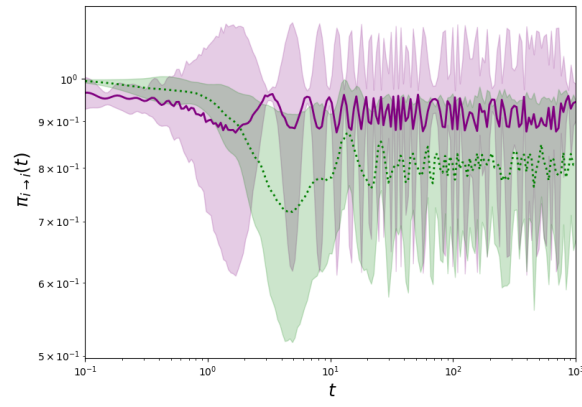
A coerência interna entre IPR, densidade de estados e as métricas topológicas ($\langle k \rangle$, D , L_{avg} e r) reforça a interpretação de que os modos localizados identificados são consequência da heterogeneidade da rede. A forte correlação entre picos de IPR e regiões espectrais associadas a autovalores altos indica que esses modos concentram sua amplitude em vértices cujo grau é superior ao da média.

4.4.1 Análise do Comportamento Dinâmico

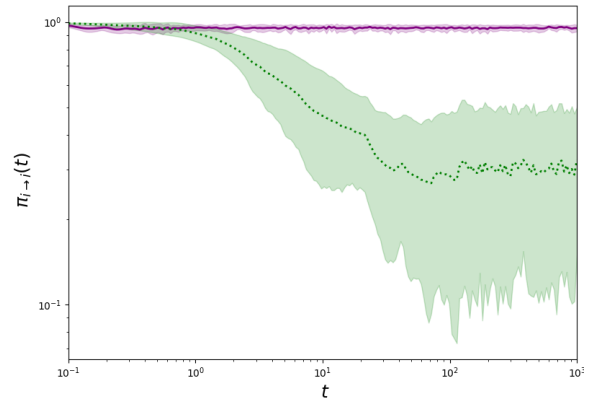
A comparação entre as probabilidades de retorno local $\pi_{ii}(t)$ nos nós de maior e menor grau revela como a topologia de BA modula a dinâmica quântica coerente. Os gráficos obtidos na **Figura 12** para as três conectividades mínimas e para ambos os tamanhos de rede exibem uma estrutura que destaca a influência da heterogeneidade de grau na localização das amplitudes quânticas.

O que vemos é a evolução temporal da probabilidade de retorno local $\pi_{ii}(t)$ para vértices topologicamente distintos, um nó de alto grau (*Hub*) e, um nó periférico de baixo grau (*Leaf*). A comparação direta entre essas curvas permite uma leitura detalhada de como a estrutura local da rede atua como um interferômetro para a função de onda, evidenciando regimes de confinamento, transição e espalhamento à medida que o parâmetro de conectividade mínima m é aumentado.

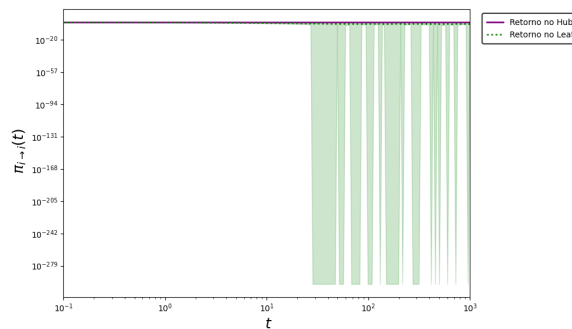
Figura 12 – Comparação da probabilidade de retorno local $\pi_{ii}(t)$ entre o nó central (*Hub*, roxo) e um nó periférico (*Leaf*, verde) para redes grandes com $N = 900$. (a) Para $m = 1$, observa-se localização forte e global, com ambos permanecendo altos. (b) Para $m = 2$, surge localização seletiva: o *Leaf* decai enquanto o *Hub* permanece saturado em ≈ 1 , atuando como armadilha dinâmica. (c) Para $m = 4$, a alta conectividade permite o espalhamento completo, com ambas as curvas decaindo para valores residuais.



(a) *Árvore* ($m = 1$)



(b) *Livre de escala* ($m = 2$)



(c) *Densa* ($m = 4$)

Fonte: Elaboração própria (2025).

4.4.1.1 Regime arborizado ($m = 1$).

Observa-se que ambas as curvas, permanecem em níveis elevados de probabilidade de retorno ao longo de todo o intervalo temporal, exibindo oscilações intensas e persistentes. Visualmente, a curva do *Hub* raramente desce abaixo de $\pi_{ii}(t) \sim 10^{-1}$, enquanto o *Leaf*, após um decaimento transiente, apresenta sucessivos picos de recorrência.

Fisicamente, o que temos é um **retroespalhamento coerente**. A topologia de árvore impõe a existência de inúmeras ramificações sem saídas topológicas. Quando a frente de onda do caminhante atinge uma dessas extremidades, ela sofre reflexão total. Uma vez que a onda refletida interage com a componente incidente e, devido à simetria das conexões no *Hub*, ocorre interferência destrutiva no centro. Isso impede que a probabilidade flua para o restante da rede, criando ondas estacionárias (modos localizados) que ficam reverberando entre o centro e as folhas. O caminhante não está apenas lento, ele está quanticamente aprisionado em uma cavidade

criada pela geometria, oscilando perpetuamente em superposições de estados degenerados, sem acessar os modos estendidos de transporte.

4.4.1.2 Regime intermediário ($m = 2$).

Para $m = 2$, o contraste visual entre as curvas torna-se gritante, revelando uma ruptura de simetria dinâmica. A curva do *Leaf* inicia um decaimento progressivo, indicando que a onda encontrou rotas de fuga. Em contrapartida, a curva do *Hub* permanece saturada em um valor próximo da unidade, comportando-se como uma armadilha.

Neste regime de localização seletiva, a introdução de laços permite que a excitação na periferia fuja para a rede. Contudo, o *Hub* atua como um poço de potencial atrativo. Devido à sua alta conectividade, ele sustenta modos de alta energia que são espacialmente compactos. A coerência de fase ao redor do nó central faz com que a amplitude de probabilidade gire localmente, reentrando no *Hub* antes de conseguir se difundir. Enquanto a periferia experimenta um transporte difusivo, o centro permanece congelado em um estado quântico, ilustrando como a heterogeneidade da rede pode desacoplar dinamicamente regiões distintas do grafo.

4.4.1.3 Regime denso ($m = 4$).

No regime de alta conectividade, a dinâmica sofre uma transição de fase completa. Tanto o *Hub* quanto o *Leaf* apresentam um decaimento rápido, sincronizado e suave da probabilidade de retorno, estabilizando-se em valores residuais. As oscilações violentas desaparecem, dando lugar a um perfil de relaxação. A rede agora opera como um interferômetro de múltiplos caminhos, visto que a abundância de ciclos garante que, para cada rota bloqueada, existam caminhos alternativos onde a interferência é construtiva na direção de propagação.

Ao atingir o *Hub*, a frente de onda incidente não é refletida, mas sim fracionada em múltiplas componentes que se acoplam simultaneamente a todos os ramos conectados, isto é, a onda se espalha por toda a rede sem interferências. Diferente do regime de árvore, onde essas componentes retornariam com fases opostas, aqui os laços permitem que as ondas parciais circulem e se afastem do centro, mantendo uma coerência de fase que estende a amplitude para o resto da rede. Portanto, a onda incidente não é mais forçada a refletir sobre si mesma, ela se divide, contorna obstáculos e se recombina adiante, propagando-se de forma super-difusiva.

O espectro do Laplaciano, agora dominado por modos estendidos, permite que o *Hub* atue como um eficiente centro de redistribuição, espalhando a informação como um todo. A topologia densa dissolve as armadilhas de interferência locais e quebra as simetrias que sustentavam a localização, transformando a rede em um condutor quântico ideal.

4.5 Eficiência do Transporte Quântico

A análise do transporte quântico é apresentada por meio da quantidade espectral $\bar{\chi}$ na **Figura 13**, que corresponde ao limite de longo tempo da probabilidade média de retorno. Para

contextualizar esse resultado, a quantidade de referência $\bar{\chi}^*$, calculada a partir da degenerescência dos autovalores, é incluída como termo de comparação. A diferença $\bar{\chi} - \bar{\chi}^*$ quantifica a parcela do retorno associada à verdadeira localização dinâmica, i.e., à permanência de amplitudes em regimes não explicáveis apenas pela estrutura degenerada do espectro.

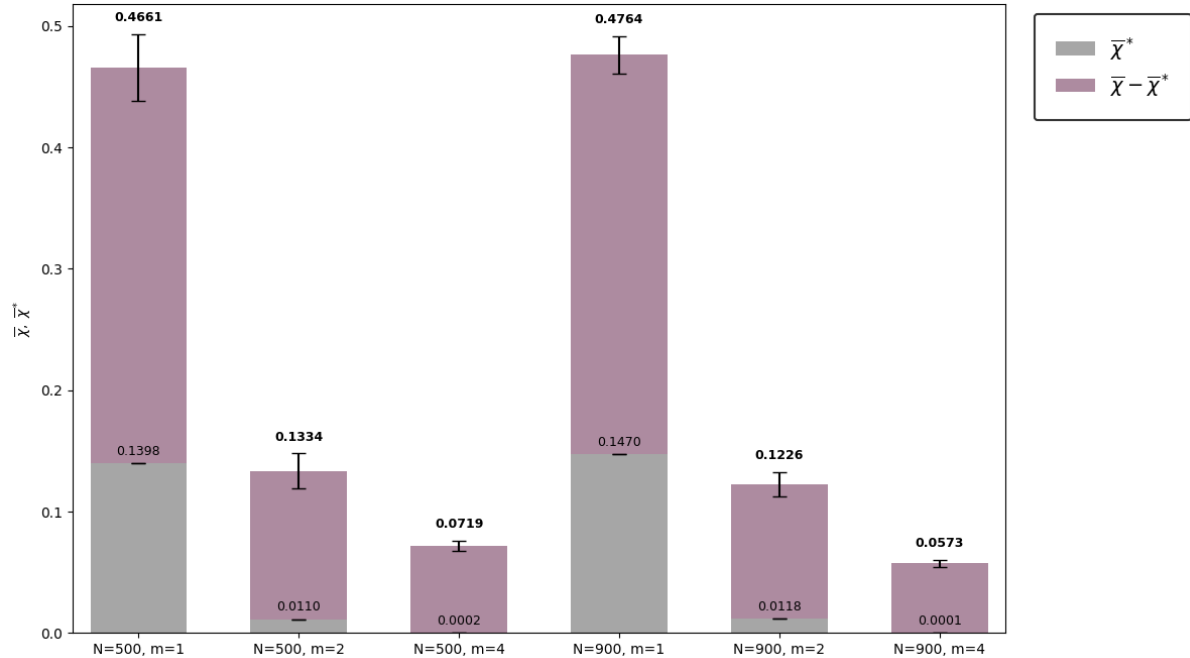
Os valores apresentados mostram que $\bar{\chi}^*$ é pequeno e varia pouco entre as diferentes conectividades, isto nos diz que a fração do retorno atribuída à degenerescência espectral é modesta. De modo geral, as famílias degeneradas de autovalores contribuem pouco para o aprisionamento das amplitudes, e que a maior parcela da ineficiência observada decorre de mecanismos genuínos de localização induzidos pela topologia heterogênea da rede.

Para $m = 1$, observa-se o regime de localização mais acentuado, ou seja, a quantidade $\bar{\chi}$ assume os maiores valores entre todos os casos analisados, com amplitude superior à referência degenerada. Esse resultado é coerente com o comportamento temporal das curvas de retorno, nas quais ambas as topologias de nó apresentaram probabilidade elevada de recorrência e amortecimento lento das oscilações. Em razão disto, o valor elevado de $\bar{\chi} - \bar{\chi}^*$ constitui a evidência direta de que a localização é intrinsecamente dinâmica e não simplesmente espectral.

Ao aumentar a conectividade para $m = 2$, ocorre uma redução da eficiência de retenção. O valor de $\bar{\chi}$ diminui de modo monotônico, aproximando-se de um regime mais intermediário entre localização e difusão. Esse comportamento está de acordo com a suavização observada tanto na distribuição de autovalores (DOS) quanto nas curvas de IPR, uma vez que a presença de caminhos redundantes suaviza os modos e aumenta a contribuição dos modos estendidos. Numericamente, essa mudança se reflete em uma queda na parcela dinâmica $\bar{\chi} - \bar{\chi}^*$, indicada pela coluna colorida no gráfico.

O caso $m = 4$ apresenta a situação mais eficiente dentre aquelas avaliadas. Ainda que a diferença $\bar{\chi} - \bar{\chi}^*$ permaneça distinta de zero, indicando que o transporte ainda está distante de um regime difusivo ideal, nota-se que a altura total das barras diminui e aproxima-se de valores menores do que nos cenários de conectividade reduzida, concordando com o comportamento dos autovetores, para os quais o IPR torna-se mais homogêneo e próximo do limite $1/N$, sinalizando que a rede passa a suportar uma proporção maior de modos estendidos. A DOS normalizada mostra, para esse regime, uma curva mais suave e menos concentrada em picos, o que é compatível com um espectro mais dispersivo. Portanto, podemos sintetizar os resultados, temos uma elevada localização quântica para topologias pouco conectadas, uma diminuição gradual da retenção à medida que a conectividade aumenta, uma dominância da localização dinâmica sobre a degenerescência espectral e a fraca dependência com o tamanho da rede. Nota-se, analiticamente, que as redes livres de escala são estruturalmente ineficientes para o transporte quântico coerente.

Figura 13 – Eficiência assintótica do transporte quântico em função da topologia. As barras representam a probabilidade média de retorno de longo prazo ($\bar{\chi}$) e seu limite inferior teórico ($\bar{\chi}^*$). A altura total da barra quantifica a ineficiência. A porção azul escura ($\bar{\chi} - \bar{\chi}^*$) isola a contribuição da localização dos autovetores, demonstrando que este é o fator dominante na supressão do transporte.



Fonte: Elaboração própria (2025).

4.6 Invariância de Escala e Quebra de Autossimilaridade

Comparamos os resultados da dinâmica escalonando a rede, as simulações foram estendidas para redes de $N = 2000$ nós, utilizando um *ensemble* de 100 repetições. A **Figura 14** compara novamente a dinâmica temporal através de diferentes ordens de magnitude, dessa vez para escala menor $N = 200$ e muito maior $N = 2000$.

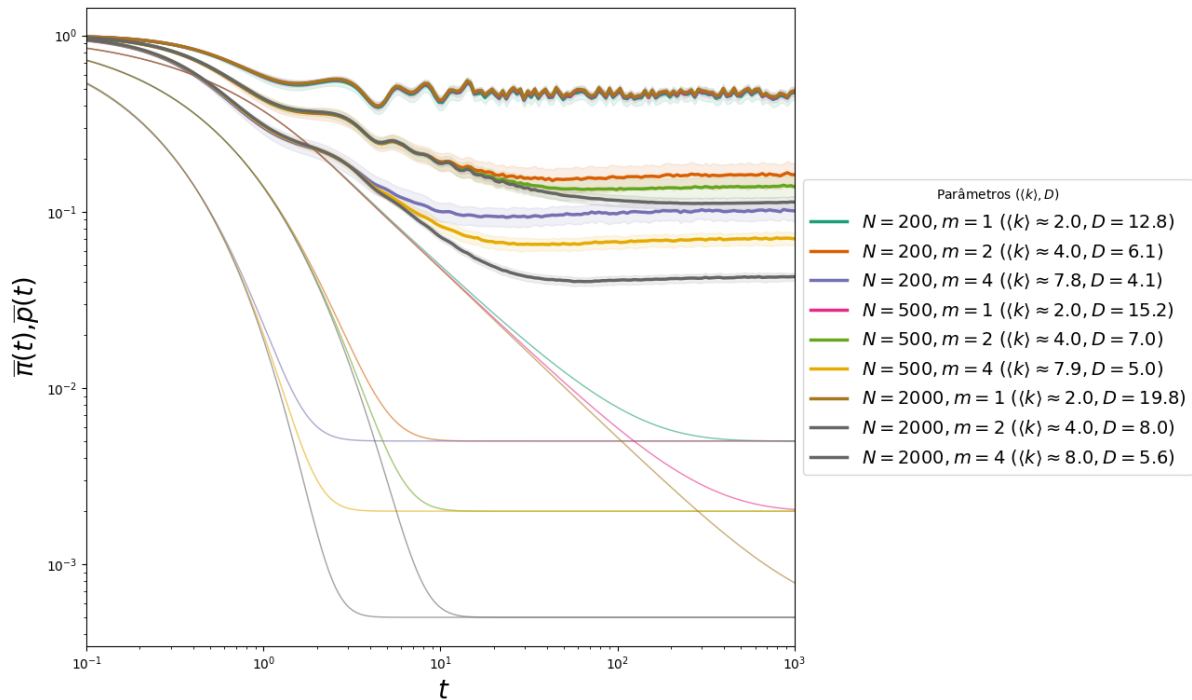
4.6.1 Dinâmica Temporal da Probabilidade de Retorno

A comparação com $N = 2000$ permitiu testar os limites do confinamento espacial da função de onda.

Para topologias esparsas, a sobreposição das curvas de retorno para $N = 200$, $N = 500$ e $N = 2000$ é quase perfeita. O $\bar{\pi}(t)$ parece permanecer travado (≈ 0.47) independentemente de N , o que pode indicar que o comprimento de localização da excitação é bem curto, vide **Figura 14**. Ou seja, pacote de ondas exploram apenas uma vizinhança finita ao redor do nó de origem antes de entrar em um estado estacionário. O aumento do diâmetro da rede (de $D \approx 13$ para $D \approx 20$) é, portanto, irrelevante para a dinâmica, dado que a excitação jamais alcança as fronteiras do sistema.

Entretanto, no regime de maior conectividade ($m = 4$), observa-se uma estratificação das

Figura 14 – Dinâmica de transporte comparativa para $N = 200, 500$ e 2000 . Observa-se uma notável sobreposição das curvas para um mesmo valor de conectividade m .



Fonte: Elaboração própria (2025).

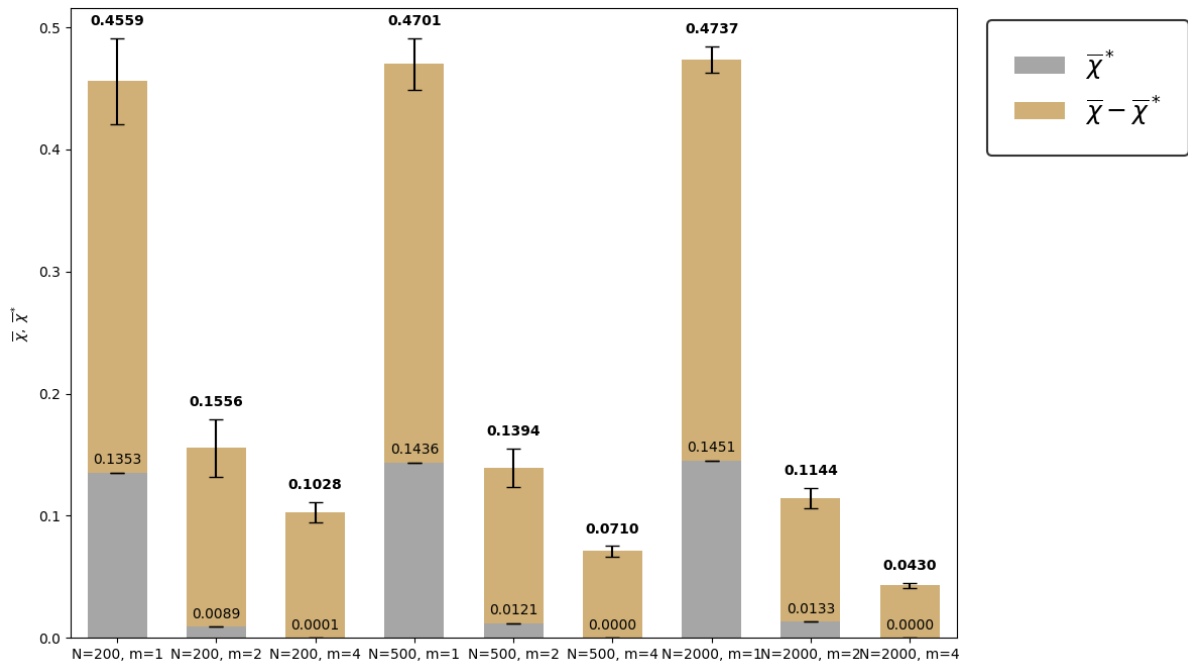
curvas de retorno em função do tamanho. A curva para $N = 2000$ estabiliza-se inferiormente em comparação com as redes menores. Neste caso, o caminhante torna-se capaz de perceber o aumento do espaço de fases. Todavia, a estabilização em valores não nulos (≈ 0.04) reitera que, mesmo com maior liberdade de propagação, o transporte è barrado pela atração dos grandes *hubs*. A sobreposição das curvas mostra que ocorre aprisionamento da função de onda e isto não diminui com o crescimento da rede. Para quantificar essa persistência, podemos analisar a eficiência assintótica na Figura 15.

4.7 Análise da Eficiência de Transporte para $N = 2000$

A extensão das simulações para redes de $N = 2000$ nos revelou uma dicotomia no comportamento da eficiência de transporte, evidenciando que a resposta do sistema ao aumento de escala depende da sua conectividade, estritamente.

Ao analisarmos a probabilidade média de retorno $\bar{\chi}$ na **Figura 15**, observamos que redes esparsas e densas divergem em sua sensibilidade ao volume total do sistema. Topologias esparsas ($m = 1$), os resultados demonstram uma estagnação. O valor de $\bar{\chi}$ permanece fixo em aproximadamente 0.47, inalterado em relação aos resultados obtidos para $N = 500$. Isso evidencia alguma invariância de escala, onde o aprisionamento da função de onda è ditado por armadilhas topológicas locais.

Figura 15 – Comparação da eficiência de transporte assintótica ($\bar{\chi}$) e do limite de degenerescência ($\bar{\chi}^*$). A localização dinâmica permanece constante para $m = 1$ mesmo ao quadruplicar a dimensão do sistema (de $N = 500$ para $N = 2000$), enquanto para $m = 4$ observa-se comportamento distinto.



Fonte: Elaboração própria (2025).

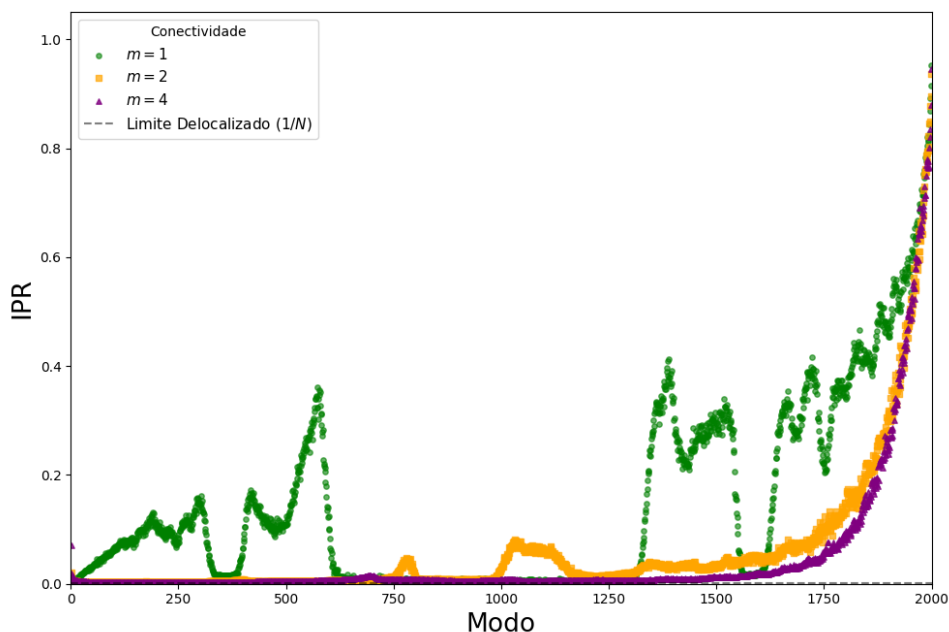
Em contraste, para redes mais densas ($m = 4$), observa-se um ganho de eficiência com a expansão da rede. A ineficiência $\bar{\chi}$ sofre uma redução de aproximadamente 40%, caindo de ≈ 0.071 (para $N = 500$) para ≈ 0.043 (para $N = 2000$). Essa sensibilidade ao tamanho do sistema indica que a multiplicidade de ciclos rompe parcialmente o confinamento, permitindo que o pacote de ondas explore um certo volume. Contudo, embora o transporte se torne mais eficiente, o sistema ainda opera longe do regime difusivo, visto que o valor da eficiência é duas ordens de magnitude superior ao limite clássico de $1/N = 0.0005$.

4.8 Análise de IPR

A análise do IPR para $N = 2000$ nos mostra que o mecanismo de aprisionamento se intensifica nas extremidades do espectro. O grau do vértice mais conectado (k_{max}) cresce com o tamanho da rede ($k_{max} \sim N^{1/2}$). Como consequência, podemos ver que os *hubs* tornam-se poços de potencial ainda mais profundos.

Observa-se na **Figura 16** que, para $m = 1$, os modos de maior frequência atingem IPR ≈ 1.0 , correspondendo a estados onde a excitação reside em um único sítio. Isso nos remete que o aumento do tamanho da rede não dilui a localização, mas ele gera defeitos topológicos capazes de encadear a função de onda. Mesmo para redes densas, a cauda de alta energia apresenta uma subida acentuada, mostrando que a dispersão total é impedida pela estrutura hierárquica da distribuição de graus.

Figura 16 – Localização dos modos de energia para $N = 2000$. Para $m = 1$, os modos de alta energia exibem valores de IPR próximos da unidade, indicando confinamento total nos vértices isolados.



Fonte: Elaboração própria (2025).

Para $m = 1$, os dados revelam que os modos de alta energia atingem valores de $IPR \approx 1.0$. Isso nos diz que há um confinamento total, ou seja, a excitação associada a esses modos reside em um único sítio da rede. O aumento da escala do sistema não diluiu a função de onda, mas permitiu a existência de defeitos topológicos que ancoram a energia com eficiência. Isso deve explicar por que a probabilidade de retorno $\bar{\pi}(t)$ não diminuiu, em outras palavras, as armadilhas locais tornaram-se mais fortes à medida que a rede cresceu.

Para o regime denso ($m = 4$), o IPR oferece a justificativa para a "eficiência imperfeita" discutida anteriormente. Embora a maior parte do espectro apresente valores baixos de IPR, a cauda de alta energia ainda exibe uma subida acentuada. Isso demonstra que, mesmo muitos ciclos facilitando o transporte, os modos de maior frequência permanecem encadeados pelos *hubs*, impedindo que o sistema atinja o regime de deslocalização. A análise do Índice de Participação Inversa (IPR) revela como a conectividade mínima m das redes de Barabási–Albert influencia a localização dos modos normais e, portanto, a capacidade da rede de aprisionar ou espalhar a dinâmica quântica. No caso $m = 1$, a rede resultante é uma árvore altamente heterogênea, composta por um único *hub* dominante e longas cadeias de vértices terminais. A ausência de ciclos e a forte assimetria estrutural criam gargalos topológicos que favorecem a concentração dos autovetores em regiões específicas da rede, especialmente em folhas e no próprio *hub*. Como consequência, a distribuição do IPR apresenta valores elevados e uma cauda longa, indicando a presença de modos fortemente localizados.

Ao aumentarmos para $m = 2$, a rede passa a possuir ciclos e caminhos alternativos, o que reduz o confinamento topológico observado no caso anterior. A conectividade adicional

permite que a amplitude quântica escape com mais facilidade das regiões altamente conectadas e se redistribua ao longo de múltiplas rotas. Nesse regime, a estrutura espectral torna-se menos fragmentada e os autovetores apresentam suporte mais amplo, produzindo valores intermediários de IPR e evidenciando uma diminuição gradual da localização.

Quando atingimos $m = 4$, a rede torna-se consideravelmente mais densa e compacta, apresentando múltiplas redundâncias estruturais e um diâmetro reduzido. A alta conectividade enfraquece de forma decisiva o aprisionamento puramente topológico, levando ao surgimento predominante de modos estendidos. A distribuição do IPR colapsa para valores muito menores quando comparada aos casos anteriores, refletindo autovetores que ocupam porções amplas da rede. Nesse limite, o comportamento aproxima-se do de sistemas quase homogêneos, nos quais o espalhamento é eficiente e o confinamento é suprimido.

Assim, o parâmetro m atua como um controlador fino da transição entre regimes localizados e estendidos. Redes muito esparsas produzem modos altamente confinados, redes intermediárias apresentam um equilíbrio entre localização e espalhamento, enquanto redes densas sustentam modos praticamente estendidos. Essa dependência direta entre topologia e localização espectral demonstra que o IPR é uma ferramenta sensível para representar como a estrutura livre de escala molda o comportamento quântico sobre grafos complexos.

5 CONCLUSÃO

Infere-se, portanto, que existe uma conexão entre a topologia de redes e a dinâmica de excitações bosônicas descritas via caminhadas quânticas contínuas. Ao modelar a geometria do espaço como uma Rede Livre de Escala do tipo Barabási–Albert e ao descrever o campo por meio de modos normais, demonstrou-se que a estrutura discreta atua como um agente na modulação do transporte quântico. A análise integrada das propriedades topológicas, espectrais e dinâmicas confirmou, de forma quantitativa, que a heterogeneidade estrutural induz regimes persistentes de localização, em plena concordância com a literatura (MÜLKEN; BLUMEN, 2011; GOH *et al.*, 2001; BARABÁSI; ALBERT, 1999).

As propriedades estruturais das redes reproduziram as características previstas pelo modelo BA. A distribuição de graus seguiu a lei de potência $P(k) \sim k^{-3}$, evidenciando a presença de *hubs* mesmo para redes de tamanho maior ($N = 900$). Redes com $m = 1$ assumem geometria arborizada, caracterizadas por diâmetros elevados e ausência de ciclos, o que restringe a comunicação entre regiões distantes e favorece regimes de localização extrema. Com $m \geq 2$, observa-se a transição para estruturas do tipo mundo pequeno, nas quais a introdução de ciclos reduz drasticamente a distância média e o diâmetro, promovendo redundância de caminhos e facilitando a dispersão quântica. A assortatividade negativa persistente reforça a organização hierárquica de redes dissortativas, nas quais *hubs* se conectam predominantemente a vértices de baixo grau (NEWMAN, 2010).

Do ponto de vista espectral, a densidade de estados evidencia diferenças qualitativas entre topologias. Para redes do tipo árvore ($m = 1$), observam-se picos degenerados e singularidades estreitas associadas a modos ancorados em subestruturas simétricas, induzindo armadilhas topológicas que dificultam a propagação das caminhadas quânticas. À medida que a conectividade aumenta, a introdução de ciclos rompe essas simetrias e conduz a uma DOS mais suave e contínua, compatível com redes altamente heterogêneas. Essa transição espectral se alinha diretamente com o comportamento do IPR. Dessarte, os modos de maior energia são fortemente localizados, predominando em folhas da rede, enquanto a fração de modos estendidos aumenta para redes mais densas.

Redes em regime $m = 1$ exibem localização global extrema, com probabilidades de retorno saturadas e oscilações persistentes, evidenciando a ausência de caminhos e a supressão da interferência destrutiva. Para $m = 2$, surge um regime de localização seletiva, no qual os *hubs* funcionam como centros de retenção dinâmica, enquanto vértices periféricos apresentam dispersão parcial. Em redes densas ($m = 4$), a multiplicidade de trajetórias favorece interferência destrutiva, aproximando a dinâmica do regime difusivo e reduzindo a saturação assintótica.

Isto posto, a consistência entre métricas estruturais, DOS, IPR e análise dinâmica reforça a interpretação de que a heterogeneidade intrínseca das redes BA controla a dinâmica quântica. A fraca dependência com o tamanho da rede, observada para $N = 500$ e $N = 900$, confirma que os mecanismos de localização são intrínsecos à topologia e não ao número de vértices. Por

fim, a análise da eficiência de transporte assintótica $\bar{\chi}$ mostrou que a maior parte da ineficiência em redes esparsas decorre de efeitos de localização dinâmica e não apenas de degenerescência espectral.

Os resultados também fornecem uma interpretação física sugerindo que a topologia atua como um mecanismo gerador de massa efetiva para o campo, de forma análoga. Em redes esparsas, a irregularidade estrutural se comporta como um potencial confinante, produzindo excitações pesadas e bem localizadas. Em contrapartida, redes densamente conectadas restauram o comportamento típico de campos leves ou não massivos, permitindo propagação eficiente e coerência distribuída. Esta condição impõe restrições a modelos discretos de espaço-tempo, como *Causal Sets* ou *Loop Quantum Gravity*, nos quais estruturas excessivamente esparsas não reproduzem a propagação de campos livres (JOHNSTON, 2009; ROVELLI, 2004).

Nesse quadro, a saturação elevada da probabilidade de retorno observada para $m = 1$ e $m = 2$ indica que a energia vibracional permanece confinada a um pequeno subconjunto de osciladores. A rede, apesar de grande, não distribui a excitação pelo sistema os modos normais associados aos *hubs* e às folhas formam estruturas quase ressonantes que retêm a amplitude de probabilidade. Esse comportamento equivale, do ponto de vista físico, a um conjunto de cavidades ópticas acopladas de modo desigual, onde certas regiões funcionam como cavidades de alto fator Q , aprisionando fótons, por exemplo.

Por outro lado, para $m = 4$, o aumento do tamanho da rede reduz tanto a probabilidade de retorno quanto a ineficiência χ , e tal redução é acompanhada pelo decréscimo do IPR dos modos extremos. Em um espaço-tempo contínuo e homogêneo, o propagador de Feynman tende a zero em tempos longos, mostrando a propagação livre da partícula. Todavia, os resultados obtidos revelam um limite assintótico finito para $\bar{\pi}(t)$ e valores altos de ineficiência χ nas topologias esparsas. Esse resultado pode induzir a um potencial confinante inerente a topologia da rede, que quebra a simetria de translação e impede a dispersão completa da excitação.

Em termos fotônicos, a presença de ciclos e acoplamentos fornece mais trajetórias que permitem que a luz escape das regiões de aprisionamento topológico. Em outras palavras, o propagador passa a se aproximar, ainda que de forma incompleta, do comportamento de um campo mais leve, cuja massa efetiva diminui com o aumento de N . Concisamente, ao escalonarmos o fator N , vemos que as redes mais esparsas permanecem localizadas fixamente e, as redes mais densas exibem um regime intermediário, no qual o transporte torna -se mais eficiente.

REFERÊNCIAS

- AGLIARI, E. Dynamics of continuous-time quantum walks in restricted geometries. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 387, n. 5–6, p. 1229–1237, 2008.
- AGUIAR, M. A. M. de; BAR-YAM, Y. Spectral analysis and the dynamic response of complex networks. **Physical Review E**, APS, v. 71, n. 1, p. 016106, 2005.
- ALBERT, R. *et al.* Internet: Diameter of the world-wide web. **Nature (London)**, v. 401, p. 130, 1999.
- ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Solid State Physics**. Philadelphia: Saunders College Publishing, 1976.
- BARABÁSI, A.-L.; ALBERT, R. Emergence of scaling in random networks. **Science**, v. 286, n. 5439, p. 509–512, 1999.
- BARRAT, A. *et al.* **Dynamical processes on complex networks**. [S.l.]: Cambridge university press, 2008.
- BELLENGERI, M.; BODINI, A. Food web's backbones and energy delivery in ecosystems. **Oikos**, v. 125, p. 586, 2016.
- BOLLOBÁS, B. e. *et al.* The degree sequence of a scale-free random graph process. **Random Structures & Algorithms**, Wiley Online Library, v. 18, n. 3, p. 279–290, 2001.
- BONA, A. A. D. *et al.* Analysis of public bus transportation of a brazilian city based on the theory of complex networks using the p-space. **Mathematical Problems in Engineering**, v. 2016, p. 3898762, 2016.
- BURIONI, R.; CASSI, D. Universal properties of spectral dimension. **Physical Review Letters**, v. 82, n. 7, p. 148–151, 1999.
- BURIONI, R.; CASSI, D. Spectral dimension of fractal networks. **Physical Review Letters**, v. 84, n. 20, p. 475–478, 2000.
- CAYLEY, A. Xxviii. on the theory of the analytical forms called trees. **The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science**, Taylor & Francis, v. 13, n. 85, p. 172–176, 1857.
- CAYLEY, A. A theorem on trees. **The Quarterly Journal of Pure and Applied Mathematics**, v. 23, p. 376–378, 1889.
- COZZO, E. *et al.* **Multiplex Networks: Basic Formalism and Structural Properties**. 1. ed. [S.l.]: Springer, 2018.
- DOROGOVTSEV, S. N. *et al.* Critical phenomena in complex networks. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 80, n. 4, p. 1275–1335, 2008.
- DOROGOVTSEV, S. N.; MENDES, J. F. F. **Evolution of Networks: From Biological Nets to the Internet and WWW**. [S.l.]: Oxford University Press, 2003.
- ERDŐS, P.; RÉNYI, A. On random graphs i. **Publicationes Mathematicae**, v. 6, p. 290–297, 1959.

- ERDŐS, P.; RÉNYI, A. On the evolution of random graphs. **Publ. Math. Inst. Hungar. Acad. Sci.**, v. 5, p. 17–61, 1960.
- ESTRADA, E. **The structure of networks**. [S.l.]: Oxford University Press, 2016.
- EULER, L. Solutio problematis ad geometriam situs pertinentis. **Commentarii Academiae Scientiarum Petropolitanae**, v. 8, p. 128–140, 1736. Reimpresso em Opera Omnia, Series I, Volume 7.
- FARHI, E.; GUTMANN, S. Quantum computation and decision trees. **Physical Review A**, APS, v. 58, n. 2, p. 915–928, 1998.
- GALICEANU, M. Continuous-time quantum walks on complex networks: Spectral properties and transport efficiency. **Physical Review E**, APS, v. 93, n. 3, p. 032402, 2016.
- GALICEANU, M.; STRUNZ, W. T. Continuous-time quantum walks on multilayer dendrimer networks. **Phys. Rev. E**, v. 94, p. 022307, 2016.
- GOH, K.-I. *et al.* Spectra and eigenvectors of scale-free networks. **Physical Review E**, APS, v. 64, n. 5, p. 051903, 2001.
- GOLDSTEIN, H. *et al.* **Classical Mechanics**. 3. ed. San Francisco: Addison-Wesley, 2002.
- HUBERMAN, B. A.; ADAMIC, L. A. Internet: Growth dynamics of the world-wide web. **Nature (London)**, v. 401, p. 131, 1999.
- JEONG, H. *et al.* The large-scale organization of metabolic networks. **Nature**, v. 407, p. 651, 2000.
- JOHNSTON, S. Feynman propagator for a free scalar field on a causal set. **Physical Review Letters**, APS, v. 103, n. 18, p. 180401, 2009.
- KITTEL, C. **Introduction to Solid State Physics**. 8. ed. New York: John Wiley & Sons, 2005.
- KIVELA, M. *et al.* Multilayer networks. **Journal of Complex Networks**, v. 2, p. 203, 2014.
- KOLMOGOROV, A. Über die analytischen methoden in der wahrscheinlichkeitsrechnung. **Mathematische Annalen**, v. 104, p. 415–458, 1931.
- LAGRANGE, J.-L. **Nouvelle Méchanique Analytique**. [S.l.]: Imprimerie Royale, 1772.
- LAGRANGE, J.-L. **Théorie des fonctions analytiques**. [S.l.]: Didot, 1788.
- LEMOS, N. A. **Mecânica Analítica**. 2. ed. São Paulo: Livraria da Física, 2007.
- MACIEL, C. M. *et al.* Quantum transport on generalized scale-free networks. **Physical Review A**, APS, v. 102, n. 3, p. 032219, 2020.
- MANDL, F.; SHAW, G. **Quantum Field Theory**. 2. ed. Chichester: Wiley, 2010.
- MONTVAY, I.; MÜNSTER, G. **Quantum Fields on a Lattice**. [S.l.]: Cambridge University Press, 1994.
- MUKAI, K.; HATANNO, N. Discrete-time quantum walk on complex networks for community detection. **Physical Review E**, APS, v. 102, n. 6, p. 062302, 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, 2011.
- NEWMAN, M. Scientific collaboration networks. i. network construction and fundamental results. **Phys. Rev. E**, v. 64, p. 016131, 2001.
- NEWMAN, M. E. J. **Networks: An Introduction**. [S.l.]: Oxford University Press, 2010.
- OZAWA, T. *et al.* Topological photonics. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 91, n. 1, p. 015006, 2019.
- PEREIRA, R. G.; MIRANDA, E. Introdução à teoria quântica de campos: do oscilador harmônico ao campo escalar livre. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, SciELO Brasil, v. 24, p. 237–246, 2002.
- PESKIN, M. E.; SCHROEDER, D. V. **An Introduction to Quantum Field Theory**. Boulder: Westview Press, 1995.
- RAMMAL, R. Random walks on fractal structures. **Journal de Physique**, v. 44, p. 131–147, 1983.
- ROTHER, H. J. **Lattice Gauge Theories: An Introduction**. 4. ed. [S.l.]: World Scientific, 2012. (World Scientific Lecture Notes in Physics).
- ROVELLI, C. **Quantum Gravity**. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
- RYDER, L. H. **Quantum Field Theory**. 2. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1996.
- SCHWARTZ, M. D. **Quantum Field Theory and the Standard Model**. Cambridge: Cambridge University Press, 2014.
- SIMON, H. A. On a class of skew distribution functions. **Biometrika**, v. 42, n. 3–4, p. 425–440, 1955.
- STEWART, W. J. **Probability, Markov chains, queues and simulation: the mathematical basis of performance modeling**. 1. ed. [S.l.]: Princeton University Press, 2009.
- SURYA, S. The causal set approach to quantum gravity. **Living Reviews in Relativity**, Springer, v. 22, n. 1, p. 5, 2019.
- WATTS, D. J.; STROGATZ, S. H. Collective dynamics of ‘small-world’ networks. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 393, n. 6684, p. 440–442, 1998.
- WEINBERG, S. **The Quantum Theory of Fields, Volume II: Modern Applications**. Cambridge: Cambridge University Press, 1996.
- WEISS, G. H. **Aspects and Applications of the Random Walk**. [S.l.]: North Holland, 1994.
- WILSON, K. G. Confinement of quarks. **Physical Review D**, v. 10, n. 8, p. 2445–2459, 1974.
- ZEE, A. **Quantum Field Theory in a Nutshell**. 2. ed. Princeton: Princeton University Press, 2010.

APÊNDICE

Observa-se uma redução no Diâmetro e no Caminho Médio ao variar a conectividade mínima. Especificamente para redes com $N = 500$, o diâmetro sofre uma contração de aproximadamente 69%, caindo de 16.25 ± 1.42 em $m = 1$ para 5.00 ± 0.00 em $m = 4$. Este último caso destaca-se pela estabilidade, eliminando a variância estatística do diâmetro, o que indica que o aumento da densidade de arestas atua como um fator homogeneizador das distâncias geodésicas.

Tabela 1 – Métricas topológicas médias das redes geradas (50 realizações).

Configuração	Grau Médio $\langle k \rangle$	Diâmetro D	Caminho Médio L_{avg}	Assortatividade r
BA ($N = 500, m = 1$)	2.00 ± 0.00	16.25 ± 1.42	6.45 ± 0.40	-0.159 ± 0.024
BA ($N = 500, m = 2$)	3.98 ± 0.00	6.92 ± 0.28	3.81 ± 0.06	-0.115 ± 0.011
BA ($N = 500, m = 4$)	7.94 ± 0.00	5.00 ± 0.00	2.95 ± 0.03	-0.085 ± 0.017
BA ($N = 900, m = 1$)	2.00 ± 0.00	17.00 ± 1.91	6.97 ± 0.68	-0.145 ± 0.029
BA ($N = 900, m = 2$)	3.99 ± 0.00	7.17 ± 0.37	4.03 ± 0.05	-0.092 ± 0.014
BA ($N = 900, m = 4$)	7.96 ± 0.00	5.00 ± 0.00	3.16 ± 0.02	-0.063 ± 0.010

Fonte: Elaboração própria (2025).

Tabela 2 – Métricas topológicas médias das redes geradas (100 realizações).

Configuração	Grau Médio $\langle k \rangle$	Diâmetro D	Caminho Médio L_{avg}	Assortatividade r
BA ($N = 200, m = 1$)	1.99 ± 0.00	12.74 ± 1.57	5.43 ± 0.47	-0.201 ± 0.041
BA ($N = 200, m = 2$)	3.96 ± 0.00	6.08 ± 0.27	3.37 ± 0.07	-0.153 ± 0.036
BA ($N = 200, m = 4$)	7.84 ± 0.00	4.12 ± 0.32	2.63 ± 0.02	-0.106 ± 0.023
BA ($N = 500, m = 1$)	2.00 ± 0.00	15.22 ± 1.72	6.27 ± 0.50	-0.159 ± 0.029
BA ($N = 500, m = 2$)	3.98 ± 0.00	6.98 ± 0.14	3.77 ± 0.06	-0.119 ± 0.021
BA ($N = 500, m = 4$)	7.94 ± 0.00	5.00 ± 0.00	2.94 ± 0.03	-0.081 ± 0.015
BA ($N = 2000, m = 1$)	2.00 ± 0.00	19.51 ± 1.82	7.63 ± 0.48	-0.100 ± 0.020
BA ($N = 2000, m = 2$)	4.00 ± 0.00	7.99 ± 0.10	4.37 ± 0.06	-0.077 ± 0.010
BA ($N = 2000, m = 4$)	7.98 ± 0.00	5.56 ± 0.50	3.41 ± 0.02	-0.053 ± 0.007

Fonte: Elaboração própria (2025).

Em contrapartida, as redes esparsas ($m = 1$) apresentam maior volatilidade, evidenciada pelos maiores desvios-padrão. Quanto à assortatividade (r), os valores permanecem negativos em todos os cenários, mas exibem uma tendência numérica de aproximação do zero à medida que o sistema cresce. Ao comparar $N = 200$ e $N = 2000$ para $m = 1$, a magnitude da correlação negativa reduz-se em 50%, acompanhada por uma redução no desvio-padrão.