الـجمهورية الـجزائـرية الديـمقراطية الشعبية

وزارة التعليـم العالي و البحث العلمي

جامعة العربـي تبسي _ تبسة _

كـلية العلوم الدقيقة وعلوم الطبيعة و الـحياة

قسـم : علوم الـمادة

مذكـرة تـخرج لنيل شـهادة ماستـر

الـميدان : علوم الـمادة

الشعبة : فيـزياء

التخصص : فيـزياء الـمادة الـمكثفة.

من إعداد الطلبة :

مبارك رامي

حفظ الله أسامة

بعنوان :

الانتشـار الكـمي لـلجسيم في الـمواد ثنـائية البعد (2D)

تاريـخ الـمناقشة:.../2021/06

أمام لجنـة المنـاقشة المكونـة من :

بومعالي عبد المالك	أستاذ	جامعة الشيخ العربي التبسي –تبسة-	رئيسا
بوقرورة حمزة	أستاذ محاضر ب	جامعة الشيخ العربي التبسي –تبسة-	مشرفا
قيرواني تقي الدين	أستاذ محاضر ب	جامعة الشيخ العربي التبسي –تبسة-	ممتحنا

السنة الجامعية 2021/2020

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

وزارة التعليم العالي و البحث العلمي

جامعة العربي تبسي _ تبسة _

كلية العلوم الدقيقة وعلوم الطبيعة و الحياة

قسم : علوم المادة

جامعة العربي التبسي - تبسة
Universite Larbi Tebessi - Tebessa

مذكرة تخرج لنيل شهادة ماستر

الميدان : علوم المادة

الشعبة : فيزياء

التخصص : فيزياء المادة المكثفة.

من إعداد الطلبة :

مبارك رامي

حفظ الله أسامة

بعنوان :

الانتشار الكمي للجسيم في المواد ثنائية البعد (2D)

تاريخ المناقشة:.../2021/06

أمام لجنة المناقشة المكونة من :

بومعالي عبد المالك	أستاذ	جامعة الشيخ العربي التبسي -تبسة-	رئيسا
بوقرورة حمزة	أستاذ محاضر ب	جامعة الشيخ العربي التبسي -تبسة-	مشرفا
قيرواني تقي الدين	أستاذ محاضر ب	جامعة الشيخ العربي التبسي -تبسة-	ممتحنا

السنة الجامعية 2021/2020

جامعة العربي التبسي - تبسة
Université Larbi Tébessi - Tébessa

Université Larbi Tebessi- Tébessa

Faculté des sciences exactes et des sciences de la nature et de la vie

Département ....

Filière : ....

Spécialité :.......................................

Année universitaire 2020/2021

جامعة العربي التبسي - تبسة
Université Larbi Tébessi - Tébessa

Formulaire de levée de réserves après soutenance d'un Mémoire de Master

جامعة العربي التبسي تبسة
قسم
علوم المادة
كلية العلوم الدقيقة وعلوم الطبيعة والحياة

<u>Données d'identification du candidats(es) :</u>

Nom et prénom du candidat : ....

....

Intitulé du Sujet : الانتشار الكمي للجسيم عبر الكمون ثنائي البعد (2D)

<u>Données d'identification du membre de jury</u> :

Nom et prénom : Bounahi A/Malib

Grade : Professeur

Lieu d'exercice : Université Larbi Tebessi- Tébessa

Vu le procès-verbal de soutenance du Mémoire sus citée comportant les réserves suivantes :

Enlevé et [illegible]

Et après constatation des modifications et corrections suivantes :

RAS

Je déclare en ma qualité de président de jury de soutenance que le mémoire cité remplit toutes les conditions exigées et permet au candidat de déposer son mémoire en vue de l'obtention de l'attestation de succès.

Le 11/07/2021

Président de jury de soutenance : (Nom/Prénom et signature)

Bounahi A/Malib

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Larbi Tébessi - Tébessa

Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie

Déclaration sur l'honneur de non-plagiat

(à joindre obligatoirement au mémoire, remplie et signée)

Je soussigné(e),

Nom, Prénom : MEBAREK RAMI.

Régulièrement inscrit(e) en **Master** au département : Science de la matiere

N° de carte d'étudiant : 151534027645

Année universitaire : 2020/2021.

Domaine: Science de la matiere

Filière: physique

Spécialité: physique de la matiere condensée

Intitulé du mémoire : la diffusion quantique d'une particule dans les matériaux 2D

Atteste que mon mémoire est un travail original et que toutes les sources utilisées ont été indiquées dans leur totalité. Je certifie également que je n'ai ni recopié ni utilisé des idées ou des formulations tirées d'un ouvrage, article ou mémoire, en version imprimée ou électronique, sans mentionner précisément leur origine et que les citations intégrales sont signalées entre guillemets.

Sanctions en cas de plagiat prouvé :

L'étudiant sera convoqué devant le conseil de discipline, les sanctions prévues selon la gravité du plagiat sont :

- L'annulation du mémoire avec possibilité de le refaire sur un sujet différent ;
- L'exclusion d'une année du master ;
- L'exclusion définitive.

12 جوان 2021

Fait à Tébessa, le : 12 جوان 2021

Signature de l'étudiant(e) :

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Larbi Tébessi - Tébessa

Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie

Déclaration sur l'honneur de non-plagiat

(à joindre obligatoirement au mémoire, remplie et signée)

Je soussigné(e),

Nom, Prénom : HAFDALLAH OUSSAMA

Régulièrement inscrit(e) en **Master** au département : Science de la matière

N° de carte d'étudiant : 2015 3402 7329

Année universitaire : 2 ème année master

Domaine: Science de la matière

Filière: Physique

Spécialité: Physique condensée

Intitulé du mémoire : la diffusion quantique d'une particule dans les matériaux 2D.

Atteste que mon mémoire est un travail original et que toutes les sources utilisées ont été indiquées dans leur totalité. Je certifie également que je n'ai ni recopié ni utilisé des idées ou des formulations tirées d'un ouvrage, article ou mémoire, en version imprimée ou électronique, sans mentionner précisément leur origine et que les citations intégrales sont signalées entre guillemets.

Sanctions en cas de plagiat prouvé :

L'étudiant sera convoqué devant le conseil de discipline, les sanctions prévues selon la gravité du plagiat sont :

- L'annulation du mémoire avec possibilité de le refaire sur un sujet différent ;
- L'exclusion d'une année du master ;
- L'exclusion définitive.

Fait à Tébessa, le : 11 جويلية 2021

Signature de l'étudiant(e) :

عن رئيس المجلس الشعبي البلدي
و بتفويض منه

بسم الله الرحمن الرحيم

الإهداء

نهدي ثمرة جهدنا هذا وخلاصة عملنا إلى آباءنا وأمهاتنا

ينابيع الصبر والتفاؤل والأمل

الذين لم يبخلوا علينا بشيء الذين كانوا سندا لنا طيلة مشوارنا الدراسي

حفظهم الله وأطال في أعمارهم والى الذين تقاسموا معنا عبء الحياة إخوتنا وأخواتنا

والى من تذوقوا معنا أجمل اللحظات

من أصدقائنا في المشوار الدراسي والى من ساهموا في هذا الانجاز

والى كل من علمنا حرفا أساتذتنا الكرماء

والى كل الأقارب والأصدقاء سواء كان قريب أو بعيد

التشكرات

الحمد لله الذي هدانا وما كنا لنهتدي لولا هدانا الله.

نشكر المولى القدير ذي الجودي والفضل الكبير على توفيقه لنا لتمام هذا العمل.

نتقدم بجزيل الشكر والعرفان لكل من ساهم في إعداد هذه المذكرة ونخص بالذكر:

الأستاذ " **بوقرورة حمزة** " على كل المجهود الذي بذله والنصائح التي قدمها لنا خلال مسيرتنا في انجاز هذه المذكرة.

"بومعالي عبد المالك" على قبوله مناقشة هذه المذكرة كرئيس للجنة المناقشة.

"قيرواني تقي الدين" على قبوله مناقشة هذه المذكرة كممتحن ضمن لجنة المناقشة.

جدول المحتويات

فهرس الأشكال

الفصل الأول (1):عموميات حول الغرافين والمواد ثنائية البعد

الفصل الثاني (2):المشي العشوائي الكلاسيكي

الفصل الثالث (3):المشي الكمي

الفصل الرابع (4):المشي العشوائي الكلاسيكي والمشي الكمي عبر بنى الغرافين

مقدمة عامة

مقدمة عامة

المواد ثنائية البعد 2D هي مواد اكتشفت حديثا بعد اكتشاف مادة الجرافين سنة 2004م تسمى بشبيهات الغرافين. زاد الاهتمام بهذه المواد في السنوات الأخيرة بدافع بنيتها الهيكلية التي تمنحها خصائص مميزة وتطبيقات متعددة.

الهدف من هذا العمل هو دراسة الانتشار الكمي للجسيم في المواد ثنائية البعد الذي له علاقة بالتطور الزمني ومبادئ الكم. اخترنا في هذه الدراسة مادة الغرافين، واستعملنا طريقة المحاكاة بلغة البرمجة بايثون واستعمال القارئ Enthoughtcanopy. وينقسم هذا العمل إلى أربعة فصول.

- ✓ الفصل الأول: نتطرق فيه إلى التعريف بالمواد ثنائية البعد والتعريف ببنيتها وخصائصها وخاصة الغرافين. نتطرق إلى بعض طرق إنتاجها وبعض تطبيقاتها.
- ✓ الفصل الثاني: نتطرق فيه إلى شرح طريقة المشي العشوائي الكلاسيكي وفق بعض البنى. نستعرض فيه كيفية بناء النموذج الرياضياتي مرورا بعدة معادلات. نستعرض أيضا كيفية تحرير البرنامج الحاسوبي الذي يتم من خلاله حساب عدد هائل من الخطوات، وتقديم النتائج في شكل رسومات بيانية وتحليلها والمقارنة بين مختلف البنى عن طريق فكرة المستويات وإبراز خاصية الانتقال.
- ✓ الفصل الثالث: نتطرق فيه إلى شرح طريقة المشي الكمي انطلاقا من الفكرة الأساسية للمشي العشوائي الكلاسيكي ومن خلال التطور الزمني ومبادئ ميكانيك الكم عوض المبادئ الكلاسيكية. نعوض احتمال العملة الكلاسيكي بمؤثر كمي واحدي جديد يسمى بمؤثر العملة أشعة وحدته تعبر عن مختلف الوصلات تساعدنا في بناء المعادلات الزمنية وإبراز مبادئ ميكانيك الكم وهو التواجد في عدة أماكن من نفس اللحظة.
- ✓ الفصل الرابع:نقوم فيه بتطبيق فكرة المشي العشوائي الكلاسيكي والكمي على بنى الغرافين من نوعي الzigzag وكذلك الarmchair ومقارنتهما مع خط.نقوم بعرض النتائج المتحصل عليها ومناقشتها واستخلاص من الأكفأ والأسرع في نقل الاحتمال الكلي.

الفصل الأول

عموميات حول الغرافين والمواد ثنائية البعد

1.1 المقدمة

المواد ثنائية البعد هي مواد تم اكتشافها حديثا لها دور كبير في ميدان الالكترونيات بنوعيها (الدقيقة والحديثة). وهذا ماجعلنا نتطرق إلى دراستها بشتى خصائصها واستعمالاتها في مختلف التطبيقات التكنولوجية الحديثة. ظهرت هذه المواد بعداكتشاف الغرافين من طرف الباحثين أندري جيم وزميله كوستيا نوفو سيلوف سنة 2004 وحصولهما على جائزة نوبل في الفيزياءسنة 2010 عن عملهما هذا بعد أن تم نشر النتائج في مجلة العلوم الأمريكية وتختلف هذه المواد من حيث مكوناتها الذريةحيث هناك مواد ذات نوع واحد من الذرات مثل الغرافين وهناك مواد أخرى تتكون من نوعين لكن هذه الموادتتشابه تقريبا من حيث البنية وبعض الخصائص المميزة كما أنها تستعمل في تطبيقات عدة مثل تصنيع الخلايا الشمسية،مثل شرائح حاسوبية ضوئية عالية السرعة، كما تستعمل كمادة لطلاء فهي مادة تحمي من تأكل وأيضا تستعمل في الأنابيب النانوية ... الخ سنتطرق في هذا الفصل لدراسة هذه المواد بصفة عامة وإبراز مختلف خصائصها ودورها.

2.1 أنواع الشبكات البلورية

تصنف الشبكات البلورية إلى ثلاث أنواع:

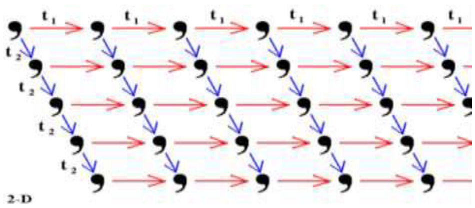
1.2.1 الشبكة البلورية أحادية البعد

لها هيكل مرتب وهي عبارة عن عقد مرتبة بانتظام في بعد واحد (على خط مستقيم) يستفاد من هذه الشبكات للدراساتالبسيطة والمبدئية لفهم الحالة الصلبة مثل ذبذبة في حالة بعد واحد [1].

الشكل1.1: شبكة خطية أحادية البعد [1]

2.2.1 الشبكة البلورية ثنائية البعد

وهي ترتيب لعقد الشبكة البلورية في بعدين ويمكن تخيل الشبكة الخطية بأنهاانتخذتمتجه انتقال ثابتة وباتجاه أخريصنع زاوية ما مع الانسحاب الأول ونحصل عندها على هيكل لترتيب منتظم يشكل خارطة ممتدة بواسطة متجهين [1].



الشكل2.1:شبكة خطية أحادية البعد [1]

3.2.1 الشبكة البلورية ثلاثية البعد

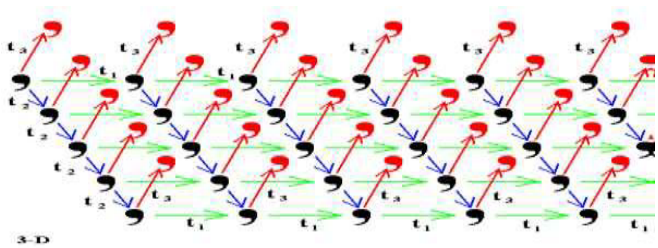
لتشكيل الشبكة الفضائية نضيف البعد الثالث للشبكة المستوية كما في الشكل التالي:

والهدف من هذه الدراسة هي:

-فهم خواص السطوح الفيزيائية للأجسام الصلبة.

-تقدير المسافة البينية بين العقد باستخدام حيود الأشعة السينية.

يمكن تصور عدد لانهائي من الشبكات البلورية الفضائية وذلك بحسب أطوال المتجهات الأولية للشبكة البلورية والزوايا المحصورة بينها ولكن الحقيقة تشير إلى وجود أربعة عشر نوعا من الشبكات الفضائية فقط مصنفة إلى سبعة أصناف رئيسية منها شكل عام ندعوه شبكة ثلاثية الميل وثلاثة عشرة شكلا خاصا تحدد خلية الوحدة من خلال المتجهات الأولية والزوايا المحصورة بينها [1].



الشكل1. 3:شبكة خطية أحادية البعد [1]

3.1المواد ثنائية البعد

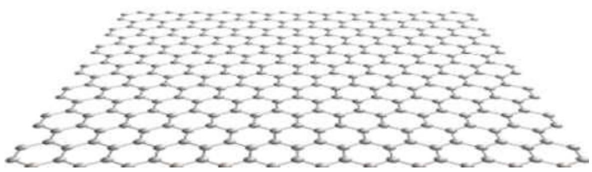
1.3.1 **تعريفها**

تعرف بثنائية الأبعاد أي لها بعدين فقط أفقي وراسي وعادة عندما نتكلم عن الأسطح الثنائية الأبعاد فإننا عادة نتكلم عن أجسام مصورة أو مطبوعة على ورق أوأجسام مسطحة، أي لها هيكل ملموس حسيا، ولكن قد ترى بالنظر وكانلها ثلاثة أبعادأما في الحقيقة فهي ذات بعدين فقط. أما تتمثل السمة الرئيسية لهذه المواد هي أن جميع ذراتها موجودة في الطبقة السطحية في الكيمياء وعلم البلورات هذا يعني أن كل عنصر من عناصر مساحة المادة لديه العديد من الروابط الحرة التي تجعل من الممكن تغيير وظائف هذه المواد عن طريق تعديل السطح [2].

2.3.1**بنية المواد ثنائية البعد**

1.2.3.1 **البنية العامة**

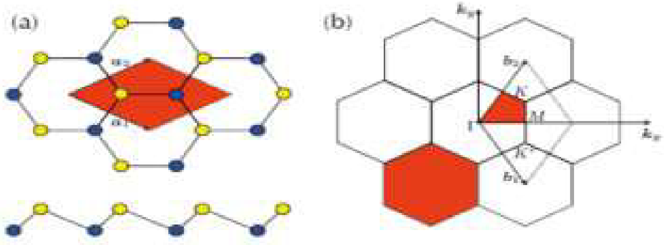
تترتب ذرات هذه المواد في نمط سداسي منتظم ويختلف طول الرابطة بين ذرتين من مادة إلى أخرى حسب نوع الذرات المشكلة لكل منها تكون ذرات هذه المواد متراصة بشكل كبير وهذا ما يكسبها خصائص مميزة [3].



الشكل1. 4: البنية العامة للمواد ثنائية البعد 2D[4]

2.2.3.1البنية البلورية

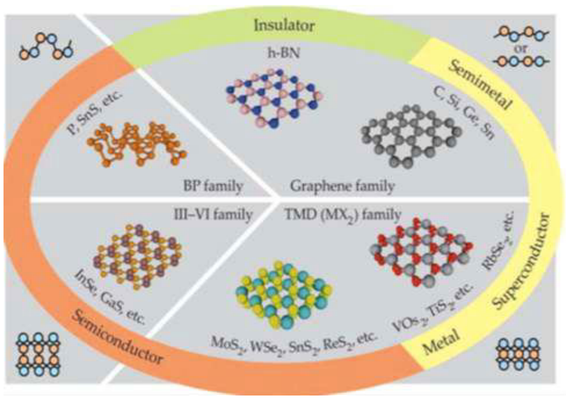
هذه المواد ثنائية البعد تتميز بان لها بنية بلورية سداسية. تتألف من ذرات مترابطة وتظهر على شكل خلية نحل ترتبط ذراتهابروابط تحتوي الخلية الواحدة لكل منها على نوعين من الذرات. تبعدان عن بعضهما البعضبمسافة. تتألف الخلية من شبكتين ثلاثيتين متطابقتان [4].



الشكل5.1: البنية العامة للمواد ثنائية البعد 2D[5]

3.2.3.1تصنيفات المواد ثنائية

يوجد عدد كبير من المواد ثنائية البعد المصنعة كونها مستقرة وأخر لم يتم تصنيعه. تصنف حسب الذرات المشكلة لهاومنها من هو مشكل من نوع واحد من الذرات مثل الغرافين مشكل من ذرات cمثل السيلسين مشكل من ذرات siوالجرمانيين مشكل من ذرات Geالخ...وهناك من تتشكل من ذرتين مختلفتين من الذرات وأكثر.



الشكل6.1: تصنيفات المواد ثنائية البعد 2D[6]

4.2.3.1تطبيقات المواد ثنائية البعد

- ❖ تستخدم هذه المواد في مواد عديدة ومختلفة أهمها:
  - ✓ تستخدم في إنتاج الطاقة الشمسية [9].
  - ✓ تستعمل هذه المواد في تصفية المياه [9].
  - ✓ تستخدم في التطبيقات الطبية والحيوية كعلاج السرطان مثلا [9].
  - ✓ في مجال الالكترونيات والبطاريات [9].

- ✓ مادة للطلاء فهي مواد تحمي من التآكل [9].
- ✓ صناعة مواد هجينة فائقة القوة يمكن تسخيرها في الصناعات الثقيلة [9].
- ✓ استعمالها في صنع أنابيب نانوية لها عدة خصائص المميزة مثل المتانة والثابتة الكيميائية والنا قلية الحرارية [9].

4.1الغرافين

1.4.1تعريف الغرافين

هو مادة متأصلة من الكربون، ثنائية الأبعاد بنيتها البلورية سداسية (وتسمى أيضا قرص العسل أو سلك الزجاج). وهي ارفعمادة معروفة على الإطلاق حتى الآن، يعادل سمكها ذرة كربون واحدة فقط، ورغم ذلك تعتبر إحدى أقوى(امتن) الموادالمعروفة. تعتبر من موصلات الكهرباء وكفاءتها ذات كفاءة النحاس، وهي أفضل موصل للحرارة على الإطلاق،وتكاد مادة الجرافين تكون شفافة تماما، ورغم ذلك فهي أيضا كثيفة للغاية لدرجة عدم سماحها بعبور أصغر ذرة (الهليوم) من خلال هيكلها السداسي [11].

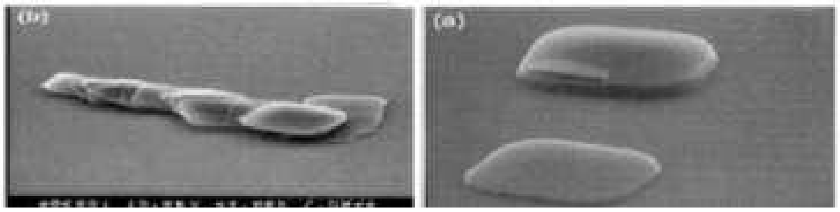
2.4.1طرق إنتاج الغرافين والمواد ثنائية البعد

هناك طرق عدة للحصول على الغرافين وستجد أنك قمت بصناعة الغرافين لمرات عديدة خلال حياتك ارسم خطا باستخدام قلم الرصاص، ونتيجة لذلك سيتكون بعض الأجزاء الصغيرة من الغرافين. لكن حتى مجيء العقد الأول من هذاالقرن؛ لم يمتلك أي شخص الأدوات والاهتمام اللازمين لعزل الغرافين. في عام 2002،أصبح الباحث اندري جيمAndré Geimمهتم بالغرافين فقام بتلميع طبقة من الغرافيت وصولا إلى سماكة بضع طبقات قليلة تمكن هذا الباحث من الوصول إلى100طبقة، لكن لم يحقق هدف جيم المتمثل في رقم يقع بين 10و 100 طبقة.

حاول جيم نهج سلوك مختلف واستخدم تقنية الشريط. طبق هذا الشريط على الغرافين وسحبه بعيدا ليحصل على رقائق من الغرافين متعدد الطبقات، ومع سحب المزيد من الأشرطة حصل جيم على طبقات اقل سماكة حتى وصل الى قطعة منالغرافين بسماكة عشرة طبقات [11].

3.4.1إنتاج الغرافين بتقنية التقشير المايكرو ميكانيكية

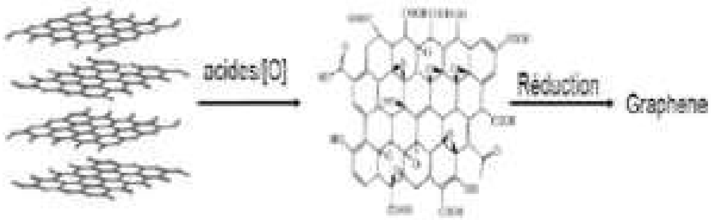
يعتبر الجرافين من أحد المعادن الأرضية المتوفرة طبيعيا وماهو في الحقيقة إلا مجموعة من طبقات الجرافين التي ينزلق بعضها فوق بعض لتحقق ما نراه من خاصية الكتابة على الورق هي ابسط الطرق المستعملة يستعمل فيها الشريط اللاصق وهي لاتحتاج الى درجة حرارة عالية علاوة على ذلك يتم إنتاج الجرافين من خلال كسر الروابط بين المستويات لان القوة بين الذراتأكبر من القوة بين المستويات والجرافيت مادة طبيعية واسعة الانتشار وطبقات كمية الغرافين المنتجة بهذه التقنية عاليةالجودة. لكن تبقى المشكلة التي تخلفها هذه التقنية هو إن كمية الغرافين التي يتم إنتاجها قليلة وبكمية معتبرة [12].



الشكل7.1: تقنية التقشير المايكرو ميكانيكية [13]

4.4.1تحويل أكسيد الجرافين

يتميز أكسيد الغرافين بأنه مادة ثلاثية الأبعاد متناهية الصغر تتكون من ملايين طبقات الكربون المشتقة من أكسيد الجرافين والمعادلة من قبل عدد من لمجموعات الأكسجين، كما يتميز أكسيد الغرافين أيضا بالاستقرار الكيميائي والذوبان وانحلال في تقنية تمتاز بانخفاض تكلفتها [11].

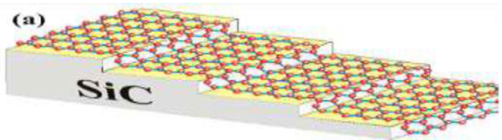


الشكل8.1: تحول أكسيد الغرافين[11]

5.4.1النمو على السطح المعدني

1.5.4.1نمو الغرافين على طبقة السليكونSi

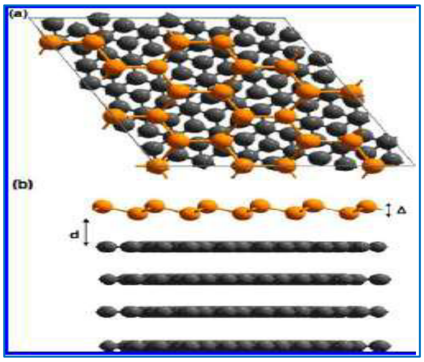
تعتبر أكثر العمليات استعمالا وتداولا يتم فيها إنتاج الغرافين بكميات هائلة وتتميز بجودة عالية [14].



الشكل9.1: تشكيل الجرافين على طبقة السيلكون[14]

2.5.4.1نمو الجرمانيين على طبقة من الذهب Au

- نمر على ثلاثة مراحل [11]:
  - أولا:نقوم بأخذ طبقة من ذرات الجرمانيوم ونضعها فوق ركيزة من الذهب **Au.**
  - ثانيا:نقوم بتسخين الجرمانيوم الى ان يبدأ بالترسب فوق ركيزة Au.
  - ثالثا:أخيرا تتحصل على ذرات الجرمانيوم منتظمة على شكل خلية نحل تشكل الجرمانين.



الشكل 10.1: تشكيل السيليسن على طبقة الذهب[11]

3.5.4.1نمو السيليسن على طبقة الفضة Ag

❖ بنفس العملية أو الطريقة التي تمت في المرحلة السابقة نمر أيضا بثلاث مراحل:

- ✓ أولا: نأخذ طبقة من ذرات السيلكون فوق ركيزة من الفضة Ag.
- ✓ ثانيا: بعدها نقوم بتسخين السيلكون الى أنيبدأ بترسب فوق ركيزة الفضةAg.
- ✓ -ثالثا: أخيرانحصل على السيلكون مرتبة ومتراصة على شكل خلية نحل تشكل مادة السيليسن.

الشكل11.1: نمو الجرمانيين على طبقة الذهب [11]

6.4.1صناعة الغرافين

عمل فريق جيم على تحسين تقنيته، وفي أكتوبر عام 2004 أنتج الفريق طبقة وحيدة من ذرات الكربون. بعد ذلك نشرت النتائج في مجلة Science، ليحصل بذلك جيم وزميله كوستيا نوفو سيلوف KostyaNovoselovعلى جائزة نوبلسنة2010. ومنذ الحصول على أولى الطبقات باستخدام الشريط تحسن إنتاج الغرافين بسرعة كبيرة جدا. وفي العام2009كان الباحثون قادرين على إنتاج فيلم رقيق من الغرافين يصل إلى30 أنش.

7.4.1خصائص الغرافين

1.7.4.1الموصلية:

الالكترونات هي الجسيمات التي تولد الكهرباء. ولذلك عندما يسمح الغرافين للإلكترونات بالتحرك بسرعة، فانه يسمح بتحرك الكهرباء سريع أيضا. وداخل الغرافين، من المعروف إن الالكترونات تتحرك عند سرعة أكبر بحوالي 200مرة مما

هي الحال داخل السيلكون لأنها تتحرك بوجود مقاومة اقل. أيضا، يعتبر الغرافين موصلا ممتازا للحرارة، وهو موصل كهربائي مستقل عن درجةالحرارة ويعمل بشكل عادي عند درجة حرارة الغرفة [12].

2.7.4.1القوة والصلابة:

تعتبر مادة قوية جدا جراء نمطها غير القابل للتحطيم والروابط القوية بين ذرات الكربون، وكما قلنا سابقا فإنك حتى تستطيع اختراق صفيحة غرا فين، تحتاج إلى موازنة فيل فوق قلم رصاص وحتى عندما تتمدد أجزاء من الغرافين، فإنها تبقى أقوى المواد التي نعرف بوجودها [11].

3.7.4.1المرونة:

تلك الروابط القوية الموجودة بين ذرات الكربون هي روابط مرنة جدا أيضا، إذ يمكن سحب وحني صفيحة الغرافين في حدود معينة دون أن تتحطم، مما يعني أن الغرافين مادة قابلة للحني وللتمديد [11].

4.7.4.1الشفافية:

يمتص الغرافين 2.3%من الضوء المرئي الذي يصدم سطحه، مما يعني انه بإمكانك الرؤية عبر هذه المادة دون ان تواجه أيوهج [11].

8.4.1مجالات استخدام الغرافين

إن استخدام الغرافين في كافة جوانب الحياة اليومية ليس بالأمر البعيد أبدا ويعود ذلك جزئيا الى وجود أبحاث في مجال الأنابيب النانوية الكربونية وهي النسخ الاسطوانية من الغرافين. ومن التطبيقات المتعلقة بالأنابيب النانوية الكربونية بالتكيف معالغرافين. ونذكر فيما يلي بعض هذه التطبيقات:

- ✓ الخلايا الشمسية
- ✓ الترانزستورات
- ✓ الشاشات الشفافة

9.4.1أهمية الغرافين

للغرافين أهمية كبيرة إذ يعتبر مادة قوية للغاية وقابلة لنقل الشحنات وأصبحت اليوم متاحة تجاريا. كما تفتح أمامنا أفاق جديدة في إيجاد حلول العقبات التكنولوجية الحالية والتي قد تكون مفتاح المستقبل عاجلا أم أجلا.وقد ثبت فائدتها بالفعل في العديد من مختبرات البحوث الصناعية في مجالات الطب وعلوم الطيران والزيوت وإمدادات الطاقةوالتخزين والنقل على سبيل المثال لا الحصر. وتكمن أهميتها في إمكانية تغيير الأسلوب الذي ننتج به الطاقة ونخزنها ونوزعها في المستقبل [11].

الفصل الثاني

المشي العشوائي الكلاسيكي

1.2المقدمة

في هذا الفصل سنتطرق إلى دراسة طريقة المشي العشوائي الكلاسيكي الغير مستمر في الزمن (هنالك نسخة أخرى مستمرة في الزمن) وفق بعض البنى المنتظمة أو الغير منتظمة.وبإختصار فكرة المشي العشوائي الكلاسيكي هي مثل شخص يتحرك بخطوة نحو الأمام أو الخلف فقط بحسب نتيجة رميه لقطعة نقدية (الوجه الأول أو الثاني)،فإذا كانت نتيجة الرمية هي الوجه الأول لقطعة النقدية سيتحرك الشخص نحو الامام أم إذا كانت نتيجة الرمية هي الوجه الثاني لقطعة النقدية سيتحرك نحو الخلف. سيكرر الشخص نفس العملية بعد كل خطوة يخطوها و هكذا و دواليك و لعدد معين من المرات و الهدف معرفة كيفية تطور توزيع احتمال تواجد الشخص عبر جيمع الأماكن التي يمكن أن يصل إليها انطلاقا من مكان انطلاقه.

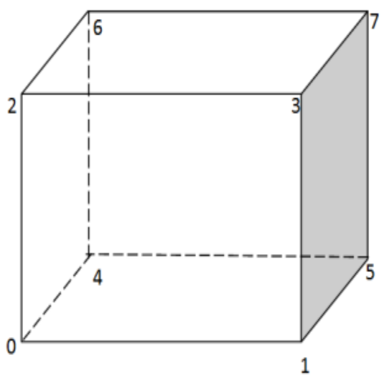
في هذا الفصل سنستعرض عن كيفية بناء النموذج الرياضي الذي يحقق هذا النوعمن الحركة العشوائية بدءا من نقطة انطلاقه لنتحصل في الأخير إلى إيجاد المعادلة الزمنية لتطور توزيع الاحتمال الكلي للمشيالعشوائيوفق أي بنية مهما كان تنوعها وشكلها، مثل المكعب، التفرعالشجري والمخطاط النجمي. كما سنستعرض كيفية تحرير البرنامج الحاسوبي الذي يتم من خلاله حساب عدد هائلمن الخطوات و استعراض النتائج في شكل رسومات بيانية لتحليلها و عرض المقارنة بين مختلف البنىعن طريق فكرة المستويات. بعدها سنتطرقإلى ميزة جديدة وهي خاصية انتقال الاحتمال الكلي بين موضعين نختارهما وهما موضع الانطلاق، وموضع الوصول مرورابمعادلات زمنية لتطور هذا الاحتمال الكلي.

وأخيرا وليس أخرا سنقوم بتحليل واستنتاج أي البنى أفضل في نقل الاحتمال الكلي للبنى التي تمدراستها[18،19،20].

2.2بناء النموذج:

ليكن لدينا مكعب بسيط و منفرد كما هو موضح في **الشكل (1.2)** يتكون من 8 عقد كل عقدة تنطلق منها 3 وصلات ترتبط بالعقد التي تليها عن طريق 3 روابط ممكنة.و ليكن لدينا متحرك ينطلقا مثلا من إحدى العقد التي نختارها (مثلا العقدة 0). هذا المتحرك سيتحرك في 3 اتجاهات محتملةوممكنة كما ذكرنا سابقا كتعريف فكرة المشي العشوائي. كما تطبق هذه العملية على جميع العقد وتتكررلعدة مرات وبشكل متماثل وعشوائي معطيا بالنسبة للزمن احتمال مكان تواجد الجسيم على مستوى البنية.

ولدراسة مميزات هذه البنية عن طريق المشي العشوائي، سنقوم ببناء نموذج الرياضي الذي يمكننا من وصف وإعطاء التفصيل الذي يحاكي هذا المشي باستعمال الجداء المصفوفي. حيث في البداية نقوم بالتعبيرعن هذه البنية بفضاء شعاعي بعده هو عدد عقد البنية وهي N=8. وذلك بالتعبير عن كل عقدة n من البنية بأحد أشعة وحدة الفضاء الشعاعيالتي تحتوي على 8 عقد كلها معدومة باستثناء المركبة التي توافق رتبة شعاع الوحدة المعنية بالأمر بشكل ترتيبي. ويمكن أن نختار التمثيل الشعاعي بالطريقة التالية ووفق ترتيب معين.



الشكل 1.2:يمثل مكعب يتكون من 8 عقد.

$$|0\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\\0\\0\\0\\0\end{pmatrix}, |1\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\\0\\0\\0\\0\end{pmatrix}, |2\rangle=\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\\0\\0\\0\\0\end{pmatrix}, |3\rangle=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\\0\\0\\0\\0\end{pmatrix}, |4\rangle=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\0\\1\\0\\0\\0\end{pmatrix}, |5\rangle=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\0\\0\\1\\0\\0\end{pmatrix}, |6\rangle=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\0\\0\\0\\1\\0\end{pmatrix}, |7\rangle=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\0\\0\\0\\0\\1\end{pmatrix} \quad (2\text{-}01)$$

انطلاقا من هذه البنية يمكننا ان نعبر عن كل خطوة ممكنة حسب البنية المدروسة بالجداء الشعاعي بين شعاع سطريمينايمثل العقدة nالتي تبدأ منها الخطوة مضروبا في شعاع عمود يسارا يمثل العقدة$\grave{n}$ التي تتنهي عنده الخطوة، أي:

$$|\grave{n}\rangle\langle n| \quad (2\text{-}02)$$

إذن يمكن التعبير عن جميع الخطوات الممكنة التي تنطلق من عقدةn بـالمصفوفة الخطوات A_n:

$$A_n = (|\grave{n}_1\rangle\langle n| + |\grave{n}_2\rangle\langle n| + |\grave{n}_3\rangle\langle n|) \quad (2\text{-}03)$$

حيث $\grave{n}_1$ ، $\grave{n}_2$ و $\grave{n}_3$هي العقد الثلاثة المتصلة مع العقدة n حسب بنية المكعب المدروسة (في حالة المكعب و العقدة 0 مثلا العقد الثلاثة المتصلة بها هي كل من 1، 2 و 4).

ثم يمكننا التعبير عن احتمال حدوث جميع الخطوات الممكنة التي تنطلق من عقدةn بـمصفوفة الانتقال أو التطور M_n:

$$M_n = A_n \cdot \frac{1}{d_n} \quad (2\text{-}04)$$

حيث d_n يمثل عدد الوصلات الممكنة لكل عقدةn (في حالة المكعب المنفرد كل عقدة لها 3 وصلات أي $d = 3$).

مصفوفة التطور الكلية هي إذن:

$$M = \sum_{n=0}^{7} M_n \quad (2\text{-}05)$$

ستؤثر مصفوفة التطور الكلية على شعاع الاحتمال الكلي الذي مركباته هي قيمة احتمال تواجد المتحرك في كل عقدة، حيث مجموع هذه المركبات تساوي الاحتمال الكلي 1، أي:

$$\mathrm{P(T)}=\sum_{n=0}^{7} \mathrm{P_n(T)}|\mathrm{n}\rangle = \begin{pmatrix}P_0(T)\\P_1(T)\\P_2(T)\\P_3(T)\\P_4(T)\\P_5(T)\\P_6(T)\\P_7(T)\end{pmatrix}, \ \sum_{n=0}^{7} P_n(T) = 1 \quad (2\text{-}06)$$

بالتاليبمكننافيالأخيروصفديناميكياالمشي العشوائي عن طريق معادلة مصفوفية تربط بين نتائج احتمال الخطوة القديمة ونتائج احتمال الخطوة الجديدة عن طريق مصفوفة التطورM[21] حيث:

$$P(T)=[c \cdot A]^T . P(0) = M^T . P(0) \quad (2\text{-}07)$$

حيث:

P:هو شعاع توزع الاحتمال الكلي. ويتكون من Nمركبة الموافقة ل N عقدة.

P(0): هو شعاع الاحتمال الكلي في اللحظة t=0 او بعد الخطوة T=0

P(T): هو شعاع توزع الاحتمال الكلي بعد Tخطوة معينة.

c : هو احتمال العملة والذي يأخذ قيمة سلمية في حالة المشي العشوائي الكلاسيكي وتساوي قيمته مقلوب عدد الاتجاهات أو الخطوات الممكنة في البنية (c=1/d).

A : هي مصفوفة الخطوات وهي عبارة عن مصفوفة مربعة (N×N).

M : هي مصفوفة الانتقال أو التطور حيث أن مجموع عناصركل عمود تساوي 1.

1.2.2الحساب اليدوي وكيفية تحرير البرنامج الحاسوبي:

إذا اخترنا مثلا أن المتحرك كان في العقدة 0 مثلا في البداية (أي بعد الخطوة T=0). أي:

$$P(0) = 1|0\rangle + 0(|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle + |4\rangle + |5\rangle + |6\rangle + |7\rangle) \qquad (2\text{-}08)$$

إذن يمكننا يدويا من إجراء الحساب لعدد معين من الخطوات فنجد:

العقدة / الخطوة	7	6	5	4	3	2	1	0
p(0)	0	0	0	0	0	0	0	1
P(1)	0	0	0	1/3	0	1/3	1/3	0
P(2)	0	2/9	2/9	0	2/9	0	0	3/9
P(3)	6/27	0	0	7/27	0	7/27	7/27	0

نلاحظ هنا أنه بعد الخطوة T=3 بدأ الإحتمال يصل على العقدة 7، و هي العقدة الأبعد عن عقدة الانطلاق 0.

في حالة عدد خطوات كبيرة نسبيا يمكننا أن نستعين ببرنامج حاسوبي للقيام بذلك.

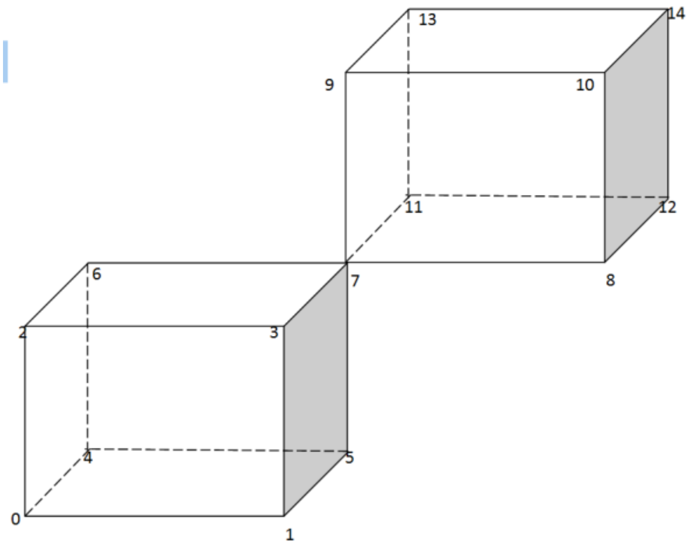
تنبيهات:

- تم استعمال لغة البرمجة بايثون وهي لغة برمجة سهلة كما أنأوامرها تشبه كثيرا العبارات الرياضياتية التي نكتبها.
- في عملنا هذا تم ترقيم العقد من 0 إلىN-1وذلك لسهولة التعامل معها أثناء الحساب والبرمجة.
- هذا البرنامج يمكن نسخه ولصقه على أي صفحة بايثون و سيتم تنفيذها مباشرة.
- أحيانا نتعرض إلى أخطاء اللصق بصورة غير صحيحة وهذا ما يدفعنا الى إعادة مراجعة السطور وتصحيح الأخطاء التي لم يتم لصقها بشكل صحيح.
- تم استعمال القارئ Enthoughtcanopy رغم تعدد البرامج التي تقرا البايثون.

- أما فيما يخص الكتابات التي تأتي بعد "#" هي تعليقات لا يتم تنفيذها من قبل البايثون.

3.2 البنى المنتظمة و الغير منتظمة:

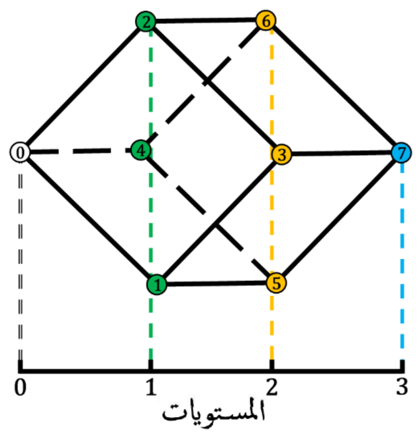
البنى المنتظمة هي البنى التي كل عقدها لها نفس عدد الوصلات. بينما البنى الغير منتظمة هي البنى التي يكفي أن نجد فيها عقدة واحدة لها عدد وصلات مختلف عن البقية[22،21]. مثلا في المكعب المنفرد (**الشكل 1.2**) تعتبر بنية منتظمة لكون جميع عقده الثمانية لها نفس عدد الوصلات. بينما في الشكل (2.2) الذي يصور معكبينمرتبطيين رأسين في العقدة 7 تعتبر بنية غير منتظمة لكون العقدة 7 لها عدد وصلات مختلف (عدد وصلاتها هو 6) عن بقية الوصلات (عدد وصلاتها هو 3).



الشكل 2.2: مكعبين مرتبطين رأسين بعقدة واحدة.

4.2 المقارنة بين مختلف البنى المختلفة:

تسمى أيضا بفكرة المستويات، حيث في هذا العمل يمكننا التمييز بان آلية الاختبار التي قمنا بها على مكعب ليست هيآلية الاختبار التي قمنا بها على مكعبين مشتركين بعقدة.ولهذا لا يمكننا المقارنة بينهما بسبب اختلاف طبيعة البنى،مما دعنا إلى استعمال طريقة أخرى تربط بين هذه البنى و إعطاء نمط موحد بينها،فهنا سنقوم بتوظيف فكرة المستوياتمن خلالها يمكننا المزج والربط بين مختلف البنى. أما فيما يخص الفرق عن عملنا السابق الذي كنا نستعمل فيه العقد هناسنتطرقإلى فكرة المستويات كحل انسب وأسهل حيث كل مستوى في المخطاط الجديد سيكون مكافئا لسلوك عقدة واحدة أومجموعة من العقد من المخطاطالأصلي.إذ نعرف على أن كل العقد الجديدة التي يمكن أن يصلها المتحرك الأولمرة بعد كل خطوة إلىالأمام مبتعدا عن نقطة انطلاقه.بعد تحديد المخطاط المكافئ لكل البنى المختلفة في هذه الحالة سندرس المكعب **الشكل 1.2** وخط مغلق مكون من أربعة عقد الذي تعتبر فيه كل عقدة مستوى[22،21].



الشكل3.2:يمثل مستويات المكعب الأربعة.

5.2 خاصية الانتقال:

تتم فيه المقارنة بين مختلف البنى كالمكعب والخط المحدود و معرفة خصائص المشي العشوائي الكلاسيكي ومن خلال عملنا هذا توصلنا إلى أن خاصية الانتقال هي الأدق من الخصائص السابقة وتعطي أفضل النتائج[21،22].

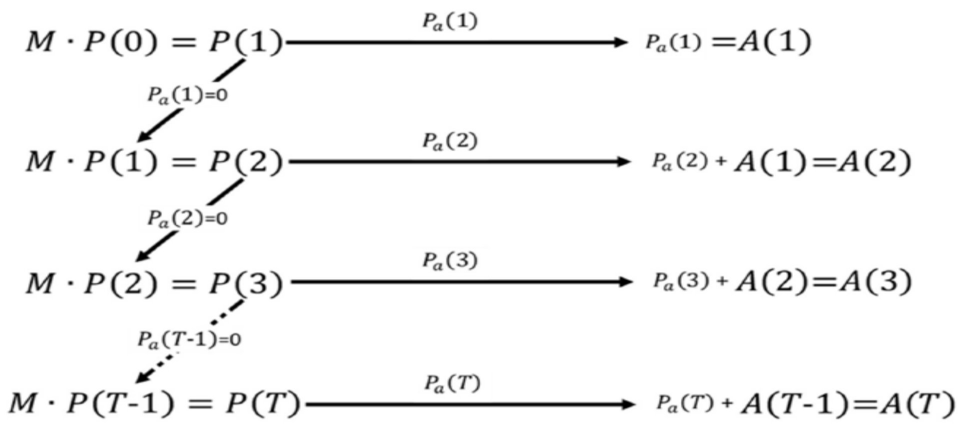
1.5.2تعريفها:

هي خاصية يتم من خلالها حساب سرعة انتقال الاحتمال بين عقدة أو مستوى معين يتم اختياره كموضع انطلاق حيثينطلق منه الاحتمال الكلي وبين عقدة أخرى أو مستوى آخر يسمى بموضع الوصول أو الهدف. حيث في هذه الوثيقةسنستعرض مجموعة من البنى والمخاطيط ومكافئتها على شكل خط منته ذي مستويات [21،22]مثل :المكعب **الشكل** 3.2 من خلال هذه الخاصية سيتم معرفة انه بعد انتشار الاحتمال بداية المشي العشوائي عبر العقد والمستويات شيئا فشيئا إلى غايةأن يبدأ في الوصول إلى الهدف ، حيث كل قيمة احتمال تصل إلى الهدف فلا يمكن أن تغادر مرة أخرى إلى أن يحتجز كل الاحتمال الكلي ،ونعبر عنها رياضياتيا بالعلاقة التالية التي تسمى دالة الانتزاع يتم فيها نزع قيمة الاحتمال التي تصل الى العقدة a بعد كل خطوة وتكتب بالشكل التالي[20]:

$$A(T) = \sum_{t=0}^{T} P_a(t) \qquad (2\text{-}09)$$

2.5.2كيفية تحرير البرنامج الحاسوبي:

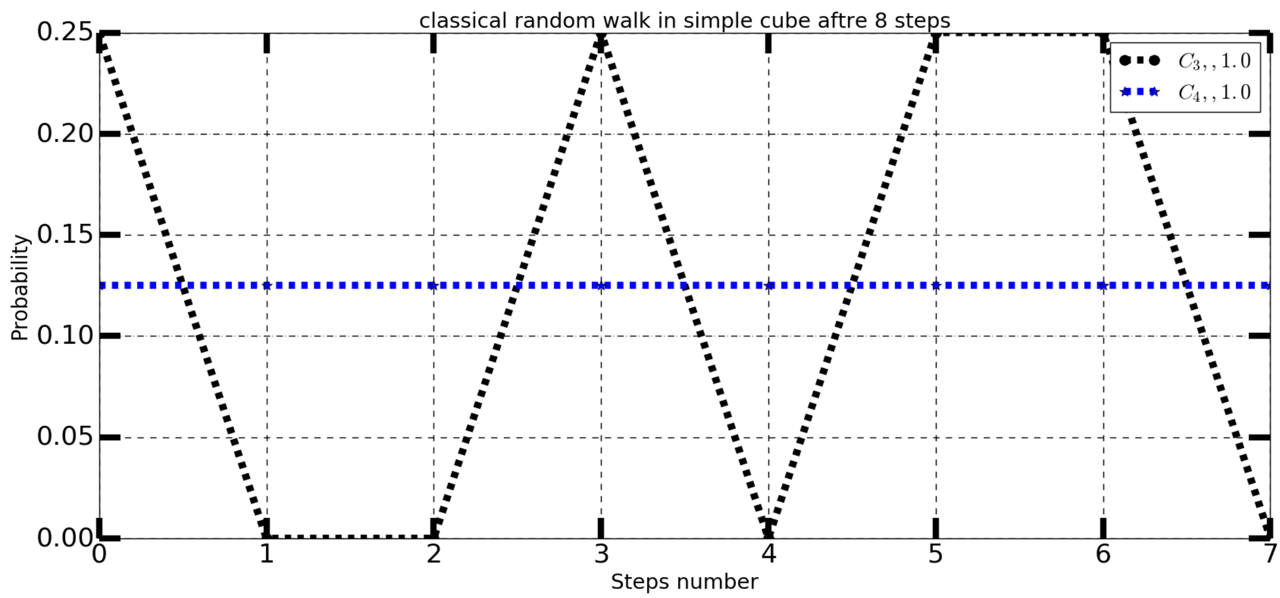
يكون البرنامج الحاسوبي لهذه الفكرة مماثل لعملنا السابق المتمثل في مختلف برامج الحساب المكعب والخط المحدود مع بعض التغييرات والملاحظات وسنتعامل في عملنا هذا مع المخطاط على شكل المكعب مثل **الشكل 1.2**ذو أربعة مستويات و8عقد وخط محدود ذو أربعة مستوياتكذلك ويحتوي على 4عقد كل عقدة تمثل بمستوي.خطة الحساب ستتم وفق مخطط مبين كمايلي[21،22]:



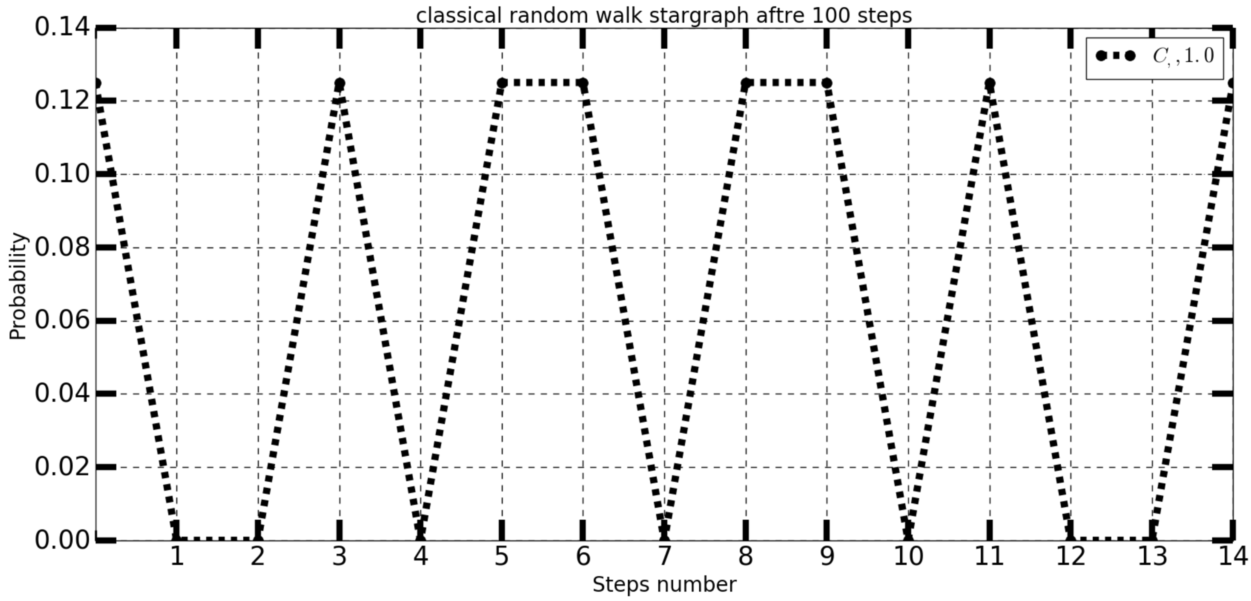
الشكل 4.2**:**تمثل مخطط توضيحي لكيفية حساب وتطور الاحتمال الممتص من الموضع 0 إلى الخطوة T.

6.2تحليل المنحنيات واستخلاص النتائج

بعد تنفيذنا للبرنامج 1 **الشكل 5.2** في حالة المشي الكلاسيكي ثلاثة اتجاهات وفي حالة أربعة (حالة الاستراحة) وجدنا أن الاحتمال يتوزع بشكل منتظم ومتساوي على جميع العقد 8 بعد الخطوة 100 حتى أن غيرنا في عدد الخطوات يبقى توزيع الاحتمال نفسه.كذلك عند تنفيذنا للبرنامج2 **الشكل 6.2** وجدنا أن الاحتمال عند المكعبين المرتبطين يتوزع ببشكل منظم ومتساوي على جميع العقد 15 وبعد الخطوة100.

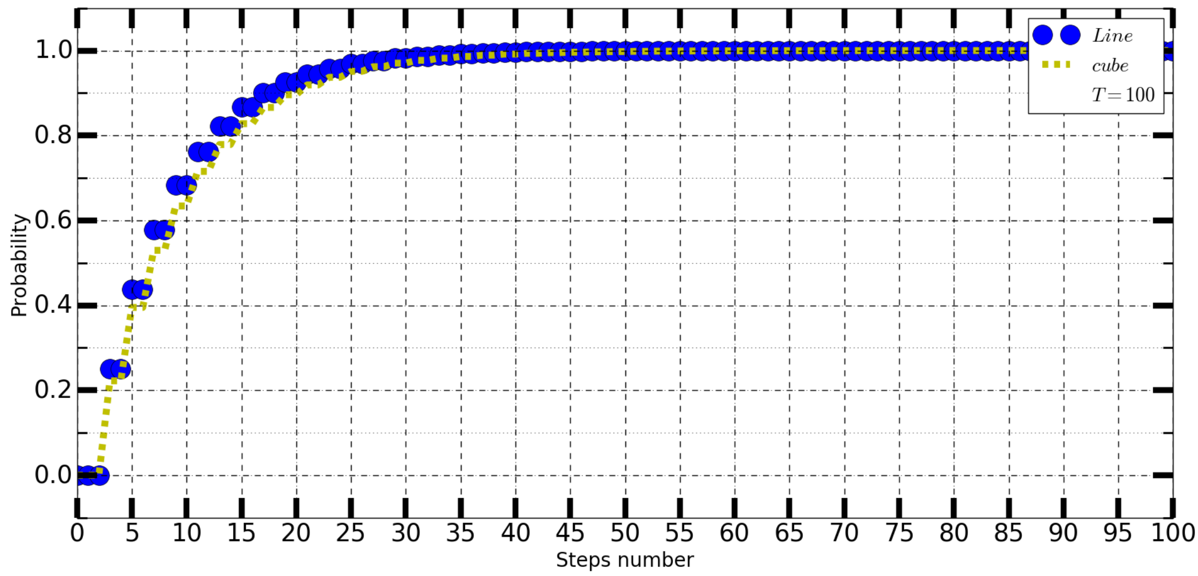


الشكل 5.2: التمثيل البياني لكيفية تطور احتمال تواجد المتحرك في المكعب.



الشكل 6.2: التمثيل البياني لكيفية تطور احتمال تواجد المتحرك مكعبين مرتبطين بعقدة.

بعد تنفيذ البرنامج 3 تحصلنا على النتائج الممثلة في **الشكل 1.2** لكل من المكعب والخط ذو 4 مستويات، وجدنا أن سرعة امتصاص الاحتمال الكلي تقريبا متساوي لكل من المكعب والخط.

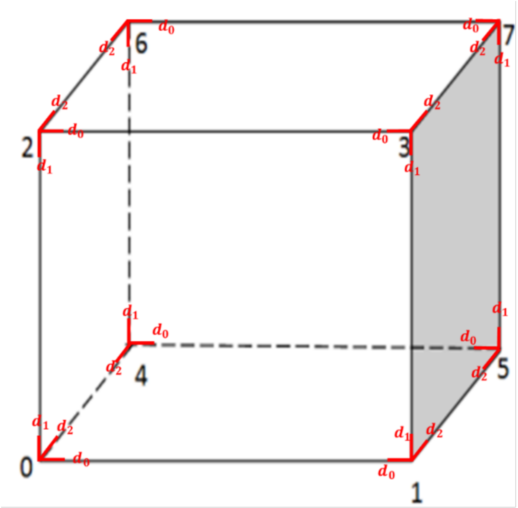


الشكل 7.2: تمثل قيمة الاحتمال الممتص في حالة المكعب والخط.

الفصل الثالث

المشي الكمي

1.3بناء النموذج:



لنأخذ نفس المكعب السابق الذي استعملناه في بناء النموذج الرياضي للمشي الكلاسيكي. و لكن هذه المرة سنحتاج لتسمية الوصلات التي تنطلق من كل عقدة كما هو مبين في الشكل المجاور. حيث سنعرف العقد كما عرفناها سابقا (شعاعا يتكون من سبع مركبات). نضيف هذه المرة أشعة وحدة تصف الوصلات الثلاث لكل عقدة كما هو مبين في الشكل المقابل, نسميها d_0، d_1 و d_2 حيث

$$|d_0\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} |d_1\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} |d_2\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix} \qquad (3\text{-}01)$$

الشكل 1.3:تمثل مكعب يتكون من 8 عقد معلم الوصلات.

كل خطوة تتم على النحو التالي حيث نقول مثلا أن المتحرط ينطلق من العقدة 0 من جهة وصلتها d_0إلى العقدة 1 من جهة وصلتها d_0و نكتبها رياضيا على الشكل:

$$|1\rangle\langle 0| \otimes |d_0\rangle\langle d_0| = |1, d_0\rangle\langle 0, d_0| \qquad (3\text{-}02)$$

ومنه نكتب مصفوفة الخطوات الخاصة بالعقدكالتالي:

$$\begin{aligned}
A_0 &= (|1,d_0\rangle\langle 0,d_0| + |2,d_1\rangle\langle 0,d_1| + |4,d_2\rangle\langle 0,d_2|)\\
A_1 &= (|0,d_0\rangle\langle 1,d_0| + |3,d_1\rangle\langle 1,d_1| + |5,d_2\rangle\langle 1,d_2|)\\
A_2 &= (|3,d_0\rangle\langle 2,d_0| + |0,d_1\rangle\langle 2,d_1| + |6,d_2\rangle\langle 2,d_2|)\\
A_3 &= (|2,d_0\rangle\langle 3,d_0| + |1,d_1\rangle\langle 3,d_1| + |7,d_2\rangle\langle 3,d_2|)\\
A_4 &= (|5,d_0\rangle\langle 4,d_0| + |6,d_1\rangle\langle 4,d_1| + |0,d_2\rangle\langle 4,d_2|)\\
A_5 &= (|4,d_0\rangle\langle 5,d_0| + |7,d_1\rangle\langle 5,d_1| + |1,d_2\rangle\langle 5,d_2|)\\
A_6 &= (|7,d_0\rangle\langle 6,d_0| + |4,d_1\rangle\langle 6,d_1| + |2,d_2\rangle\langle 6,d_2|)\\
A_7 &= (|6,d_0\rangle\langle 7,d_0| + |5,d_1\rangle\langle 7,d_1| + |3,d_2\rangle\langle 7,d_2|)
\end{aligned} \qquad (3\text{-}03)$$

لايجاد مصوفة الانتقال أو التطور نضرب كل مصفوفة خطوات بمؤثر العملة G_3، أي:

$$\begin{aligned}
M_0 &= A_0 \cdot (|0\rangle\langle 0| \otimes G_3)\\
M_1 &= A_1 \cdot (|1\rangle\langle 1| \otimes G_3)\\
&\vdots\\
M_7 &= A_7 \cdot (|7\rangle\langle 7| \otimes G_3)
\end{aligned} \qquad (3\text{-}04)$$

حيث G_3 هو مؤثريسمى مؤثر العملة و هو مؤثر واحدي ولكن غير متساوي الفرص:

$$G_3 = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \end{pmatrix} / \;\; G_3 {G_3}^{\dagger} = {G_3}^{\dagger} G_3 = \mathbb{1} \qquad (3\text{-}05)$$

بجمع جميع المصفوفات التطور الخاصة بكل عقدة نتحصل على مصفوفة التطور الكلية:

$$M = \sum_{n=0}^{7} M_n \qquad (3\text{-}06)$$

ملاحظة: يمكننا استعمال مؤثرات عملة أخرى مثل مؤثر فورييه هو مؤثر متساوي الفرص و الذي شكله كالتالي:

$$F_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & e^{\frac{-i2\pi}{3}} & e^{\frac{-i2\pi}{3}\times 2} \\ 1 & e^{\frac{-i2\pi}{3}\times 2} & e^{\frac{-i2\pi}{3}\times 4} \end{pmatrix} / \;\; F_3 {F_3}^{\dagger} = {F_3}^{\dagger} F_3 = \mathbb{1} \qquad (3\text{-}07)$$

سنختار الأن الحالة الابتدائية حيث الأن سنعمل في فضاء الحالات (فضاء هيلبارت)، أي:

$$|\psi(0)\rangle = |0, d_0\rangle \qquad (3\text{-}08)$$

و منه تكون معادلة التطور الزمني للحركة كالتالي:

$$|\psi(T)\rangle = M^T |\psi(0)\rangle \qquad (3\text{-}09)$$

للحصول على مركبات $\psi_n(T)$ الخاصة بكل عقدة n نقوم بالتأثير بمؤثر الاسقاط $\mathbb{M}_n$، أي:

$$\psi_n(T) = \mathbb{M}_n \cdot \psi(T)$$
$$\psi_n(T) = [\mathbb{1}_d \otimes |n\rangle\langle n|] \cdot \psi(T) \qquad (3\text{-}10)$$

يمكننا أن نحسب الاحتمال الجزئي لتواجد الجسيمة عند كل عقدة معينة n من مجموع العقد. عن طريق الجداء السلمي لـ $\psi_n(T)$ مع نفسه.

$$P_n(T) = \langle \psi_n(T) | \psi_n(T) \rangle \qquad (3\text{-}11)$$

ومنه في الأخير نجد عبارة شعاع الاحتمال الكلي:

$$P(T) = \sum_{n=0}^{7} P_n(T) |n\rangle \qquad (3\text{-}12)$$

هنا نكون قد انتهاينا من بناء المعادلات و يمكننا تحرير برنامج ليقوم بالحسابات.

2.3حالة المشي الكمي في حالة الخط المحدود:

في حالة الخط المستقيم المحدود من الطرفين تكون مصفوفة الخطوات الخاصة بكل عقدة على النحو التالي:

الشكل 2.3:خط مستقيم محدود من الطرفين يتكون من 4 عقد.

$$A_0 = (|1, d_1\rangle\langle 0, d_0| + |0, d_1\rangle\langle 0, d_1|)$$
$$A_1 = (|2, d_1\rangle\langle 1, d_0| + |0, d_0\rangle\langle 1, d_1|) \qquad (3\text{-}13)$$
$$A_2 = (|3, d_1\rangle\langle 2, d_0| + |1, d_0\rangle\langle 2, d_1|)$$

$$A_3 = (|3, d_0\rangle\langle 3, d_0| + |2, d_0\rangle\langle 3, d_1|)$$

حيث:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}, |1\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}, |2\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix}, |3\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix} \tag{3-14}$$

$$|d_0\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, |d_1\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

مصفوفة التطور لكل عقدة تصبح إذن:

$$\begin{aligned} M_0 &= A_0 \cdot (|0\rangle\langle 0| \otimes \mathbb{1}_2) \\ M_1 &= A_1 \cdot (|1\rangle\langle 1| \otimes H_2) \\ M_2 &= A_2 \cdot (|2\rangle\langle 2| \otimes H_2) \\ M_3 &= A_3 \cdot (|3\rangle\langle 3| \otimes \mathbb{1}_2) \end{aligned} \tag{3-15}$$

حيث H_2 هي مؤثر العملة و هو مؤثر واحدي متساوي الفرص و عبارته من الشكل:

$$H_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\1 & -1\end{bmatrix} \quad , \quad \mathbb{1}_2 = \begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix} \tag{3-16}$$

سنختار الأن الحالة الابتدائية:

$$|\psi(0)\rangle = |0, d_0\rangle \tag{3-17}$$

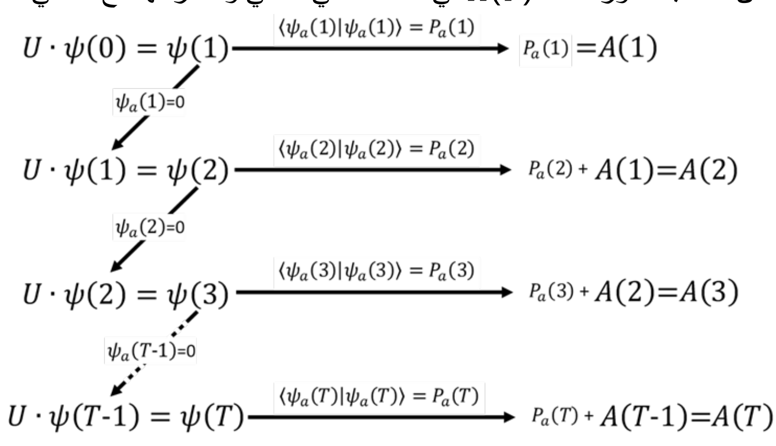
الخطوات و المعادلات المتبقية هي نفسها كما في حالة المكعب. و لا يبقى لنا سوى كتابة البرنامج4 (أنظر إلى الملحق) و الحصول على النتائج.

3.3خاصية الانتقال:

نفس الطريقة بالنسبة للمشي العشوائي الكلاسيكي، حيث سنحافظ على جميع التعريفات والأفكار في حالة المشي العشوائي الكلاسيكي مع تغيير معادلات الحركة إلى معادلات الحركة الخاصة بالمشي الكمي. حيث ستصبح دالة انتزاع قيمة الاحتمال A(T)كمايلي[17]:

$$A(T) = \sum_{t=0}^{T} \langle \psi_a(t) | \psi_a(t) \rangle = \sum_{t=0}^{T} P_a(t) \tag{3-18}$$

الشكل 3.3 توضح فكرة حساب خاصية الانتقال في شكل مخطط توضيحي عن طريق المعادلات و خطوة بعد خطوة. و بالتالي يمكننا في النهاية من حساب تطور الدالة $A(T)$ في حالة المشي الكمي و مقارنتها مع المشي الكلاسيكي.

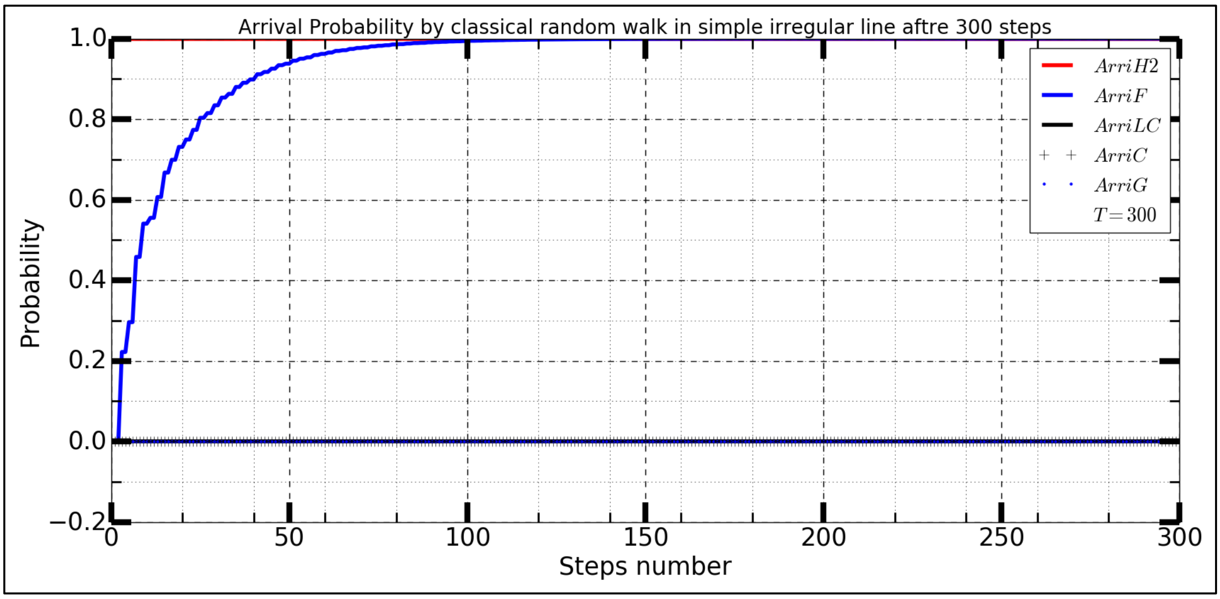


الشكل 3.3:تبين طريقة حساب خاصية الانتقال في شكل مخطط عن طريق المعادلات خطوة بخطوة.

4.3المقارنة بين المكعب و الخط المحدود ذو الأربع مستويات:

حيث نلاحظ ان سرعة نقل الاحتمال للخط في المشي الكمي H_2هي الاسرع والاكفا مقارنة بالمكعب بالنسبة للمشي الكمي F غير انهما يتساويان في نقل الاحتمال في الخطوة تقريبا 70 .

نلاحظ انعدام سرعة نقل الاحتمال للمشي الكمي G.



الشكل 4.3: تطور الإحتمال لكل من المكعب و الخط المحدود ذو الأربع مستويات.

الفصل الرابع

المشي العشوائي الكلاسيكي والمشي الكمي عبر بنى الجرافين

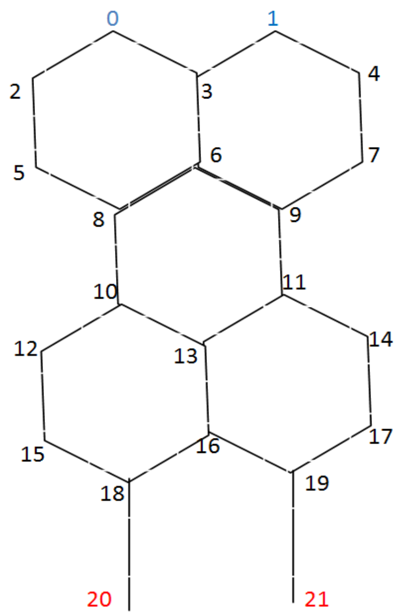
1.4المقدمة

في فصلنا هذا سنقوم بتطبيق المشي العشوائي الكلاسيكي والكمي على بنى الغرافين ذات البنية الكربونية من خلال التعامل معها كعقدة مجردة ،حيث أن بنى الغرافين تتميز بتناظرها وبنيتها المعقدة نوعا ما مقارنة بما تعرضنا إليه في الفصلين السابقين.هذه البنى تتميز بتناظر مضلعاتها الخماسية والسداسية والتي لها دور مهم في اختيار مجموعة العقد التي ستشكل موضع الانطلاق ومجموعة العقد التي ستشكل موضع الهدف، من خلال الاختبار وتحليل النتائجسنمربتطورتوزع الاحتمال ووصولا إلى خاصية الانتقال.

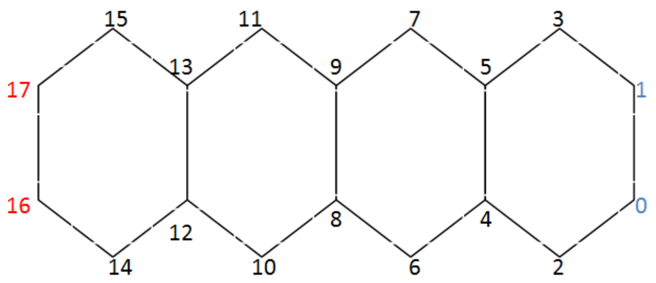
أولا سنقوم بدراسة بعض بنى أنابيب النانو الكربونية بصنفين، zigzag وarmchairومقارنتها بخط مكون من 9 عقد،كل هذا العمل كلل بنتائج مهمة وأكثر كفاءة بخصوص المشي الكمي مقارنته بالكلاسيكي، كما تعتبرانها أفضل من المشي الكمي لبعض البنى المدروسة سابقا.

2.4 وريقات النانو الكربونية (الzigzagوarmchair):

تتكون بنى الغرافين من ذرات الكربون ذات ثلاث وصلات ،تتصل بثلاث ذرات مجاورة لها مشكلة سداسيات متتالية ومتراصة في شكل منبسط ومستو.وإذا لفت وفق الاتجاه zigzagفإننا سنحصل على أنبوب مفتوح من نوع zigzag،وإذا لفت وفق اتجاه الarmchairفإننا سنحصل على أنبوب مفتوح armchair. أنابيب النانو المفتوحة هي بنى غير منتظمة بسبب العقد الطرفية التي تملك وصلتين فقط ولهذا قمنا بطريقتين مميزتين وهي الzigzag وarmchair.



الشكل 1.4:تمثل سداسيات الكربون وفق الاتجاه الarmchair(العقدتان باللون الأزرق0و1 تمثلان عقدتا الانطلاق والعقدتان باللون الأحمر 20و21 يمثلان عقدتا الوصول)



الشكل2.4:تمثل سداسيات الكربون وفق الاتجاه الzigzag(العقدتان باللون الأزرق0و1 تمثلان عقدتا الانطلاق والعقدتان باللون الأحمر 16و17 يمثلان عقدتا الوصول).

1.2.4المعادلات التي تخص armchair:

مصفوفة الخطوات لكل عقدة من بنية الـ Armchair:

$$
\begin{aligned}
A_0 &= (|2,d_0\rangle\langle 0,d_1| + |3,d_0\rangle\langle 0,d_0| + |0,d_2\rangle\langle 0,d_2|)\\
A_1 &= (|3,d_1\rangle\langle 1,d_1| + |4,d_0\rangle\langle 1,d_0| + |1,d_2\rangle\langle 1,d_2|)\\
A_2 &= (|0,d_0\rangle\langle 2,d_0| + |5,d_2\rangle\langle 2,d_2| + |2,d_0\rangle\langle 2,d_0|)\\
A_3 &= (|0,d_0\rangle\langle 3,d_0| + |1,d_1\rangle\langle 3,d_1| + |6,d_2\rangle\langle 3,d_2|)\\
A_4 &= (|1,d_0\rangle\langle 4,d_0| + |7,d_2\rangle\langle 4,d_2| + |4,d_1\rangle\langle 4,d_1|)\\
A_5 &= (|2,d_2\rangle\langle 5,d_2| + |8,d_0\rangle\langle 5,d_0| + |5,d_1\rangle\langle 5,d_1|)\\
A_6 &= (|3,d_2\rangle\langle 6,d_2| + |8,d_1\rangle\langle 6,d_1| + |9,d_0\rangle\langle 6,d_0|)\\
A_7 &= (|4,d_2\rangle\langle 7,d_2| + |9,d_1\rangle\langle 7,d_1| + |7,d_0\rangle\langle 7,d_0|)\\
A_8 &= (|5,d_0\rangle\langle 8,d_0| + |6,d_1\rangle\langle 8,d_1| + |10,d_2\rangle\langle 8,d_2|)\\
A_9 &= (|6,d_0\rangle\langle 9,d_0| + |7,d_1\rangle\langle 9,d_1| + |11,d_2\rangle\langle 9,d_2|)\\
A_{10} &= (|8,d_2\rangle\langle 10,d_2| + |12,d_1\rangle\langle 10,d_1| + |13,d_0\rangle\langle 10,d_0|)\\
A_{11} &= (|9,d_2\rangle\langle 11,d_2| + |13,d_1\rangle\langle 11,d_1| + |14,d_0\rangle\langle 11,d_0|)\\
A_{12} &= (|10,d_1\rangle\langle 12,d_1| + |15,d_2\rangle\langle 12,d_2| + |12,d_0\rangle\langle 12,d_0|)\\
A_{13} &= (|10,d_0\rangle\langle 13,d_0| + |11,d_1\rangle\langle 13,d_1| + |16,d_2\rangle\langle 13,d_2|)\\
A_{14} &= (|11,d_0\rangle\langle 14,d_0| + |17,d_2\rangle\langle 14,d_2| + |14,d_1\rangle\langle 14,d_1|)\\
A_{15} &= (|12,d_2\rangle\langle 15,d_2| + |18,d_0\rangle\langle 15,d_0| + |15,d_1\rangle\langle 15,d_1|)\\
A_{16} &= (|13,d_2\rangle\langle 16,d_2| + |18,d_1\rangle\langle 16,d_1| + |19,d_0\rangle\langle 16,d_0|)\\
A_{17} &= (|14,d_2\rangle\langle 17,d_2| + |19,d_1\rangle\langle 17,d_1| + |17,d_0\rangle\langle 17,d_0|)\\
A_{18} &= (|15,d_0\rangle\langle 18,d_0| + |16,d_1\rangle\langle 18,d_1| + |20,d_2\rangle\langle 18,d_2|)\\
A_{19} &= (|16,d_0\rangle\langle 19,d_0| + |17,d_1\rangle\langle 19,d_1| + |21,d_2\rangle\langle 19,d_2|)\\
A_{20} &= (|18,d_2\rangle\langle 20,d_2| + |20,d_1\rangle\langle 20,d_1| + |20,d_0\rangle\langle 20,d_0|)\\
A_{21} &= (|19,d_2\rangle\langle 21,d_2| + |21,d_1\rangle\langle 21,d_1| + |21,d_0\rangle\langle 21,d_0|)
\end{aligned}
\tag{4-01}
$$

مصفوفة التطور لكل عقدة من بنية الـ Armchair:

M_0=A_0.($\|0\rangle\langle 0\|\otimes \mathrm{Hd}_2$)	M_8=A_8.($\|8\rangle\langle 8\|\otimes \mathrm{G}_3$)	M_{16}=A_{16}.($\|16\rangle\langle 16\|\otimes \mathrm{G}_3$)
M_1=A_1.($\|1\rangle\langle 1\|\otimes \mathrm{Hd}_2$)	M_9=A_9.($\|9\rangle\langle 9\|\otimes \mathrm{G}_3$)	M_{17}=A_{17}.($\|17\rangle\langle 17\|\otimes \mathrm{Hd}_0$)
M_2=A_2.($\|2\rangle\langle 2\|\otimes \mathrm{Hd}_0$)	M_{10}=A_{10}.($\|10\rangle\langle 10\|\otimes \mathrm{G}_3$)	M_{18}=A_{18}.($\|18\rangle\langle 18\|\otimes \mathrm{G}_3$)
M_3=A_3.($\|3\rangle\langle 3\|\otimes \mathrm{G}_3$)	M_{11}=A_{11}.($\|11\rangle\langle 11\|\otimes \mathrm{G}_3$)	M_{19}=A_{19}.($\|19\rangle\langle 19\|\otimes \mathrm{G}_3$)
M_4=A_4.($\|4\rangle\langle 4\|\otimes \mathrm{Hd}_1$)	M_{12}=A_{12}.($\|12\rangle\langle 12\|\otimes \mathrm{Hd}_0$)	M_{20}=A_{20}.($\|20\rangle\langle 20\|\otimes \mathrm{Hd}_0$)
M_5=A_5.($\|5\rangle\langle 5\|\otimes \mathrm{Hd}_1$)	M_{13}=A_{13}.($\|13\rangle\langle 13\|\otimes \mathrm{G}_3$)	M_{20}=A_{20}.($\|20\rangle\langle 20\|\otimes \mathrm{Hd}_1$)
M_6=A_6.($\|6\rangle\langle 6\|\otimes \mathrm{G}_3$)	M_{14}=A_{14}.($\|14\rangle\langle 14\|\otimes \mathrm{Hd}_1$)	M_{21}=A_{21}.($\|21\rangle\langle 21\|\otimes \mathrm{Hd}_0$)
M_7=A_7.($\|7\rangle\langle 7\|\otimes \mathrm{Hd}_0$)	M_{15}=A_{15}.($\|15\rangle\langle 15\|\otimes \mathrm{Hd}_1$)	M_{21}=A_{21}.($\|21\rangle\langle 21\|\otimes \mathrm{Hd}_1$)

الشكل 3.4 :تمثل مصفوفة التطور من بنية الـ Armchair.

ومنه مؤثر التطور الكلي هو:

$$M = \sum_{n=0}^{21} M_n \tag{4-02}$$

يمكن أن نستبدل مؤثر G_3 الغير متساوي الفرص بمؤثر F_3 المتساوي الفرص و نقارن النتائج.

الحالة الابتدائية سنختاره من الشكل:

$$|\psi(0)\rangle = |1, d_1\rangle \tag{4-03}$$

2.2.4 المعادلات التي تخص zigzag:

مصفوفة الخطوات لكل عقدة من بنية الـ zigzag:

$$\begin{aligned}
A_0 &= (|1,d_2\rangle\langle 0,d_2| + |2,d_1\rangle\langle 0,d_1| + |0,d_0\rangle\langle 0,d_0|)\\
A_1 &= (|0,d_2\rangle\langle 1,d_2| + |3,d_0\rangle\langle 1,d_0| + |1,d_1\rangle\langle 1,d_1|)\\
A_2 &= (|0,d_2\rangle\langle 2,d_2| + |4,d_0\rangle\langle 2,d_0| + |2,d_1\rangle\langle 2,d_1|)\\
A_3 &= (|5,d_1\rangle\langle 3,d_1| + |1,d_0\rangle\langle 3,d_0| + |3,d_2\rangle\langle 3,d_2|)\\
A_4 &= (|5,d_2\rangle\langle 4,d_2| + |6,d_1\rangle\langle 4,d_1| + |2,d_0\rangle\langle 4,d_0|)\\
A_5 &= (|4,d_2\rangle\langle 5,d_2| + |7,d_0\rangle\langle 5,d_0| + |3,d_1\rangle\langle 5,d_1|)\\
A_6 &= (|6,d_2\rangle\langle 6,d_2| + |8,d_0\rangle\langle 6,d_0| + |4,d_1\rangle\langle 6,d_1|)\\
A_7 &= (|9,d_1\rangle\langle 7,d_1| + |5,d_0\rangle\langle 7,d_0| + |7,d_2\rangle\langle 7,d_2|)\\
A_8 &= (|9,d_2\rangle\langle 8,d_2| + |10,d_1\rangle\langle 8,d_1| + |6,d_0\rangle\langle 8,d_0|)\\
A_9 &= (|8,d_2\rangle\langle 9,d_2| + |11,d_0\rangle\langle 9,d_0| + |7,d_1\rangle\langle 9,d_1|)\\
A_{10} &= (|10,d_2\rangle\langle 10,d_2| + |12,d_0\rangle\langle 10,d_0| + |8,d_1\rangle\langle 10,d_1|)\\
A_{11} &= (|13,d_1\rangle\langle 11,d_1| + |9,d_0\rangle\langle 11,d_0| + |11,d_2\rangle\langle 11,d_2|)\\
A_{12} &= (|14,d_1\rangle\langle 12,d_1| + |10,d_0\rangle\langle 12,d_0| + |13,d_2\rangle\langle 12,d_2|)\\
A_{13} &= (|11,d_1\rangle\langle 13,d_1| + |15,d_0\rangle\langle 13,d_0| + |12,d_2\rangle\langle 13,d_2|)\\
A_{14} &= (|12,d_1\rangle\langle 14,d_1| + |16,d_0\rangle\langle 14,d_0| + |14,d_2\rangle\langle 14,d_2|)\\
A_{15} &= (|17,d_1\rangle\langle 15,d_1| + |13,d_0\rangle\langle 15,d_0| + |15,d_2\rangle\langle 15,d_2|)\\
A_{16} &= (|16,d_1\rangle\langle 16,d_1| + |14,d_0\rangle\langle 16,d_0| + |17,d_2\rangle\langle 16,d_2|)\\
A_{17} &= (|15,d_1\rangle\langle 17,d_1| + |17,d_0\rangle\langle 17,d_0| + |16,d_2\rangle\langle 17,d_2|)
\end{aligned} \tag{4-04}$$

مصفوفة التطور لكل عقدة من بنية الـ zigzag:

M_0=A_0.(|0⟩⟨0|⊗Hd_1)	M_6=A_6.(|6⟩⟨6|⊗Hd_2)	M_{12}=A_{12}.(|12⟩⟨12|⊗G_3)
M_1=A_1.(|1⟩⟨1|⊗Hd_1)	M_7=A_7.(|7⟩⟨7|⊗Hd_2)	M_{13}=A_{13}.(|13⟩⟨13|⊗G_3)
M_2=A_2.(|2⟩⟨2|⊗Hd_2)	M_8=A_8.(|8⟩⟨8|⊗G_3)	M_{14}=A_{14}.(|14⟩⟨14|⊗Hd_2)
M_3=A_3.(|3⟩⟨3|⊗Hd_2)	M_9=A_9.(|9⟩⟨9|⊗G_3)	M_{15}=A_{15}.(|15⟩⟨15|⊗Hd_2)
M_4=A_4.(|4⟩⟨4|⊗G_3)	M_{10}=A_{10}.(|10⟩⟨10|⊗Hd_2)	M_{16}=A_{16}.(|16⟩⟨16|⊗Hd_0)
M_5=A_5.(|5⟩⟨5|⊗G_3)	M_{11}=A_{11}.(|11⟩⟨11|⊗Hd_2)	M_{17}=A_{17}.(|17⟩⟨17|⊗Hd_0)

الشكل 4.4:تمثل مصفوفة التطور من بنية الـzigzag .

ومنه مؤثر التطور الكلي هو:

$$M = \sum_{n=0}^{17} M_n \tag{4-05}$$

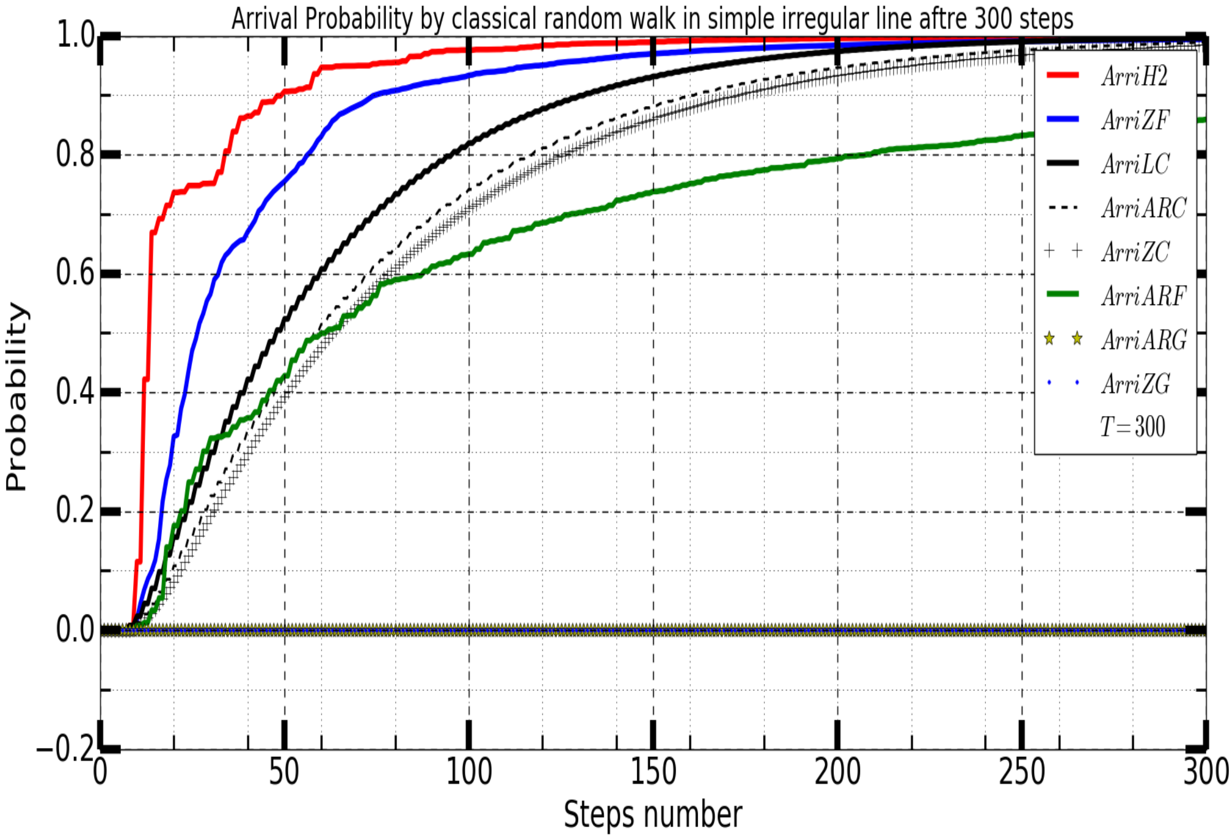
يمكن أن نستبدل مؤثر G_3 الغير متساوي الفرص بمؤثر F_3 المتساوي الفرص و نقارن النتائج.

الحالة الابتدائية سنختاره من الشكل:

$$|\psi(0)\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{4}}\right)(|0,d_0\rangle + |0,d_2\rangle + |1,d_2\rangle + |1,d_0\rangle) \tag{4-06}$$

3.4 المقارنة بين ورقةالzigzagوarmchair وخط ذو 9 عقد:

بعد تحرير البرنامج(5) وتنفيذه ودراستنا لـ17 عقدة وفق اتجاه zigzag و21عقدة وفق اتجاهarmchair(8مستويات) ومقارنتهما مع خط مكون من 9 عقد و8مستويات تحصلنا على النتائج الموضحة في **الشكل 5.4** حيث نلاحظ أن الغلبة تكون في البداية للخط (H_2)ينقل الاحتمال الكلي في الخطوة 150، ثم تأتي أنابيب الzigzag (ZF) تنقل الاحتمال الكلي تقريبا بعد الخطوة 180 بعدهما يأتي أنبوب ال armchair (نقل أكثر من 33%من الاحتمال الكلي) ثم يتغلب عليه نقل احتمال الكلاسيكي للخط (LC) (في الخطوة حوالي25) وينقل الاحتمال الكلي بعد الخطوة 200 ،أما نلاحظ نقل الاحتمال الكلاسيكي لzigzag و armchair تقريبا متساويان وينقلان الاحتمال الكلي إلا بعد الخطوة 300 . أما فيما يخص (ARG)و(ZG)لا وجود لنقل الاحتمال (منعدم).



الشكل 5.4:تطور الاحتمال الممتص في بنية مثل الzigzagوarmchair والخط يتكونوا من ثمانية مستويات بدلالة الخطوات.

حيث نلاحظ أن سرعة نقل الاحتمال الكلاسيكي والكمي للخط أفضل من الzigzagوarmchair.

المشي الكمي F_3 أفضل في نقل الاحتمال مقارنة بG_3 الذي كانت قيمة سرعة نقل احتماله منعدمة بدلالة الخطوات.

الخلاصة

المواد ثنائية البعد هي مواد جديدة فريدة تم اكتشافها منذ عزل الجرافين عام 2004 م واعتبرت من أهم المواد المكتشفة في القرن 21م وهي محط اهتمام العلماء والباحثين نتيجة خصائصها وقدرتها الفيزيائية ومستقبلها الواعد.لا تزال هذه المواد وتطبيقاتها قيد الدراسة والاكتشاف.

في هذه المذكرة قمنا بالتعريف بهذه المواد. تطرقنا إلى أهم خصائصها وتطبيقاتها. كما تطرقنا إلى دراسة فكرة المشي العشوائي الكلاسيكي والكمي عبر بعض البنى وخاصة الغرافين.أنجزنا البرنامج بلغة البرمجة بايثون واستعمال القارئ

Enthoughtcanopy. أهم ما يمكن أن نستخلصه في هذا البحث هو تمكننا من معرفة خاصية الانتقال عن طريق المشي العشوائي الكمي للخط كانت أكثر كفاءة وسرعة في نقل الاحتمال الكلي مقارنة من الzigzagوarmchair.

وجدنا أيضا أن المشي الكمي F_3 أفضل في نقل الاحتمال مقارنة G_3في ورقتي النانو بنوعيها الzigzagوarmchair.

يعتبر الانتقال الكمي أو الانتقال الكلي ل zigzag المصنف ضمن النواقل هو الأسرع والأكفأ من ال armchair المصنف ضمن المعادن. إذن عمليا يمكننا القول من خلال مقارنتنا ل zigzagوarmchair مع الخط، استنتجنا بأنه هذا الأخير هوالأكفأ والأسرع في نقل الاحتمال الكلي.

الملحق:

البرامج الحاسوبية

البرنامج1: تطور الاحتمال الكلي للمكعب

```
Print('بسماللهالرحمنالرحيم')
#Author: RAMI AND OUSSAMA
#===== Import the requirement module
==================================================
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib.ticker import AutoMinorLocator
from matplotlib.ticker import MultipleLocator
#====== Define the critical number
=====================================================
T = 100     # number of random steps
N = 8 # number of node or vertex
#====== Define steps ==================================
n1=np.array([1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
n2=np.array([0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
n3=np.array([0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0])
n4=np.array([0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0])
n5=np.array([0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0])
n6=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0])
n7=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0])
n8=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1])
s1= np.outer(n2, n1)
s2= np.outer(n3, n1)
s3= np.outer(n5, n1)
s4= np.outer(n1, n2)
s5= np.outer(n4, n2)
s6= np.outer(n6, n2)
s7= np.outer(n1, n3)
s8= np.outer(n4, n3)
s9= np.outer(n7, n3)
s10= np.outer(n2, n4)
s11= np.outer(n3, n4)
s12= np.outer(n8, n4)
s13= np.outer(n1, n5)
s14= np.outer(n6, n5)
s15= np.outer(n7, n5)
s16= np.outer(n2, n6)
s17= np.outer(n5, n6)
s18= np.outer(n8, n6)
s19= np.outer(n3, n7)
s20= np.outer(n5, n7)
s21= np.outer(n8, n7)
s22= np.outer(n4, n8)
s23= np.outer(n6, n8)
s24= np.outer(n7, n8)
```

```
s25= np.outer(n1, n1)
s26= np.outer(n2, n2)
s27= np.outer(n3, n3)
s28= np.outer(n4, n4)
s29= np.outer(n5, n5)
s30= np.outer(n6, n6)
s31= np.outer(n7, n7)
s32= np.outer(n8, n8)
#===== Evolution operator ==================
F3=s1+s2+s3+s4+s5+s6+s7+s8+s9+s10+s11+s12+s13+s14+s15+s16+s17+s18+s1
9+s20+s21+s22+s23+s24
F4= F3+s25+s26+s27+s28+s29+s30+s31+s32
AC4 = F4/(4.)
AC3 = F3/(3.)
#==== Define the initial state Psi(zero) ============
posn0 = n1
#==========evolution equation======================
Prob_TC3 = np.linalg.matrix_power(AC3, T).dot(posn0)     # P(T)=(A^T)P(t=0)
Prob_TC4 = np.linalg.matrix_power(AC4, T).dot(posn0)
#======classic: 3D ====================
xC3=np.sum(Prob_TC3)
xC4=np.sum(Prob_TC4)
#======Plot the probability==================
minorLocator = AutoMinorLocator()
fig, ax = plt.subplots()
plt.plot(Prob_TC3, 'ko--', label='$C_3,,'+str(xC3)+'$', markersize=10, linewidth=7)
plt.plot(Prob_TC4, 'b*--', label='$C_4,,'+str(xC4)+'$', markersize=10, linewidth=7)
A = np.array([[Prob_TC3,Prob_TC4]])
y = (np.max (A))
plt.text((((N-1)/2)+(N/4)), y, '$T= '+str(T)+'$',
fontweight='heavy',bbox={'facecolor':'red', 'alpha':0.5, 'pad':10}, fontsize=65)
ax.xaxis.set_minor_locator(minorLocator)
ax.yaxis.set_minor_locator(minorLocator)
ax.grid(which='both')
ax.grid(which='minor', lw=0.5, ls=':')
ax.grid(which='major', lw=1, ls='--')
ax.tick_params(axis='x', which='major', labelsize=70, width=6, length=20, colors='k')
ax.tick_params(axis='x', which='minor', labelsize=70, width=2, length=10, colors='k')
ax.tick_params(axis='y', which='major', labelsize=70, width=6, length=20, colors='k')
ax.tick_params(axis='y', which='minor', labelsize=70, width=2, length=10, colors='k')
ax.set_xlabel('Steps number', fontsize=65)
ax.set_ylabel('Probability', color='k', fontsize=65)
for tl in ax.get_yticklabels():
tl.set_color('k')
ax.xaxis.set_minor_locator(MultipleLocator(50))
ax.yaxis.set_minor_locator(MultipleLocator(0.10))
plt.title('classical random walk in simple cubiqueaftre ' + str(N) + ' steps', fontsize=50)
plt.legend(fontsize=50)
figManager = plt.get_current_fig_manager()
figManager.window.showMaximized()
```

```
plt.tight_layout()
plt.show()
print ('xC3=',xC3)
print ('xC4=',xC4)
print('الحمدلله')
#=== End of the code=========
```

<u>البرنامج 2:تطور الاحتمال الكلي لمكعبين مشتركين بعقدة</u>

```
print('بسماللهالرحمنالرحيم')
#Author: RAMI MEBAREK
 =====#Import the requirement module
=================================================
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib.ticker import AutoMinorLocator
from matplotlib.ticker import MultipleLocator
 ======#Define the critical number
====================================================
T = 100  # number of random steps
N = 15# number of node or vertex
 ======#Define steps==================================
n1=np.array([1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
n2=np.array([0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
n3=np.array([0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
n4=np.array([0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
n5=np.array([0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
n6=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
n7=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
n8=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
n9=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
n10=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0])
n11=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0])
n12=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0])
n13=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0])
n14=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0])
n15=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1])
s1= ( np.outer(n2, n1)+np.outer(n3, n1)+np.outer(n5, n1))* (1/(3.))
s2= (np.outer(n1, n2)+ np.outer(n4, n2)+np.outer(n6, n2))* (1/(3.))
s3= (np.outer(n1, n3)+ np.outer(n4, n3)+ np.outer(n7, n3))* (1/(3.))
s4= (np.outer(n2, n4)+np.outer(n3, n4)+np.outer(n8, n4))* (1/(3.))
s5= (np.outer(n1, n5)+np.outer(n6, n5)+ np.outer(n7, n5))* (1/(3.))
s6= (np.outer(n2, n6)+np.outer(n5, n6)+np.outer(n8, n6))* (1/(3.))
s7= (np.outer(n3, n7)+ np.outer(n5, n7)+np.outer(n8, n7))* (1/(3.))
s8= (np.outer(n4, n8)+np.outer(n6, n8)+np.outer(n7, n8)+np.outer(n9,
n8)+np.outer(n10, n8)+ np.outer(n12, n8))*(1/(6)).
s9= (np.outer(n8, n9)+np.outer(n11, n9)+np.outer(n13, n9))* (1/(3.))
s10= (np.outer(n8, n10)+np.outer(n11, n10)+np.outer(n14, n10))* (1/(3.))
s11= (np.outer(n9, n11)+np.outer(n10, n11)+ np.outer(n15, n11))* (1/(3.))
s12= (np.outer(n8, n12)+np.outer(n13, n12)+ np.outer(n14, n12))* (1/(3.))
s13= (np.outer(n9, n13)+np.outer(n12, n13)+np.outer(n15, n13))* (1/(3.))
s14= (np.outer(n10, n14)+np.outer(n12, n14)+np.outer(n15, n14))* (1/(3.))
```

```
s15= (np.outer(n11, n15)+np.outer(n13, n15)+np.outer(n14, n15))* (1/(3.))
 =====#Evolution operator=====================
AC= s1+s2+s3+s4+s5+s6+s7+s8+s9+s10+s11+s12+s13+s14+s15
 ====#Define the initial state Psi(zero)=============
posn0 = n1
==========#evolutionequation========================
Prob_TC = np.linalg.matrix_power(AC, T).dot(posn0)     # P(T)=(A^T)P(t=0)
======#classic: 3D=====================
xC=np.sum(Prob_TC)
probC=Prob_TC
======#Plot the probability====================
minorLocator = AutoMinorLocator()
fig, ax = plt.subplots()
plt.plot(Prob_TC, 'ko--', label='$C_,,'+str(xC)+'$', markersize=10, linewidth=7(
plt.xticks(range (1, N))
ax.set_xticklabels(range (1, N))
A = np.array([[Prob_TC]])
y = (np.max (A))
plt.text((((N-1)/2)+(N/4)), y, '$T= '+str(T)+'$',
fontweight='heavy',bbox={'facecolor':'red', 'alpha':0.5, 'pad':10}, fontsize=65)
ax.xaxis.set_minor_locator(minorLocator)
ax.yaxis.set_minor_locator(minorLocator)
ax.grid(which='both('
ax.grid(which='minor', lw=0.5, ls':'=)
ax.grid(which='major', lw=1, ls'--'=)
ax.tick_params(axis='x', which='major', labelsize=70, width=6, length=20, colors='k')
ax.tick_params(axis='x', which='minor', labelsize=70, width=2, length=10, colors='k')
ax.tick_params(axis='y', which='major', labelsize=70, width=6, length=20, colors='k')
ax.tick_params(axis='y', which='minor', labelsize=70, width=2, length=10, colors='k')
ax.set_xlabel('Steps number', fontsize=65)
ax.set_ylabel('Probability', color='k', fontsize=65)
for tl in ax.get_yticklabels:()
tl.set_color('k')
ax.xaxis.set_minor_locator(MultipleLocator(50))
ax.yaxis.set_minor_locator(MultipleLocator(0.10))
plt.title('classical random walk stargraphaftre ' + str(T) + ' steps', fontsize=50)
plt.legend(fontsize=50)
figManager = plt.get_current_fig_manager()
figManager.window.showMaximized()
plt.tight_layout()
plt.show()
print ('xC=',xC)
print('الحمدلله')
 ===#End of the code========
```

البرنامج 3:تطور الاحتمال الكلي للمكعب وخط ذو اربعة عقد

```
print('بسم الله الرحمن الرحيم')
'Title: Arrival Probability by classical random walk in different stuctures'
#===== Import the requirement module ==============
import numpy as np
```

```
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib.ticker import AutoMinorLocator
from matplotlib.ticker import MultipleLocator
#====== Define the critical number ================
T = 100 # number of random steps
#====== Define nodes ===============================
nL0=np.array([1, 0, 0, 0])
nL1=np.array([0, 1, 0, 0])
nL2=np.array([0, 0, 1, 0])
nL3=np.array([0, 0, 0, 1])
nC0=np.array([1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nC1=np.array([0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nC2=np.array([0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0])
nC3=np.array([0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0])
nC4=np.array([0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0])
nC5=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0])
nC6=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0])
nC7=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1])
#===========define steps#=================================
sL0= (np.outer(nL1,nL0))*1
sL1= (np.outer(nL0,nL1)+np.outer(nL2,nL1))*(1/(2.))
sL2= (np.outer(nL1,nL2)+np.outer(nL3,nL2))*(1/(2.))
sL3= (np.outer(nL2,nL3))*1
sC0= (np.outer(nC1,nC0)+np.outer(nC2,nC0)+np.outer(nC4,nC0))*(1/(3.))
sC1= (np.outer(nC0,nC1)+np.outer(nC3,nC1)+np.outer(nC5,nC1))*(1/(3.))
sC2= (np.outer(nC0,nC2)+np.outer(nC3,nC2)+np.outer(nC6,nC2))*(1/(3.))
sC3= (np.outer(nC1,nC3)+np.outer(nC2,nC3)+np.outer(nC7,nC3))*(1/(3.))
sC4= (np.outer(nC0,nC4)+np.outer(nC5,nC4)+np.outer(nC6,nC4))*(1/(3.))
sC5= (np.outer(nC1,nC5)+np.outer(nC4,nC5)+np.outer(nC7,nC5))*(1/(3.))
sC6= (np.outer(nC2,nC6)+np.outer(nC4,nC6)+np.outer(nC7,nC6))*(1/(3.))
sC7= (np.outer(nC3,nC7)+np.outer(nC5,nC7)+np.outer(nC6,nC7))*(1/(3.))
#===== Evolution operator =====================
ULC  = sL0+sL1+sL2+sL3
UCC  = sC0+sC1+sC2+sC3+sC4+sC5+sC6+sC7
#==== Define the initial state =================
Pro_L_0  = nL0
Pro_C_0  = nC0
#==========evolution equation====================
Arri_Pro_L_C  =np.zeros(T+1)
Arri_Pro_C_C  =np.zeros(T+1)
Verification_L  =np.zeros(T+1)
Verification_C  =np.zeros(T+1)
Sum_Pro_L_C  =np.zeros(T+1)
Sum_Pro_C_C  =np.zeros(T+1)
t=0
while t<=T:
if t==0:
Pro_L_C  = Pro_L_0
Pro_C_C  = Pro_C_0
Arri_Pro_L_C[t]  =Pro_L_C[(3)]
```

```
Arri_Pro_C_C[t]  =Pro_C_C[(7)]
else :
Pro_L_C  = np.dot(ULC, Pro_L_C)
Pro_C_C  = np.dot(UCC, Pro_C_C)
Arri_Pro_L_C[t]  =Arri_Pro_L_C[t-1] + Pro_L_C[(3)]
Arri_Pro_C_C[t]  =Arri_Pro_C_C[t-1] + Pro_C_C[(7)]
Pro_L_C[(3)]  = 0
Pro_C_C[(7)]  = 0
Sum_Pro_L_C[t]  =np.sum(Pro_L_C)
Sum_Pro_C_C[t]  =np.sum(Pro_C_C)
Verification_L[t]  =Arri_Pro_L_C[t]  + Sum_Pro_L_C[t]
Verification_C[t]  =Arri_Pro_C_C[t]  + Sum_Pro_C_C[t]
t+=1
print('Verification_L',Verification_L)
print('==========')
print('Verification_C',Verification_C)
print('==========')
#======Plot the probability====================
minorLocator = AutoMinorLocator()
fig, ax = plt.subplots()
#plt.plot(Sum_Pro, 'ko--', label='$SumPro$', markersize=10, linewidth=7)
plt.plot(Arri_Pro_L_C, 'bo', label='$Line$', markersize=20, linewidth=7)
plt.plot(Arri_Pro_C_C, 'y--', label='$tree$', markersize=10, linewidth=7)
#plt.plot(Verification, 'ro--', label='$Ver$', markersize=10, linewidth=7)
plt.plot([], [], ' ', label='$T= '+str(T)+'$')
plt.xticks(range (0, T+1, 5))
ax.set_xticklabels(range (0, T+1, 5))
plt.ylim(-0.1, 1.1)
ax.xaxis.set_minor_locator(minorLocator)
ax.yaxis.set_minor_locator(minorLocator)
ax.grid(which='both')
ax.grid(which='minor', lw=0.5, ls=':')
ax.grid(which='major', lw=1, ls='--')
ax.tick_params(axis='x', which='major', labelsize=70, width=6, length=20, colors='k')
ax.tick_params(axis='x', which='minor', labelsize=70, width=2, length=10, colors='k')
ax.tick_params(axis='y', which='major', labelsize=70, width=6, length=20, colors='k')
ax.tick_params(axis='y', which='minor', labelsize=70, width=2, length=10, colors='k')
ax.set_xlabel('Steps number', fontsize=65)
ax.set_ylabel('Probability', color='k', fontsize=65)
for tl in ax.get_yticklabels():
tl.set_color('k')
ax.xaxis.set_minor_locator(MultipleLocator(50))
ax.yaxis.set_minor_locator(MultipleLocator(0.10))
plt.title('Arrival Probability by classical random walk in differentsstuctures after
'+str(T)+' steps', fontsize=50)
plt.legend(fontsize=50)
figManager = plt.get_current_fig_manager()
figManager.window.showMaximized()
plt.tight_layout()
plt.show()
```

```
print('الحمد لله')
#=== End of the code=========
```

البرنامج4:مقارنة تطور الاحتمال لكل من الخط والمكعب ذو اربعة مستويات

```
print('بسم الله الرحمن الرحيم')
#Author:
#============================ استدعاء الحزم المطلوبة
============================
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib.ticker import AutoMinorLocator
from matplotlib.ticker import MultipleLocator
#============================ تعيين المقادير الثابة
===============================
T = 300 # عدد الخطوات
N = 4   # عدد العقد
#====================================== المشي
الكلاسيكي======================
#----------------الأشعة التي تمثل العقد-----------
nL0=np.array([1, 0, 0, 0])
nL1=np.array([0, 1, 0, 0])
nL2=np.array([0, 0, 1, 0])
nL3=np.array([0, 0, 0, 1])
#----الخطوات ضرب الاحتمال المتعلقة بكل عقدة-------
AL0= (np.outer(nL1,nL0))*(1)
AL1= (np.outer(nL0,nL1)+np.outer(nL2,nL1))*(1/(2.))
AL2= (np.outer(nL1,nL2)+np.outer(nL3,nL2))*(1/(2.))
AL3= (np.outer(nL2,nL3))*1

#------------مؤثر التطور الكلاسيكي-----------------
ULC = AL0+AL1+AL2+AL3

#-----------إختيار الحالة الابتدائية------------------
Prob0 = nL0

#---------------حساب الإحتمال الواصل-------------
Arri_Probt_LC = np.zeros(T+1)
Verification= np.zeros(T+1)
Sum_Probt_LC  = np.zeros(T+1)

k=1
t=0
while t<=T:
    if t==0:
        Probt_LC = Prob0
        Arri_Probt_LC[t]=Probt_LC[(3)]
        Probt_LC[(3)] = 0
    else :
        Probt_C = np.dot(ULC, Probt_LC)
        Arri_Probt_LC[t]=Arri_Probt_LC[t-1]+Probt_C[(3)]
        Probt_C[(3)] = 0
```

```
        #print ('t=', t)
        print ('Arri_Probt_C[t]=', Arri_Probt_LC[t])
        if Arri_Probt_LC[t]==1:
           if k==1:
              k=2
              print ('tLC2=', t)
    t+=1

#========================================= المشي الكمي=====================
#----------------الأشعة التي تمثل حواف العقد-----------
d0 = np.array([1, 0])
d1 = np.array([0, 1])

#--------------مؤثرات العملة المستعملة---------------
H2   = (np.array([[1, 1], [1, -1]]))/np.sqrt(2)
one2 = np.array([[1, 0], [0, 1]])

#------------------------------الخطوات المتعلقة بكل عقدة مع مراعات حوافها-------------------
A0 = np.kron(np.outer(nL0, nL0),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nL1, nL0),np.outer(d0, d1))
A1 = np.kron(np.outer(nL2, nL1),np.outer(d0, d1))+np.kron(np.outer(nL0, nL1),np.outer(d1, d0))
A2 = np.kron(np.outer(nL3, nL2),np.outer(d0, d1))+np.kron(np.outer(nL1, nL2),np.outer(d1, d0))
A3 = np.kron(np.outer(nL3, nL3),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nL2, nL3),np.outer(d1, d0))
#--------------------------------------الخطوات ضرب مصفوفة العملة الخاصة بكل عقدة------------
U0  = A0.dot(np.kron(np.outer(nL0, nL0),one2))
U1  = A1.dot(np.kron(np.outer(nL1, nL1),H2))
U2  = A2.dot(np.kron(np.outer(nL2, nL2),H2))
U3  = A3.dot(np.kron(np.outer(nL3, nL3),one2))
#----------مؤثر التطور الكمي--------------------
UH2 = U0+U1+U2+U3
#-----------------------------------------------
psi0 = np.kron(nL3,d0)

#---------------حساب الإحتمال الواصل-------------
Arri_Probt_H2 = np.zeros(T+1)
VerificationH2= np.zeros(T+1)
Sum_Probt_H2  = np.zeros(T+1)

k=1
t=0
while t<=T:
    if t==0:
        psitH2 = psi0
        psitH2[(6)] = 0
        psitH2[(7)] = 0
        probtH2=np.inner(psitH2, psitH2)
```

```
        Arri_Probt_H2[t]= 1- probtH2
    else :
        psitH2 = np.dot(UH2, psitH2)
        psitH2[(6)] = 0
        psitH2[(7)] = 0
        probtH2=np.inner(psitH2, psitH2)
        Arri_Probt_H2[t]= 1- probtH2
        #print ('Arri_Probt_H2[t]=', Arri_Probt_H2[t])
        if Arri_Probt_H2[t]==1:
            if k==1:
                k=2
                print ('tH2=', t)
    t+=1

#==========================================================

#==========================================C??O?
C???C????======================
#----------------C??O?E C?E? E?E? C???I-----------
nC0=np.array([1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nC1=np.array([0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nC2=np.array([0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0])
nC3=np.array([0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0])
nC4=np.array([0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0])
nC5=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0])
nC6=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0])
nC7=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1])

#----الخطوات ضرب الاحتمال المتعلقة بكل عقدة-------
AC0= (np.outer(nC1,nC0)+np.outer(nC2,nC0)+np.outer(nC4,nC0))*(1/(3.))
AC1= (np.outer(nC0,nC1)+np.outer(nC3,nC1)+np.outer(nC5,nC1))*(1/(3.))
AC2= (np.outer(nC0,nC2)+np.outer(nC3,nC2)+np.outer(nC6,nC2))*(1/(3.))
AC3= (np.outer(nC1,nC3)+np.outer(nC2,nC3)+np.outer(nC7,nC3))*(1/(3.))
AC4= (np.outer(nC0,nC4)+np.outer(nC5,nC4)+np.outer(nC6,nC4))*(1/(3.))
AC5= (np.outer(nC1,nC5)+np.outer(nC4,nC5)+np.outer(nC7,nC5))*(1/(3.))
AC6= (np.outer(nC2,nC6)+np.outer(nC4,nC6)+np.outer(nC7,nC6))*(1/(3.))
AC7= (np.outer(nC3,nC7)+np.outer(nC5,nC7)+np.outer(nC6,nC7))*(1/(3.))
#------------مؤثر التطور الكلاسيكي-----------------
UCC = AC0+AC1+AC2+AC3+AC4+AC5+AC6+AC7
#-----------إختيار الحالة الابتدائية-------------------
Prob0 = nC0

#---------------حساب الإحتمال الواصل-------------
Arri_Probt_CC = np.zeros(T+1)
Verification= np.zeros(T+1)
Sum_Probt_CC  = np.zeros(T+1)

k=1
t=0
while t<=T:
```

```
    if t==0:
        Probt_CC = Prob0
        Arri_Probt_CC[t]=Probt_CC[(7)]
    else :
        Probt_C = np.dot(ULC, Probt_C)
        Arri_Probt_CC[t]=Arri_Probt_CC[t-1]+Probt_CC[(7)]
        Probt_CC[(7)] = 0
        #print ('t=', t)
        print ('Arri_Probt_CC[t]=', Arri_Probt_CC[t])
        if Arri_Probt_CC[t]==1:
            if k==1:
                k=2
                print ('tCC2=', t)
    t+=1
#=========================================== المشي
الكمي======================
#----------------الأشعة التي تمثل حواف العقد-----------
d0 = np.array([1, 0, 0])
d1 = np.array([0, 1, 0])
d2 = np.array([0, 0, 1])
#--------------مؤثرات العملة المستعملة---------------
H2   = (np.array([[1, 1], [1, -1]]))/np.sqrt(2)
one2 = np.array([[1, 0], [0, 1]])
G3   = np.array([[-1/3, 2/3, 2/3], [2/3, -1/3, 2/3], [2/3, 2/3, -1/3]])
H2one1 = np.array([[1/np.sqrt(2), 1/np.sqrt(2), 0], [1/np.sqrt(2), -1/np.sqrt(2), 0], [0, 0,
1]])
F3   = (np.fft.fft(np.eye(3)))/np.sqrt(3.)
Hd2= np.array([[1/np.sqrt(2), 1/np.sqrt(2), 0], [1/np.sqrt(2), -1/np.sqrt(2), 0], [0, 0, 1]])
Hd0= np.array([[0, 0, 1], [ 0, 1/np.sqrt(2), 1/np.sqrt(2)],[ 0, 1/np.sqrt(2), -1/np.sqrt(2)]])
Hd1= np.array([[1/np.sqrt(2), 0, 1/np.sqrt(2)], [0, 1, 0],[1/np.sqrt(2), 0, -1/np.sqrt(2)]])
#------------------------------الخطوات المتعلقة بكل عقدة مع مراعات حوافها-------------------
AC0 = np.kron(np.outer(nC1, nC0),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nC2,
nC0),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nC4, nC0),np.outer(d2, d2))
AC1 = np.kron(np.outer(nC0, nC1),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nC3,
nC1),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nC5, nC1),np.outer(d2, d2))
AC2 = np.kron(np.outer(nC0, nC2),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nC3,
nC2),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nC6, nC2),np.outer(d2, d2))
AC3 = np.kron(np.outer(nC1, nC3),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nC2,
nC3),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nC7, nC3),np.outer(d2, d2))
AC4 = np.kron(np.outer(nC0, nC4),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nC5,
nC4),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nC6, nC4),np.outer(d1, d1))
AC5 = np.kron(np.outer(nC1, nC5),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nC4,
nC5),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nC7, nC5),np.outer(d1, d1))
AC6 = np.kron(np.outer(nC2, nC6),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nC4,
nC6),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nC7, nC6),np.outer(d0, d0))
AC7 = np.kron(np.outer(nC3, nC7),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nC5,
nC7),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nC6, nC7),np.outer(d0, d0))

#---------------------------------------الخطوات ضرب مصفوفة العملة الخاصة بكل عقدة------------
UG0  = AC0.dot(np.kron(np.outer(nC0, nC0),G3))
```

```
UF0  = AC0.dot(np.kron(np.outer(nC0, nC0),F3))
UG1  = AC1.dot(np.kron(np.outer(nC1, nC1),G3))
UF1  = AC1.dot(np.kron(np.outer(nC1, nC1),F3))
UG2  = AC2.dot(np.kron(np.outer(nC2, nC2),G3))
UF2  = AC2.dot(np.kron(np.outer(nC2, nC2),F3))
UG3  = AC3.dot(np.kron(np.outer(nC3, nC3),G3))
UF3  = AC3.dot(np.kron(np.outer(nC3, nC3),F3))
UG4  = AC4.dot(np.kron(np.outer(nC4, nC4),G3))
UF4  = AC4.dot(np.kron(np.outer(nC4, nC4),F3))
UG5  = AC5.dot(np.kron(np.outer(nC5, nC5),G3))
UF5  = AC5.dot(np.kron(np.outer(nC5, nC5),F3))
UG6  = AC6.dot(np.kron(np.outer(nC6, nC6),G3))
UF6  = AC6.dot(np.kron(np.outer(nC6, nC6),F3))
UG7  = AC7.dot(np.kron(np.outer(nC7, nC7),G3))
UF7  = AC7.dot(np.kron(np.outer(nC7, nC7),F3))
#----------مؤثر التطور الكمي--------------------
UF= UF0+UF1+UF2+UF3+UF4+UF5+UF6+UF7
UG= UG0+UG1+UG2+UG3+UG4+UG5+UG6+UG7
#---------------------------------------------------
psi0 = (np.kron(nC0,d0)+np.kron(nC0,d1)+np.kron(nC0,d2))*(1/np.sqrt(3))
#---------------حساب الإحتمال الواصل-------------
Arri_Probt_G= np.zeros(T+1)
VerificationG= np.zeros(T+1)
Sum_Probt_G = np.zeros(T+1)

k=1
t=0
while t<=T:
   if t==0:
      psitG= psi0
      psitG[(23)] = 0
      psitG[(22)] = 0
      psitG[(21)] = 0
      probtG=psitG.dot(psitG.conjugate()).real
      Arri_Probt_G[t]= 1- probtG
   else :
      psitG= np.dot(UG, psitG)
      psitG[(23)] = 0
      psitG[(22)] = 0
      psitG[(21)] = 0

      probtG=psitG.dot(psitG.conjugate()).real
      Arri_Probt_G[t]= 1- probtG

      if Arri_Probt_G[t]==1:
         if k==1:
            k=2
            print ('tG=', t)
   t+=1
#==========================================================
```

```
Arri_Probt_F= np.zeros(T+1)
VerificationF= np.zeros(T+1)
Sum_Probt_F = np.zeros(T+1)
k=1
t=0
while t<=T:
   if t==0:
      psitF= psi0

      psitF[(23)] = 0
      psitF[(22)] = 0
      psitF[(21)] = 0

      probtF = psitF.dot(psitF.conjugate()).real
      Arri_Probt_F[t]= 1- probtF
   else :
      psitF= np.dot(UF, psitF)
      psitF[(23)] = 0
      psitF[(22)] = 0
      psitF[(21)] = 0

      probtF = psitF.dot(psitF.conjugate()).real
      Arri_Probt_F[t]= 1- probtF

      if Arri_Probt_F[t]==1:
         if k==1:
            k=2
            print ('tF=', t)
   t+=1
#============================ بسم الله الرحمن الرحيم
=========================
#=========================================================
#======Plot the probability====================
minorLocator = AutoMinorLocator()
fig, ax = plt.subplots()

#plt.plot(Sum_Probt_H2, 'ko--', label='$SumProH2$', markersize=10, linewidth=7)

plt.plot(Arri_Probt_H2, 'r-', label='$ArriH2$', markersize=5, linewidth=4)
plt.plot(Arri_Probt_F, 'b-', label='$ArriF$', markersize=5, linewidth=4)
plt.plot(Arri_Probt_LC, 'k-', label='$ArriLC$', markersize=5, linewidth=4)
plt.plot(Arri_Probt_CC, 'k+', label='$ArriC$', markersize=10, linewidth=4)
plt.plot(Arri_Probt_G, 'b.', label='$ArriG$', markersize=5, linewidth=2)

#plt.plot(VerificationH2, 'ro--', label='$VerH2$', markersize=10, linewidth=7)
plt.plot([], [], ' ', label='$T= '+str(T)+'$')

#plt.xticks(range (0, T+1, 5))
#ax.set_xticklabels(range (0, T+1, 5))
```

```
#plt.ylim(-0.1, 1.1)

ax.xaxis.set_minor_locator(minorLocator)
ax.yaxis.set_minor_locator(minorLocator)
ax.grid(which='both')
ax.grid(which='minor', lw=0.5, ls=':')
ax.grid(which='major', lw=1, ls='--')

ax.tick_params(axis='x', which='major', labelsize=25, width=6, length=20, colors='k')
ax.tick_params(axis='x', which='minor', labelsize=25, width=2, length=10, colors='k')
ax.tick_params(axis='y', which='major', labelsize=25, width=6, length=20, colors='k')
ax.tick_params(axis='y', which='minor', labelsize=25, width=2, length=10, colors='k')
ax.set_xlabel('Steps number', fontsize=25)
ax.set_ylabel('Probability', color='k', fontsize=25)

for tl in ax.get_yticklabels():
    tl.set_color('k')
ax.xaxis.set_minor_locator(MultipleLocator(20))
ax.yaxis.set_minor_locator(MultipleLocator(0.10))
plt.title('Arrival Probability by classical random walk in simple irregular line aftre ' +
str(T) + ' steps', fontsize=20)
plt.legend(fontsize=20)
figManager = plt.get_current_fig_manager()
figManager.window.showMaximized()
plt.tight_layout()
plt.show()

print('الحمد لله')
=========End of the code ===#
```

البرنامج5:مقارنة تطور الاحتمال لكل من الخط و الzigzagوarmchair

```
print('بسم الله الرحمن الرحيم')
#Author :
#============================== استدعاءالحزمالمطلوبة
==========================
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib.ticker import AutoMinorLocator
from matplotlib.ticker import MultipleLocator
#============================= تعييناالمقاديرالثابة
===============================
T = 300# عددالخطوات
N = 9# عددالعقد
#========================================المشيالكلاسيكي================
=======
#----------------الأشعةالتيتمثلالعقد-----------
nL0=np.array([1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nL1=np.array([0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nL2=np.array([0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nL3=np.array([0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0])
```

```
nL4=np.array([0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0])
nL5=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0])
nL6=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0])
nL7=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0])
nL8=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1])
#----الخطوات ضرب الاحتمال المتعلقة بكل عقدة-------
AL0= (np.outer(nL1,nL0))*(1(
AL1= (np.outer(nL0,nL1)+np.outer(nL2,nL1))*(1/(2)).
AL2= (np.outer(nL1,nL2)+np.outer(nL3,nL2))*(1/(2)).
AL3= (np.outer(nL2,nL3)+np.outer(nL4,nL3))*(1/(2)).
AL4= (np.outer(nL3,nL4)+np.outer(nL5,nL4))*(1/(2)).
AL5= (np.outer(nL4,nL5)+np.outer(nL6,nL5))*(1/(2)).
AL6= (np.outer(nL5,nL6)+np.outer(nL7,nL6))*(1/(2)).
AL7= (np.outer(nL6,nL7)+np.outer(nL8,nL7))*(1/(2)).
AL8= (np.outer(nL7,nL8))*(1)
#------------مؤثر التطور الكلاسيكي-----------------
ULC = AL0+AL1+AL2+AL3+AL4+AL5+AL6+AL7+AL8
#-----------إختيار الحالةالابتدائية-------------------
ProbL0 = nL0
#---------------حسابالإحتمالالواصل-------------
Arri_Probt_LC = np.zeros(T+1)
k=1
t=0
while t<=T:
if t==0:
Probt_LC = ProbL0
Arri_Probt_LC[t]=Probt_LC[(8)]
Probt_LC[(8)] = 0
else:
Probt_LC = np.dot(ULC, Probt_LC)
Arri_Probt_LC[t]=Arri_Probt_LC[t-1]+Probt_LC[(8)]
Probt_LC[(8)] = 0
#       print ('t=', t(
print ('Arri_Probt_LC[t]=', Arri_Probt_LC[t])
if Arri_Probt_LC[t]==1:
if k==1:
k=2
print ('tLC2=', t)
t+=1
#=============================================المشيالكمي==============
=========
#----------------الأشعةالتي تمثل حواف العقد-----------
dL0 = np.array([1, 0])
dL1 = np.array([0, 1])
#--------------مؤثراتالعملةالمستعملة---------------
H2   = (np.array([[1, 1], [1, -1]]))/np.sqrt(2)
one2 = np.array([[1, 0], [0, 1]])
#------------------------------الخطوا ت المتعلق بكل عقد ةمعمراعات حوافها-------------------
A0 = np.kron(np.outer(nL1, nL0),np.outer(dL1, dL0))+np.kron(np.outer(nL0,
nL0),np.outer(dL1, dL1))
```

```
A1 = np.kron(np.outer(nL2, nL1),np.outer(dL1, dL0))+np.kron(np.outer(nL0, nL1),np.outer(dL0, dL1))
A2 = np.kron(np.outer(nL3, nL2),np.outer(dL1, dL0))+np.kron(np.outer(nL1, nL2),np.outer(dL0, dL1))
A3 = np.kron(np.outer(nL4, nL3),np.outer(dL1, dL0))+np.kron(np.outer(nL2, nL3),np.outer(dL0, dL1))
A4 = np.kron(np.outer(nL5, nL4),np.outer(dL1, dL0))+np.kron(np.outer(nL3, nL4),np.outer(dL0, dL1))
A5 = np.kron(np.outer(nL6, nL5),np.outer(dL1, dL0))+np.kron(np.outer(nL4, nL5),np.outer(dL0, dL1))
A6 = np.kron(np.outer(nL7, nL6),np.outer(dL1, dL0))+np.kron(np.outer(nL5, nL6),np.outer(dL0, dL1))
A7 = np.kron(np.outer(nL8, nL7),np.outer(dL1, dL0))+np.kron(np.outer(nL6, nL7),np.outer(dL0, dL1))
A8 = np.kron(np.outer(nL8, nL8),np.outer(dL0, dL0))+np.kron(np.outer(nL7, nL8),np.outer(dL0, dL1))
#-----------------------------------------الخطوات ضر بمصفوفة العملةالخاصةبكل عقدة------------
U0  = A0.dot(np.kron(np.outer(nL0, nL0),one2))
U1  = A1.dot(np.kron(np.outer(nL1, nL1),H2))
U2  = A2.dot(np.kron(np.outer(nL2, nL2),H2))
U3  = A3.dot(np.kron(np.outer(nL3, nL3),H2))
U4  = A4.dot(np.kron(np.outer(nL4, nL4),H2))
U5  = A5.dot(np.kron(np.outer(nL5, nL5),H2))
U6  = A6.dot(np.kron(np.outer(nL6, nL6),H2))
U7  = A7.dot(np.kron(np.outer(nL7, nL7),H2))
U8  = A8.dot(np.kron(np.outer(nL8, nL8),one2))
#----------مؤثرالتطورالكمي--------------------
UH2 = U0+U1+U2+U3+U4+U5+U6+U7+U8
#---------------------------------------------------
psiL0 = np.kron(nL0,dL0)
#---------------حساب الإحتمال الواصل-------------
Arri_Probt_H2 = np.zeros(T+1)
k=1
t=0
while t<=T:
if t==0:
psitH2 = psiL0
psitH2[(17)] = 0
psitH2[(16)] = 0
probtH2=psitH2.dot(psitH2.conjugate()).real
Arri_Probt_H2[t]= 1- probtH2
else:
psitH2 = np.dot(UH2, psitH2)
psitH2[(17)] = 0
psitH2[(16)] = 0
probtH2=psitH2.dot(psitH2.conjugate()).real
Arri_Probt_H2[t]= 1- probtH2
if Arri_Probt_H2[t]==1:
if k==1:
k=2
```

```
print ('tH2=', t)
t+=1
==========================================================#
========================================#C??O?
C???C=======================????
----------------#C??O?E C?E? E?E? C???I-----------
nar0=np.array([1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nar1=np.array([0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nar2=np.array([0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nar3=np.array([0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nar4=np.array([0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nar5=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nar6=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nar7=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nar8=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nar9=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nar10=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nar11=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nar12=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nar13=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nar14=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nar15=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nar16=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0])
nar17=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0])
nar18=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0])
nar19=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0])
nar20=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0])
nar21=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1])
----#C?I??CE ??E C?C?E?C? C??E???E E?? ??IE-------
A0= (np.outer(nar2,nar0)+np.outer(nar3,nar0))*(1/(2)).
A1= (np.outer(nar3,nar1)+np.outer(nar4,nar1))*(1/(2)).
A2= (np.outer(nar0,nar2)+np.outer(nar5,nar2))*(1/(2)).
A3= (np.outer(nar0,nar3)+np.outer(nar1,nar3)+np.outer(nar6,nar3))*(1/(3)).
A4= (np.outer(nar1,nar4)+np.outer(nar7,nar4))*(1/(2)).
A5= (np.outer(nar2,nar5)+np.outer(nar8,nar5))*(1/(2)).
A6=(np.outer(nar3,nar6)+np.outer(nar8,nar6)+np.outer(nar9,nar6))*(1/(3)).
A7= (np.outer(nar4,nar7)+np.outer(nar9,nar7))*(1/(2)).
A8= (np.outer(nar5,nar8)+np.outer(nar6,nar8)+np.outer(nar10,nar8))*(1/(3)).
A9= (np.outer(nar6,nar9)+np.outer(nar7,nar9)+np.outer(nar11,nar9))*(1/(3)).
A10= (np.outer(nar8,nar10)+np.outer(nar12,nar10)+np.outer(nar13,nar10))*(1/(3)).
A11= (np.outer(nar9,nar11)+np.outer(nar13,nar11)+np.outer(nar14,nar11))*(1/(3)).
A12= (np.outer(nar10,nar12)+np.outer(nar15,nar12))*(1/(2)).
A13= (np.outer(nar10,nar13)+np.outer(nar11,nar13)+np.outer(nar16,nar13))*(1/(3)).
A14= (np.outer(nar11,nar14)+np.outer(nar17,nar14))*(1/(2)).
A15= (np.outer(nar12,nar15)+np.outer(nar18,nar15))*(1/(2)).
A16= (np.outer(nar13,nar16)+np.outer(nar18,nar16)+np.outer(nar19,nar16))*(1/(3)).
A17= (np.outer(nar14,nar17)+np.outer(nar19,nar17))*(1/(2)).
A18= (np.outer(nar15,nar18)+np.outer(nar16,nar18)+np.outer(nar20,nar18))*(1/(3)).
A19= (np.outer(nar16,nar19)+np.outer(nar17,nar19)+np.outer(nar21,nar19))*(1/(3)).
A20= (np.outer(nar18,nar20))*1
```

```
A21= (np.outer(nar19,nar21))*1
??-----------#E? C?E??? C???C----------------????
UarC=
A0+A1+A2+A3+A4+A5+A6+A7+A8+A9+A10+A11+A12+A13+A14+A15+A16+A17+A
18+A19+A20+A21
#UarC_inv = np.linalg.inv(UarC)
#Unitarity_UarC = UarC.dot(UarC_inv)
#a = np.eye(N)
#print ('Unitarity_UarC', Unitarity_UarC)
#if Unitarity_UarC.all()==a.all:()
#    print ('UarC is unitary')
?-----------#IE?C? C??C?E C?CEEIC??E------------------
#Prob0 = Probar0 = (nar0+nar1)*(1/(2)).
Probar0 = (nar0+nar1)*(1/(2)).
print ('Probar0=', Probar0)
??---------------#0CE C???E?C? C??C-------------??
Arri_Probt_arC = np.zeros(T+1)
k=1
t=0
while t<=T:
if t==0:
Probt_arC = Probar0
Arri_Probt_arC[t]=Probt_arC[(21)]+Probt_arC[(20])
Probt_arC[(21)] = 0
Probt_arC[(20)] = 0
else:
Probt_arC = np.dot(UarC, Probt_arC)
Arri_Probt_arC[t]=Arri_Probt_arC[t-1]+Probt_arC[(21)]+Probt_arC[(20])
Probt_arC[(21)] = 0
Probt_arC[(20)] = 0
if Arri_Probt_arC[t]==1:
if k==1:
k=2
print ('tarC=', t)
t+=1
==========================================#C??O?
C======================????
----------------#C??O?E C?E? E?E? ??C? C???I-----------
d0 = np.array([1, 0, 0])
d1 = np.array([0, 1, 0])
d2 = np.array([0, 0, 1])
??--------------#E?CE C????E C????E???E---------------
G3   = np.array([[-1/3, 2/3, 2/3], [2/3, -1/3, 2/3], [2/3, 2/3, -1/3]])
F3   = (np.fft.fft(np.eye(3)))/np.sqrt(3).
Hd2= np.array([[1/np.sqrt(2), 1/np.sqrt(2), 0], [1/np.sqrt(2), -1/np.sqrt(2), 0], [0, 0, 1]])
Hd0= np.array([[1, 0, 0], [ 0, 1/np.sqrt(2), 1/np.sqrt(2)],[ 0, 1/np.sqrt(2), -1/np.sqrt(2)]])
Hd1= np.array([[1/np.sqrt(2), 0, 1/np.sqrt(2)], [0, 1, 0],[1/np.sqrt(2), 0, -1/np.sqrt(2)]])
------------------------------#C?I??CE C??E???E E?? ??IE ?? ??C?CE ??C??C-----------
-----
```

```
A0 = np.kron(np.outer(nar0, nar0),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nar3,
nar0),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nar2, nar0),np.outer(d1, d1))
A1 = np.kron(np.outer(nar1, nar1),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nar3,
nar1),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nar4, nar1),np.outer(d0, d0))
A2 = np.kron(np.outer(nar2, nar2),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nar5,
nar2),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nar0, nar2),np.outer(d1, d1))
A3 = np.kron(np.outer(nar0, nar3),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nar1,
nar3),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nar6, nar3),np.outer(d2, d2))
A4 = np.kron(np.outer(nar4, nar4),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nar1,
nar4),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nar7, nar4),np.outer(d2, d2))
A5 = np.kron(np.outer(nar5, nar5),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nar2,
nar5),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nar8, nar5),np.outer(d0, d0))
A6 = np.kron(np.outer(nar9, nar6),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nar8,
nar6),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nar3, nar6),np.outer(d2, d2))
A7 = np.kron(np.outer(nar4, nar7),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nar9,
nar7),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nar7, nar7),np.outer(d0, d0))
A8 = np.kron(np.outer(nar5, nar8),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nar6,
nar8),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nar10, nar8),np.outer(d2, d2))
A9 = np.kron(np.outer(nar11, nar9),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nar7,
nar9),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nar6, nar9),np.outer(d0, d0))
A10 = np.kron(np.outer(nar8, nar10),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nar12,
nar10),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nar13, nar10),np.outer(d0, d0))
A11 = np.kron(np.outer(nar14, nar11),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nar13,
nar11),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nar9, nar11),np.outer(d2, d2))
A12 = np.kron(np.outer(nar12, nar12),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nar10,
nar12),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nar15, nar12),np.outer(d2, d2))
A13 = np.kron(np.outer(nar16, nar13),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nar11,
nar13),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nar10, nar13),np.outer(d0, d0))
A14 = np.kron(np.outer(nar14, nar14),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nar11,
nar14),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nar17, nar14),np.outer(d2, d2))
A15 = np.kron(np.outer(nar18, nar15),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nar12,
nar15),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nar15, nar15),np.outer(d1, d1))
A16= np.kron(np.outer(nar13, nar16),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nar18,
nar16),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nar19, nar16),np.outer(d0, d0))
A17 = np.kron(np.outer(nar19, nar17),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nar14,
nar17),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nar17, nar17),np.outer(d0, d0))
A18 = np.kron(np.outer(nar15, nar18),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nar16,
nar18),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nar20, nar18),np.outer(d2, d2))
A19 = np.kron(np.outer(nar21, nar19),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nar17,
nar19),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nar16, nar19),np.outer(d0, d0))
A20 = np.kron(np.outer(nar18, nar20),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nar20,
nar20),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nar20, nar20),np.outer(d0, d0))
A21 = np.kron(np.outer(nar19, nar21),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nar21,
nar21),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nar21, nar21),np.outer(d0, d0))
---------------------------------------#C?I??CE ??E ?????E C????E C?IC?E E?? ??IE------
----
Uar0  = A0.dot(np.kron(np.outer(nar0, nar0),Hd2))
Uar1  = A1.dot(np.kron(np.outer(nar1, nar1),Hd2))
Uar2  = A2.dot(np.kron(np.outer(nar2, nar2),Hd0))
UarG3  = A3.dot(np.kron(np.outer(nar3, nar3),G3))
```

```
UarF3  = A3.dot(np.kron(np.outer(nar3, nar3),F3))
Uar4  = A4.dot(np.kron(np.outer(nar4, nar4),Hd1))
Uar5  = A5.dot(np.kron(np.outer(nar5, nar5),Hd1))
UarG6  = A6.dot(np.kron(np.outer(nar6, nar6),G3))
UarF6  = A6.dot(np.kron(np.outer(nar6, nar6),F3))
Uar7  = A7.dot(np.kron(np.outer(nar7, nar7),Hd0))
UarG8  = A8.dot(np.kron(np.outer(nar8, nar8),G3))
UarF8  = A8.dot(np.kron(np.outer(nar8, nar8),F3))
UarG9  = A9.dot(np.kron(np.outer(nar9, nar9),G3))
UarF9  = A9.dot(np.kron(np.outer(nar9, nar9),F3))
UarG10  = A10.dot(np.kron(np.outer(nar10, nar10),G3))
UarF10  = A10.dot(np.kron(np.outer(nar10, nar10),F3))
UarG11  = A11.dot(np.kron(np.outer(nar11, nar11),G3))
UarF11  = A11.dot(np.kron(np.outer(nar11, nar11),F3))
Uar12  = A12.dot(np.kron(np.outer(nar12, nar12),Hd0))
UarG13  = A13.dot(np.kron(np.outer(nar13, nar13),G3))
UarF13  = A13.dot(np.kron(np.outer(nar13, nar13),F3))
Uar14  = A14.dot(np.kron(np.outer(nar14, nar14),Hd1))
Uar15  = A15.dot(np.kron(np.outer(nar15, nar15),Hd1))
UarG16  = A16.dot(np.kron(np.outer(nar16, nar16),G3))
UarF16  = A16.dot(np.kron(np.outer(nar16, nar16),F3))
Uar17  = A17.dot(np.kron(np.outer(nar17, nar17),Hd0))
UarG18  = A18.dot(np.kron(np.outer(nar18, nar18),G3))
UarF18  = A18.dot(np.kron(np.outer(nar18, nar18),F3))
UarG19  = A19.dot(np.kron(np.outer(nar19, nar19),G3))
UarF19  = A19.dot(np.kron(np.outer(nar19, nar19),F3))
Uar020  = A20.dot(np.kron(np.outer(nar20, nar20),Hd0))
Uar120  = A20.dot(np.kron(np.outer(nar20, nar20),Hd1))
Uar021  = A21.dot(np.kron(np.outer(nar21, nar21),Hd0))
Uar121  = A21.dot(np.kron(np.outer(nar21, nar21),Hd1))
??----------#E? C?E??? C--------------------????
UarF=Uar0+Uar1+Uar2+UarF3+Uar4+Uar5+UarF6+Uar7+UarF8+UarF9+UarF10+U
arF11+Uar12+UarF13+Uar14+Uar15+UarF16+Uar17+UarF18+UarF19+Uar020+Uar
021+Uar120+Uar121
UarG=Uar0+Uar1+Uar2+UarG3+Uar4+Uar5+UarG6+Uar7+UarG8+UarG9+UarG10+
UarG11+Uar12+UarG13+Uar14+Uar15+UarG16+Uar17+UarG18+UarG19+Uar020+
Uar021+Uar120+Uar121
Unitarity_UarF = UarF.dot(np.linalg.inv(UarF))
print ('[UarF].[UarF]^(-1)', Unitarity_UarF)
Unitarity_UarG = UarG.dot(np.linalg.inv(UarG))
print ('Unitarity_UarG', Unitarity_UarG)
---------------------------------------------------#
#psi0 =
((np.kron(nar0,d1)+np.kron(nar0,d0))+(np.kron(nar1,d1)+np.kron(nar1,d0)))*(1/np.sqr
t(4))
#psi0 = ((np.kron(nar0,d1))+(np.kron(nar0,d0)))*(1/np.sqrt(2))
#psi0 = ((np.kron(nz0,d2))+(np.kron(nz1,d2)))*(1/np.sqrt(2))
#psi0 = ((np.kron(nz0,d2))+(np.kron(nz1,d0)))*(1/np.sqrt(2))
#psi0 = (np.kron(nz0,d2))
#psi0 = (np.kron(nar0,d1))
```

```
#psi0 = (np.kron(nar0,d0))
#psi0 =
((np.kron(nar0,d1)+np.kron(nar0,d0))+(np.kron(nar1,d1)+np.kron(nar1,d0)))*(1/np.sqr
t(4))
#psi0 = (np.kron(nar0,d1))
#psi0 = (np.kron(nar0,d0))
#psi0 = (np.kron(nar1,d0))
psiar0 = (np.kron(nar1,d1))
#psi0 = ((np.kron(nar0,d1))+(np.kron(nar0,d0)))*(1/np.sqrt(2))
#psi0 = ((np.kron(nar0,d1))+(np.kron(nar1,d0)))*(1/np.sqrt(2))
#psi0 = ((np.kron(nar0,d1))+(np.kron(nar1,d1)))*(1/np.sqrt(2))
#psi0 = ((np.kron(nar0,d0))+(np.kron(nar0,d1)))*(1/np.sqrt(2))
#psi0 = ((np.kron(nar0,d0))+(np.kron(nar1,d0)))*(1/np.sqrt(2))
#psi0 = ((np.kron(nar0,d0))+(np.kron(nar1,d1)))*(1/np.sqrt(2))
#psi0 = (np.kron(nar20,d2)+np.kron(nar21,d2))*(1/np.sqrt(2))
probar0=psiar0.dot(psiar0.conjugate()).real
print ('<psiar0|psiar0>=', probar0)
??---------------#CE C???E?C? C??C-------------??
Arri_Probt_arG= np.zeros(T+1)
k=1
t=0
while t<=T:
if t==0:
psitarG= psiar0
psitarG[(65)] = 0
psitarG[(64)] = 0
psitarG[(63)] = 0
psitarG[(62)] = 0
psitarG[(61)] = 0
psitarG[(60)] = 0
probtarG=psitarG.dot(psitarG.conjugate()).real
Arri_Probt_arG[t]= 1- probtarG
else:
psitarG= np.dot(UarG, psitarG)
psitarG[(65)] = 0
psitarG[(64)] = 0
psitarG[(63)] = 0
psitarG[(62)] = 0
psitarG[(61)] = 0
psitarG[(60)] = 0
probtarG=psitarG.dot(psitarG.conjugate()).real
Arri_Probt_arG[t]= 1- probtarG
ifArri_Probt_arG[t]==1:
if k==1:
k=2
print ('tarG=', t)
t+=1
=========================================================#
Arri_Probt_arF= np.zeros(T+1)
k=1
```

```
t=0
while t<=T:
if t==0:
psitarF= psiar0
psitarF[(65)] = 0
psitarF[(64)] = 0
psitarF[(63)] = 0
psitarF[(62)] = 0
psitarF[(61)] = 0
psitarF[(60)] = 0
probtarF = psitarF.dot(psitarF.conjugate()).real
Arri_Probt_arF[t]= 1- probtarF
else:
psitarF= np.dot(UarF, psitarF)
psitarF[(65)] = 0
psitarF[(64)] = 0
psitarF[(63)] = 0
psitarF[(62)] = 0
psitarF[(61)] = 0
psitarF[(60)] = 0
probtarF = psitarF.dot(psitarF.conjugate()).real
Arri_Probt_arF[t]= 1- probtarF
if Arri_Probt_arF[t]==1:
if k==1:
k=2
print ('tarF=', t)
t+=1
بسماللهالرحمنالرحيم ================================#
========================
=========================================#C??O?
C???C========================????
----------------#C??O?E C?E? E?E? C???I-----------
nz0=np.array([1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nz1=np.array([0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nz2=np.array([0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nz3=np.array([0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nz4=np.array([0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nz5=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nz6=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nz7=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nz8=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nz9=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nz10=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nz11=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0])
nz12=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0])
nz13=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0])
nz14=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0])
nz15=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0])
nz16=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0])
nz17=np.array([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1])
```

```
----#C?I??CE ??E C?C?E?C? C??E???E E?? ??IE-------
A0= (np.outer(nz1,nz0)+np.outer(nz2,nz0))*(1/(2)).
A1= (np.outer(nz0,nz1)+np.outer(nz3,nz1))*(1/(2)).
A2= (np.outer(nz0,nz2)+np.outer(nz4,nz2))*(1/(2)).
A3= (np.outer(nz1,nz3)+np.outer(nz5,nz3))*(1/(2)).
A4= (np.outer(nz2,nz4)+np.outer(nz5,nz4)+np.outer(nz6,nz4))*(1/(3)).
A5= (np.outer(nz3,nz5)+np.outer(nz4,nz5)+np.outer(nz7,nz5))*(1/(3)).
A6= (np.outer(nz4,nz6)+np.outer(nz8,nz6))*(1/(2)).
A7= (np.outer(nz5,nz7)+np.outer(nz9,nz7))*(1/(2)).
A8= (np.outer(nz6,nz8)+np.outer(nz10,nz8)+np.outer(nz9,nz8))*(1/(3)).
A9= (np.outer(nz7,nz9)+np.outer(nz11,nz9)+np.outer(nz8,nz9))*(1/(3)).
A10= (np.outer(nz8,nz10)+np.outer(nz12,nz10))*(1/(2)).
A11= (np.outer(nz9,nz11)+np.outer(nz13,nz11))*(1/(2)).
A12= (np.outer(nz10,nz12)+np.outer(nz14,nz12)+np.outer(nz13,nz12))*(1/(3)).
A13= (np.outer(nz11,nz13)+np.outer(nz12,nz13)+np.outer(nz15,nz13))*(1/(3)).
A14= (np.outer(nz12,nz14)+np.outer(nz16,nz14))*(1/(2)).
A15= (np.outer(nz13,nz15)+np.outer(nz17,nz15))*(1/(2)).
A16= (np.outer(nz17,nz16)+np.outer(nz14,nz16))*(1/(2)).
A17= (np.outer(nz15,nz17)+np.outer(nz16,nz17))*(1/(2)).
??------------#E? C?E??? C???C-----------------????
UzC
=A0+A1+A2+A3+A4+A5+A6+A7+A8+A9+A10+A11+A12+A13+A14+A15+A16+A17
UzC_inv = np.linalg.inv(UzC)
Unitarity_UzC = UzC.dot(UzC_inv)
#a = np.eye(N)
#print ('Unitarity_UzC', Unitarity_UzC)
#if Unitarity_UzC.all()==a.all:()
#    print ('UzC is unitary')
?-----------#IE?C? C??C?E C?CEEIC??E-------------------
Probz0 = (nz0+nz1)*(1/(2)).
print ('Probz0=', Probz0)
??---------------#CE C???E?C? C??C-------------??
Arri_Probt_zC = np.zeros(T+1)
k=1
t=0
while t<=T:
if t==0:
Probt_zC = Probz0
Arri_Probt_zC[t]=Probt_zC[(17)]+Probt_zC[(16])
Probt_zC[(17)] = 0
Probt_zC[(16)] = 0
else:
Probt_zC = np.dot(UzC, Probt_zC)
Arri_Probt_zC[t]=Arri_Probt_zC[t-1]+Probt_zC[(17)]+Probt_zC[(16])
Probt_zC[(17)] = 0
Probt_zC[(16)] = 0
if Arri_Probt_zC[t]==1:
if k==1:
k=2
print ('tzC=', t)
```

```
t+=1
==========================================#zigzag
======================
A0 = np.kron(np.outer(nz0, nz0),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nz1,
nz0),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nz2, nz0),np.outer(d1, d1))
A1 = np.kron(np.outer(nz1, nz1),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nz0,
nz1),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nz3, nz1),np.outer(d0, d0))
A2 = np.kron(np.outer(nz2, nz2),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nz0,
nz2),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nz4, nz2),np.outer(d0, d0))
A3 = np.kron(np.outer(nz3, nz3),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nz1,
nz3),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nz5, nz3),np.outer(d1, d1))
A4 = np.kron(np.outer(nz2, nz4),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nz6,
nz4),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nz5, nz4),np.outer(d2, d2))
A5 = np.kron(np.outer(nz3, nz5),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nz4,
nz5),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nz7, nz5),np.outer(d0, d0))
A6 = np.kron(np.outer(nz8, nz6),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nz4,
nz6),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nz6, nz6),np.outer(d2, d2))
A7 = np.kron(np.outer(nz9, nz7),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nz5,
nz7),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nz7, nz7),np.outer(d2, d2))
A8 = np.kron(np.outer(nz6, nz8),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nz10,
nz8),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nz9, nz8),np.outer(d2, d2))
A9 = np.kron(np.outer(nz8, nz9),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nz7,
nz9),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nz11, nz9),np.outer(d0, d0))
A10 = np.kron(np.outer(nz10, nz10),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nz8,
nz10),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nz12, nz10),np.outer(d0, d0))
A11 = np.kron(np.outer(nz9, nz11),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nz13,
nz11),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nz11, nz11),np.outer(d2, d2))
A12 = np.kron(np.outer(nz10, nz12),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nz14,
nz12),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nz13, nz12),np.outer(d2, d2))
A13 = np.kron(np.outer(nz12, nz13),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nz11,
nz13),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nz15, nz13),np.outer(d0, d0))
A14 = np.kron(np.outer(nz16, nz14),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nz12,
nz14),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nz14, nz14),np.outer(d2, d2))
A15 = np.kron(np.outer(nz13, nz15),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nz15,
nz15),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nz17, nz15),np.outer(d1, d1))
A16= np.kron(np.outer(nz17, nz16),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nz16,
nz16),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nz14, nz16),np.outer(d0, d0))
A17 = np.kron(np.outer(nz15, nz17),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nz16,
nz17),np.outer(d2, d2))+np.kron(np.outer(nz17, nz17),np.outer(d0, d0))
'''
A0   = np.kron(np.outer(nz0, nz0),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nz2,
nz0),np.outer(d1, d0))+np.kron(np.outer(nz1, nz0),np.outer(d2, d2))
A1   = np.kron(np.outer(nz1, nz1),np.outer(d1, d1))+np.kron(np.outer(nz3,
nz1),np.outer(d1, d0))+ np.kron(np.outer(nz0, nz1),np.outer(d2, d2))
A2   = np.kron(np.outer(nz0, nz2),np.outer(d0, d1))+np.kron(np.outer(nz4,
nz2),np.outer(d1, d0))+ np.kron(np.outer(nz2, nz2),np.outer(d2, d2))
A3   = np.kron(np.outer(nz1, nz3),np.outer(d0, d1))+np.kron(np.outer(nz5,
nz3),np.outer(d1, d0))+np.kron(np.outer(nz3, nz3),np.outer(d2, d2))
A4   = np.kron(np.outer(nz2, nz4),np.outer(d0, d1))+np.kron(np.outer(nz6,
nz4),np.outer(d1, d0))+np.kron(np.outer(nz5, nz4),np.outer(d2, d2))
```

```
A5   = np.kron(np.outer(nz3, nz5),np.outer(d0, d1))+np.kron(np.outer(nz7,
nz5),np.outer(d1, d0))+ np.kron(np.outer(nz4, nz5),np.outer(d2, d2))
A6   = np.kron(np.outer(nz4, nz6),np.outer(d0, d1))+np.kron(np.outer(nz8,
nz6),np.outer(d1, d0))+np.kron(np.outer(nz6, nz6),np.outer(d2, d2))
A7   = np.kron(np.outer(nz5, nz7),np.outer(d0, d1))+np.kron(np.outer(nz9,
nz7),np.outer(d1, d0))+np.kron(np.outer(nz7, nz7),np.outer(d2, d2))
A8   = np.kron(np.outer(nz6, nz8),np.outer(d0, d1))+np.kron(np.outer(nz10,
nz8),np.outer(d1, d0))+np.kron(np.outer(nz9, nz8),np.outer(d2, d2))
A9   = np.kron(np.outer(nz7, nz9),np.outer(d0, d1))+np.kron(np.outer(nz11,
nz9),np.outer(d1, d0))+ np.kron(np.outer(nz8, nz9),np.outer(d2, d2))
A10 = np.kron(np.outer(nz8, nz10),np.outer(d0, d1))+np.kron(np.outer(nz12,
nz10),np.outer(d1, d0))+ np.kron(np.outer(nz10, nz10),np.outer(d2, d2))
A11 = np.kron(np.outer(nz9, nz11),np.outer(d0, d1))+np.kron(np.outer(nz13,
nz11),np.outer(d1, d0))+np.kron(np.outer(nz11, nz11),np.outer(d2, d2))
A12 = np.kron(np.outer(nz10, nz12),np.outer(d0, d1))+np.kron(np.outer(nz14,
nz12),np.outer(d1, d0))+np.kron(np.outer(nz13, nz12),np.outer(d2, d2))
A13 = np.kron(np.outer(nz11, nz13),np.outer(d0, d1))+np.kron(np.outer(nz15,
nz13),np.outer(d1, d0))+np.kron(np.outer(nz12, nz13),np.outer(d2, d2))
A14 = np.kron(np.outer(nz12, nz14),np.outer(d0, d1))+np.kron(np.outer(nz16,
nz14),np.outer(d1, d0))+np.kron(np.outer(nz14, nz14),np.outer(d2, d2))
A15 = np.kron(np.outer(nz13, nz15),np.outer(d0, d1))+np.kron(np.outer(nz17,
nz15),np.outer(d1, d0))+np.kron(np.outer(nz15, nz15),np.outer(d2, d2))
A16 = np.kron(np.outer(nz14, nz16),np.outer(d0, d1))+np.kron(np.outer(nz16,
nz16),np.outer(d0, d0))+np.kron(np.outer(nz17, nz16),np.outer(d2, d2))
A17 = np.kron(np.outer(nz15, nz17),np.outer(d0, d1))+np.kron(np.outer(nz17,
nz17),np.outer(d0, d0))+ np.kron(np.outer(nz16, nz17),np.outer(d2, d2))
'''
---------------------------------------#C?I??CE ??E ?????E C????E C?IC?E E?? ??IE------
----
Uz0  = A0.dot(np.kron(np.outer(nz0, nz0),Hd1))
Uz1  = A1.dot(np.kron(np.outer(nz1, nz1),Hd1))
Uz2  = A2.dot(np.kron(np.outer(nz2, nz2),Hd2))
Uz3  = A3.dot(np.kron(np.outer(nz3, nz3),Hd2))
UzG4  = A4.dot(np.kron(np.outer(nz4, nz4),G3))
UzF4  = A4.dot(np.kron(np.outer(nz4, nz4),F3))
UzG5  = A5.dot(np.kron(np.outer(nz5, nz5),G3))
UzF5  = A5.dot(np.kron(np.outer(nz5, nz5),F3))
Uz6  = A6.dot(np.kron(np.outer(nz6, nz6),Hd2))
Uz7  = A7.dot(np.kron(np.outer(nz7, nz7),Hd2))
UzG8  = A8.dot(np.kron(np.outer(nz8, nz8),G3))
UzF8  = A8.dot(np.kron(np.outer(nz8, nz8),F3))
UzG9  = A9.dot(np.kron(np.outer(nz9, nz9),G3))
UzF9  = A9.dot(np.kron(np.outer(nz9, nz9),F3))
Uz10  = A10.dot(np.kron(np.outer(nz10, nz10),Hd2))
Uz11  = A11.dot(np.kron(np.outer(nz11, nz11),Hd2))
UzG12  = A12.dot(np.kron(np.outer(nz12, nz12),G3))
UzF12  = A12.dot(np.kron(np.outer(nz12, nz12),F3))
UzG13  = A13.dot(np.kron(np.outer(nz13, nz13),G3))
UzF13  = A13.dot(np.kron(np.outer(nz13, nz13),F3))
Uz14  = A14.dot(np.kron(np.outer(nz14, nz14),Hd2))
```

```
Uz15  = A15.dot(np.kron(np.outer(nz15, nz15),Hd2))
Uz16  = A16.dot(np.kron(np.outer(nz16, nz16),Hd0))
Uz17  = A17.dot(np.kron(np.outer(nz17, nz17),Hd0))
??----------#E? C?E??? C--------------------????
UzF=Uz0+Uz1+Uz2+Uz3+UzF4+UzF5+Uz6+Uz7+UzF8+UzF9+Uz10+Uz11+UzF12
+UzF13+Uz14+Uz15+Uz16+Uz17
UzG=Uz0+Uz1+Uz2+Uz3+UzG4+UzG5+Uz6+Uz7+UzG8+UzG9+Uz10+Uz11+UzG1
2+UzG13+Uz14+Uz15+Uz16+Uz17
Unitarity_UzF = UzF.dot(np.linalg.inv(UzF))
print ('[UzF].[UzF]^(-1)', Unitarity_UzF)
Unitarity_UzG = UzG.dot(np.linalg.inv(UzG))
print ('Unitarity_UzG', Unitarity_UzG)
----------------------------------------------------#
#psi0 =
((np.kron(nz17,d1)+np.kron(nz17,d2))+(np.kron(nz16,d2)+np.kron(nz16,d1)))*(1/np.s
qrt(4))
psiz0 =
((np.kron(nz0,d0)+np.kron(nz0,d2))+(np.kron(nz1,d2)+np.kron(nz1,d0)))*(1/np.sqrt(4)
)
#psi0 = ((np.kron(nz0,d1))+(np.kron(nz1,d0)))*(1/np.sqrt(2))
#psi0 = ((np.kron(nz0,d2))+(np.kron(nz1,d2)))*(1/np.sqrt(2))
#psi0 = ((np.kron(nz0,d2))+(np.kron(nz1,d0)))*(1/np.sqrt(2))
#psi0 = (np.kron(nz0,d2))
#psi0 = (np.kron(nz1,d0))
probz0=psiz0.dot(psiz0.conjugate()).real
print ('<psiz0|psiz0>=', probz0)
??---------------#CE C???E?C? C??C-------------??
Arri_Probt_zG= np.zeros(T+1)
k=1
t=0
while t<=T:
if t==0:
psitzG= psiz0
psitzG[(53)] = 0
psitzG[(52)] = 0
psitzG[(51)] = 0
psitzG[(50)] = 0
psitzG[(49)] = 0
psitzG[(48)] = 0
'''
psitzG[(0)] = 0
psitzG[(1)] = 0
psitzG[(2)] = 0
psitzG[(3)] = 0
psitzG[(4)] = 0
psitzG[(5)] = 0
'''
probtzG=psitzG.dot(psitzG.conjugate()).real
Arri_Probt_zG[t]= 1- probtzG
else:
```

```
psitzG= np.dot(UzG, psitzG)
psitzG[(53)] = 0
psitzG[(52)] = 0
psitzG[(51)] = 0
psitzG[(50)] = 0
psitzG[(49)] = 0
psitzG[(48)] = 0
'''
psitzG[(0)] = 0
psitzG[(1)] = 0
psitzG[(2)] = 0
psitzG[(3)] = 0
psitzG[(4)] = 0
psitzG[(5)] = 0
'''
probtzG=psitzG.dot(psitzG.conjugate()).real
Arri_Probt_zG[t]= 1- probtzG
ifArri_Probt_zG[t]==1:
if k==1:
k=2
print ('tzG=', t)
#    print ('psitzG', psitzG)
t+=1
=========================================================#
Arri_Probt_zF= np.zeros(T+1)
k=1
t=0
while t<=T:
if t==0:
psitzF= psiz0
psitzF[(53)] = 0
psitzF[(52)] = 0
psitzF[(51)] = 0
psitzF[(50)] = 0
psitzF[(49)] = 0
psitzF[(48)] = 0
'''
psitzF[(0)] = 0
psitzF[(1)] = 0
psitzF[(2)] = 0
psitzF[(3)] = 0
psitzF[(4)] = 0
psitzF[(5)] = 0
'''
probtzF = psitzF.dot(psitzF.conjugate()).real
Arri_Probt_zF[t]= 1- probtzF
else:
psitzF= np.dot(UzF, psitzF)
psitzF[(53)] = 0
psitzF[(52)] = 0
```

```
psitzF[(51)] = 0
psitzF[(50)] = 0
psitzF[(49)] = 0
psitzF[(48)] = 0
'''
psitzF[(0)] = 0
psitzF[(1)] = 0
psitzF[(2)] = 0
psitzF[(3)] = 0
psitzF[(4)] = 0
psitzF[(5)] = 0
'''
probtzF = psitzF.dot(psitzF.conjugate()).real
Arri_Probt_zF[t]= 1- probtzF
ifArri_Probt_zF[t]==1:
if k==1:
k=2
print ('tzF=', t)
t+=1
===========================================================#
======#Plot the probability====================
minorLocator = AutoMinorLocator()
fig, ax = plt.subplots()
#plt.plot(Sum_Probt_H2, 'ko--', label='$SumProH2$', markersize=10, linewidth=7)
plt.plot(Arri_Probt_H2, 'r-', label='$ArriH2$', markersize=5, linewidth=4)
plt.plot(Arri_Probt_zF, 'b-', label='$ArriZF$', markersize=5, linewidth=4)
plt.plot(Arri_Probt_LC, 'k-', label='$ArriLC$', markersize=5, linewidth=4)
plt.plot(Arri_Probt_arC, 'k--', label='$ArriARC$', markersize=5, linewidth=2)
plt.plot(Arri_Probt_zC, 'k+', label='$ArriZC$', markersize=10, linewidth=4)
plt.plot(Arri_Probt_arF, 'g-', label='$ArriARF$', markersize=5, linewidth=4)
plt.plot(Arri_Probt_arG, 'y*', label='$ArriARG$', markersize=10, linewidth=4)
plt.plot(Arri_Probt_zG, 'b.', label='$ArriZG$', markersize=5, linewidth=2)
#plt.plot(VerificationH2, 'ro--', label='$VerH2$', markersize=10, linewidth=7)
plt.plot([], [], ' ', label='$T= '+str(T('$'+)
#plt.xticks(range (0, T+1, 5))
#ax.set_xticklabels(range (0, T+1, 5))
#plt.ylim(-0.1, 1.1)
ax.xaxis.set_minor_locator(minorLocator)
ax.yaxis.set_minor_locator(minorLocator)
ax.grid(which='both')
ax.grid(which='minor', lw=0.5, ls':'=)
ax.grid(which='major', lw=1, ls'--'=)
ax.tick_params(axis='x', which='major', labelsize=25, width=6, length=20, colors='k')
ax.tick_params(axis='x', which='minor', labelsize=25, width=2, length=10, colors='k')
ax.tick_params(axis='y', which='major', labelsize=25, width=6, length=20, colors='k')
ax.tick_params(axis='y', which='minor', labelsize=25, width=2, length=10, colors='k')
ax.set_xlabel('Steps number', fontsize=25)
ax.set_ylabel('Probability', color='k', fontsize=25)
for tl in ax.get_yticklabels:()
tl.set_color('k')
```

```
ax.xaxis.set_minor_locator(MultipleLocator(20))
ax.yaxis.set_minor_locator(MultipleLocator(0.10))
plt.title('Arrival Probability by classical random walk in simple irregular line aftre ' +
str(T) + ' steps', fontsize=20)
plt.legend(fontsize=20)
figManager = plt.get_current_fig_manager()
figManager.window.showMaximized()
plt.tight_layout()
plt.show()
print('الحمدلله')
 ===#End of the code=========
```

المراجع

[1] Xining Zang: "*Silicene: Graphene's silicon cousin* "*: Graduate Student* ME@ Berkeley:) 5/02/2013).

[2]"*Crystal Structure Theory and Applications*": vol 5: pp43:Published Online August in Sciures:(2016).

[3] M. Elachaby :"*NanocompositesGraphéne-Polymé Thermoplastique : Fabrication et-Etude des Propriétés Structurales, Thermiques Rhéologiques et Mécaniques*" : Thèse de doctorat : Université Mohammed V-A (2012).

[4] M. Czernaik-Reczulska, A. Niedzielska, A. Jedrzejak: "*Graphene as a material for solar cells application*": Material Science: Vol.15:No.4 (46) :(2015).

[5] F. Bechstedt: "*Principles of Surface Physics*.": Springer-Verlag: Berlin: (2003).

[6] P. Ajayan, P. Kim, and K. Banerjee: "*Two-dimensional van der Waals Materials":*Phys. Today: vol. 69:no. 9: pp 38–44(: 2016).

[7] Xiaokun Gu and Ronggui Yang:*" Phonon transport and thermal conductivity in two-dimensional materials": Annual* Review of Heat Transfer: vol 19: pp1-65: (2015).

[8] Jackie D. Renteria 1, Denis L. Nika 2, and Alexander A. Balandin 3:*"Graphene Thermal Properties: Applications in Thermal Management and Energy Storage*"*: Appl. Sci:* vol *4: pp* 525-547: (2011).

[9] I. Batra, P. García, N. Rohrer, H. Salemink, H. Stoll, E. Ciraci: *"Study of Graphite Surface with STM and Electronic Structure Calculations*": Surf. Sci. 181 : pp126−138 : (1987).

[10]A. Allard : "*Etude ab-initio des phonons du Graphene sur substrat Métalliques*"*Université Sciences et Technologies Lille, hèse*" : de doctorat en Physique de la matière condensée : (2011).

[11] S. Reich, J. Maultzsch, C. Thomsen, and P. Ordejón" *Tight-binding Description of Graphene*". In: Phys. Rev. B: vol 66 (3): pp 035412: (2002).

[12] K. Kin, J. Young, T. Kim, S. Hocho, H. Jong Chung: "*A role for grapheme in siliconbased semiconductor devices* ": Review insight: Vol. 479:(2011).

[13] K. Manouchehri, J. Wang, Physical Implementation of Quantum Walks, Quantum Science and Technology. Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2014.

[14] C. Moore, S. Mertens, The Nature of Computation. Oxford University Press, New York (2011)

[15] T.M. Cover, J. Thomas, Elements of Information Theory. Wiley, New York (1991)

[16] R. Portugal, Quantum Walks and Search Algorithms, Quantum Science and Technology. Springer-Verlag New York 2013.

[17] W. Feller, an Introduction to Probability Theory and Its Applications, vol. 1, 3rd edn. Wiley, New York (1968)

[18] B.D. Hughes, Random Walks and Random Environments: Random Environments (Vol 2). Oxford University Press, Oxford (1996)

[19] V. Kendon and B. C. Sanders, Complementarity and quantum walks, Phys. Rev. A 71, 022307 (2005)

[20] V. Kendon, Decoherence in quantum walks – a review. Math. Struct.Comput. Sci. 17, 1169 (2007)

[21] V. Kendon, B. Tregenna, Decoherence can be useful in quantum walks.Phys. Rev. A 67, 042315 (2003)

[22] A. Kay, The basics of perfect communication through quantum networks, Phys. Rev. A 84, 022337 (2011).

الملخص:

في هذه المذكرة تعرفنا على المواد ثنائية البعد التي اكتشفت حديثا. هذه المواد هي حاليا محط اهتمام الكثير من الباحثين لخصائصها المنفردة والمميزة. تطرقنا في هذا العمل إلى معالجة رقمية تحاكي المشي الكلاسيكي والكمي في بعض المواد ثنائية البعد من اجل اختبار خاصية الانتقال. أنجزنا البرامج بلغة البايثون وبواسطة القارئ Enthoughtcanopy.وجدنا أن فكرة المشي العشوائي الكمي تطبق عموما عبر البنى المجردة .تمكنا من مقارنة واستخلاص أن خاصية الانتقال عن طريق المشي الكمي للخط ذو 8 مستويات كانت أكثر كفاءة وسرعة لنقل الاحتمال الكلي من الzigzagوarmchair. كما وجدنا أيضا أن نقل الاحتمال في أنابيبzigzag كانت أسرع من نظيرتها armchair.

الكلمات المفتاحية:المشي العشوائي الكلاسيكي،المشي الكمي، خاصية الانتقال،أنابيبzigzag،أنابيبarmchair.

Abstract

In this note, we learned about newly discovered two-dimensional materials. These materials are currently the focus of many researchers for their unique and distinctive properties. In this work, we touched on a digital processing that simulates classical and quantitative walking in some two-dimensional materials in order to test the transmission property. We implemented the programs in Python language and using the reader Enthought canopy. We found that the quantum random walk idea is generally applied across abstract structures. We were able to compare and conclude that the 8-level line quantum walking feature was more efficient and faster to transfer the total probability from the zigzag and armchair. We also found that the probability transfer into the zigzag tubes was faster than that of the armchair.

Key words: classical random walking, quantitative walking, locomotion, zigzag tubes, armchair tubes.

Résumé

Dans cette note, nous avons découvert des matériaux bidimensionnels nouvellement découverts. Ces matériaux sont actuellement au centre de nombreux chercheurs pour leurs propriétés uniques et distinctives. Dans ce travail, nous avons abordé un traitement numérique qui simule la marche classique et quantitative dans certains matériaux bidimensionnels afin de tester la propriété de transmission. Nous avons implémenté les programmes en langage Python et en utilisant le lecteur Enthought canopée. Nous avons constaté que l'idée de marche aléatoire quantique est généralement appliquée à travers des structures abstraites. Nous avons pu comparer et conclure que la fonction de marche quantique en ligne à 8 niveaux était plus efficace et plus rapide pour transférer la probabilité totale du zigzag et du fauteuil. Nous avons également constaté que le transfert de probabilité dans les tubes en zigzag était plus rapide que celui du fauteuil.

Mots clés :marche aléatoire classique, marche quantitative, locomotion, tubes en zigzag, tubes fauteuil.