



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
MESTRADO ACADÊMICO EM FÍSICA

SERGIO LEVY NOBRE DOS SANTOS

***EFEITO ZITTERBEWEGUNG NA BICAMADA DE GRAFENO COM TRIGONAL
WARPING***

FORTALEZA

2023

SERGIO LEVY NOBRE DOS SANTOS

EFEITO *ZITTERBEWEGUNG* NA BICAMADA DE GRAFENO COM *TRIGONAL WARPING*

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física. Área de Concentração: Física da matéria condensada

Orientador: Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa

Coorientador: Prof. Dr. João Milton Pereira Junior

FORTALEZA

2023

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Sistema de Bibliotecas
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

- S238e Santos, Sergio Levy Nobre dos.
Efeito zitterbewegung na bicamada de grafeno com trigonal warping / Sergio Levy Nobre dos Santos. – 2023.
151 f. : il. color.
- Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2023.
Orientação: Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa.
Coorientação: Prof. Dr. João Milton Pereira Junior.
1. Zitterbewegung. 2. Bicamada de grafeno. 3. Trigonal warping. 4. Técnica split-operator. 5. Dinâmica de Pacotes de onda. I. Título.

CDD 530

SERGIO LEVY NOBRE DOS SANTOS

EFEITO *ZITTERBEWEGUNG* NA BICAMADA DE GRAFENO COM *TRIGONAL WARPING*

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física. Área de Concentração: Física da matéria condensada

Aprovada em: 23 de Fevereiro de 2023

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. João Milton Pereira Junior (Coorientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Francois Maria Leopold Peeters
Universidade de Antuérpia - Bélgica

Prof. Dr. Alexandro das Chagas de Sousa Nascimento
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia
do Piauí -IFPI

A Deus e aos meus pais.

AGRADECIMENTOS

Agradeço, primeiramente, à Deus por ter me dado essa maravilhosa oportunidade de estudar e entender suas magnificas criações.

Aos meus pais, Sergio e Lena, pelo suporte financeiro e emocional que me foi concedido durante toda minha vida.

À minha noiva Rayanna, por me apoiar e me levantar sempre quando caia.

Ao Departamento de Física da UFC pelo suporte com os professores.

Ao meu orientador, Diego Rabelo da Costa, pelo suporte neste trabalho.

Aos membros do Grupo de Teoria da Matéria Condensada (GTMC).

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

“A prova real de que você está na presença de Deus é que você ou esquece completamente de si ou se vê como um objeto pequeno e sujo.”

(Lewis, 1952)

RESUMO

Analisando a estrutura de bandas para baixas energias na bicamada de grafeno com empilhamento do tipo Bernal (AB), nota-se a presença de três mini-cones de Dirac ao redor dos vales K e K' , cuja razão física está associada ao conhecido efeito *trigonal warping*. Este efeito é responsável pela assimetria da estrutura de bandas. Neste contexto, investigamos teoricamente a evolução temporal de um pacote de ondas gaussiano propagando-se em uma amostra de bicamada de grafeno a fim de verificar o papel do *trigonal warping* na dinâmica. Para calcular os valores esperados da posição (x, y) do centro de massa e as densidades de probabilidade totais do pacote de ondas, é necessário resolver numericamente a equação de Schrödinger dependente do tempo. Esse cálculo é realizado por meio de um formalismo numérico baseado na técnica *split-operator*. Esse método é usado dentro da abordagem para Hamiltonianos contínuos de Dirac, tanto para o modelo 2 bandas quanto para o de 4 bandas, considerando os efeitos mencionados acima devido aos *hoppings* intercamadas não-perpendiculares, no caso da bicamada de grafeno. Além de uma abordagem numérica, é feita uma abordagem analítica do ponto de vista dos propagadores da mecânica quântica com o uso das funções de Green $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$. As oscilações espaciais transientes devidas ao efeito conhecido como *zitterbewegung* são discutidas para diferentes polarizações iniciais de *pseudospin*, larguras, energias e momentos dos pacotes de onda iniciais.

Palavras-chave: *Zitterbewegung*; bicamada de grafeno; *Trigonal warping*; técnica *Split-Operator*;

ABSTRACT

Analyzing the low-energy band structure in Bernal-stacked graphene bilayers (AB), three Dirac mini-cones are observed around the K and K' valleys, whose physical rationale is associated with the well-known trigonal warping effect. This effect induces the asymmetry in the band structure. In this context, we theoretically investigate the time evolution of a Gaussian wave packet propagating through a graphene bilayer sample to examine the role of trigonal warping in the dynamics. Numerically solving the time-dependent Schrödinger equation is necessary to calculate the expected values of the position (x, y) of the center of mass and the total probability densities of the wave packet. This calculation is performed using a numerical formalism based on the split-operator technique. The method is applied within the framework of continuous Dirac Hamiltonians, both for the 2-band and 2-band models, taking into account the aforementioned effects arising from non-perpendicular interlayer hoppings in the case of graphene bilayers. In addition to a numerical approach, an analytical approach is pursued from the standpoint of quantum mechanics propagators using Green's functions $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$. Transient spatial oscillations due to the effect known as zitterbewegung are discussed for different initial pseudospin polarizations, widths, energies, and momenta of the initial wave packets.

Keywords: Zitterbewegung; Bilayer graphene; Trigonal warping; Split-operator technique;

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1 – (a) Enxofre obtido na natureza na forma Rômbico, (b) Minério flourita. Do (c) até o (f) temos a representação de materiais do tipo dimensão 0, unidimensional, bidimensional e tridimensional, respectivamente. Figuras adptadas das Refs. (Leidus, 2021), (Lavinsky, 2010) e (Tiwari *et al.*, 2012). 21
- Figura 2 – (a) Representação de alguns alótropos do carbono descendentes do grafeno (2D), com relação ao tipo de dimensionalidade: Fulereo (0D), Nanotubos de carbono (1D) e Grafite (3D). (b) Representação do diamante e sua estrutura cristalina do tipo *FCC*. Figuras adaptada das Refs (Geim A.K. ; Novoselov, 2007) e (Ashcroft N.W. ; Mermin, 2011). 21
- Figura 3 – Representação dos materiais da família do grafeno: (a) grafeno, (b) nitreto de boro, (c) grafano e o fluorografeno. Figura adaptada de (Pollard e Clifford, 2017) 23
- Figura 4 – Representação cronológica da obtenção de diversos tipos de materiais tipos materiais bidimensionais, inclusive materiais nitreto de boro (Zhang *et al.*, 2017), com o fósforo negro (Akhtar *et al.*, 2017) e o borofeno (Wang *et al.*, 2019). (*) O ano de 2015 representado aqui para a síntese do TMDs trata-se de obtenções posteriores do MoS_2 , depositando-o sobre uma camada de ouro *Au* (Grønberg *et al.*, 2015), e o WSe_2 através do uso da deposição de vapor químico orgânico-metal (Eichfeld *et al.*, 2015). 24
- Figura 5 – (a) Oscilações ZBW transitórias de elétrons quase livres, representado pela a posição média em z , versus tempo, calculado para um pacote de onda muito estreito, comparando alguns valores de *momentum* k_{z_0} para o Arsenieto de Gálio *GaAs*. Figura adptada de (Rusin, 2011). (b) O *zitterbewegung* de um elétron em um fio quântico harmônico perpendicular na direção do fio no semiconductor *zinc-blende*. O número de onda k_0 , para o movimento ao longo do fio é $k_0 \lambda = 5$. A amplitude do *zitterbewegung* é máximo na ressonância $2\alpha k_0 = \hbar \omega$ (painel do meio). Figura adaptada de (Schliemann *et al.*, 2005). 27

- Figura 6 – (a) Densidade probabilidade $|\psi|^2$ para um pacote de onda de comprimento $d = 20$ nm e *momentum* $k_0 = \frac{1}{d}$ no eixo y , para monocamada de grafeno no tempo $t = 200$ fs e polarizações $[1, 0]^T$, $[1, 1]^T$ e $[1, i]^T$ (Figura adaptada de (Maksimova *et al.*, 2008)). (b) Representação do empilhamento de camadas de grafeno, ressaltando a monocamada, bicamada e tricamada, com o *hopping* ortogonal γ_{\perp} entre eles (Figura adptada de (Lavor *et al.*, 2020b)). Trajetórias médias para as respectivas polarizações com comprimento $d = 20$ nm e a relação $k_0d = a$ para cada valor de a , ressaltando o efeito *zitterbewegung* em cada uma delas: (c) Monocamada, (d) Bicamanda e (e) Tricamada (Figura adptada de (Lavor *et al.*, 2020b)). 29
- Figura 7 – (a) Posição média e [(b) e (c)] valor esperado da velocidade ao longo da direção y em função do tempo para o caso $[C_1, C_2]^T = [1, 0]^T$ (preto), $[C_1, C_2]^T = [1, 1]^T$ (vermelho) e $[C_1, C_2]^T = [1, i]^T$ (azul). (c) Uma ampliação dos resultados em (b) para grandes intervalos de tempo mostrando o comportamento oscilatório de v_y . (Direita) Gráficos de contorno do módulo ao quadrado da função de onda em (I) $t = 390$ e (II) 391 fs, e um zoom enfatizado pelas curvas tracejadas mostrando as isosuperfícies nas duas etapas de tempo. Figura adptada de (Cunha *et al.*, 2019). 30
- Figura 8 – Representação esquemática da bicamada de grafeno com empilhamento (a) AB e (b) AA , mostrando (painéis superiores) em perspectiva e (painéis inferior) visão superior. O termo de *hopping* intracamada γ_0 e os termos intercadas γ_1 , γ_3 , e γ_4 são apresentados. Apenas *hoppings* de primeiros vizinhos são mostrados para o caso do empilhamento AA . Na visão superior para cada empilhamento destacamos a célula unitária (linha preta tracejada), os vetores de bases \mathbf{a}_1 e \mathbf{b}_2 , e os vetores de rede δ_1 , δ_2 e δ_3 34
- Figura 9 – Representação da rede recíproca da bicamada de grafeno com o pontos de alta simetria Γ , \mathbf{M} , K e K' , sendo a área delimitada pela a linha tracejada corresponde à célula unitária, com vetores de base \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 (dados em Eq.(2.4)), com destaque para o contorno da primeira zona de Brillouin, em verde, para o vale K e vermelho para o vale K' . O contorno da primeira zona será analisado na são de estrutura de bandas. 36
- Figura 10 – Distribuição dos orbitais p_z em cada camada para a BLG, mostrando o caso do empilhamento AB (a) e AA (b). 37

- Figura 11 – Organização dos vetores primitivos da rede $\vec{\delta}_j$ (com o referencial O) dessa vez sendo relacionado em função dos vetores $\mathbf{R}_j^B - \mathbf{R}^A$ com j valendo $i = 1, 2, 3$. Notamos a representação dos termos de *Hopping* $t_{ij} = \gamma_0$ entre cada um dos pares de átomos da sub-rede $A(\tilde{A})$ e $B(\tilde{B})$ 42
- Figura 12 – Estrutura de bandas no contorno da primeira zona de Brillouin, como o auto-valor $E(\mathbf{k})$ da equação $\det\{\mathcal{H}_{TB} - E(\mathbf{k})\mathcal{S}\} = 0$, onde \mathcal{H}_{TB} é dada na Eq.(2.63) e \mathcal{S} na Eq.(2.26), com os parâmetros $E_{\tilde{A}} = E_{\tilde{B}} = E_A = E_B = 0 eV$, para a-) $s_0 = s_1 = 0$, b-) $s_0 = 0.065$ e $s_1 = 2s_0$ e c-) $s_0 = s_1 = 0.1$ 55
- Figura 13 – Estrutura de bandas nas proximidades dos vales \mathbf{K}_ξ na BLG, com $\xi = 1$ para o vale K e $\xi = -1$ para o vale K' , obtido como o auto-valor $E(\mathbf{k})$ da equação $\det[\mathcal{H}_{TB}^{app} - E(\mathbf{k})\mathcal{S}_{app}] = 0$, onde \mathcal{H}_{TB}^{app} é dada na Eq.(2.71) e \mathcal{S}_{app} na Eq.(2.72), com $U = 0 eV$ para a-) $s_0 = s_1 = 0$ (Eq.(2.73)), b-) $s_0 = 0.065$ e $s_1 = 2s_0$ 58
- Figura 14 – Representação das bandas de energia, com base na Eq.(2.108), tomando $\gamma_4 = 0$ e $U = 0$, para os casos a-) $\gamma_3 = 0$ e b-) $\gamma_3 \neq 0$, como os destaques para a isotropia no caso $\gamma_3 = 0$ e o efeito *Trigonal Warping* para $\gamma_3 \neq 0$ 68
- Figura 15 – Comparação entre os casos $\gamma_3 = 0$ e $\gamma_3 \neq 0$ para os vales K e K' , mostrando a assimetria entre vales para $\gamma_3 \neq 0$ e a equivalência para $\gamma_3 = 0$ 69
- Figura 16 – Banda de energia do Hamiltoniano de duas banda, com a presença do GAP Δ . 70
- Figura 17 – Algoritmo da técnica *Split Operator*, com ênfase nos passos que envolvem todas as operações no pacote de ondas. As transformadas FFT e iFFT lidam com algoritmos além de toda a trajetória original da técnica *Split Operator*. . 76
- Figura 18 – Representação da discretização da rede real por camada $\lambda = \{1, 2\}$ da BLG. 82
- Figura 19 – **Polarização em x ($\theta = 0^\circ$)**: Utilizando um pacote de ondas gaussiano na forma da Eq.(4.4), analisamos sua evolução temporal na bicamada de grafeno sob a perspectiva dos propagadores $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ (linhas sólidas) e da técnica *Split Operator* (linhas tracejadas). Tomamos $\sigma = 2, nm$, $\mathbf{k}_0 = (k_0, 0), nm^{-1}$, onde analisamos quatro produtos $a = \sigma k_0 = 1, 2, 3, 4$, e $\mathbf{r}_0 = (0, 0)$ para o momento e a posição inicial. O efeito *zitterbewegung* é perceptível devido às oscilações nas trajetórias ao longo do tempo ($\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$). 104

Figura 20 – (Polarização em x) : Utilizando um pacote de ondas gaussiano na forma da Eq.(4.4), analisamos sua evolução temporal na bicamada de grafeno, observando os instantes da densidade de probabilidade $ \Psi ^2$ para as 3 polarizações $[C_1, C_2]^T$. Tomamos $\sigma = 20, nm$, momentum $\mathbf{k}_0 = (k_0, 0), nm^{-1}$, onde analisamos dois produtos $a = \sigma k_0 = 1, 2$. A posição inicial é $\mathbf{r}_0 = (0, 0)$	105
Figura 21 – Polarização em y $\phi = 90^\circ$: Os mesmos parâmetros da polarização em x (Fig.19), mas agora para a polarização do eixo y do momentum.	106
Figura 22 – (Polarização em y) : Os mesmos parâmetros da polarização x (Fig.20), mas para a polarização do eixo y do momentum, com $\mathbf{k}_0 = (0, k_0)$	107
Figura 23 – Comparação entre as velocidades de grupo sem a presença do efeito <i>trigonal warping</i> ($\gamma_3 = 0$) (a) e com a presença do mesmo ($\gamma_3 \neq 0$) (b). Vemos que no caso $\gamma_3 = 0$ (a), a velocidade de grupo v_x^p é na mesma direção da polarização escolhida no eixo-x (k_x^p) ou no eixo-y (k_y^p), sendo a velocidade v_y^p . O mesmo não acontece para o caso $\gamma_3 \neq 0$ (b) para o eixo-y, com o efeito <i>trigonal warping</i> , onde a velocidade de grupo não está na direção de k_y^p e sim na diagonal.	110
Figura 24 – x polarização $\phi = 0^\circ$: Usando um pacote de ondas gaussiano na forma da Eq.(4.58) e Eq.(3.33), analisamos sua evolução temporal no grafeno bicamada no ponto de vista do hamiltoniano de 4 bandas e hamiltoniano <i>Tight Binding</i> , respectivamente. Pegamos $\sigma = 2 nm$, $\mathbf{k}_0 = (k_0, 0) nm^{-1}$, onde analisamos quatro produtos $\sigma k_0 = \{1, 2, 3, 4\}$ e $\mathbf{r}_0 = (0, 0)$ para o momento inicial e a posição. O efeito <i>zitterbewegung</i> é perceptível tendo em vista as oscilações nas trajetórias em função do tempo ($\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$) e as curvas no trajetória $\langle \mathbf{r} \rangle$. 113	113
Figura 25 – Polarização em y $\phi = 90^\circ$: Os mesmos parâmetros da polarização em x (Fig.24), mas agora considerando a polarização no eixo y do momento.	115
Figura 26 – Representação da estrutura de bandas do ponto de vista do modelo contínuo de 4 bandas, destacando as energias $\epsilon_a^{(x)}$, para a polarização no eixo x e $\epsilon_a^{(y)}$, para o eixo y , onde $a = k_0 \sigma$. Além disso, temos a representação os intervalos de momentum $\Delta \mathbf{k}$ e energia ΔE , calculados na tabela 4.	118
Figura 27 – Comparação de valores médios de x , $\langle x(t) \rangle$ e y , $\langle y(t) \rangle$, para os instantes iniciais para o <i>pseudospin</i> $[1, 0]^T$ com e sem a inclusão do efeito <i>trigonal warping</i> do ponto de vista da polarização no eixo x e no eixo y	120

- Figura 28 – a-) Representações de células unitárias ("tijolos") de materiais, como minérios, encontrados na natureza como Cloreto de Césio ($CsCl$), Cloreto de Sódio ou sal do cozinha ($NaCl$), Sulfeto de Zinco ou Esfalerita (ZnS), Fluoreto de Cálcio ou Fluorita (CaF_2), Dióxido de Titânio ou Rutilo (TiO_2) e o Óxido de Cálcio e Titânio ou Perovskita ($CaTiO_3$). b-) Os 14 tipos de Redes de Bravais em que são tipos de redes invariantes a traslações e rotações. Destaque para a rede hexagonal da forma ao grafeno. Figuras adaptadas de (Castro *et al.*, 2015). 149
- Figura 29 – (a) Representação de uma construção de uma célula de Wigner-Seitz bidimensional, traçando retas perpendiculares à ligações entre átomos. (b) Representação de uma construção de uma célula de Wigner-Seitz tridimensional para uma rede cúbica de face centrada. Vemos que, ao invés de traçarmos retas, colocamos planos perpendiculares a retas que ligam os átomos. Figura adaptada de (JoãoXP, 2011) e (Ashcroft N.W. ; Mermin, 2011). 150
- Figura 30 – a-) Representação da replicação de um célula unitária do tipo BCC (Cúbica de Corpo Centrado), um dos 14 tipos de Redes de Bravais 28, com seus vetores de base \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 e \mathbf{a}_3 . b-) Representação da replicação células unitárias bidimensionais (2D), que também são tipos de Redes de Bravais em duas dimensões, com os vetores de base \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 . Vemos que não há pontos sobrepostos, nem células, pelo o fato de n_i na equação (B.2) ser inteiro. Figura adaptada de (Castro *et al.*, 2015). 150
- Figura 31 – Representação de Família de planos em rede cristalinas tridimensionais. Note que, em ambos, os planos estão sempre distanciados igualmente, funcionando como cristas de uma onda. Figura adaptada de (Ashcroft N.W. ; Mermin, 2011) 151

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Valores dos <i>hoppings</i> γ_0 , γ_1 , γ_3 e γ_4 para o empilhamento <i>AB</i> (McCann; Koshino; Kuzmenko <i>et al.</i> , 2013, 2009) e <i>AA</i> (Mohammadi, 2021), obtidos através do modelo de Slonczewski-Weiss-McClure (SWMcC), que está relacionado ao hamiltoniano do grafite (Kuzmenko <i>et al.</i> , 2009).	37
Tabela 2 – Representação da interação entre orbitais atômicos dentro da célula unitária. Os traços representam a energia <i>onsite</i> relativa à sub-rede.	82
Tabela 3 – Tabela de parâmetro usados na construção do pacote de onda na Eq.(4.4), com a polarização no eixo <i>x</i> ou <i>y</i>	102
Tabela 4 – Representação de parâmetros de energia do pacote de onda gaussiano Eq.4.58 para o modelo de 4 bandas, como o <i>momentum</i> inicial \mathbf{k}_0 , a sua energia E_0 do ponto de vista do modelo de 2 bandas, e as distribuições ΔE e $\Delta \mathbf{k}$, para $a = 1$ e $a = 2$	118

LISTA DE SÍMBOLOS

v_f	Velocidade de Fermi
\hbar	Constante de Planck
γ_i	Parâmetro de <i>hopping</i>
v_i	Velocidade de banda relacionado ao <i>hopping</i> γ_i
s_0	Parâmetro de <i>overlap</i> 0
s_1	Parâmetro de <i>overlap</i> 1
\mathcal{S}	Matriz de <i>overlap</i>
\hat{H}_2	Hamiltoniano de duas bandas
\hat{H}_4	Hamiltoniano de quatro bandas

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	19
1.1	Surgimento dos materiais bidimensionais	20
1.2	Efeito <i>Zitterbewegung</i>	25
1.3	Escopo do trabalho	31
2	MODELO TEÓRICO PARA BICAMADA DE GRAFENO	33
2.1	Anatomia da bicamada de Grafeno	33
2.1.1	<i>Estrutura cristalina</i>	33
2.1.2	<i>Rede Reciproca do Grafeno</i>	35
2.1.3	<i>Parâmetros de Hoppings</i>	36
2.1.4	<i>Orbitais: dímeros e não-dímeros</i>	37
2.2	Modelo <i>tight-binding</i> : Primeira quantização	38
2.2.1	<i>O Cálculo do Modelo</i>	38
2.2.2	<i>Calculo da Matriz de Overlap</i>	40
2.2.3	<i>Cálculo do Hamiltoniano</i>	43
2.3	Modelo <i>tight-binding</i> : Segunda quantização	47
2.3.1	<i>O Espaço de Fock</i>	47
2.3.2	<i>Aplicação do espaço de Fock</i>	49
2.3.3	<i>Estrutura de Bandas</i>	54
2.4	Modelo contínuo: Quatro bandas	56
2.5	Modelo contínuo: Duas bandas	59
2.5.1	<i>Hamiltoniano de duas bandas em termos de matrizes de Pauli ($\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$)</i>	63
2.5.2	<i>O efeito Trigonal Warping</i>	66
2.5.3	<i>Assimetria elétron-buraco</i>	69
2.5.4	<i>Efeito Trigonal Warping com GAP</i>	70
2.5.5	<i>Auto-estados do Hamiltoniano de duas bandas</i>	70
3	EVOLUÇÃO TEMPORAL	72
3.1	O Operador de Evolução Temporal $\hat{U}(t_0, t)$	72
3.2	A técnica <i>Split Operator</i>	74
3.3	Hamiltoniano de duas bandas na técnica <i>Split Operator</i>	77
3.4	Hamiltoniano de quatro bandas na técnica <i>Split Operator</i>	78
3.5	Hamiltoniano <i>tight binding</i> na técnica <i>Split Operator</i>	81

4	EFEITO DE DEFORMAÇÃO TRIGONAL DEVIDO AO ZITTERBEWEGUNG NA PROPAGAÇÃO DE PACOTES DE ONDAS EM BICAMADA DE GRAFENO	85
4.1	Introdução	85
4.2	Propagador $G_{\mu,\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ para a bicamada de grafeno	86
4.3	Valores médios de posição $\langle \mathbf{r}(t) \rangle$ com o uso dos propagadores $G_{\mu,\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$	90
4.3.1	<i>Pseudospin</i> $[1, 0]^T$	91
4.3.2	<i>Pseudospin</i> $[1, 1]^T$	93
4.3.3	<i>Pseudospin</i> $[1, i]^T$	97
4.4	Resultados para o Hamiltoniano de 2 bandas	102
4.4.1	<i>Polarização no eixo x</i>	102
4.4.2	<i>Polarização no eixo y</i>	106
4.5	Resultados para o Hamiltoniano de 4 bandas e <i>Tight Binding</i>	112
4.5.1	<i>Polarização no eixo x</i>	113
4.5.2	<i>Polarização no eixo y</i>	115
4.6	Equivalência entre os modelos	117
5	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	121
5.1	Perspectivas	123
	REFERÊNCIAS	124
	APÊNDICE A – PROVA DE IDENTIDADES	130
	APÊNDICE B – FÍSICA DO ESTADO SÓLIDO	148

1 INTRODUÇÃO

O século XX foi memorável no que diz respeito aos avanços da ciência, seja nas ciências da natureza, nas ciências humanas ou, até mesmo, na literatura com seu modernismo e pós-modernismo. Um dos aspectos associados aos grandes avanços nas ciências da natureza foi o estudo de semicondutores que proporcionou maiores feitos na eletrônica, dentro da física de estado sólido, com a criação de dispositivos como o diodo e o transistor (triodo) através do estudo das junções *pn*, para diodos, e *npn*, para transistores, ambos obtidos no ápice dos estudos envolvendo a física do estado sólido e a mecânica quântica na época em questão. A junção *npn* surgiu como uma teoria do físico William Shockley (1910-1989), com a dopagem de germânio¹, obtida de forma experimental em 1952 pelo próprio Shockley, o físico Walter Brattain (1902-1987), e os químicos Gordon Teal (1907-2003) e Morgan Sparks (1918-2008)², sendo Gordon e Morgan os responsáveis mais diretos pela obtenção experimental no laboratório Bell Labs³. O transistor de junção bipolar é uma evolução do primeiro transistor obtido em 1947, também obtido por Brattain e pelo físico John Bardeen (1908-1991), onde foi proposto um transistor do tipo point-contact (Shockley, 1951)⁴.

O impacto dos transistores desde a sua implementação até os dias atuais é bastante perceptivo, tanto pelo fato de ter impulsionado na ciência básica a descoberta de vários outros novos fenômenos físicos, como também na tecnologia, pois permitiu a evolução do processamento de dados com *chips* com alta capacidade de trabalho e o desenvolvimento de meios de comunicação, como o rádio e *wireless*. Nos aspectos econômico e social, permitiu o crescimento da indústria no setor terciário em decorrência da produção de semicondutores, alavancando o PIB dos países, e conseqüentemente influenciando na sociedade e na cultura. Isso foi mais perceptíveis no início dos anos 2000. Atuais pesquisas no setor são norteadas pela busca por altas capacidades de processamento, buscando-se o desenvolvimento de *chips* compostos por vários transistores. Uma saída para contornar o problema da eficiência e limitação espacial nos *chips* seria o desenvolvimento de tecnologias que utilizassem de outros materiais com alta performance

¹Previsto na teoria do próprio Shockley sobre o transistor de junção bipolar (Bipolar Junction Transistor - BJT) (Shockley, 1951)

²Mais detalhes podem ser encontrados nas referências das patêntes (Sparks e Teal, 1950) e (Shockley, 1948)

³O laboratório Bell Labs, originalmente conhecido como Bell Telephone Laboratories, é uma empresa de semicondutores com sede em Nova Jersey, EUA. O laboratório foi o berço de diversas ideias, não só do transistor como a criação e implementação da linguagem de programação C por Dennis Ritchie e Ken Thompson, muito utilizada hoje no kernel de microcontroladores e sistemas operacionais.

⁴O transistor do tipo point-contact foi primeiramente pensado para uso de uma camada de germânio com excesso de elétrons, usado como uma base juntamente com duas pontas: um emissor e o outro coletor.

quando comparados aos utilizados na indústria semicondutora padrão. Essa demanda fomenta pesquisas em materiais bidimensionais, investigando suas propriedades eletrônicas, de transporte e óticas, que se tem intensificado bastante na última década. Esta dissertação se insere neste contexto da investigação das propriedades eletrônicas e de transporte de materiais bidimensionais visando sua utilização para propor futuros dispositivos em aplicações tecnológicas.

Nas próximas seções, veremos aspectos históricos dos materiais bidimensionais, desde o seu surgimento até suas propriedades físicas e aplicações.

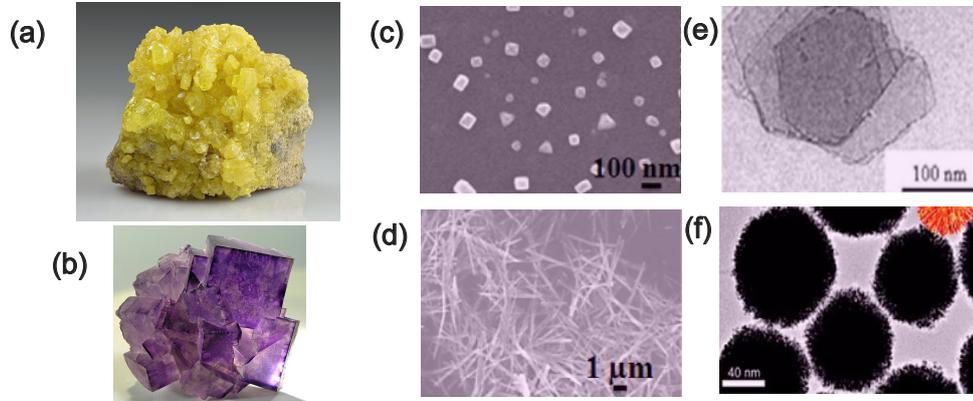
1.1 Surgimento dos materiais bidimensionais

A natureza abriga diversos formatos para os materiais encontrados nela. Muitos materiais na natureza possuem um arranjo específico relacionado à sua dimensionalidade. A dimensionalidade, juntamente com o arranjo do material, é um atributo muito importante, pois diz respeito à estabilização do material para sua existência. Essa estabilidade dos elementos da natureza é fundamental e é um aspecto intrínseco aos elementos da tabela periódica. A forma como os elementos são encontrados na natureza consiste em sua forma mais estável possível, ou seja, em seu estado de menor energia (Ashcroft N.W. ; Mermin, 2011). Um exemplo disso é o enxofre (S) mostrado na Figura 1(a) e o minério fluorita roxo (CaF_2) na Figura 1(b), sendo este último uma combinação de elementos da tabela periódica.

As Figs.1(c)-1(f) mostram a dimensionalidade dos materiais, que pode ser do tipo dimensão zero (0D), também chamado de ponto artificial, como mostrado na Fig.1(c), ou do tipo unidimensional (1D), como os fios quânticos apresentados na Fig.1(d), ou do tipo bidimensional (2D), como as superfícies ou planos apresentados na Fig.1(e), ou do tipo tridimensional (3D), os próprios sólidos na sua forma *bulk*, como mostrado na Fig. 1(f). O entendimento da dimensionalidade é importante no contexto dos materiais bidimensionais, como o grafeno, pois as características intrínsecas à uma determinada dimensionalidade influencia bastante na propriedades eletrônicas e de transporte.

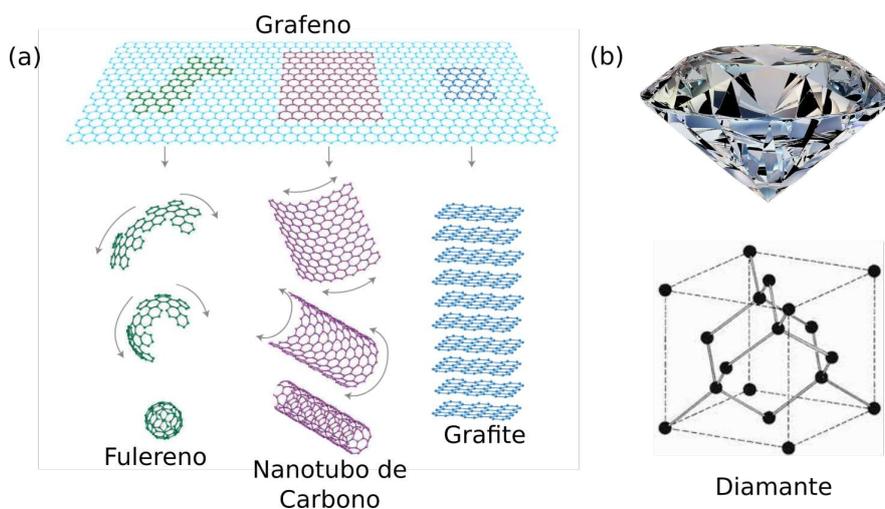
Outro critério que diz respeito à estabilidade dos materiais é a Alotropia, que consiste em formas diferentes de se encontrar um elemento na natureza. O Carbono, embora não seja o elemento mais abundante da natureza, é o elemento mais importante do ponto de vista estrutural da matéria encontrada na natureza. Os chamados alótropos do carbono são estruturas carbônicas que se organizam de acordo com a dimensionalidade, semelhante às figuras Fig.1(c-f). O Fulereo é um das forma de alotropia do carbono que mimetiza um estrutura 0D. Sua descoberta

Figura 1 – (a) Enxofre obtido na natureza na forma Rômbico, (b) Minério flourita. Do (c) até o (f) temos a representação de materiais do tipo dimensão 0, unidimensional, bidimensional e tridimensional, respectivamente. Figuras adaptadas das Refs. (Leidus, 2021), (Lavinsky, 2010) e (Tiwari *et al.*, 2012).



em 1985 e isso possibilitou outras descobertas de alótropos do carbono, como os Nanotubos em 1991, sendo estrutura do tipo 1D (Singh *et al.*, 2021). Todos os alótropos do carbono aqui apresentados, juntamente com o grafite (3D) descendem do grafeno (2D), como mostra a Fig.2. Além dos materiais mencionados, temos o diamante, que também é um alótropo do carbono, cuja a sua estrutura cristalina é do tipo FCC^5 , uma classificação comum à física do estado sólido.

Figura 2 – (a) Representação de alguns alótropos do carbono descendentes do grafeno (2D), com relação ao tipo de dimensionalidade: Fulereo (0D), Nanotubos de carbono (1D) e Grafite (3D). (b) Representação do diamante e sua estrutura cristalina do tipo FCC . Figuras adaptada das Refs (Geim A.K. ; Novoselov, 2007) e (Ashcroft N.W. ; Mermin, 2011).



Na década de 30, Landau e Peierls argumentaram que estruturas cristalinas de baixas dimensionalidades, como cristais bidimensionais, eram termodinamicamente instáveis

⁵Face Centered Cube ou Cúbica de face centrada.

e, portanto, não poderiam existir, o que levaria a inexistência de materiais como grafeno ⁶. A instabilidade termodinâmica dar-se pelo fato de que redes cristalinas em baixas dimensões apresentariam flutuações térmicas, fazendo com que átomos na rede poderiam ter deslocamentos da ordem da distância interatômica. A diminuição da dimensionalidade de uma estrutura cristalina em aspectos como espessura ou número de camadas (como o grafite), está relacionada com a diminuição de graus de liberdade no sistema, implicando em temperaturas mais baixas (do ponto de vista do teorema da Equipartição⁷), implicando em flutuações térmicas no material. Com isso, os materiais de baixas dimensões que “poderiam” ser formados, na verdade torna-se instáveis e fragmentam-se, formando estruturas de maior complexidade (dimensionalidade) com maior espessura ou camadas.

Embora as previsões eram de que materiais como o grafeno não poderiam existir por questões de estabilidade, para a surpresa de muitos, a obtenção do grafeno em 2004 foi feita, experimentalmente, pelos cientistas Andre Geim juntamente com Konstantin Novoselov na Universidade de Manchester na Inglaterra (Geim A.K. ; Novoselov, 2007). Os cientistas conseguiram obter o material usando a técnica chamada de Esfoliação Mecânica. Tal técnica consiste em obter as camadas grafeno a partir de uma amostra de grafite usando uma ferramenta semelhante à uma fita adesiva, onde na mesma estarão localizadas as camadas retiradas. A técnica é possível pelo fato de que cada camada é ligada a outra por ligações fracas chamada de ligações (ou forças) de Van der Waals ⁸, que são forças de interação entre moléculas na qual, no grafeno, é feita pela a formação de dipolos induzidos do orbital p_z do carbono hibridizado, ortogonal ao plano⁹.

O grafeno foi o primeiro material 2D baseado em carbono. Desde sua obtenção do mesmo em 2004, os anos subsequentes foram cruciais para as pesquisa em materiais bidimensionais (ou de baixas dimensionalidades). Após a obtenção do grafeno, muito outros materiais de características semelhantes, começaram à ser pesquisados e tiveram uma verificação quanto à sua existência de uma maneira estável, tornando-se objetos de estudo tanto teórico quanto experimental. Muitos materiais semelhantes ao grafeno foram estudados e descobertos, como o

⁶Mais detalhes podem ser encontrados nas referências (Geim A.K. ; Novoselov, 2007) e (Singh *et al.*, 2021).

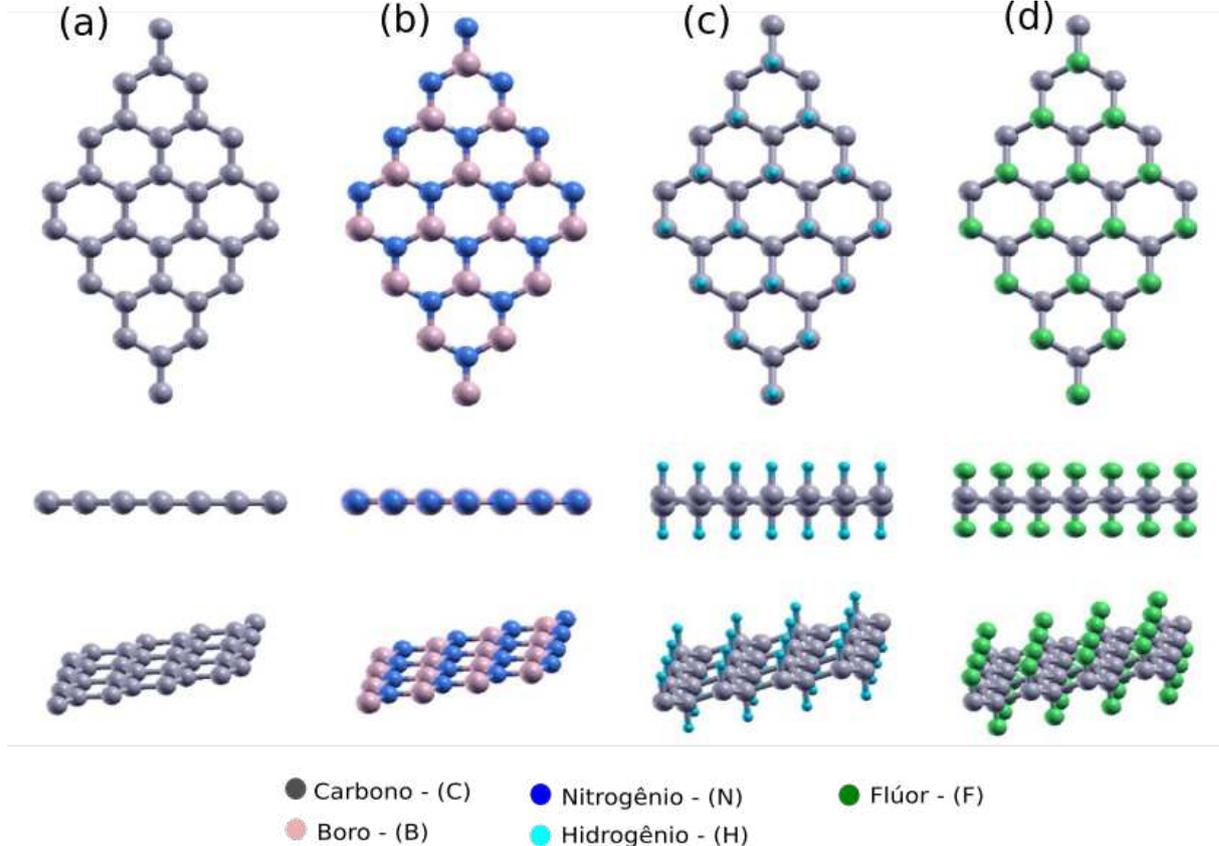
⁷Na física Estatística, o teorema da Equipartição consiste em que cada grau de liberdade em um sistema com muitas partículas à uma temperatura T contriui com $\frac{\kappa_B T}{2}$ para a Energia cinética, sendo κ_B a constante de Boltzmann.

⁸Johannes Diderik van der Waals (1837-1923) foi um físico neerlandês (nascido nos Países Baixos) que trabalhou com gases e líquidos, descrevendo seu comportamento microscópico, chegando a formular equações, sendo agraciado com o Nobel de Física de 1910.

⁹Além do grafeno, a técnica de Esfoliação mecânica foi utilizada para a obtenção de outros materiais, como os da família do grafeno e dos TMDs.

nitreto de boro hexagonal *hBN*, o grafano, o fluorografeno e o oxido de grafeno¹⁰. São materiais com propriedades semelhantes ao grafeno, no que diz respeito ao arranjo estrutural, do tipo "favo de mel", mas com características eletrônicas quase isolantes (Singh *et al.*, 2021).

Figura 3 – Representação dos materiais da família do grafeno: (a) grafeno, (b) nitreto de boro, (c) grafano e o fluorografeno. Figura adaptada de (Pollard e Clifford, 2017)



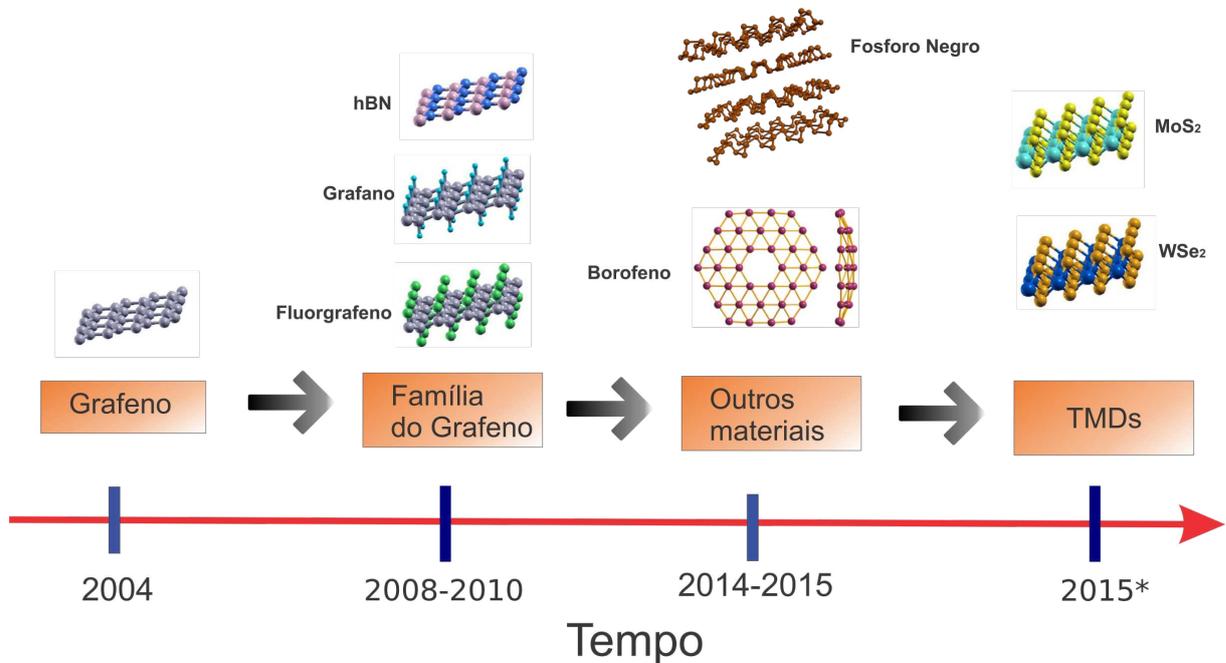
Posteriormente, o grande interesse no tópico de materiais bidimensionais se concentrou nos chamados Dicalcogenetos de Metais de Transição (*transition metal dichalcogenides* - TMDs). Os TMDs são semelhantes aos materiais da família do grafeno comentados anteriormente, mas com constituintes diferentes. A formação de um TMD consiste de uma ligação covalente de um metal de transição *M* com 2 calcogênios *X*, formando materiais do tipo MX_2 . Exemplos de TMDs são o dissulfeto de molibdênio MoS_2 , o dissulfeto de tungstênio WS_2 , ditelureto de tungstênio WTe_2 e outros, com *M* podendo ser *Mo*, *W*, e *X* podendo ser *Se*, *S*, *Te*, e outros.

Muitos dos TMDs tiveram seu processo de obtenção utilizando outras técnicas além da conhecida esfoliação mecânica, comentada anteriormente para a obtenção do grafeno.

¹⁰Mais detalhes podem ser encontrados nas referências (Singh *et al.*, 2021) e (Pollard e Clifford, 2017).

Algumas dessas técnicas consiste no uso do Método químico úmido e método de deposição de vapor. O método químico úmido se baseia na criação de um estrutura tipo TMD em uma solução com seu constituintes juntamente com o uso de uma corrente elétrica ou calor ¹¹. O método de deposição de vapor consiste na deposição de partículas constituintes do TMD em um dado substrato com o controle de espessura. Trata-se de um método mais sofisticado que os outros em virtude da quantidade de parâmetros de controle ¹².

Figura 4 – Representação cronológica da obtenção de diversos tipos de materiais tipos materiais bidimensionais, inclusive materiais nitreto de boro (Zhang *et al.*, 2017), com o fósforo negro (Akhtar *et al.*, 2017) e o borofeno (Wang *et al.*, 2019). (*) O ano de 2015 representado aqui para a síntese do TMDs trata-se de obtenções posteriores do MoS_2 , depositando-o sobre uma camada de ouro Au (Grønberg *et al.*, 2015), e o WSe_2 através do uso da deposição de vapor químico orgânico-metal (Eichfeld *et al.*, 2015).



Aspectos eletrônicos em materiais bidimensionais, tais a como mobilidade eletrônica e propriedades de transporte, são explorados uma vez que, na maioria dos casos, tem-se a expectativa para a implementação em dispositivos, como, por exemplo, em transistores, que é a base para todo tipo de processamento de dados comuns em tecnologias modernas. Depois da obtenção experimental do grafeno em 2004, muitos outros materiais bidimensionais semelhantes ao grafeno foram obtidos (como mostra Fig.4), sendo que alguns desse materiais bidimensionais consiste em um simples “hidrogenização”, como o grafano, ou, ao invés do hidrogênio, temos a

¹¹Mais detalhes podem ser encontrados nas referências (Singh *et al.*, 2021), (Wan *et al.*, 2017) e (Ren *et al.*, 2015).

¹²Mais detalhes podem ser encontrados nas referências (Singh *et al.*, 2021) e (Giri *et al.*, 2018).

adição de flúor, formando o fluorgrafeno. Na família do grafeno, que consiste em uma classe de materiais bidimensionais com características semelhantes ao do grafeno, o próprio grafeno possui uma mobilidade eletrônica alta devido ao fato um material de gap^{13} nulo (Geim A.K. ; Novoselov, 2007). O nitreto de boro hexagonal - hBN também não deixa à desejar na mobilidade eletrônica. Em temperatura ambiente, o hBN tem mobilidade de $125000\text{ cm}^2\text{ V}^{-1}/\text{s}$. Por outro lado, possui um mobilidade de $275000\text{ cm}^2\text{ V}^{-1}/\text{s}$ à uma temperatura de $T = 4,2\text{ K}$. Ambos os valores foram obtidos mediante à aplicação de um campo magnético de $B = 5\text{ T}$ (Zomer *et al.*, 2011). A mobilidade de TMDs do tipo MoX_2 e WX_2 , sendo X os calcogênios S ou Te , pode $> 1000\text{ cm}^2\text{ V}^{-1}/\text{s}$. Não é uma mobilidade alta comparadas aos da família do grafeno, mas ainda permite ampla aplicações com a implementação de células voltaicas (Rawat *et al.*, 2018).

Além de aspectos estruturais ou geométricos dos materiais bidimensionais, outros aspectos são bastante importantes no estudo de tais materiais, afim de uma melhor compreensão e aplicações em casos reais. As propriedades eletrônicas dos materiais dizem respeito à mobilidade eletrônica para vários tipos de implementações, como a criação de dispositivos como transistores. Para este trabalho, iremos lidar com a bicamada de grafeno. Nas seções futura, iremos tratar de aspectos relacionados à suas propriedades eletrônicas como a estrutura de bandas.

1.2 Efeito *Zitterbewegung*

O efeito *zitterbewegung* (ZBW) foi investigado pelo físico austríaco Erwin Schrödinger em 1930 (Barut A. O. ; Bracken, 1981). Schrödinger, analisando a equação de Dirac para partículas inicialmente localizadas (como um pacote de ondas gaussianas), viu que as trajetórias e velocidades médias da equação de Dirac têm um comportamento oscilatório em intervalo transitório de tempo, implicando que operadores como posição e velocidade não constantes de movimento do ponto de vista da equação de Heisenberg. Em 1930, analisando a equação de Dirac, Schrödinger percebeu que tal oscilação vem do acoplamento entre estados com energias positivas e negativas, elétrons ou buracos na ausência de forças externas¹⁴. Schrödinger publicou suas análises em um artigo intitulado *Ueber die kraefftefreie Bewegung in der relativistischen Quantenmechanik*¹⁵. Acreditava-se que a observação experimental do efeito era impossível, pois confinaria o elétron a uma escala do comprimento de onda Compton \hbar/m_0c , onde m_0 é a massa

¹³A energia de gap de um material é muito importante tendo em vista que trata-se da energia que um dado elétron no topo da banda de valência precisa para ir para o mínimo da banda de condução. Na seções futuras iremos falar mais sobre o gap .

¹⁴Mais detalhes podem ser encontrados nas referências (Rusin, 2011) e (Lock, 1979).

¹⁵Do alemão, "Sobre o movimento livre de força na mecânica quântica relativística".

de repouso do elétron ¹⁶. No entanto, o efeito ZBW não é um efeito estritamente relativístico: pode aparecer mesmo para uma partícula não relativística movendo-se em um cristal ou para quasipartículas regidas pelas equações de Bogoliubov–de Gennes em supercondutores (Cserti e Dávid, 2006).

Muitos trabalhos tem investigado o efeito ZBW tanto em materiais semicondutores quanto no próprio grafeno, com de técnicas que envolve a dinâmica de pacotes de ondas gaussianos. Alguns mostram, analiticamente e numericamente, que o pacote de onda inicial se divide em duas partes com diferentes polarizações de spin se propagando com velocidades de grupo diferentes. Além disso, demonstram também que a divisão e sobreposição de pacotes de ondas levam ao amortecimento do efeito *zitterbewegung* ¹⁷.

Dois dos trabalhos pioneiros que investigam o efeito ZBW em semicondutores de *gap* estreito¹⁸ são os estudos teóricos de Schliemann (Schliemann *et al.*, 2005) e Zawadzki (Zawadzki, 2005) em 2005, que considerou o acoplamento entre a energia positiva-negativa dos autoestados de sistemas quânticos usando um modelo de duas bandas de energia. Zawadzki demonstrou que os elétrons de semicondutores experimentam um efeito ZBW, considerando a analogia entre a estrutura de bandas de semicondutores tipo fio de *gap* estreito e a equação de Dirac para elétrons relativísticos no vácuo para diferentes valores de *momentum* k_{z_0} , como mostra a figura Fig.5-(a). Também em 2005, Schliemann e colaboradores estudaram o efeito ZBW de pacotes de ondas eletrônicas em poços quânticos de semicondutores tipo *zinc-blende* na presença de acoplamento *spin*-órbita do tipo Rashba e Dresselhaus, usando o hamiltoniano de divisão de *spin* (o mecanismo de Bychkov-Rashba), que requer assimetria de inversão espacial do sistema. De forma mais teórica, Zawadzki *et al.*(Rusin, 2011), através de um acoplamento entre autoestados de energia positiva e negativa, notou que elétrons em semicondutores experimentam o efeito ZBW graças à estrutura de banda do material que, para baixas energias, possui dispersão linear, sendo compatível com uma equação análoga a Dirac para elétrons relativísticos. Na figura Fig.5-b, temos a variação do parâmetro de acoplamento Rashba α , tendo o *momentum* k_{0y} fixo, resultando em padrões diferentes do efeito ZBW, levando em conta frações da frequência característica ω do potencial de confinamento do fio. Esses trabalhos despertaram um forte interesse nas investigações teóricas da dinâmica do pacote de ondas e oscilações ZBW em outros

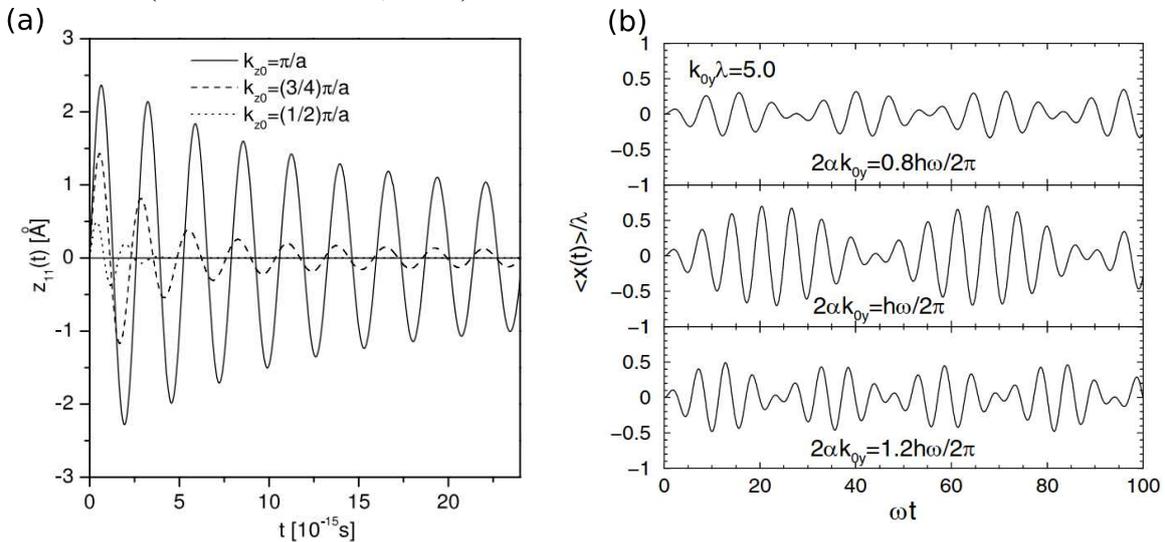
¹⁶Mais detalhes podem ser encontrados nas referências (Lia *et al.*, 2022) e (Cserti e Dávid, 2006).

¹⁷Mais detalhes podem ser encontrados nas referências (Maksimova *et al.*, 2008), (Lavor *et al.*, 2020b) e (Cunha *et al.*, 2019).

¹⁸Valor de *gap* muito pequeno.

sistemas físicos, como, por exemplo, cristal fotônico 2D¹⁹, cristal sônico 2D (Zhang e Liu, 2008), íons presos²⁰, sistemas de buraco Luttinger²¹, átomos ultrafrios²², isolantes topológicos²³ e pulsos eletromagnéticos se propagando através de metamateriais apresentando um efeito análogo óptico ZBW (Wang *et al.*, 2009).

Figura 5 – (a) Oscilações ZBW transitórias de elétrons quase livres, representado pela a posição média em z , versus tempo, calculado para um pacote de onda muito estreito, comparando alguns valores de *momentum* k_{z_0} para o Arsenieto de Gálio *GaAs*. Figura adaptada de (Rusin, 2011). (b) O *zitterbewegung* de um elétron em um fio quântico harmônico perpendicular na direção do fio no semiconductor *zinc-blende*. O número de onda k_{0_y} , para o movimento ao longo do fio é $k_{0_y}\lambda = 5$. A amplitude do *zitterbewegung* é máximo na ressonância $2\alpha k_{0_y} = \hbar\omega$ (painel do meio). Figura adaptada de (Schliemann *et al.*, 2005).



Com o uso da dinâmica de pacotes de ondas gaussianas, o ZBW foi analisado em grafeno monocamada por Maksimova *et al.* (Maksimova *et al.*, 2008), observando as oscilações nas trajetórias médias, através do acoplamento entre estados de energia positivos e negativos. Na figura Fig.6-(a), é demonstrado que a forma do pacote de onda em tempo arbitrário t depende da correlação entre as amplitudes iniciais do elétron ψ_A e ψ_B , nas sub-redes A e B correspondentemente, isto é, a polarização dos *pseudospin* $[C_A, C_B]^T$ ²⁴ e, dependendo de qual polarização está sendo adotada, o pacote de onda pode se dividir em dois sub-pacotes. A mesma depen-

¹⁹Mais detalhes podem ser encontrados nas referências (Zhang, 2008) e (Dreisow *et al.*, 2010).

²⁰Mais detalhes podem ser encontrados nas referências (Gerritsma *et al.*, 2010) e (Rusin e Zawadzki, 2010).

²¹Mais detalhes podem ser encontrados nas referências (Demikhovskii *et al.*, 2010) e (Winkler *et al.*, 2007).

²²Mais detalhes podem ser encontrados nas referências (Vaishnav e Clark, 2008) e (Zhang *et al.*, 2013).

²³Mais detalhes podem ser encontrados nas referências (Shi *et al.*, 2013) e (Shi *et al.*, 2011)

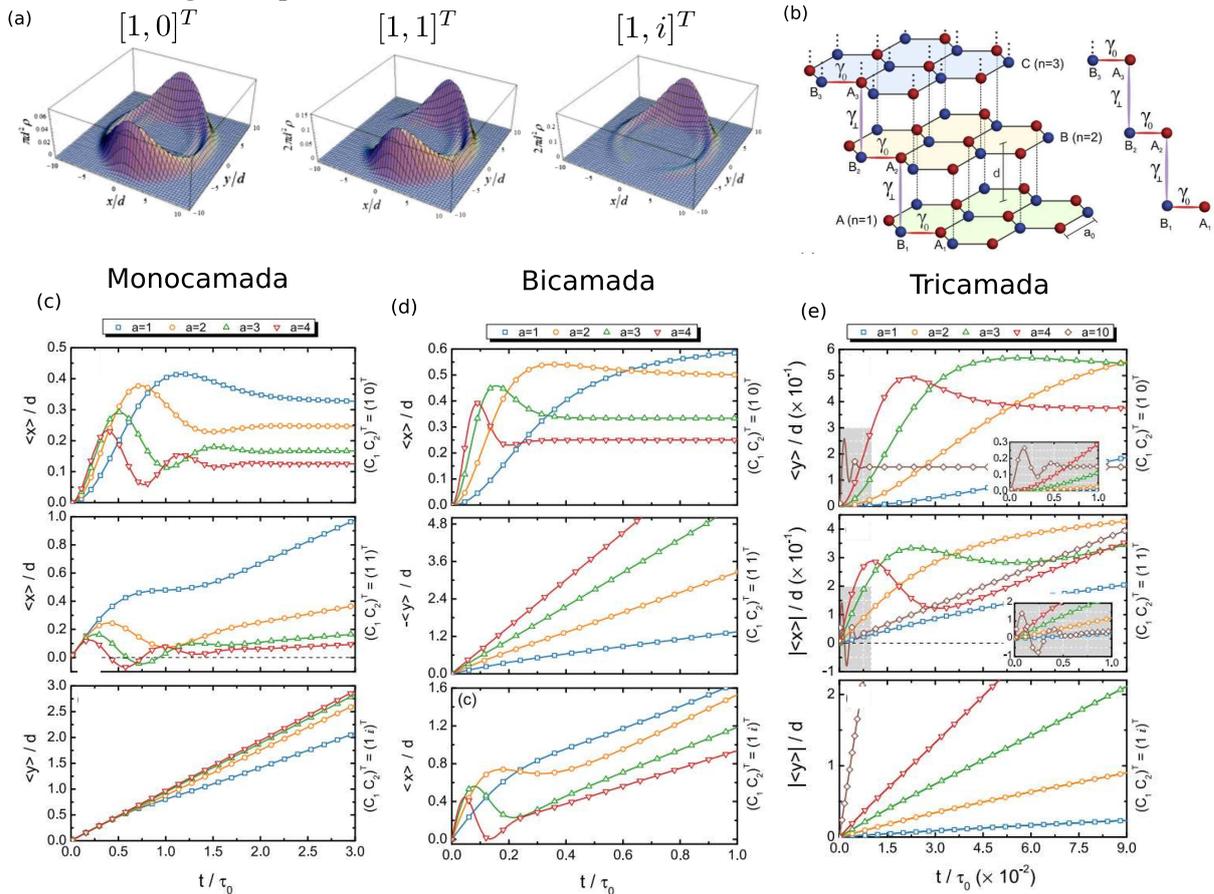
²⁴Elemento análogo ao *spinor* da equação de Dirac, contudo, está relacionado à fatores geométricos da rede, como iremos ver nas próximas seções.

dência da polarização dos *pseudospin* é perceptível quando analisamos as trajetórias médias na Fig.6-(c), para a monocamada, onde para diferentes polarizações, vemos a incidência (ou não) do efeito ZBW. Para a polarização de *pseudospin* transversal, o movimento do centro do pacote de ondas ocorre na direção perpendicular ao momento médio $p_0 = \hbar k_0$. Esse trabalho demonstra claramente que a evolução da função de onda é acompanhada pelo *zitterbewegung* e depende fortemente da polarização inicial do *pseudospin*. Em particular, se a polarização inicial do *pseudospin* coincidir com o momento médio inicial, o centro do pacote se move e exibe o efeito ZBW ao longo da mesma direção. Em 2009, de forma similar, usando também pacotes de onda gaussiano, A. Chaves *et al.* (Chaves *et al.*, 2009) investigou a dinâmica temporal de pacotes de onda em anéis quânticos de semicondutores usando a técnica numérica split operator para o cálculo do operador de evolução temporal. Em 2010, também A. Chaves *et al.* (Chaves *et al.*, 2010a), se utilizou da mesma técnica numérica para investigar a dinâmica de pacotes de onda no grafeno com a aplicação de *strain* e uma abordagem voltada para a filtragem de vales.

O efeito ZBW também foi investigado na bicamada e tricamada de grafeno (Fig 6-(b)) (Lavor *et al.*, 2020b), levando em conta apenas o *hopping* perpendicular γ_{\perp} . Foi visto que o pacote de ondas propagadas, depois de um tempo, se divide em dois para alguns tipos de polarização, assim como no caso de monocamada. Nestes casos, é perceptível as oscilações das trajetórias médias baseadas na polarização *momentum* do pacote de ondas considerado, como podemos ver na figura Fig.6-(d), para a bicamada, e Fig.6-(e), para a tricamada, em ambos os casos, podemos ver que o efeito ZBW está presente. Nos trabalhos apresentados, vemos como a incidência do efeito ZBW pode depender do número de camadas de grafeno. Nas figura Fig.6-(c-e), podemos ver que pacotes de onda com a mesma orientação de *pseudospin* $[C_A, C_B]^T$ podem exibir perfis diferentes do efeito ZBW em uma monocamada, bicamada e tricamada. Em alguns casos, dependendo da escolha de *pseudospin* e *momentum*, a incidência do efeito ZBW de um dado pacote pode ser minimizado como base na análise das trajetórias médias.

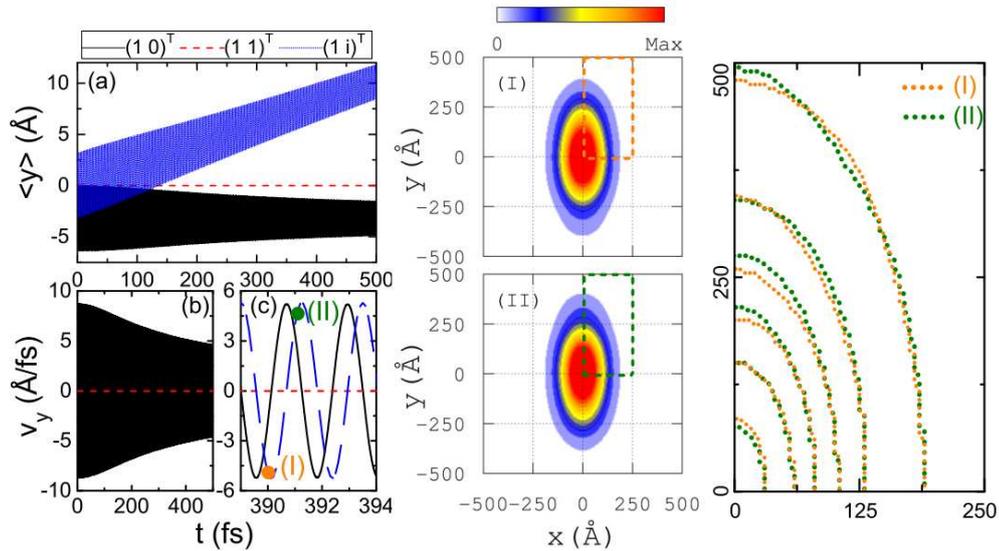
Outro material onde o efeito ZBW foi investigado é o fosforeno (Cunha *et al.*, 2019), onde foi analisado a evolução temporal de um pacote de ondas tanto para monocamada como para multicamadas. Considerando as três diferentes configurações de *pseudospin* usadas nos trabalhos anteriores, observando na Fig.7, vemos que a distinção entre os movimentos com diferentes *pseudospin* vale para o movimento do elétron em fosforeno, exibindo oscilações na posição média (Fig.7-a) e velocidade (Fig.7-b e Fig.7-c) ao longo da direção *y*, mostrando uma grande intensidade do efeito ZBW com frequência de oscilação e período curto, que é claramente um consequência da redução do valor do momento.

Figura 6 – (a) Densidade probabilística $|\psi|^2$ para um pacote de onda de comprimento $d = 20$ nm e *momentum* $k_0 = \frac{1}{d}$ no eixo y , para monocamada de grafeno no tempo $t = 200$ fs e polarizações $[1, 0]^T$, $[1, 1]^T$ e $[1, i]^T$ (Figura adaptada de (Maksimova *et al.*, 2008)). (b) Representação do emilhamento de camadas de grafeno, ressaltando a monocamada, bicamada e tricamada, com o *hopping* ortogonal γ_\perp entre eles (Figura adaptada de (Lavor *et al.*, 2020b)). Trajetórias médias para as respectivas polarizações com comprimento $d = 20$ nm e a relação $k_0 d = a$ para cada valor de a , ressaltando o efeito *zitterbewegung* em cada uma delas: (c) Monocamada, (d) Bicamada e (e) Tricamada (Figura adaptada de (Lavor *et al.*, 2020b)).



Para entender a natureza de tais oscilações que, contra-intuitivamente, aparecem mesmo para o caso com momento inicial nulo, é mostrado nos painéis à direita da Fig.7 a densidade de probabilidade do elétron (I) em $t = 390$ e (II) em 391 fs perto de um vale e um pico da curva de velocidade média, correspondente a pontos com velocidades negativas e positivas, respectivamente, como marcado, implicando na presença do efeito ZBW. Pode-se observar que a dispersão do pacote de ondas está apenas ao longo da direção y , mantendo seu raio ao longo da direção x praticamente inalterado em relação à forma circularmente simétrica inicial e, assim, por tempos mais longos, torna-se distorcido em uma forma elíptica. Alguém pode ver comparando os painéis (I) e (II) que para pontos positivos e negativos da curva de velocidade média, o pacote

Figura 7 – (a) Posição média e [(b) e (c)] valor esperado da velocidade ao longo da direção y em função do tempo para o caso $[C_1, C_2]^T = [1, 0]^T$ (preto), $[C_1, C_2]^T = [1, 1]^T$ (vermelho) e $[C_1, C_2]^T = [1, i]^T$ (azul). (c) Uma ampliação dos resultados em (b) para grandes intervalos de tempo mostrando o comportamento oscilatório de v_y . (Direita) Gráficos de contorno do módulo ao quadrado da função de onda em (I) $t = 390$ e (II) 391 fs, e um zoom enfatizado pelas curvas tracejadas mostrando as isosuperfícies nas duas etapas de tempo. Figura adaptada de (Cunha *et al.*, 2019).



de ondas oscila ao longo de y , de forma que a simetria da densidade de probabilidade em relação a esse eixo muda ao longo do tempo, ou seja, $|\Psi(x, y, t)|^2 = |\Psi(x, -y, t)|^2$.

A incidência do efeito ZBW é de fato real nos materiais pesquisados atualmente como o grafeno e o fosforeno. Com um comportamento ligado à equação de Dirac, esses materiais podem exibir tal efeito pelo o fato de possuir uma física no que diz respeito ao seu Hamiltoniano e dispersão de energias e um isomorfismo algébrico semelhante ao da equação de Dirac ²⁵, tornando o efeito ZBW viável nesses materiais.

Um dos primeiros trabalhos que aborda a existência do efeito *zitterbewegung* na bicamada de grafeno foi feito por Rusin e Zawadzki (Rusin, 2011). Eles estudaram a evolução do pacote de ondas no grafeno bilayer e encontraram as expressões analíticas para os componentes do pseudospin da função de onda e o operador de posição média, bem como resultados analíticos para as oscilações relativos ao efeito *zitterbewegung*. Eles demonstraram que o caráter transitório do efeito *zitterbewegung* na bicamada de grafeno está relacionado ao aumento da separação espacial dos subpacotes correspondentes aos estados de energia positiva e negativa movendo-se em direções opostas, de maneira semelhante a algumas configurações de *pseudospin* no grafeno monocamada, e não apenas devido à lenta dispersão do pacote, que por sua vez é responsável

²⁵Mais detalhes podem ser encontrados nas referências (Geim A.K. ; Novoselov, 2007) e (Cunha *et al.*, 2019).

pela atenuação e decadência do efeito *zitterbewegung*.

Outros trabalhos investigando o efeito *zitterbewegung* na bicamada de grafeno foram feitos por Chang-Soo Park em 2012 e Eylee Jung *et al.* em 2013 sendo que, em ambos, é abordado o efeito do *trigonal warping* sobre a deformação das bandas no energia nas proximidades do vales K/K' . Usando o formalismo do modelo contínuo de 2-bandas, Chang-Soo Park (Park, 2012) estudou os efeitos do *trigonal warping* juntamente com aplicação de campo elétrico, investigando a incidência do efeito *zitterbewegung* para eletrôn em baixas energia representados por pacotes de onda gaussiano, tendo a presença de tunelamento de Klein para um dado potencial aplicado, além de uma aplicação de filtragem de vales, calculando coeficiente de transmissão e reflexão. Eylee Jung *et al.* (Jung *et al.*, 2013), fazendo uso também do modelo contínuo de 2-bandas, investiga de maneira mais profunda a existência do efeito *zitterbewegung* com a presença do *trigonal warping*, mas com o cálculo analítico mais explícito dos operadores de velocidade, resultando na percepção de oscilações transientes²⁶ relativas ao efeito *zitterbewegung*.

O uso do modelo contínuo de 2 bandas para a bicamada de grafeno é bastante comum, principalmente para a investigação dos efeitos do *trigonal warping* seja feita de forma mais direta (McCann e Koshino, 2013). Sendo assim, o modelo de contínuo de 4 bandas, o próprio modelo *tight binding* e o propagadores de função Green seja ignorado até hoje na literatura para a investigação do efeito *zitterbewegung* na bicamada. A presente dissertação tem com objetivo principal a investigação do efeito *zitterbewegung* em comparação com o caso do modelo contínuo de 2-bandas sobre a presença do efeito *trigonal warping*.

1.3 Escopo do trabalho

No capítulo 2, começaremos tratando a estrutura da bicamada de grafeno, sobre a luz do modelo *Tight-Binding*, que consiste em modelo aproximativo para as estrutura de bandas do material. Analisamos como os *hoppings* se comportam no hamiltoniano final do modelo aproximativo, como base na análise do orbitais dímeros e não-dímeros. Ademais, vamos para um modelo mais aproximativo com a análise para baixas energias, com o modelo de 4 bandas. Encerrando esse capítulo, temos que a apresentação do modelo de duas bandas que consiste em um modelo para baixas energias para os orbitais não-dímeros, culminando no efeito *trigonal warping*, que da base para a definição do modelo de 2 bandas, que veremos mais adiante.

No capítulo 3, apresentamos a técnica *Split Operator* que consiste numa abordagem

²⁶temporárias

da evolução temporal de um estado $\Psi(\mathbf{r}, t)$. Tal abordagem consiste em uma resolução numérica, ou computacional, para obtenção do estado em um tempo posterior $\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t)$ mediante a aplicação do operador de evolução temporal $\hat{U}(t, t_0)$. A técnica possui um algoritmo que inicia com a preparação de um estado inicial, passa por processos dentro do espaço recíproco, com o uso da FFT (*Fast Fourier Transform* - Transformada rápida de Fourier), e retorno ao espaço real com uma iFFT (*Inverse Fast Fourier Transform* - Transformada inversa rápida de Fourier), chegando no estado em um tempo posterior. Esse processo pode ser repetido inúmeras vezes, dependendo da vontade do usuário. A técnica é muito importante visto consiste em uma abordagem mais simplificada da evolução temporal em sistema, tendo sido usado nos trabalhos apresentados anteriormente. Neste trabalho, a técnica *Split Operator* será utilizado nas abordagens.

No capítulo 4, temos o tratamento do efeito *zitterbewegung*, que consiste na oscilação da trajetórias médias, ou movimento trêmulo das posições médias $\langle x \rangle$ e $\langle y \rangle$. Investigamos tal comportamento sobre a luz do efeito *trigonal warping*, do ponto de vista do modelo de 2 e 4 bandas, além de uma abordagem com o uso de propagadores $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$, verificando se a sua presença em relação às trajetórias médias influencia no comportamento das mesma. Toda a dinâmica da trajetórias médias é feita a partir da propagação de um pacote de onda gaussiano com o uso da técnica *Split Operator*. Percebemos que o *zitterbewegung* ocorre com e sem ausência do *trigonal warping*. Um aspecto à ser ressaltado é o fato de que a consideração do *trigonal warping* implica que a densidade probabilidade $|\Psi|^2$ não será simétrico com respeito à dado devido à velocidade grupo modificada pela a deformidade das bandas.

No capítulo 5, apresentamos as conclusões e as perspectivas desse trabalho acerca da influência do efeito *trigonal warping* sobre a dinâmica de pacotes de onda. Analisamos aspectos como as trajetórias médias e as densidades de probabilidades, vemos que há um certa perda de simetria na densidade do pacote de onda $|\Psi|^2$ ao consideramos o efeito *trigonal warping*. Mais detalhes acerca do como um pacote de onda deva se comportar na presença do efeito *trigonal warping*, veremos nas próximas seções.

2 MODELO TEÓRICO PARA BICAMADA DE GRAFENO

Muitas das propriedades da bicamada de grafeno são similares aquelas apresentadas pela a monocamada, tais como sendo um excelente condutor elétrico à temperatura ambiente, com mobilidade eletrônica de até $40000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, um ótimo condutor térmico à temperatura ambiente, possuindo também propriedades vibracionais que torna tal feito possível, assim como a monocamada (McCann e Koshino, 2013). A bicamada tem grande potencial para aplicações futuras, tais como transistores de alta frequência, dispositivos termoelétricos e fotônicos, entre outras aplicações.

Contudo, deve-se ressaltar algumas diferenças entre a bicamada e a monocamada. Veremos que o espectro para baixas energias para a bicamada não possui um comportamento linear com o *momentum* k como apresentado na monocamada. Veremos que o espectro da bicamada ainda possui os Cones de Dirac mas não em relação à quasi-partículas sem massa e sim quasi-partículas quirais (McCann e Koshino, 2013).

O modelo (ou aproximação) *Tight-Binding*, idealizado anteriormente para grafite (que são camadas de grafeno) por P.R. Wallace em 1947 (Wallace, 1947), consiste em um modelo de aproximação de energias permitidas (ou bandas) para partículas (no caso elétrons) no material em que, no grafeno, tomamos um dado átomo fixo em uma sub-rede A , B , A' ou B' e seus vizinhos próximos através de suas ligações covalentes. Energeticamente, as ligações para com seus vizinhos pode ser representado pelo os termos de *hopping*, como mostrado na Fig. 8(a).

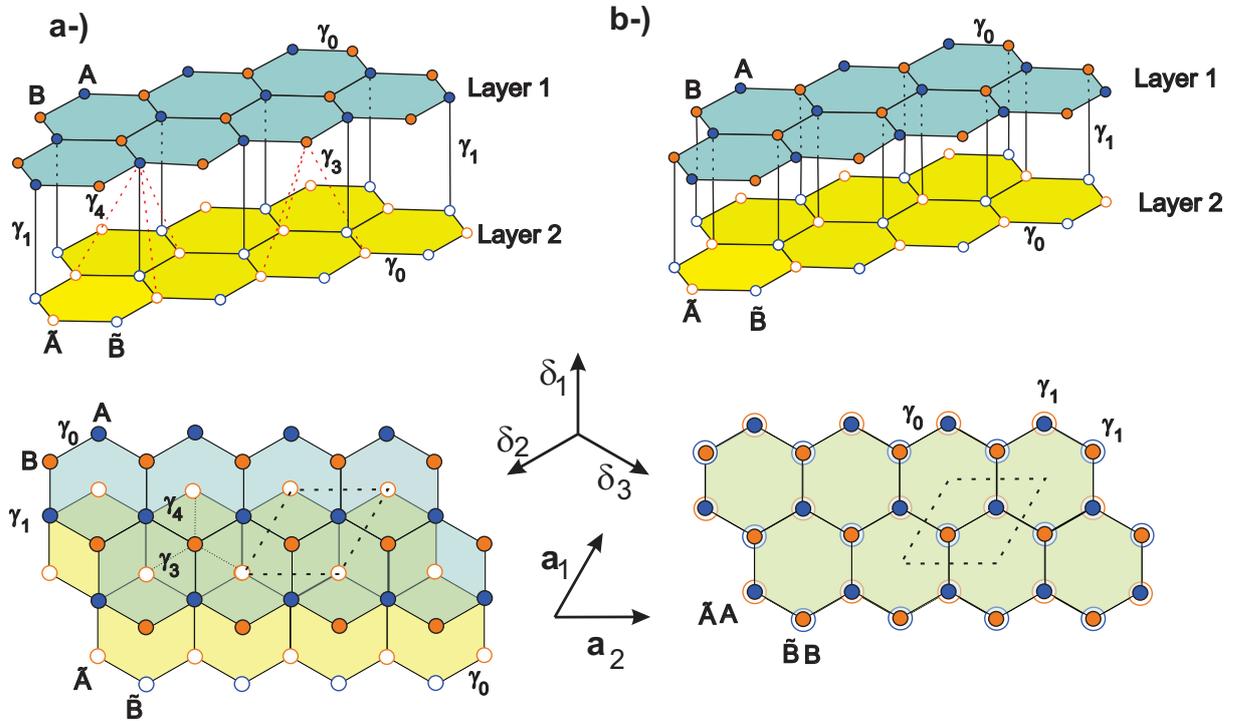
2.1 Anatomia da bicamada de Grafeno

2.1.1 Estrutura cristalina

Em termos geométrico, o grafeno pode ser representado como duas redes triangulares regulares na qual uma tem sua célula unitária rotacionada de 180° da outra. Com isso, chamamos as redes triangulares de A , para a rede normal, e B para a rede rotacionada de 180° e fazemos uma sobreposta a outra, construindo a estrutura geométrica e cristalina do grafeno. Essa análise é importante pois a estrutura cristalina do grafeno como “favo de mel”, que é como a conhecemos, não é considerada com uma Rede de Bravais, ou seja, tal rede caracterizada por suas simetrias de translação e rotação.

A obtenção da bicamada de grafeno (representado na Fig.8), do ponto de vista experimental, está associado com o processo de esfoliação mecânica, feita por Andre Geim e

Figura 8 – Representação esquemática da bicamada de grafeno com empilhamento (a) AB e (b) AA , mostrando (painéis superiores) em perspectiva e (painéis inferior) visão superior. O termo de *hopping* intracamada γ_0 e os termos intercamadas γ_1 , γ_3 , e γ_4 são apresentados. Apenas *hoppings* de primeiros vizinhos são mostrados para o caso do empilhamento AA . Na visão superior para cada empilhamento destacamos a célula unitária (linha preta tracejada), os vetores de bases \mathbf{a}_1 e \mathbf{b}_2 , e os vetores de rede δ_1 , δ_2 e δ_3 .



Konstantin Novoselov para a obtenção do grafeno em 2004 (Geim A.K. ; Novoselov, 2007). A forma de organização da BLG dar-se em função de seu empilhamento, como mostrado em Fig.8, onde temos o empilhamento AB Fig.8-a) e o empilhamento AA Fig.8-b) em que é visto o acoplamento entre camadas feitas em átomo de uma sub-rede da camada de cima com outro átomo de uma sub-rede da camada abaixo, ou seja, átomos da sub-rede A e da sub-rede \tilde{B} , para o empilhamento AB e átomos da sub-rede $A(B)$ e da sub-rede $\tilde{A}(\tilde{B})$, para o empilhamento AA .

A construção da bicamada como uma rede de Bravais implica nas mesmas configuração de simetrias para a monocamada, seja com a célula unitária ou os vetores de base. Como podemos ver na Fig.8, em ambos os empilhamento, temos a presença da célula unitária em que, juntamente com os vetores de base \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 , conseguimos fazer a construção de toda a rede, sendo os vetores de base direta dados por:

$$\mathbf{a}_1 = a_0\sqrt{3}\left(\frac{1}{2}\hat{\mathbf{x}} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{\mathbf{y}}\right), \quad \mathbf{a}_2 = a_0\sqrt{3}\hat{\mathbf{x}}, \quad (2.1)$$

com $a_0 = 0,142\text{nm}$ a distância carbono-carbono convencional de um camada de grafeno. Ainda

na Fig.8, temos a presença dos vetores de rede δ_1 , δ_2 e δ_3 , responsáveis pela a geometria do tipo "favo de mel" (*honeycomb*) do grafeno, devido à hibridização do tipo sp^2 no carbono. Os vetores de rede são dados por:

$$\delta_1 = a_0 \hat{\mathbf{y}}, \quad (2.2a)$$

$$\delta_2 = -\frac{a_0}{2}(\sqrt{3}\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}}), \quad (2.2b)$$

$$\delta_3 = \frac{a_0}{2}(\sqrt{3}\hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{y}}), \quad (2.2c)$$

2.1.2 Rede Reciproca do Grafeno

Para a construção da Rede Reciproca do bicamada de grafeno, usamos a relação entre base real e base reciproca $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ (como na Eq.(B.9) no apêndice B), sendo \mathbf{b}_j os vetores da base reciproca. Com essa relação, chegamos em dois sistemas de equações 2×2 onde descobrimos as coordenadas de \mathbf{b}_1 (b_1^x e b_1^y) e \mathbf{b}_2 (b_2^x e b_2^y).

$$\begin{cases} \frac{a_0\sqrt{3}}{2}b_1^x + \frac{3a_0}{2}b_1^y = 2\pi \\ a_0\sqrt{3}b_1^x = 0 \end{cases}, \begin{cases} \frac{a_0\sqrt{3}}{2}b_2^x + \frac{3a_0}{2}b_2^y = 0 \\ a_0\sqrt{3}b_2^x = 2\pi \end{cases}, \quad (2.3)$$

Com as Eq.(2.3), temos que os vetores da rede reciproca do grafeno é dado por:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{4\pi}{3a_0}\hat{\mathbf{y}}; \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a_0}(\sqrt{3}\hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{y}}), \quad (2.4)$$

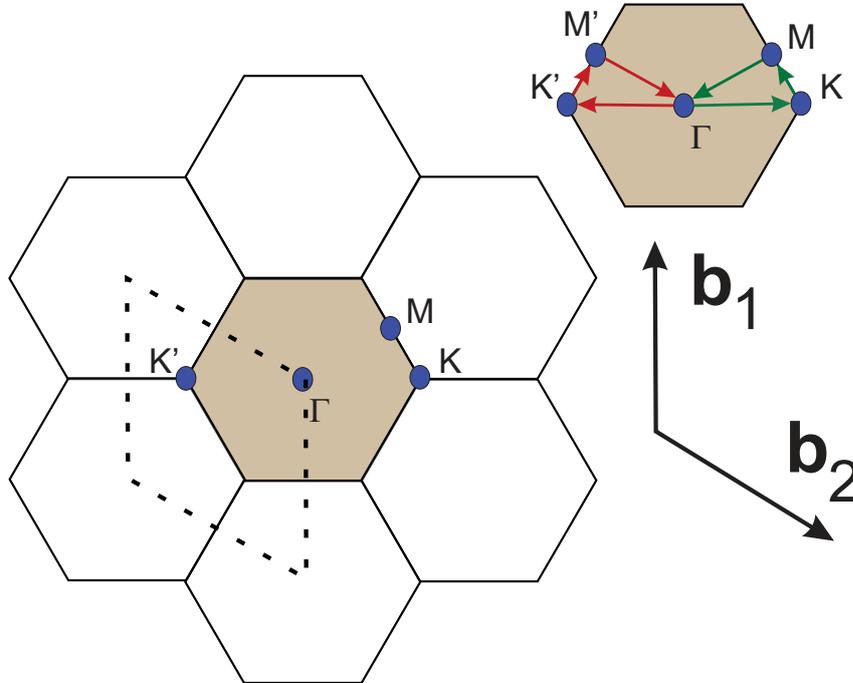
sendo possível a construção da rede (ou espaço) reciproca.

Construindo a rede reciproca, como mostrado em Fig.9, vemos que a célula unitária é semelhante à rede direta (mostrada na Fig.8), mas rotacionada em 90° ¹. Isso implica em isomorfismos entre espaços no que diz respeito à sua geometria, tendo a semelhança de um "favo de mel", tanto na rede direta como na recíproca.

Outra coisa à se analisar diz respeito a primeira zona de Brillouin e seus pontos de alta simetria, muito importante quando analisamos as propriedades eletrônicas via estrutura de bandas, sendo os pontos Γ dado por $\Gamma = (0, 0)$, \mathbf{M} dado por $\mathbf{M} = \left(\frac{2\pi}{3a_0}, \frac{2\sqrt{3}\pi}{3a_0}\right)$ e \mathbf{K}_ξ é dado por $\mathbf{K}_\xi = \xi \left(\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0}, 0\right)$, com $\xi = 1$ para o ponto K e $\xi = -1$ para K' .

¹Assim como na monocamada de grafeno, a construção da célula unitária da bicamada também dar pelo método da célula de Wigner-Seitz(Ashcroft N.W. ; Mermin, 2011).

Figura 9 – Representação da rede recíproca da bicamada de grafeno com o pontos de alta simetria Γ , M , K e K' , sendo a área delimitada pela a linha tracejada corresponde à célula unitária, com vetores de base \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 (dados em Eq.(2.4)), com destaque para o contorno da primeira zona de Brillouin, em verde, para o vale K e vermelho para o vale K' . O contorno da primeira zona será analisado na seção de estrutura de bandas.



2.1.3 Parâmetros de Hoppings

No empilhamento AB Fig.8-a), temos a presença dos *hoppings*² γ_0 , γ_1 , γ_3 e γ_4 . O *hopping* γ_0 caracteriza a clássica energia carbono-carbono da monocamada, γ_1 consiste na energia de acoplamento entre camadas. Vale ressaltar que γ_1 entra na análise do grafite perfeitamente orientado que possibilitou a esfoliação mecânica para a obtenção experimental em 2004 (Geim A.K. ; Novoselov, 2007). Os *hoppings* γ_0 e γ_1 se fazem presentes no empilhamento AA Fig.8-b), sendo os únicos *hoppings* constituintes do empilhamento. Os valores que os *hoppings* possuem são dados na tabela Tab.1.

Os valores de γ_0 , γ_1 , γ_3 e γ_4 são obtidos através de processos com cálculos *ab initio* como do modelo Slonczewski-Weiss-McClure (SWMcC) e de cálculos envolvendo Teoria do Funcional da Densidade - DFT (Kuzmenko *et al.*, 2009). Tais parâmetros de *hopping* podem ser obtidos experimentalmente (McCann e Koshino, 2013). Voltando para o empilhamento AB , os *hoppings* γ_3 e γ_4 são bastante importantes nas propriedades eletrônicas da BLG³. Nas seções futuras, iremos fazer discussões à respeito de suas funções.

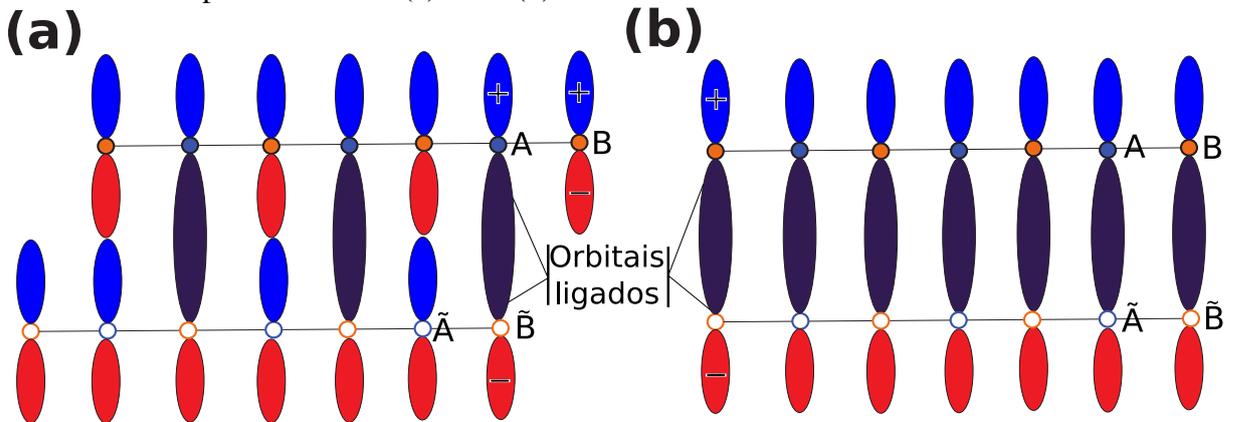
²Os termos de *hopping*, dentro da teoria da Física de estado sólido, caracteriza uma energia de "salto" entre átomos numa rede cristalina, realizados pelos elétrons localizados em cada átomo.

³*Bilayer graphene* - Bicamada de grafeno.

Tabela 1 – Valores dos *hoppings* γ_0 , γ_1 , γ_3 e γ_4 para o empilhamento *AB* (McCann e Koshino; Kuzmenko *et al.*, 2013, 2009) e *AA* (Mohammadi, 2021), obtidos através do modelo de Slonczewski-Weiss-McClure (SWMcC), que está relacionado ao hamiltoniano do grafite (Kuzmenko *et al.*, 2009).

<i>Hopping</i> (eV) Empilhamento:	AB	AA
γ_0	3,16	2,7
γ_1	0,381	0,2
γ_3	0,38	-
γ_4	0,14	-

Figura 10 – Distribuição dos orbitais p_z em cada camada para a BLG, mostrando o caso do empilhamento *AB* (a) e *AA* (b).



2.1.4 Orbitais: dímeros e não-dímeros

A discussão sobre os orbitais do elétrons na bicamada de grafeno é bastante importante, tendo em vista que o tratamento energético entre as camadas. Analisando a Fig.10, vemos que a interação entre os orbitais atômicos do tipo p_z de camadas diferentes é específico para cada tipo de empilhamento e consideração de sub-redes.

Os orbitais na bicamada são classificados com dímeros e não-dímeros, que obedecem as características à seguir:

Definição 1 Orbitais Dímeros: Orbitais que se ligam à outros, respeitando o princípio de exclusão de Pauli.

Definição 2 Orbitais não-Dímeros: Orbitais livres, que não se ligam entre si.

No empilhamento *AB*, vemos que há orbitais p_z de uma camada que não se liga com outro orbital da outra camada abaixo, mais especificamente os orbitais \tilde{A} e B . Esses são orbitais não-dímeros, de acordo com a definição 2. Ao analisarmos os orbitais ligantes na Fig.10, para o empilhamento *AB*, vemos que os únicos podem ser classificados como dímeros é os orbitais

os sítios \tilde{B} e A , e para o empilhamento AA , todos os orbitais presentes nas sub-redes podem ser classificados como dímeros.

A classificação como dímero ou não-dímero depende muito da geometria. No empilhamento AB , como mostrado na Fig.8-a), vemos que os átomos da sub-rede B não estão na mesma linha que os da sub-rede \tilde{A} , inviabilizando a interação entre os orbitais, classificando-os como não-dímeros. Contudo, os orbitais \tilde{B} e A estão na mesma linha, implicando em orbitais dímeros e garantindo o acoplamento entre as camadas, visto, também no empilhamento AA . Na seção sobre hamiltoniano de duas bandas, iremos tratar da escolha do orbitais em que iremos trabalhar.

2.2 Modelo *tight-binding*: Primeira quantização

O formalismo da primeira quantização consiste na adoção de funções de onda como vetores no espaço de Hilbert \mathbb{H} , a forma convencional da Mecânica Quântica, como uma forma de tratamento de um sistema físico. Em um dado material, como parte da abordagem voltada ao teorema de Bloch, tomamos um potencial periódico em os pontos que representam os mínimos de potencial representam os átomos da rede. As soluções para funções de onda para partículas como elétrons pode ser dado pela as funções de Bloch, que são, também periódicas (Ashcroft N.W. ; Mermin, 2011).

Na bicamada de grafeno, temos 4 átomos na sua célula unitária e, então, fazemos o tratamento com as funções de Bloch. O modelo aproximativo *tight-binding* para a BLG consiste interação de primeiros vizinho representados pelas funções de Bloch, que veremos com mais detalhes no cálculos a seguir.

2.2.1 O Cálculo do Modelo

Para o tratamento do modelo *Tight-Binding* em primeira quantização, fazemos o uso da função de Bloch para cada uma das sub-redes, dadas por:

$$\Phi_m^{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_m}} \sum_j^{N_m} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^m) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j^m}, \quad m = \{A, B, \tilde{A}, \tilde{B}\}, \quad (2.5)$$

onde ϕ consiste nas funções de Wannier que representa os orbitais atômicos do grafeno, mais especificamente o orbital p_z . Usando a notação de Dirac, podemos representar Eq.(2.5) como:

$$|\Phi_m^{\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_m}} \sum_j^{N_m} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j^m} |\phi(\mathbf{R}_j^m)\rangle, \quad (2.6)$$

Um dado estado $|\Psi^{\mathbf{k}}\rangle$ que pode representar um elétron na material, como combinação linear das funções de Bloch das sub-redes, pode ser dado por:

$$|\Psi^{\mathbf{k}}\rangle = \psi_A(\mathbf{k})|\Phi_A^{\mathbf{k}}\rangle + \psi_B(\mathbf{k})|\Phi_B^{\mathbf{k}}\rangle + \psi_{\tilde{A}}(\mathbf{k})|\Phi_{\tilde{A}}^{\mathbf{k}}\rangle + \psi_{\tilde{B}}(\mathbf{k})|\Phi_{\tilde{B}}^{\mathbf{k}}\rangle,$$

ou na forma mais reduzida:

$$|\Psi^{\mathbf{k}}\rangle = \sum_{\{m\}} \psi_m(\mathbf{k})|\Phi_m^{\mathbf{k}}\rangle, \quad (2.7)$$

Resolvendo a Equação de Schrödinger para $|\Psi_j\rangle$ com o Hamiltoniano H , temos:

$$\begin{aligned} H|\Psi^{\mathbf{k}}\rangle &= E(\mathbf{k})|\Psi^{\mathbf{k}}\rangle, \\ H\left[\sum_{\{m\}} \psi_m(\mathbf{k})|\Phi_m^{\mathbf{k}}\rangle\right] &= E(\mathbf{k})\left[\sum_{\{m\}} \psi_m(\mathbf{k})|\Phi_m^{\mathbf{k}}\rangle\right], \end{aligned} \quad (2.8)$$

Tendo a Eq.(2.8), multiplicamos pelo o bra $\langle\Phi_{m'}^{\mathbf{k}}|$.

$$\begin{aligned} \langle\Phi_{m'}^{\mathbf{k}}|H\left[\sum_{\{m\}} \psi_m(\mathbf{k})|\Phi_m^{\mathbf{k}}\rangle\right] &= E(\mathbf{k})\langle\Phi_{m'}^{\mathbf{k}}|\left[\sum_{\{m\}} \psi_m(\mathbf{k})|\Phi_m^{\mathbf{k}}\rangle\right], \\ \sum_{\{m\}} \psi_m(\mathbf{k})\langle\Phi_{m'}^{\mathbf{k}}|H|\Phi_m^{\mathbf{k}}\rangle &= \sum_{\{m\}} E(\mathbf{k})\psi_m(\mathbf{k})\langle\Phi_{m'}^{\mathbf{k}}|\Phi_m^{\mathbf{k}}\rangle, \end{aligned} \quad (2.9)$$

Em uma representação matricial, podemos escrever a Eq.(2.9) como:

$$\mathcal{H}\psi^{\mathbf{k}} = E(\mathbf{k})\mathcal{S}\psi^{\mathbf{k}}, \quad (2.10)$$

onde \mathcal{H} é a representação matricial do Hamiltoniano H , \mathcal{S} é a conhecida matriz de *overlap*, $\psi^{\mathbf{k}}$ seria a representação em um vetor das projeções nas devidas sub-redes, sendo representado por:

$$\psi^{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \psi_{\tilde{A}}(\mathbf{k}) \\ \psi_{\tilde{B}}(\mathbf{k}) \\ \psi_A(\mathbf{k}) \\ \psi_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

Os termos de \mathcal{H} e \mathcal{S} podem ser dados por:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{m,m'} &= \langle\Phi_m^{\mathbf{k}}|H|\Phi_{m'}^{\mathbf{k}}\rangle = \int_{\Omega} \Phi_m^{*\mathbf{k}}(\mathbf{r})H\Phi_{m'}^{\mathbf{k}}(\mathbf{r})d^2\mathbf{r}, \\ \mathcal{S}_{m,m'} &= \langle\Phi_m^{\mathbf{k}}|\Phi_{m'}^{\mathbf{k}}\rangle = \int_{\Omega} \Phi_m^{*\mathbf{k}}(\mathbf{r})\Phi_{m'}^{\mathbf{k}}(\mathbf{r})d^2\mathbf{r}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

2.2.2 Cálculo da Matriz de Overlap

Calculando os termos da matriz de *overlap*, temos que \mathcal{S}_{AA} é:

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_{AA} &= \langle \Phi_A^{\mathbf{k}} | \Phi_A^{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \frac{1}{N_A} \sum_i^{N_A} \sum_j^{N_A} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^A - \mathbf{R}_i^A)} \langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | \phi(\mathbf{R}_j^A) \rangle,\end{aligned}$$

Pela ortogonalidade das funções de Wannier, em uma da sub-rede m , temos que:

$$\langle \phi(\mathbf{R}_i^m) | \phi(\mathbf{R}_j^m) \rangle = \delta_{ij}, \quad (2.13)$$

Implicando que \mathcal{S}_{AA} é:

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_{AA} &= \frac{1}{N_A} \sum_i^{N_A} \sum_j^{N_A} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^A - \mathbf{R}_i^A)} \langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | \phi(\mathbf{R}_j^A) \rangle \\ &= \frac{1}{N_A} \sum_i^{N_A} \sum_j^{N_A} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^A - \mathbf{R}_i^A)} \delta_{ij} \\ &= \frac{1}{N_A} \sum_i^{N_A} 1 \\ &= 1,\end{aligned} \quad (2.14)$$

Através da ortogonalidade dada pela Eq.(2.13) e do resultado de \mathcal{S}_{AA} em Eq.(2.14), temos que, por indução, \mathcal{S}_{BB} , $\mathcal{S}_{\tilde{A}\tilde{A}}$ e $\mathcal{S}_{\tilde{B}\tilde{B}}$ constitui a seguinte relação com \mathcal{S}_{AA} :

$$\mathcal{S}_{AA} = \mathcal{S}_{BB} = \mathcal{S}_{\tilde{A}\tilde{A}} = \mathcal{S}_{\tilde{B}\tilde{B}} = 1, \quad (2.15)$$

Na Eq.(2.15), temos os termos da diagonal de \mathcal{S} . Agora, iremos calcular os termos relativo às diagonais secundárias. Calculando, \mathcal{S}_{AB} , temos:

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_{AB} &= \mathcal{S}_{BA}^* \\ &= \langle \Phi_A^{\mathbf{k}} | \Phi_B^{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N_A N_B}} \sum_i^{N_A} \sum_j^{N_B} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^B - \mathbf{R}_i^A)} \langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | \phi(\mathbf{R}_j^B) \rangle,\end{aligned} \quad (2.16)$$

Podemos dizer que a relação de duas sub-redes de uma mesma camada nas funções de Wannier pode ser dado por:

$$\langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | \phi(\mathbf{R}_j^B) \rangle = \langle \phi(\mathbf{R}_i^{\tilde{A}}) | \phi(\mathbf{R}_j^{\tilde{B}}) \rangle = s_0 \quad \forall i, j \quad (2.17)$$

em que s_0 descreve a não ortogonalidade de orbitais adjacentes de uma camada (McCann e Koshino, 2013), uma vez que, em uma mesma camada, ocorre os "saltos" do orbital p_z de um sítio $A(\tilde{A})$ para o sítio $B(\tilde{B})$ vizinho. Para sub-redes de camadas diferentes, temos:

$$\langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | \phi(\mathbf{R}_j^{\tilde{B}}) \rangle = s_1 \quad \forall i, j \quad (2.18)$$

onde s_1 descreve a não ortogonalidade de orbitais adjacentes entre as camadas, nesse caso, para o empilhamento AB , como mostrado na Fig. 8(a). Para as mesma sub-redes mas de camadas diferentes, temos que :

$$\langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | \phi(\mathbf{R}_j^{\tilde{A}}) \rangle = \langle \phi(\mathbf{R}_i^B) | \phi(\mathbf{R}_j^{\tilde{B}}) \rangle = \langle \phi(\mathbf{R}_i^{\tilde{A}}) | \phi(\mathbf{R}_j^B) \rangle = 0 \quad \forall i, j \quad (2.19)$$

No empilhamento AB , temos que a equação Eq.(2.19) é verdade pois os orbitais no sítio $A(B)$ não se encontram com os orbitais no sítio $\tilde{A}(\tilde{B})$. Com isso, a equação Eq.(2.16) pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{AB} &= \frac{1}{\sqrt{N_A N_B}} \sum_i^{N_A} \sum_j^{N_B} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^B - \mathbf{R}_i^A)} \langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | \phi(\mathbf{R}_j^B) \rangle \\ &= \frac{s_0}{\sqrt{N_A N_B}} \sum_i^{N_A} \sum_j^{N_B} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^B - \mathbf{R}_i^A)}, \end{aligned}$$

Em uma camada, analisamos um átomo fixo A e seus 3 primeiros vizinhos B , corroborando com a aproximação *tight-binding*. Então temos:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{AB} &= \frac{s_0}{\sqrt{N_A N_B}} \sum_i^{N_A} \sum_j^{N_B} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^B - \mathbf{R}_i^A)} \\ &= s_0 \sum_j^3 e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^B - \mathbf{R}^A)}, \end{aligned}$$

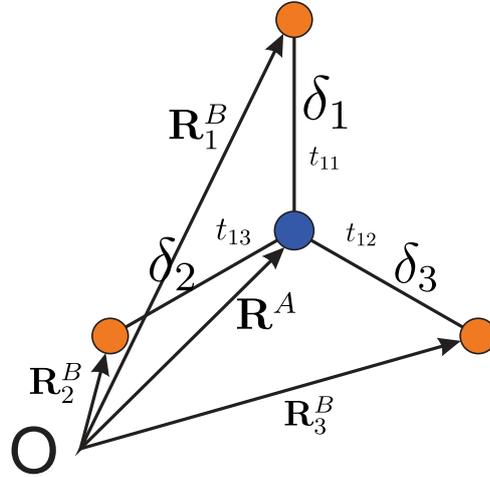
Analisando a figura Fig.11, temos que $\mathbf{R}_j^B - \mathbf{R}^A$ implica nos vetores primitivos da rede $\vec{\delta}_j$, ou seja, temos que:

$$\vec{\delta}_1 = \mathbf{R}_1^B - \mathbf{R}^A, \quad \vec{\delta}_2 = \mathbf{R}_2^B - \mathbf{R}^A, \quad \vec{\delta}_3 = \mathbf{R}_3^B - \mathbf{R}^A,$$

Sendo o fator de estrutura dado por:

$$f(\mathbf{k}) = \sum_j^3 e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_j}, \quad (2.20)$$

Figura 11 – Organização dos vetores primitivos da rede $\vec{\delta}_j$ (com o referencial O) dessa vez sendo relacionado em função dos vetores $\mathbf{R}_j^B - \mathbf{R}^A$ com j valendo $i = 1, 2, 3$. Notamos a representação dos termos de *Hopping* $t_{ij} = \gamma_0$ entre cada um dos pares de átomos da sub-rede $A(\tilde{A})$ e $B(\tilde{B})$.



\mathcal{S}_{AB} pode ser expressa por:

$$\mathcal{S}_{AB} = \mathcal{S}_{BA}^* = s_0 f(\mathbf{k}), \quad (2.21)$$

Através da equação Eq.(2.17) e Eq.(2.21), por indução, podemos dizer que $\mathcal{S}_{\tilde{A}\tilde{B}}$ é:

$$\mathcal{S}_{\tilde{A}\tilde{B}} = \mathcal{S}_{\tilde{B}\tilde{A}}^* = s_0 f(\mathbf{k}), \quad (2.22)$$

Calculando $\mathcal{S}_{\tilde{A}\tilde{B}}$, temos:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{\tilde{A}\tilde{B}} &= \mathcal{S}_{\tilde{B}\tilde{A}}^* \\ &= \langle \Phi_{\tilde{A}}^{\mathbf{k}} | \Phi_{\tilde{B}}^{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N_A N_B}} \sum_i^{N_A} \sum_j^{N_B} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^B - \mathbf{R}_i^A)} \langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | \phi(\mathbf{R}_j^B) \rangle, \end{aligned}$$

Usando a equação Eq.(2.18), assim como caso anterior, analisamos o primeiros vizinhos dos ponto de vista da aproximação *tight-binding*, $\mathcal{S}_{\tilde{A}\tilde{B}}$ pode ser dado por:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{\tilde{A}\tilde{B}} &= \mathcal{S}_{\tilde{B}\tilde{A}}^* \\ &= \frac{1}{\sqrt{N_A N_B}} \sum_i^{N_A} \sum_j^{N_B} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^B - \mathbf{R}_i^A)} \langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | \phi(\mathbf{R}_j^B) \rangle \\ &= s_1 \sum_j^3 e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^B - \mathbf{R}^A)}, \end{aligned}$$

Analisando a Fig. 8(a) no empilhamento AB , vemos que $\mathbf{R}_j^{\bar{B}} - \mathbf{R}^A$ é proporcional ao eixo $\hat{\mathbf{z}}$ para qualquer j , da forma:

$$\mathbf{R}_j^{\bar{B}} - \mathbf{R}^A = \lambda \hat{\mathbf{z}}, \quad (2.23)$$

implicando em:

$$e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^{\bar{B}} - \mathbf{R}^A)} = e^{i\lambda \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{z}}} = 1,$$

pois, sendo $\mathbf{k} = k_x \hat{\mathbf{x}} + k_y \hat{\mathbf{y}}$, temos que $\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{z}} = 0$. Logo, $\mathcal{S}_{AB'}$ é:

$$\mathcal{S}_{A\bar{B}} = \mathcal{S}_{\bar{B}A}^* = 3s_1 \approx s_1, \quad (2.24)$$

Pela a equação Eq.(2.19), podemos inferir que:

$$\mathcal{S}_{A\bar{A}} = \mathcal{S}_{\bar{B}\bar{B}} = 0, \quad \mathcal{S}_{\bar{A}B} = \mathcal{S}_{\bar{B}\bar{A}}^* = 0, \quad (2.25)$$

Logo, como os termos dados em Eq.(2.15), Eq.(2.21), Eq.(2.22), Eq.(2.24) e Eq.(2.25), a matriz de *overlap* \mathcal{S} é representado por:

$$\mathcal{S} = \begin{pmatrix} 1 & s_0 f(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ s_0 f^*(\mathbf{k}) & 1 & s_1 & 0 \\ 0 & s_1 & 1 & s_0 f(\mathbf{k}) \\ 0 & 0 & s_0 f^*(\mathbf{k}) & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.26)$$

2.2.3 Cálculo do Hamiltoniano

Calculando os termos *on-site* como $\mathcal{H}_{m,m}$, primeiramente para \mathcal{H}_{AA} , temos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{AA} &= \langle \Phi_A^{\mathbf{k}} | H | \Phi_A^{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \frac{1}{N_A} \sum_i^{N_A} \sum_j^{N_A} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^A - \mathbf{R}_i^A)} \langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | H | \phi(\mathbf{R}_j^A) \rangle, \end{aligned}$$

Temos que o termo $\langle \phi(\mathbf{R}_i^m) | H | \phi(\mathbf{R}_j^m) \rangle$ implica na conhecida energia *on-site*, da forma:

$$\langle \phi(\mathbf{R}_i^m) | H | \phi(\mathbf{R}_j^m) \rangle = \int_{\Omega} \phi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i^m) H \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^m) d^2 \mathbf{r} = E_m \delta_{ij}, \quad (2.27)$$

O termo *on-site* E_m pode ser visto como a energia do orbital $2p_z$ na sub-rede m . Temos que \mathcal{H}_{AA} pode ser dado por:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{AA} &= \frac{1}{N_A} \sum_i^{N_A} \sum_j^{N_A} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j^A - \mathbf{R}_i^A)} \langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | H | \phi(\mathbf{R}_j^A) \rangle \\
&= \frac{E_A}{N_A} \sum_i^{N_A} \sum_j^{N_A} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j^A - \mathbf{R}_i^A)} \delta_{ij} \\
&= \frac{E_A}{N_A} \sum_i^{N_A} 1 \\
&= E_A,
\end{aligned} \tag{2.28}$$

Tendo a Eq.(2.27), podemos dizer que, por indução, \mathcal{H}_{BB} , $\mathcal{H}_{\bar{A}\bar{A}}$ e $\mathcal{H}_{\bar{B}\bar{B}}$ são:

$$\mathcal{H}_{BB} = E_B, \quad \mathcal{H}_{\bar{A}\bar{A}} = E_{\bar{A}}, \quad \mathcal{H}_{\bar{B}\bar{B}} = E_{\bar{B}}, \tag{2.29}$$

Agora iremos calcular os termos de *Hopping*. Iniciando por \mathcal{H}_{AB} ,

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{AB} &= \mathcal{H}_{BA}^* \\
&= \langle \Phi_A^{\mathbf{k}} | H | \Phi_B^{\mathbf{k}} \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N_A N_B}} \sum_i^{N_A} \sum_j^{N_B} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j^B - \mathbf{R}_i^A)} \langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | H | \phi(\mathbf{R}_j^B) \rangle,
\end{aligned}$$

O termo $\frac{1}{\sqrt{N_A N_B}} \langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | H | \phi(\mathbf{R}_j^B) \rangle$ consiste no termo de *Hopping* em uma mesma camada, como visto na Fig. 8(a), dado da forma:

$$\frac{1}{\sqrt{N_A N_B}} \langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | H | \phi(\mathbf{R}_j^B) \rangle = \frac{1}{\sqrt{N_{\bar{A}} N_{\bar{B}}}} \langle \phi(\mathbf{R}_i^{\bar{A}}) | H | \phi(\mathbf{R}_j^{\bar{B}}) \rangle = -\gamma_0 \quad \forall i, j, \tag{2.30}$$

Assim como nos termos da matriz de *overlap*, analisamos os primeiros vizinhos do ponto de vista da aproximação *Tight-Binding*. Então temos:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{AB} &= \frac{1}{\sqrt{N_A N_B}} \sum_i^{N_A} \sum_j^{N_B} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j^B - \mathbf{R}_i^A)} \langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | H | \phi(\mathbf{R}_j^B) \rangle \\
&= -\gamma_0 \sum_j^3 e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j^B - \mathbf{R}^A)} \\
&= -\gamma_0 \sum_j^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_j},
\end{aligned} \tag{2.31}$$

Logo, \mathcal{H}_{AB} , com base na Eq.(2.30), é:

$$\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_{BA}^* = \mathcal{H}_{\bar{A}\bar{B}} = \mathcal{H}_{\bar{B}\bar{A}}^* = -\gamma_0 f(\mathbf{k}), \tag{2.32}$$

Calculando $\mathcal{H}_{A\tilde{A}}$, temos:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{A\tilde{A}} &= \mathcal{H}_{\tilde{A}A}^* \\ &= \langle \Phi_A^{\mathbf{k}} | H | \Phi_{\tilde{A}}^{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N_A N_{\tilde{A}}}} \sum_i^{N_A} \sum_j^{N_{\tilde{A}}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^{\tilde{A}} - \mathbf{R}_i^A)} \langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | H | \phi(\mathbf{R}_j^{\tilde{A}}) \rangle,\end{aligned}$$

Temos que o termo $\frac{1}{\sqrt{N_A N_{\tilde{A}}}} \langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | H | \phi(\mathbf{R}_j^{\tilde{A}}) \rangle$ que é um dos termos *Hopping* entre camadas que, vendo a Fig. 8(a), é dado por:

$$\frac{1}{\sqrt{N_A N_{\tilde{A}}}} \langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | H | \phi(\mathbf{R}_j^{\tilde{A}}) \rangle = \frac{1}{\sqrt{N_B N_{\tilde{B}}}} \langle \phi(\mathbf{R}_i^B) | H | \phi(\mathbf{R}_j^{\tilde{B}}) \rangle = \gamma_4 \quad \forall i, j \quad (2.33)$$

Assim como \mathcal{H}_{AB} , analisemos os primeiros vizinhos dos ponto de vista da aproximação *tight-binding*. Então, temos que $\mathcal{H}_{A\tilde{A}}$ é:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{A\tilde{A}} &= \frac{1}{\sqrt{N_A N_{\tilde{A}}}} \sum_i^{N_A} \sum_j^{N_{\tilde{A}}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^{\tilde{A}} - \mathbf{R}_i^A)} \langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | H | \phi(\mathbf{R}_j^{\tilde{A}}) \rangle \\ &= \gamma_4 \sum_j^3 e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^{\tilde{A}} - \mathbf{R}^A)} \\ &= \gamma_4 \sum_j^3 e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^{\tilde{A}} - \mathbf{R}^A)}\end{aligned} \quad (2.34)$$

Analisando a Fig. 8(a), temos que o termo $\mathbf{R}_j^{\tilde{A}} - \mathbf{R}^A$ pode ser dado por:

$$\mathbf{R}_j^{\tilde{A}} - \mathbf{R}^A = \delta_j + \lambda \hat{\mathbf{z}}$$

onde λ seria a distância entre as camadas. Logo, temos que $\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^{\tilde{A}} - \mathbf{R}^A) = \mathbf{k} \cdot \delta_j$. Então, $\mathcal{H}_{A\tilde{A}}$ e $\mathcal{H}_{B\tilde{B}}$, analisando a equação Eq.(2.33), pode ser dados por:

$$\mathcal{H}_{A\tilde{A}} = \mathcal{H}_{\tilde{A}A}^* = \mathcal{H}_{B\tilde{B}} = \mathcal{H}_{\tilde{B}B}^* = \gamma_4 f(\mathbf{k}) \quad (2.35)$$

Calculando $\mathcal{H}_{B\tilde{A}}$, temos:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{B\tilde{A}} &= \mathcal{H}_{\tilde{A}B}^* \\ &= \langle \Phi_B^{\mathbf{k}} | H | \Phi_{\tilde{A}}^{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N_{\tilde{A}} N_B}} \sum_i^{N_B} \sum_j^{N_{\tilde{A}}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^{\tilde{A}} - \mathbf{R}_i^B)} \langle \phi(\mathbf{R}_i^B) | H | \phi(\mathbf{R}_j^{\tilde{A}}) \rangle\end{aligned}$$

Temos que o termo $\frac{1}{\sqrt{N_{\tilde{A}} N_B}} \langle \phi(\mathbf{R}_i^B) | H | \phi(\mathbf{R}_j^{\tilde{A}}) \rangle$ que é um segundo termo de *Hopping* entre camadas que, vendo a Fig. 8(a), é dado por:

$$\frac{1}{\sqrt{N_{\tilde{A}} N_B}} \langle \phi(\mathbf{R}_i^B) | H | \phi(\mathbf{R}_j^{\tilde{A}}) \rangle = -\gamma_3 \quad \forall i, j \quad (2.36)$$

Assim como os casos anteriores para os termos do hamiltoniano, analisando os primeiros vizinhos dos ponto de vista da aproximação *tight-binding*, $\mathcal{H}_{B\tilde{A}}$ pode ser dado por:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{B\tilde{A}} &= \frac{1}{\sqrt{N_{\tilde{A}}N_B}} \sum_i^{N_B} \sum_j^{N_{\tilde{A}}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j^{\tilde{A}}-\mathbf{R}_i^B)} \langle \phi(\mathbf{R}_i^B) | H | \phi(\mathbf{R}_j^{\tilde{A}}) \rangle \\ &= -\gamma_3 \sum_j^3 e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j^{\tilde{A}}-\mathbf{R}^B)}\end{aligned}$$

Analisando a Fig. 8(a), temos que o termo $\mathbf{R}_j^{\tilde{A}} - \mathbf{R}^B$ pode ser dado por:

$$\mathbf{R}_j^{\tilde{A}} - \mathbf{R}^B = -\delta_j + \lambda \hat{\mathbf{z}}$$

Logo, temos que o termo $\mathcal{H}_{B\tilde{A}}$, é dado por:

$$\mathcal{H}_{B\tilde{A}} = \mathcal{H}_{\tilde{A}B}^* = -\gamma_3 f^*(\mathbf{k}) \quad (2.37)$$

Calculando $\mathcal{H}_{A\tilde{B}}$, temos:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{A\tilde{B}} &= \mathcal{H}_{\tilde{B}A}^* \\ &= \langle \Phi_A^{\mathbf{k}} | H | \Phi_B^{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N_A N_{\tilde{B}}}} \sum_i^{N_A} \sum_j^{N_{\tilde{B}}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j^{\tilde{B}}-\mathbf{R}_i^A)} \langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | H | \phi(\mathbf{R}_j^{\tilde{B}}) \rangle\end{aligned}$$

Tendo que o termo $\frac{1}{\sqrt{N_A N_{\tilde{B}}}} \langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | H | \phi(\mathbf{R}_j^{\tilde{B}}) \rangle$ consiste no ultimo termo de *hopping* entre camadas. Esse termo é um tanto especial pois diz respeito a energia entre camadas na direção ortogonal ao plano. O termo é dado por:

$$\frac{1}{\sqrt{N_A N_{\tilde{B}}}} \langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | H | \phi(\mathbf{R}_j^{\tilde{B}}) \rangle = \gamma_1 \quad \forall i, j \quad (2.38)$$

Assim como os casos anteriores para os termos do hamiltoniano, analisando os primeiros vizinhos dos ponto de vista da aproximação *tight-binding*, $\mathcal{H}_{B\tilde{A}}$ pode ser dado por:, $\mathcal{H}_{A\tilde{B}}$ é dado por:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{A\tilde{B}} &= \frac{1}{\sqrt{N_A N_{\tilde{B}}}} \sum_i^{N_A} \sum_j^{N_{\tilde{B}}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j^{\tilde{B}}-\mathbf{R}_i^A)} \langle \phi(\mathbf{R}_i^A) | H | \phi(\mathbf{R}_j^{\tilde{B}}) \rangle \\ &= \gamma_1 e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}^{\tilde{B}}-\mathbf{R}^A)}\end{aligned}$$

Analisando a Fig. 8(a), o termo $\mathbf{R}^{\tilde{B}} - \mathbf{R}^A$ é dado por:

$$\mathbf{R}^{\tilde{B}} - \mathbf{R}^A = \lambda \hat{\mathbf{z}}$$

Logo $\mathcal{H}_{A\tilde{B}}$ é dado por:

$$\mathcal{H}_{A\tilde{B}} = \mathcal{H}_{\tilde{B}A}^* = \gamma_1 \quad (2.39)$$

Logo, tendo os termos em Eq.(2.29), Eq.(2.32), Eq.(2.35), Eq.(2.37) e Eq.(2.39), a matriz do Hamiltoniano \mathcal{H} é dada por:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} E_{\bar{A}} & -\gamma_0 f(\mathbf{k}) & \gamma_4 f(\mathbf{k}) & -\gamma_3 f^*(\mathbf{k}) \\ -\gamma_0 f^*(\mathbf{k}) & E_{\bar{B}} & \gamma_1 & \gamma_4 f(\mathbf{k}) \\ \gamma_4 f^*(\mathbf{k}) & \gamma_1 & E_A & -\gamma_0 f(\mathbf{k}) \\ -\gamma_3 f(\mathbf{k}) & \gamma_4 f^*(\mathbf{k}) & -\gamma_0 f^*(\mathbf{k}) & E_B \end{pmatrix} \quad (2.40)$$

O Hamiltoniano da equação Eq.(2.40) representa, de fato, a aproximação *tight-binding* para a BLG. Analisando os passos, partimos de conceitos puramente geométricos para chegarmos ao Hamiltoniano final, com a representação máxima de características geométricas no fator de estrutura $f(\mathbf{k})$, um atributo intrínseco a para os sólidos cristalinos, com base na sua células unitária e seus vetores de rede.

Essa foi a forma da primeira quantização, onde consideramos a funções dentro do espaço de Hilbert convencional, como uma representação de vetores de um espaço abstrato, com todas suas propriedades que regem um espaço vetorial. Na próxima seção, analisaremos uma nova forma de encontrar o hamiltoniano Eq.(2.40) através da chamada segunda quantização, em que também consiste em método de escrita de um hamiltoniano para material do ponto de vista da aproximação *tight-binding*, com toda a análise geométrica envolvida, mas considerações considerações sobre função de onda são distintas da primeira quantização.

2.3 Modelo *tight-binding*: Segunda quantização

2.3.1 O Espaço de Fock

No modelo de segunda quantização (Bena e Montambaux; Beggi *et al.*, 2009, 2018), enxergamos o sistema de uma maneira diferente comparado ao caso da primeira quantização. No presente modelo, não trabalhamos no espaço de Hilbert convencional, como na primeira quantização, mas no espaço de Fock⁴. O espaço de Fock \mathbb{F}_V consiste em um espaço de Hilbert \mathbb{H} generalizado para sistemas de muitas partículas, sendo a equação um representação de um sub-espaço do espaço de Fock \mathbb{F}_V^N , dado por (Beggi *et al.*, 2018):

$$\mathbb{F}_V^N = \bigotimes_{n=1}^N \hat{S}_V \mathbb{H} = \hat{S}_V \underbrace{(\mathbb{H} \otimes \mathbb{H} \otimes \mathbb{H} \otimes \dots \otimes \mathbb{H})}_{N \text{ Termos}}, \quad (2.41)$$

⁴Vladimir Aleksandrovich Fock (1898-1974) foi um físico soviético que deu grandes contribuições para a teoria de muitos corpos com o método Hartree–Fock.

para um sistema de N partículas e \hat{S}_v consiste em um operador de simetrização, $v = 1$ para Bósons e $v = -1$ para Férmons. O espaço de Fock completo consiste sobre a soma de todos sub-espacos ($\mathbb{F}_v = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathbb{F}_v^N$), respeitando todos os teoremas e axiomas que o espaço de Hilbert \mathbb{H} respeita, à exemplo da característica de um espaço com produto interno (espaço métrico), com a desigualdade de triangular e de cauchy, e do fechamento de um espaço vetorial onde a combinação de um ou mais elementos, via soma, de um espaço resultam em um novo elemento do mesmo espaço.

Tendo em vista a forma como é construído o espaço de Fock, damos uma nova interpretação para a os estados que compõe o sistema. Sendo $|n_i\rangle$ um estado que pode representar um sistema com número de ocupação n_i (inteiro) para o i -ésimo estado pertencente ao espaço de Hilbert \mathbb{H} , um estado que pode representar um sistema de N partículas no sub-espaço de Fock \mathbb{F}_v^N pode ser dado por (Bruus e Flensberg, 2004):

$$|n_1, n_2, n_3, \dots, n_N\rangle = \hat{S}_v |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes |n_3\rangle \otimes \dots \otimes |n_N\rangle \quad (2.42)$$

tal que $\sum_i n_i = N$. Pela a Eq.(2.42), podemos aplicar um formalismo semelhante aos operadores "escada", usados na mecânica quântica de schrodinger para a resolução do problema do oscilador harmônico, e redefini-los com a função de operadores de "criação" e "destruição". Com isso, podemos representar o estado $|n_1, n_2, n_3, \dots, n_N\rangle$ em função dos operadores de criação \mathcal{O}_i^\dagger e destruição \mathcal{O}_i , aplicados no estado fundamental $|0, 0, 0, \dots, 0\rangle$, da forma:

$$|n_1, n_2, n_3, \dots, n_N\rangle = \left[\prod_{i=1}^N \frac{(\mathcal{O}_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} \right] |0, 0, 0, \dots, 0\rangle \quad (2.43)$$

Considerando a base coordenada do tipo $|\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N\rangle$, aplicando na equação Eq.(2.42) no seu bra, implica na combinação:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) &= \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N | n_1, n_2, n_3, \dots, n_N \rangle \\ &= \hat{S}_v \langle \mathbf{r}_1 | n_1 \rangle \otimes \langle \mathbf{r}_2 | n_2 \rangle \otimes \langle \mathbf{r}_3 | n_3 \rangle \otimes \dots \otimes \langle \mathbf{r}_N | n_N \rangle \\ &= \hat{S}_v \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) \psi_{n_3}(\mathbf{r}_3) \dots \psi_{n_N}(\mathbf{r}_N) \end{aligned} \quad (2.44)$$

onde o temos que o operador de simetrização atua de forma mais direta na função de onda do que em um simples estado de Fock, dado na equação Eq.(2.42)⁵. As funções de onda ψ_{n_i} seriam a representação do estados no vetor coordenada para as partículas na posição \mathbf{r}_i .

⁵O operador de simetrização atua em um dado estado permutando as posições na função de onda na forma da equação (2.44)

As funções de onda, sobre uma perspectiva de mudanças de variáveis, é enxergadas, como operadores. Tomando as funções de onda ψ_{n_i} na Eq.(2.44), as funções de onda, denominadas agora por operadores de campo, são dadas por:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_i \psi_{n_i}(\mathbf{r}) \mathcal{O}_i, \quad \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_i \psi_{n_i}^*(\mathbf{r}) \mathcal{O}_i^\dagger \quad (2.45)$$

Com isso as observáveis nesse formalismo, como a energia cinética, são dados por (??, ??):

$$T = \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) T_{\mathbf{r}} \hat{\Psi}(\mathbf{r}) d^2\mathbf{r} = \sum_{i,j} \left(\int \psi_{n_i}^*(\mathbf{r}) T_{\mathbf{r}} \psi_{n_j}(\mathbf{r}) d^2\mathbf{r} \right) \mathcal{O}_i^\dagger \mathcal{O}_j \quad (2.46)$$

onde $T_{\mathbf{r}}$ consiste no operador clássico da energia cinética de schrodinger. O cálculo do hamiltoniano para a BLG, via segunda quantização será feita usando a Eq.(2.46), com a considerações sobre quais operadores de criação e destruição iremos usar.

2.3.2 Aplicação do espaço de Fock

O formalismo de segunda quantização é bastante intuitivo quando estamos lidando com sistemas de muitas partículas, sendo cada uma localizada em um átomo na rede, com uma analogia as funções de Wannier, usadas na primeira quantização. O operador, seja ele de criação ou destruição, está associado à localização de um átomo em que na BLG para cada sítio na rede. A analogia para um sistema de muitas partículas na bicamada dar-se em considerarmos a funções de onda no sítios como representação das partículas no sistema.

Para a BLG, os operadores de campo, dado na Eq.(2.45), consiste em uma combinação sobre todos os operadores das sub-redes, da forma:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_i \left(\psi_{n_i}^{\tilde{A}}(\mathbf{r}) \tilde{a}_i + \psi_{n_i}^{\tilde{B}}(\mathbf{r}) \tilde{b}_i + \psi_{n_i}^A(\mathbf{r}) a_i + \psi_{n_i}^B(\mathbf{r}) b_i \right) \quad (2.47)$$

em função dos operadores de destruição $a_i(b_j)$ e $\tilde{a}_i(\tilde{b}_j)$ para a camada superior $A(B)$ e a camada inferior $\tilde{A}(\tilde{B})$, respectivamente. Conseqüentemente, $\hat{\Psi}^\dagger$ estará em função dos seus complexos conjugados $a_i^\dagger(b_j^\dagger)$ e $\tilde{a}_i^\dagger(\tilde{b}_j^\dagger)$.

Sendo $H_{\mathbf{r}}$ a representação do hamiltoniano no formalismo de schrodinger, usando a Eq.(2.46), o Hamiltoniano em segunda quantização é dado por:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) H_{\mathbf{r}} \hat{\Psi}(\mathbf{r}) d^2\mathbf{r} \\
&= \sum_{i,j} \int \left(\psi_{n_i}^{*\tilde{A}}(\mathbf{r}) \tilde{a}_i^\dagger + \psi_{n_i}^{*\tilde{B}}(\mathbf{r}) \tilde{b}_i^\dagger + \psi_{n_i}^{*A}(\mathbf{r}) a_i^\dagger + \psi_{n_i}^{*B}(\mathbf{r}) b_i^\dagger \right) H_{\mathbf{r}} \left(\psi_{n_j}^{\tilde{A}}(\mathbf{r}) \tilde{a}_j + \psi_{n_j}^{\tilde{B}}(\mathbf{r}) \tilde{b}_j + \psi_{n_j}^A(\mathbf{r}) a_j \right. \\
&\quad \left. + \psi_{n_j}^B(\mathbf{r}) b_j \right) d^2\mathbf{r} \\
&= \sum_{i,j} \sum_{\mu,\mu'} \left(\int \psi_{n_i}^{*\mu}(\mathbf{r}) H_{\mathbf{r}} \psi_{n_j}^{\mu'}(\mathbf{r}) d^2\mathbf{r} \right) \hat{\mu}_i^\dagger \hat{\mu}'_j
\end{aligned} \tag{2.48}$$

em que $\mu, \mu' \in \{\tilde{A}, \tilde{B}, A, B\}$, onde $\hat{\mu}(\hat{\mu}^\dagger)$ e $\hat{\mu}'(\hat{\mu}'^\dagger)$ seria os operadores de criação e destruição correspondentes. A integral na Eq.(2.48) corresponde aos termos *on-site* E_μ e os termos de *hoppings* $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_3$ e γ_4 é da forma:

$$\int \psi_{n_i}^{*\mu}(\mathbf{r}) H_{\mathbf{r}} \psi_{n_j}^{\mu}(\mathbf{r}) d^2\mathbf{r} = E_\mu \delta_{i,j} \tag{2.49a}$$

$$\int \psi_{n_i}^{*\mu}(\mathbf{r}) H_{\mathbf{r}} \psi_{n_j}^{\mu'}(\mathbf{r}) d^2\mathbf{r} = \gamma_{\mu,\mu'} \tag{2.49b}$$

A Eq.(2.49b), relativo aos *hoppings*, é equivalente às equações Eq.(2.29), Eq.(2.32), Eq.(2.35), Eq.(2.37) e Eq.(2.39), tal que:

$$\gamma_{A,B} = \gamma_{B,A} = \gamma_{\tilde{A},\tilde{B}} = \gamma_{\tilde{B},\tilde{A}} = -\gamma_0 \tag{2.50a}$$

$$\gamma_{A,\tilde{B}} = \gamma_{\tilde{B},A} = \gamma_1 \tag{2.50b}$$

$$\gamma_{\tilde{A},B} = \gamma_{B,\tilde{A}} = -\gamma_3 \tag{2.50c}$$

$$\gamma_{\tilde{A},A} = \gamma_{A,\tilde{A}} = \gamma_{\tilde{B},B} = \gamma_{B,\tilde{B}} = \gamma_4 \tag{2.50d}$$

fazendo as mesma considerações sobre os primeiros vizinhos. Com isso, uma representação do hamiltoniano \mathcal{H} (como a representação da energia) de uma bicamada de grafeno, sob a luz dessa nova abordagem, pode ser dada como na Eq.(2.51).

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= E_{\tilde{A}} \sum_i \tilde{a}_i^\dagger \tilde{a}_i + E_{\tilde{B}} \sum_i \tilde{b}_i^\dagger \tilde{b}_i + E_A \sum_i a_i^\dagger a_i + E_B \sum_i b_i^\dagger b_i \\
&\quad - \gamma_0 \left[\sum_{i,j} \left(a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i \right) + \sum_{i,j} \left(\tilde{a}_i^\dagger \tilde{b}_j + \tilde{b}_j^\dagger \tilde{a}_i \right) \right] \\
&\quad + \gamma_1 \sum_i \left(a_i^\dagger \tilde{b}_i + \tilde{b}_i^\dagger a_i \right) - \gamma_3 \sum_i \left(\tilde{a}_i^\dagger b_i + b_i^\dagger \tilde{a}_i \right) \\
&\quad + \gamma_4 \left[\sum_i \left(\tilde{a}_i^\dagger a_i + a_i^\dagger \tilde{a}_i \right) + \sum_i \left(\tilde{b}_i^\dagger b_i + b_i^\dagger \tilde{b}_i \right) \right]
\end{aligned} \tag{2.51}$$

Podemos tomar os operadores de criação e destruição como uma transformada de fourier da forma:

$$\begin{aligned}
a_i &= \frac{1}{\sqrt{N_A}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^A} a_{\mathbf{k}} , & a_i^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N_A}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^A} a_{\mathbf{k}}^\dagger \\
b_i &= \frac{1}{\sqrt{N_B}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^B} b_{\mathbf{k}} , & b_i^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N_B}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^B} b_{\mathbf{k}}^\dagger \\
\tilde{a}_i &= \frac{1}{\sqrt{N_{\tilde{A}}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^{\tilde{A}}} \tilde{a}_{\mathbf{k}} , & \tilde{a}_i^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N_{\tilde{A}}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^{\tilde{A}}} \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \\
\tilde{b}_i &= \frac{1}{\sqrt{N_{\tilde{B}}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^{\tilde{B}}} \tilde{b}_{\mathbf{k}} , & \tilde{b}_i^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N_{\tilde{B}}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^{\tilde{B}}} \tilde{b}_{\mathbf{k}}^\dagger
\end{aligned} \tag{2.52}$$

Substituindo os operadores na equação Eq.(2.52) no Hamiltoniano Eq.(2.51), temos que:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left[E_{\tilde{A}} \left(\frac{1}{N_{\tilde{A}}} \sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_i^{\tilde{A}}} \right) \tilde{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}} + E_{\tilde{B}} \left(\frac{1}{N_{\tilde{B}}} \sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_i^{\tilde{B}}} \right) \tilde{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}} \right. \\
&+ \left. E_A \left(\frac{1}{N_A} \sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_i^A} \right) a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} + E_B \left(\frac{1}{N_B} \sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_i^B} \right) b_{\mathbf{k}'}^\dagger b_{\mathbf{k}} \right] \\
&- \gamma_0 \frac{1}{\sqrt{N_A N_B}} \sum_{i,j} \left[\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^A} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_j^B} a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^A} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_j^B} b_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} \right] \\
&- \gamma_0 \frac{1}{\sqrt{N_{\tilde{A}} N_{\tilde{B}}}} \sum_{i,j} \left[\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^{\tilde{A}}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_j^{\tilde{B}}} \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^{\tilde{A}}} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_j^{\tilde{B}}} \tilde{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}'} \right] \\
&+ \gamma_1 \frac{1}{\sqrt{N_A N_{\tilde{B}}}} \sum_i \left[\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^A} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_i^{\tilde{B}}} a_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^A} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_i^{\tilde{B}}} \tilde{b}_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} \right] \\
&- \gamma_3 \frac{1}{\sqrt{N_{\tilde{A}} N_B}} \sum_i \left[\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^{\tilde{A}}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_i^B} \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^{\tilde{A}}} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_i^B} b_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}'} \right] \\
&+ \gamma_4 \frac{1}{\sqrt{N_{\tilde{A}} N_A}} \sum_i \left[\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^{\tilde{A}}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_i^A} \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^{\tilde{A}}} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_i^A} a_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}'} \right] \\
&+ \gamma_4 \frac{1}{\sqrt{N_{\tilde{B}} N_B}} \sum_i \left[\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^{\tilde{B}}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_i^B} \tilde{b}_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^{\tilde{B}}} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_i^B} b_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}'} \right]
\end{aligned} \tag{2.53}$$

Podemos reescrever a exponencial do tipo $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{b}}$ na forma:

$$e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{b}} = e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{a}} e^{-i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{a}-\mathbf{b})} \tag{2.54}$$

Os seguintes somatórios representados na equação Eq.(2.53) pode ser convertidos na forma:

$$\sum_{i,j} \longrightarrow \sum_i \sum_n \quad (2.55a)$$

$$\sum_i \longrightarrow \sum_j \sum_n \quad (2.55b)$$

Onde o primeiro somatório diz respeito ao i, j -ésimo sítio de uma rede e seu n -ésimo primeiro vizinho, onde n vai de 1 à 3, em uma mesma camada, de acordo com a Fig. 8(a).

Analisando a equação Eq.(2.54), vemos que a diferença $\mathbf{a} - \mathbf{b}$ pode implicar no vetores de rede δ_n mostrados na figura 11, principalmente para os casos individuais de cada camada. Para os casos fora de ambas as camadas, com os *hoppings* γ_1, γ_3 e γ_4 , dado o vetor que une os sítios em cada camada, tomamos apenas sua projeção no plano xy , uma vez que $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, de acordo com o empilhamento AB na Fig. 8(a), dado da forma:

$$\gamma_0: \quad \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^{\tilde{B}} - \mathbf{R}_i^{\tilde{A}}) = \mathbf{k} \cdot \delta_n \text{ e } \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^B - \mathbf{R}_i^A) = \mathbf{k} \cdot \delta_n \quad \forall i, j \quad (2.56a)$$

$$\gamma_1: \quad \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^{\tilde{B}} - \mathbf{R}_i^A) = \mathbf{k} \cdot \lambda \hat{\mathbf{z}} = 0 \quad \forall i, j \quad (2.56b)$$

$$\gamma_3: \quad \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^B - \mathbf{R}_i^{\tilde{A}}) = \mathbf{k} \cdot (-\delta_n + \lambda \hat{\mathbf{z}}) = -\mathbf{k} \cdot \delta_n \quad \forall i, j \quad (2.56c)$$

$$\gamma_4: \quad \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^{\tilde{A}} - \mathbf{R}_i^A) = \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^{\tilde{B}} - \mathbf{R}_i^B) = \mathbf{k} \cdot (\delta_n + \lambda \hat{\mathbf{z}}) = \mathbf{k} \cdot \delta_n \quad \forall i, j \quad (2.56d)$$

onde λ seria a distância entre as camadas. Com isso, o Hamiltoniano Eq.(2.53) pode ser dado por:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[E_{\tilde{A}} \left(\frac{1}{N_{\tilde{A}}} \sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i^{\tilde{A}}} \right) \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}} + E_{\tilde{B}} \left(\frac{1}{N_{\tilde{B}}} \sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i^{\tilde{B}}} \right) \tilde{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}} \right. \\ & + E_A \left(\frac{1}{N_A} \sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i^A} \right) a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} + E_B \left(\frac{1}{N_B} \sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i^B} \right) b_{\mathbf{k}'}^\dagger b_{\mathbf{k}} \left. \right] \\ & - \frac{\gamma_0}{\sqrt{N_A N_B}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[\left(\sum_i e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i^A} \right) \sum_n e^{i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} + \left(\sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i^A} \right) \sum_n e^{-i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} b_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} \right] \\ & - \frac{\gamma_0}{\sqrt{N_{\tilde{A}} N_{\tilde{B}}}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[\left(\sum_i e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i^{\tilde{A}}} \right) \sum_n e^{i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}'} + \left(\sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i^{\tilde{A}}} \right) \sum_n e^{-i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} \tilde{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}} \right] \\ & + \frac{\gamma_1}{\sqrt{N_A N_{\tilde{B}}}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[\left(\sum_i e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i^A} \right) a_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}'} + \left(\sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i^A} \right) \tilde{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} \right] \\ & - \frac{\gamma_3}{\sqrt{N_{\tilde{A}} N_B}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[\left(\sum_i e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i^{\tilde{A}}} \right) \sum_n e^{-i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} + \left(\sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i^{\tilde{A}}} \right) \sum_n e^{i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} b_{\mathbf{k}'}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}} \right] \\ & + \frac{\gamma_4}{\sqrt{N_{\tilde{A}} N_A}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[\left(\sum_i e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i^{\tilde{A}}} \right) \sum_n e^{i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} + \left(\sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i^{\tilde{A}}} \right) \sum_n e^{-i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} a_{\mathbf{k}'}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}} \right] \end{aligned}$$

$$+ \frac{\gamma_4}{\sqrt{N_{\tilde{B}}N_B}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[\left(\sum_i e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i^{\tilde{B}}} \right) \sum_n e^{i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} \tilde{b}_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} + \left(\sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i^{\tilde{B}}} \right) \sum_n e^{-i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} b_{\mathbf{k}'}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}} \right] \quad (2.57)$$

Tendo que podemos ter um representação da delta de kronecker da forma:

$$\frac{1}{\sqrt{N_{\mathbf{v}}N_{\mathbf{v}'}}} \sum_i e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i^{\mathbf{v}}} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \quad \forall \mathbf{v}, \mathbf{v}' = \{A, B, \tilde{A}, \tilde{B}\} \quad (2.58)$$

Com isso, podemos simplificar ainda mais o hamiltoniano Eq.(2.57) na forma:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[E_{\tilde{A}} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}} + E_{\tilde{B}} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}} + E_A \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + E_B \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \right] \\ & - \gamma_0 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_n e^{i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} + \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_n e^{-i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} b_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} \right] \\ & - \gamma_0 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_n e^{i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}'} + \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_n e^{-i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} \tilde{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}} \right] \\ & + \gamma_1 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}'} + \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}} \right] \\ & - \gamma_3 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_n e^{-i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} + \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_n e^{i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} b_{\mathbf{k}'}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}} \right] \\ & + \gamma_4 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_n e^{i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} + \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_n e^{-i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} a_{\mathbf{k}'}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}} \right] \\ & + \gamma_4 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_n e^{i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} \tilde{b}_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} + \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_n e^{-i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} b_{\mathbf{k}'}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}} \right] \end{aligned} \quad (2.59)$$

Logo, aplicando a delta de kronecker, temos que a equação Eq.(2.59) resulta em:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\mathbf{k}} \left[E_{\tilde{A}} \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}} + E_{\tilde{B}} \tilde{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}} + E_A a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + E_B b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \right] \\ & - \gamma_0 \sum_{\mathbf{k}} \left[\sum_n e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_n} a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \sum_n e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta_n} b_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \right] - \gamma_0 \sum_{\mathbf{k}} \left[\sum_n e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_n} \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}} + \sum_n e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta_n} \tilde{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}} \right] \\ & + \gamma_1 \sum_{\mathbf{k}} \left[a_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}} + \tilde{b}_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \right] - \gamma_3 \sum_{\mathbf{k}} \left[\sum_n e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta_n} \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \sum_n e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_n} b_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}} \right] \\ & + \gamma_4 \sum_{\mathbf{k}} \left[\sum_n e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_n} \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \sum_n e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta_n} a_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}} \right] \\ & + \gamma_4 \sum_{\mathbf{k}} \left[\sum_n e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_n} \tilde{b}_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \sum_n e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta_n} b_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}} \right] \end{aligned} \quad (2.60)$$

Tendo que $f(\mathbf{k}) = \sum_n e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_n}$, escrevemos o hamiltoniano Eq.(2.60) como:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \sum_{\mathbf{k}} \left[E_{\bar{A}} \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}} + E_{\bar{B}} \tilde{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}} + E_A a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + E_B b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \right] \\
&- \gamma_0 \sum_{\mathbf{k}} \left[f(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + f^*(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \right] - \gamma_0 \sum_{\mathbf{k}} \left[f(\mathbf{k}) \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}} + f^*(\mathbf{k}) \tilde{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}} \right] \\
&+ \gamma_1 \sum_{\mathbf{k}} \left[a_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}} + \tilde{b}_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \right] - \gamma_3 \sum_{\mathbf{k}} \left[f^*(\mathbf{k}) \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + f(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}} \right] \\
&+ \gamma_4 \sum_{\mathbf{k}} \left[f(\mathbf{k}) \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + f^*(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{a}_{\mathbf{k}} \right] + \gamma_4 \sum_{\mathbf{k}} \left[f(\mathbf{k}) \tilde{b}_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + f^*(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}} \right]
\end{aligned} \tag{2.61}$$

Podemos representar o Hamiltoniano Eq.(2.61) na forma:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger & \tilde{b}_{\mathbf{k}}^\dagger & a_{\mathbf{k}}^\dagger & b_{\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\bar{A}} & -\gamma_0 f(\mathbf{k}) & \gamma_4 f(\mathbf{k}) & -\gamma_3 f^*(\mathbf{k}) \\ -\gamma_0 f^*(\mathbf{k}) & E_{\bar{B}} & \gamma_1 & \gamma_4 f(\mathbf{k}) \\ \gamma_4 f^*(\mathbf{k}) & \gamma_1 & E_A & -\gamma_0 f(\mathbf{k}) \\ -\gamma_3 f(\mathbf{k}) & \gamma_4 f^*(\mathbf{k}) & -\gamma_0 f^*(\mathbf{k}) & E_B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{a}_{\mathbf{k}} \\ \tilde{b}_{\mathbf{k}} \\ a_{\mathbf{k}} \\ b_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \tag{2.62}$$

com sua forma matricial dada da forma:

$$\mathcal{H}_{TB} = \begin{pmatrix} E_{\bar{A}} & -\gamma_0 f(\mathbf{k}) & \gamma_4 f(\mathbf{k}) & -\gamma_3 f^*(\mathbf{k}) \\ -\gamma_0 f^*(\mathbf{k}) & E_{\bar{B}} & \gamma_1 & \gamma_4 f(\mathbf{k}) \\ \gamma_4 f^*(\mathbf{k}) & \gamma_1 & E_A & -\gamma_0 f(\mathbf{k}) \\ -\gamma_3 f(\mathbf{k}) & \gamma_4 f^*(\mathbf{k}) & -\gamma_0 f^*(\mathbf{k}) & E_B \end{pmatrix} \tag{2.63}$$

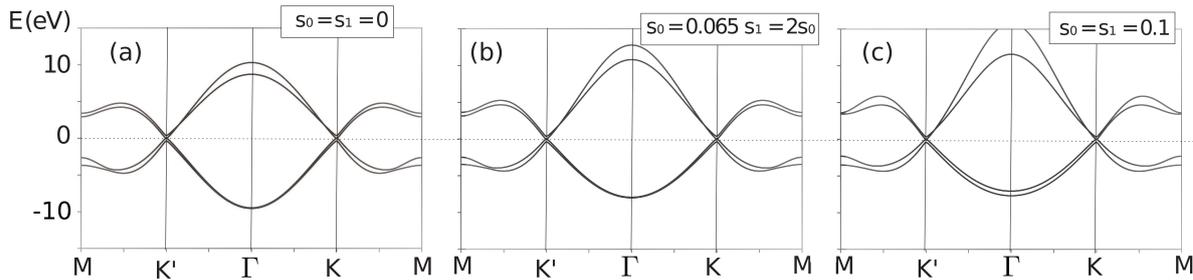
A equação Eq.(2.63) resume a descrição energética e eletrônica para a bicamada de grafeno, dentro do espaço recíproco para a segunda quantização, assim como no caso da primeira quantização, demonstrando uma equivalência entre ambas (Lima *et al.*, 2022). Com isso, considerando o uma equação de auto-valor do tipo $\det\{\mathcal{H}_{TB} - E(\mathbf{k})\mathcal{S}\} = 0$ (com a matriz de *overlap*), obtemos a energias permitidas que formam a estrutura de bandas do grafeno. Com a teoria de do espaço recíproco para a bicamada, temos que a estrutura de bandas na primeira zona de Brillouin é dada na figura Fig.12.

2.3.3 Estrutura de Bandas

Analisando a estrutura de bandas, mostrado na Fig.12, no contorno da primeira zona de Brillouin com os pontos de alta simetria M, K', Γ, K e M , percebemos que o hamiltoniano *tight-binding* Eq.(2.63) nos retorna 4 bandas de energia, 2 para a valência e 2 para condução

(McCann e Koshino, 2013). Comparado com a monocamada de grafeno, que tem apenas 2 bandas, a diferença entre ambas ocorre pelo fato de que a bicamada possui 2 átomos na célula unitária a mais que a monocamada possui, como mostrado na seção sobre a anatomia da bicamada.

Figura 12 – Estrutura de bandas no contorno da primeira zona de Brillouin, como o auto-valor $E(\mathbf{k})$ da equação $\det\{\mathcal{H}_{TB} - E(\mathbf{k})\mathcal{S}\} = 0$, onde \mathcal{H}_{TB} é dada na Eq.(2.63) e \mathcal{S} na Eq.(2.26), com os parâmetros $E_{\tilde{A}} = E_{\tilde{B}} = E_A = E_B = 0\text{eV}$, para a-) $s_0 = s_1 = 0$, b-) $s_0 = 0.065$ e $s_1 = 2s_0$ e c-) $s_0 = s_1 = 0.1$.



Nos vales K e K' , vemos que há um par de bandas (condução e valência) que se tocam. Isso se deve ao acoplamento fortíssimo entre camadas gerado pelo *hopping* ortogonal γ_1 , presente na teoria de primeira e segunda quantização do *tight-binding*. Esse acoplamento é devido aos orbitais dímeros A e \tilde{B} (McCann e Koshino, 2013), vistos anteriormente. Outro aspecto que podemos ver, analisando o gráfico Fig.12, é o fato de que quando fazemos um parâmetros de *overlap* s_0 (Eq.(2.17)) e s_1 (Eq.(2.18)) não nulos, dependendo de sua intensidade, temos um aumento da distância entre as bandas, com destaque para o ponto Γ , onde vemos uma acentuação da banda de condução ao variarmos os parâmetro de *overlap*.

Ao fazermos s_0 e s_1 não nulos, implica não ortogonalidade entre os orbitais AB e $\tilde{A}\tilde{B}$, para s_0 e entre $A\tilde{B}$, para s_1 . Com um destaque para s_1 , seu calculo é feito envolvendo os chamados orbitais dímeros A e \tilde{B} , vistos anteriormente na análise da estrutura da BLG, equanto que os não dímeros $\tilde{A}\tilde{B}$, $\tilde{A}A$ ou $\tilde{B}B$ não possui nenhuma contribuição. Acontece que, ao aumentarmos a projeção de um orbital dímero sobre outro, estaremos fortalecendo as ligações de Van der Waals entre as camadas, fazendo com as bandas de energia se afastem entre si.

Uma maneira de simplificar o estudo da teoria de bandas na bicamada é utilizando o modelo contínuo, dentro das quatro bandas e de uma forma mais simples, chegando em um modelo de duas bandas. Veremos com mais detalhes nas próximas seções.

2.4 Modelo contínuo: Quatro bandas

Esta presente seção e a próxima se dedicará à estudar formas mais aproximativas para o Hamiltoniano *tight-binding* dado na Eq.(2.63). Tal aproximação consiste em tomarmos o fator de estrutura $f(\mathbf{k})$ até a primeira ordem usando séries de Taylor em uma situação onde estamos trabalho com baixas energias.

Sendo o Hamiltoniano \mathcal{H} dado por:

$$\mathcal{H}_{TB} = \begin{pmatrix} E_{\bar{A}} & -\gamma_0 f(\mathbf{k}) & \gamma_4 f(\mathbf{k}) & -\gamma_3 f^*(\mathbf{k}) \\ -\gamma_0 f^*(\mathbf{k}) & E_{\bar{B}} & \gamma_1 & \gamma_4 f(\mathbf{k}) \\ \gamma_4 f^*(\mathbf{k}) & \gamma_1 & E_A & -\gamma_0 f(\mathbf{k}) \\ -\gamma_3 f(\mathbf{k}) & \gamma_4 f^*(\mathbf{k}) & -\gamma_0 f^*(\mathbf{k}) & E_B \end{pmatrix} \quad (2.64)$$

Com o fator de estrutura $f(\mathbf{k})$, em função dos vetores primitivos δ_n , sendo dado da forma:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}) &= \sum_n e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_n} \\ &= e^{ik_y a_0} + e^{ia_0 \left(-k_x \frac{\sqrt{3}}{2} - k_y \frac{1}{2} \right)} + e^{ia_0 \left(k_x \frac{\sqrt{3}}{2} - k_y \frac{1}{2} \right)} \\ &= e^{ik_y a_0} + e^{-ik_y \frac{a_0}{2}} \left(e^{ik_x a_0 \frac{\sqrt{3}}{2}} + e^{-ik_x a_0 \frac{\sqrt{3}}{2}} \right) \\ &= e^{ik_y a_0} + 2e^{-\frac{ik_y a_0}{2}} \cos \left(\frac{k_x a_0 \sqrt{3}}{2} \right) \end{aligned} \quad (2.65)$$

Tendo em a forma apresentada na Eq.(2.65), a aproximação à ser feita consiste em tomar a região dos vales $\mathbf{K}_\xi = \xi(K_0, 0)$, onde $K_0 = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0}$, com $\xi = 1$ para o vale K e $\xi = -1$, para o vale K' . Logo, a aproximação pode ser dado por:

$$f(\mathbf{k}) \approx f(\mathbf{K}_\xi) + \nabla f \Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{K}_\xi} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{K}_\xi) \quad (2.66)$$

Com a Eq.(2.66), a aproximação para $f(\mathbf{k})$ pode ser dada:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}) &\approx 1 + 2 \cos \left(\frac{\xi K_0 a_0 \sqrt{3}}{2} \right) \\ &+ \left[-a_0 \sqrt{3} \sin \left(\frac{\xi K_0 a_0 \sqrt{3}}{2} \right), ia_0 \left[1 - \cos \left(\frac{\xi K_0 a_0 \sqrt{3}}{2} \right) \right] \right] \cdot (k_x - \xi K_0, k_y) \end{aligned}$$

Fazendo as devidas simplificações, temos:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}) &\approx 1 + 2 \cos \left(\frac{\xi K_0 a_0 \sqrt{3}}{2} \right) - a_0 \sqrt{3} (k_x - \xi K_0) \sin \left(\frac{\xi K_0 a_0 \sqrt{3}}{2} \right) \\ &+ ik_y a_0 \left[1 - \cos \left(\frac{\xi K_0 a_0 \sqrt{3}}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.67)$$

Substituindo K_0 , temos:

$$f(\mathbf{k}) \approx 1 + 2 \cos\left(\xi \frac{2\pi}{3}\right) - a_0 \sqrt{3}(k_x - \xi K_0) \sin\left(\xi \frac{2\pi}{3}\right) + ik_y a_0 \left[1 - \cos\left(\xi \frac{2\pi}{3}\right)\right] \quad (2.68)$$

sendo que $\cos(\xi x) = \cos(x)$ e $\sin(\xi x) = \xi \sin(x)$, temos:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}) &\approx 1 - 1 - \xi a_0 \frac{3}{2}(k_x - \xi K_0) + ik_y a_0 \left[1 + \frac{1}{2}\right] \\ &\approx -\xi a_0 \frac{3}{2}(k_x - \xi K_0) + \frac{3i}{2} k_y a_0 \\ &\approx -\frac{3a_0}{2} \left[\xi(k_x - \xi K_0) - ik_y\right] \end{aligned} \quad (2.69)$$

Tomando um vetor $\mathbf{q} = (q_x, q_y) = (k_x - \xi K_0, k_y)$ próximo ao vale \mathbf{K}_ξ , temos que $f(\mathbf{k})$ em uma aproximação de primeira ordem pode ser dado por:

$$f(\mathbf{k}) \approx -\frac{3a_0}{2}(\xi q_x - iq_y) = -\frac{3a_0}{2\hbar} \pi^\dagger \quad (2.70)$$

onde $\pi = (\xi p_x + ip_y)$, $\pi^\dagger = (\xi p_x - ip_y)$. Com isso, o hamiltoniano Eq.(2.63) pode ser representado por:

$$\mathcal{H}_{TB}^{app} = \begin{pmatrix} E_{\tilde{A}} & v_0 \pi^\dagger & -v_4 \pi^\dagger & v_3 \pi \\ v_0 \pi & E_{\tilde{B}} & \gamma_1 & -v_4 \pi^\dagger \\ -v_4 \pi & \gamma_1 & E_A & v_0 \pi^\dagger \\ v_3 \pi^\dagger & -v_4 \pi & v_0 \pi & E_B \end{pmatrix} \quad (2.71)$$

onde $v_i = \frac{3a_0 \gamma_i}{2\hbar}$. Esse é o chamado hamiltoniano do modelo contínuo de 4 bandas para a BLG, com a característica de ser para baixas energias. Com a aproximação de $f(\mathbf{k})$ na Eq.(2.70), a matriz de *overlap* pode ser dada por:

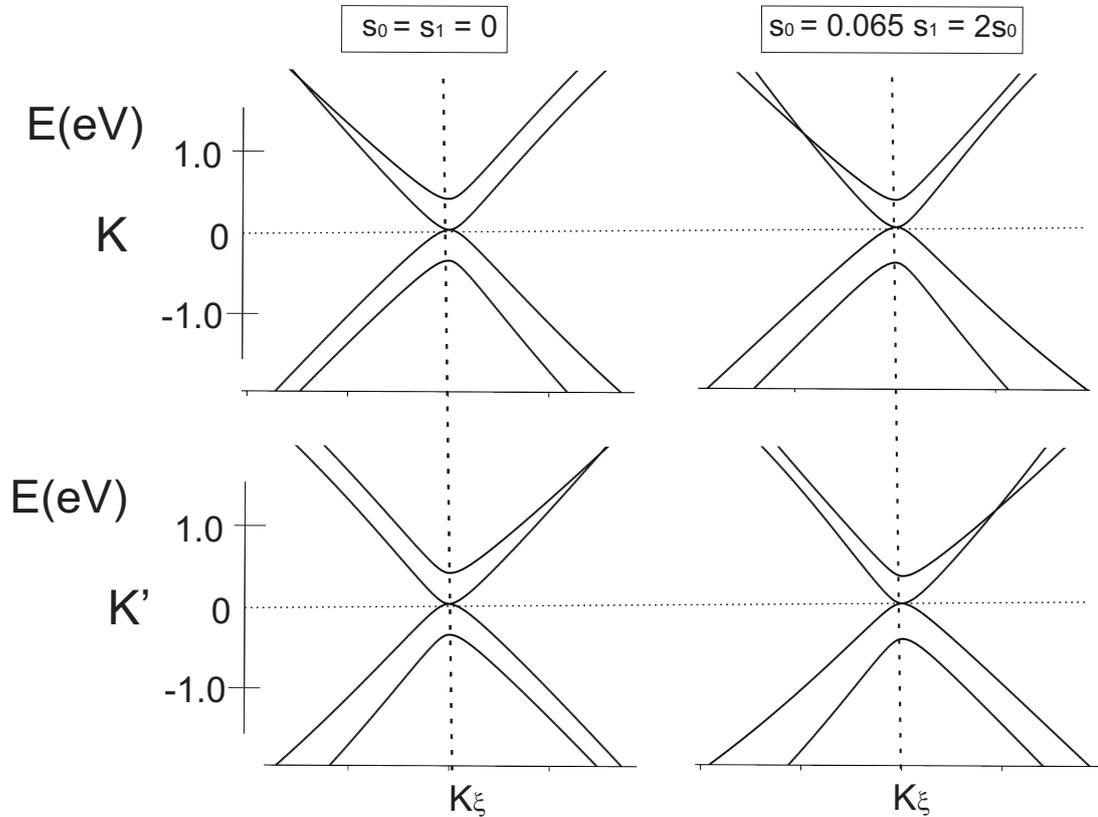
$$\mathcal{S}_{app} = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{3a_0 s_0}{2\hbar} \pi^\dagger & 0 & 0 \\ -\frac{3a_0 s_0}{2\hbar} \pi & 1 & s_1 & 0 \\ 0 & s_1 & 1 & -\frac{3a_0 s_0}{2\hbar} \pi^\dagger \\ 0 & 0 & -\frac{3a_0 s_0}{2\hbar} \pi & 1 \end{pmatrix} \quad (2.72)$$

Com isso, a estrutura de bandas para essa aproximação, através da equação $\det[\mathcal{H}_{TB}^{app} - E(\mathbf{k})\mathcal{S}_{app}] = 0$. Fazendo $E_{\tilde{A}} = E_{\tilde{B}} = \frac{U}{2}$ e $E_A = E_B = -\frac{U}{2}$, onde U consiste na diferença de energia entre as camadas $U = \frac{1}{2}[(E_{\tilde{A}} + E_{\tilde{B}}) - (E_A + E_B)]$. As energias da estrutura de bandas pode ser dados pela a equação(McCann e Koshino, 2013):

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\frac{\gamma_1^2}{2} + \frac{U^2}{4} + \left(v_0^2 + \frac{v_3^2}{2}\right) p^2 + (-1)^\alpha \sqrt{\Gamma}} \quad (2.73)$$

para $s_0 = s_1 = 0$, $\alpha = 1, 2$ e $\Gamma = \frac{1}{4}(\gamma_1^2 - v_3^2 p^2)^2 + v_0^2 p^2 (\gamma_1^2 + U^2 + v_3^2 p^2) + 2\xi \gamma_1 v_3 v_0^2 p^3 \cos(3\phi)$, em que $p = \hbar|\mathbf{k}|$ e ϕ o ângulo de \mathbf{k} . A Eq.(2.73) está relacionada com a Fig.13 para $s_0 = s_1 = 0$, enquanto que $s_0 = 0.065$ e $s_1 = 2s_0$ é obtida numericamente. Percebe-se que o parâmetro α juntamente com \pm em Eq.(2.73) resulta nas 4 bandas proposto no modelo com o hamiltoniano em Eq.(2.71).

Figura 13 – Estrutura de bandas nas proximidades dos vales \mathbf{K}_ξ na BLG, com $\xi = 1$ para o vale K e $\xi = -1$ para o vale K' , obtido como o auto-valor $E(\mathbf{k})$ da equação $\det[\mathcal{H}_{TB}^{app} - E(\mathbf{k})\mathcal{S}_{app}] = 0$, onde \mathcal{H}_{TB}^{app} é dada na Eq.(2.71) e \mathcal{S}_{app} na Eq.(2.72), com $U = 0 eV$ para a-) $s_0 = s_1 = 0$ (Eq.(2.73)), b-) $s_0 = 0.065$ e $s_1 = 2s_0$



Analisando as estruturas de bandas na Fig.13, vemos que os efeitos semelhantes ao da Fig.12 (como as 4 bandas presentes) ao fazermos s_0 e s_1 não nulos, implicando no afastamento das bandas até mesmo para baixas energias. Além disso, percebemos a ausência de GAP entre as bandas e temos que as mesmas possuem um comportamento parabólico para energias ainda mais baixas. Isso está, claramente, em consonância com a Eq.(2.73) em que, ainda que não dependa dos parâmetros de *overlap*, podemos ver uma dependência do tipo $E(\mathbf{k}) \propto p^2$.

Outro aspecto a se analisar consiste em assimetria entre os vales K e K' , onde podemos perceber que um é o "espelho" do outro. Isso será de extrema importância quando estivermos

analisando o efeito *Trigonal warping* no Modelo de 2 bandas na próxima seção.

2.5 Modelo contínuo: Duas bandas

O Modelo contínuo de duas bandas para a BLG consiste em trabalharmos em uma aproximação de primeira ordem de $f(\mathbf{k})$, assim como o modelo de quatro de bandas, mas apenas considerando os orbitais não dímeros $\tilde{A}B$. Veremos que, através deste método, teremos simplificações significativas no hamiltoniano final. Tendo o hamiltoniano de 4 bandas em Eq.(2.71) e seu *overlap* em Eq.(2.72), escrevemos a equação $\mathcal{H}_{TB}^{app} \Psi^{\mathbf{k}} = E(\mathbf{k}) \mathcal{S}_{app} \Psi^{\mathbf{k}}$ na forma:

$$\begin{pmatrix} \frac{U}{2} & v_0 \pi^\dagger & -v_4 \pi^\dagger & v_3 \pi \\ v_0 \pi & \frac{U}{2} & \gamma_1 & -v_4 \pi^\dagger \\ -v_4 \pi & \gamma_1 & -\frac{U}{2} & v_0 \pi^\dagger \\ v_3 \pi^\dagger & -v_4 \pi & v_0 \pi & -\frac{U}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{\tilde{A}} \\ \Psi_{\tilde{B}} \\ \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} = E(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{\tilde{A}} \\ \Psi_{\tilde{B}} \\ \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} = E(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} \Psi_{\tilde{A}} \\ \Psi_{\tilde{B}} \\ \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} \quad (2.74)$$

considerando $s_0 = 0$ e $s_1 = 0$ (ortogonalidade entre os orbitais) e a distinção entre energias localizadas nas duas camadas: $E_{\tilde{A}} = E_{\tilde{B}} = \frac{U}{2}$ e $E_A = E_B = -\frac{U}{2}$. O lado direito da Eq.(2.74) pode ser dado por:

$$\begin{pmatrix} \frac{U}{2} & v_0 \pi^\dagger & -v_4 \pi^\dagger & v_3 \pi \\ v_0 \pi & \frac{U}{2} & \gamma_1 & -v_4 \pi^\dagger \\ -v_4 \pi & \gamma_1 & -\frac{U}{2} & v_0 \pi^\dagger \\ v_3 \pi^\dagger & -v_4 \pi & v_0 \pi & -\frac{U}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{\tilde{A}} \\ \Psi_{\tilde{B}} \\ \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{U}{2} \Psi_{\tilde{A}} + v_0 \pi^\dagger \Psi_{\tilde{B}} - v_4 \pi^\dagger \Psi_A + v_3 \pi \Psi_B \\ v_0 \pi \Psi_{\tilde{A}} + \frac{U}{2} \Psi_{\tilde{B}} + \gamma_1 \Psi_A - v_4 \pi^\dagger \Psi_B \\ -v_4 \pi \Psi_{\tilde{A}} + \gamma_1 \Psi_{\tilde{B}} - \frac{U}{2} \Psi_A + v_0 \pi^\dagger \Psi_B \\ v_3 \pi^\dagger \Psi_{\tilde{A}} - v_4 \pi \Psi_{\tilde{B}} + v_0 \pi \Psi_A - \frac{U}{2} \Psi_B \end{pmatrix} \quad (2.75)$$

Igualando a Eq.(2.75) ao lado direito da Eq.(2.74), temos:

$$\begin{pmatrix} \frac{U}{2} \Psi_{\tilde{A}} + v_0 \pi^\dagger \Psi_{\tilde{B}} - v_4 \pi^\dagger \Psi_A + v_3 \pi \Psi_B \\ v_0 \pi \Psi_{\tilde{A}} + \frac{U}{2} \Psi_{\tilde{B}} + \gamma_1 \Psi_A - v_4 \pi^\dagger \Psi_B \\ -v_4 \pi \Psi_{\tilde{A}} + \gamma_1 \Psi_{\tilde{B}} - \frac{U}{2} \Psi_A + v_0 \pi^\dagger \Psi_B \\ v_3 \pi^\dagger \Psi_{\tilde{A}} - v_4 \pi \Psi_{\tilde{B}} + v_0 \pi \Psi_A - \frac{U}{2} \Psi_B \end{pmatrix} = E(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} \Psi_{\tilde{A}} \\ \Psi_{\tilde{B}} \\ \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} = E(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} \Psi_{\tilde{A}} \\ 0 \\ 0 \\ \Psi_B \end{pmatrix} \quad (2.76)$$

Tendo as seguintes equações obtida de Eq.(2.76):

$$\frac{U}{2} \psi_{\tilde{A}} + v_0 \pi^\dagger \psi_{\tilde{B}} - v_4 \pi^\dagger \psi_A + v_3 \pi \psi_B = E(\mathbf{k}) \psi_{\tilde{A}} \quad (2.77a)$$

$$v_0 \pi \psi_{\tilde{A}} + \frac{U}{2} \psi_{\tilde{B}} + \gamma_1 \psi_A - v_4 \pi^\dagger \psi_B = 0 \quad (2.77b)$$

$$-v_4 \pi \psi_{\tilde{A}} + \gamma_1 \psi_{\tilde{B}} - \frac{U}{2} \psi_A + v_0 \pi^\dagger \psi_B = 0 \quad (2.77c)$$

$$v_3 \pi^\dagger \psi_{\tilde{A}} - v_4 \pi \psi_{\tilde{B}} + v_0 \pi \psi_A - \frac{U}{2} \psi_B = E(\mathbf{k}) \psi_B \quad (2.77d)$$

Por Eq.(2.77b) e Eq.(2.77c), temos que $\psi_{\tilde{B}}$ e ψ_A é dado por:

$$\psi_{\tilde{B}} = -\frac{2}{U} \left[v_0 \pi \psi_{\tilde{A}} + \gamma_1 \psi_A - v_4 \pi^\dagger \psi_B \right] \quad (2.78a)$$

$$\psi_A = \frac{2}{U} \left[v_0 \pi^\dagger \psi_B + \gamma_1 \psi_{\tilde{B}} - v_4 \pi \psi_{\tilde{A}} \right] \quad (2.78b)$$

Substituindo Eq.(2.78b) em Eq.(2.78a), temos que $\psi_{\tilde{B}}$ é:

$$\begin{aligned} \psi_{\tilde{B}} &= -\frac{2}{U} \left[v_0 \pi \psi_{\tilde{A}} + \gamma_1 \psi_A - v_4 \pi^\dagger \psi_B \right] \\ \psi_{\tilde{B}} &= -\frac{2}{U} \left[v_0 \pi \psi_{\tilde{A}} + \gamma_1 \frac{2}{U} \left[v_0 \pi^\dagger \psi_B + \gamma_1 \psi_{\tilde{B}} - v_4 \pi \psi_{\tilde{A}} \right] - v_4 \pi^\dagger \psi_B \right] \\ \psi_{\tilde{B}} &= -\frac{2}{U} \left[v_0 \pi \psi_{\tilde{A}} + \frac{2\gamma_1 v_0}{U} \pi^\dagger \psi_B + \frac{2\gamma_1^2}{U} \psi_{\tilde{B}} - \frac{2\gamma_1 v_4}{U} \pi \psi_{\tilde{A}} - v_4 \pi^\dagger \psi_B \right] \\ \left(1 + \frac{4\gamma_1^2}{U^2} \right) \psi_{\tilde{B}} &= -\frac{2}{U} \left[v_0 \pi \psi_{\tilde{A}} + \frac{2\gamma_1 v_0}{U} \pi^\dagger \psi_B - \frac{2\gamma_1 v_4}{U} \pi \psi_{\tilde{A}} - v_4 \pi^\dagger \psi_B \right] \\ \psi_{\tilde{B}} &= -\frac{\frac{2}{U} \left[v_0 \pi \psi_{\tilde{A}} + \frac{2\gamma_1 v_0}{U} \pi^\dagger \psi_B - \frac{2\gamma_1 v_4}{U} \pi \psi_{\tilde{A}} - v_4 \pi^\dagger \psi_B \right]}{\frac{U^2 + 4\gamma_1^2}{U^2}} \\ \psi_{\tilde{B}} &= -\frac{2U}{U^2 + 4\gamma_1^2} \left[v_0 \pi \psi_{\tilde{A}} + \frac{2\gamma_1 v_0}{U} \pi^\dagger \psi_B - \frac{2\gamma_1 v_4}{U} \pi \psi_{\tilde{A}} - v_4 \pi^\dagger \psi_B \right] \end{aligned} \quad (2.79)$$

Assumindo que $\gamma_0, \gamma_1 \gg |U|$, ou seja, um acoplamento muito forte entre camadas e os átomos nas camadas (McCann e Koshino, 2013), temos que $\psi_{\tilde{B}}$ é:

$$\psi_{\tilde{B}} \approx -\frac{U}{2\gamma_1^2} \left[\left(v_0 \pi - \frac{2\gamma_1 v_4}{U} \pi \right) \psi_{\tilde{A}} + \left(\frac{2\gamma_1 v_0}{U} \pi^\dagger - v_4 \pi^\dagger \right) \psi_B \right] \quad (2.80)$$

Da mesma forma que para $\psi_{\bar{B}}$, substituímos, agora Eq.(2.78a) em Eq.(2.78b) e descobrimos ψ_A .

$$\begin{aligned}
\psi_A &= \frac{2}{U} \left[v_0 \pi^\dagger \psi_B + \gamma_1 \psi_{\bar{B}} - v_4 \pi \psi_{\bar{A}} \right] \\
\psi_A &= \frac{2}{U} \left[v_0 \pi^\dagger \psi_B - \gamma_1 \frac{2}{U} \left[v_0 \pi \psi_{\bar{A}} + \gamma_1 \psi_A - v_4 \pi^\dagger \psi_B \right] - v_4 \pi \psi_{\bar{A}} \right] \\
\psi_A &= \frac{2}{U} \left[v_0 \pi^\dagger \psi_B - \frac{2\gamma_1 v_0}{U} \pi \psi_{\bar{A}} - \frac{2\gamma_1^2}{U} \psi_A + \frac{2\gamma_1 v_4}{U} \pi^\dagger \psi_B - v_4 \pi \psi_{\bar{A}} \right] \\
\left(1 + \frac{4\gamma_1^2}{U^2} \right) \psi_A &= \frac{2}{U} \left[v_0 \pi^\dagger \psi_B - \frac{2\gamma_1 v_0}{U} \pi \psi_{\bar{A}} + \frac{2\gamma_1 v_4}{U} \pi^\dagger \psi_B - v_4 \pi \psi_{\bar{A}} \right] \\
\psi_A &= \frac{\frac{2}{U} \left[v_0 \pi^\dagger \psi_B - \frac{2\gamma_1 v_0}{U} \pi \psi_{\bar{A}} + \frac{2\gamma_1 v_4}{U} \pi^\dagger \psi_B - v_4 \pi \psi_{\bar{A}} \right]}{\frac{U^2 + 4\gamma_1^2}{U^2}} \\
\psi_A &= \frac{2U}{U^2 + 4\gamma_1^2} \left[v_0 \pi^\dagger \psi_B - \frac{2\gamma_1 v_0}{U} \pi \psi_{\bar{A}} + \frac{2\gamma_1 v_4}{U} \pi^\dagger \psi_B - v_4 \pi \psi_{\bar{A}} \right] \tag{2.81}
\end{aligned}$$

Da mesma forma que em $\psi_{\bar{B}}$ Eq.(2.80), fazemos $\gamma_0, \gamma_1 \gg |U|$. Logo, ψ_A é:

$$\psi_A \approx \frac{U}{2\gamma_1^2} \left[- \left(v_4 \pi + \frac{2\gamma_1 v_0}{U} \pi \right) \psi_{\bar{A}} + \left(\frac{2\gamma_1 v_4}{U} \pi^\dagger + v_0 \pi^\dagger \right) \psi_B \right] \tag{2.82}$$

Logo, tomando $\psi_{\bar{B}}$ Eq.(2.80) e ψ_A Eq.(2.82), substituindo nas equações Eq.(2.77a)-Eq.(2.77d).

Tendo que Eq.(2.77b) e Eq.(2.77c) são nulas, só iremos fazer os cálculos em Eq.(2.77a) e

Eq.(2.77d). Temos que Eq.(2.77a) pode ser dado por:

$$\begin{aligned}
E(\mathbf{k}) \psi_{\bar{A}} &= \frac{U}{2} \psi_{\bar{A}} + v_0 \pi^\dagger \psi_{\bar{B}} - v_4 \pi^\dagger \psi_A + v_3 \pi \psi_B \\
E(\mathbf{k}) \psi_{\bar{A}} &= \frac{U}{2} \psi_{\bar{A}} - \frac{U v_0}{2\gamma_1^2} \pi^\dagger \left[\left(v_0 \pi - \frac{2\gamma_1 v_4}{U} \pi \right) \psi_{\bar{A}} + \left(\frac{2\gamma_1 v_0}{U} \pi^\dagger - v_4 \pi^\dagger \right) \psi_B \right] \\
&\quad - \frac{U v_4}{2\gamma_1^2} \pi^\dagger \left[- \left(v_4 \pi + \frac{2\gamma_1 v_0}{U} \pi \right) \psi_{\bar{A}} + \left(\frac{2\gamma_1 v_4}{U} \pi^\dagger + v_0 \pi^\dagger \right) \psi_B \right] + v_3 \pi \psi_B \\
E(\mathbf{k}) \psi_{\bar{A}} &= \frac{U}{2} \psi_{\bar{A}} - \frac{U}{2\gamma_1^2} v_0^2 \pi^\dagger \pi \psi_{\bar{A}} + \frac{v_0 v_4}{\gamma_1} \pi^\dagger \pi \psi_{\bar{A}} - \frac{v_0^2}{\gamma_1} (\pi^\dagger)^2 \psi_B + \frac{U v_4 v_0}{2\gamma_1^2} (\pi^\dagger)^2 \psi_B \\
&\quad + \frac{U}{2\gamma_1^2} v_4^2 \pi^\dagger \pi \psi_{\bar{A}} + \frac{v_0 v_4}{\gamma_1} \pi^\dagger \pi \psi_{\bar{A}} - \frac{U v_4 v_0}{2\gamma_1^2} (\pi^\dagger)^2 \psi_B - \frac{v_4^2}{\gamma_1} (\pi^\dagger)^2 \psi_B + v_3 \pi \psi_B \tag{2.83}
\end{aligned}$$

Simplificando a Eq.(2.83), sendo que $v_4^2 \ll v_0^2$ e sabendo que $\gamma_1 \gg v_0 p$ (McCann e Koshino, 2013), temos:

$$E(\mathbf{k}) \psi_{\bar{A}} \approx \frac{U}{2} \psi_{\bar{A}} - \frac{U}{2\gamma_1^2} v_0^2 \pi^\dagger \pi \psi_{\bar{A}} + \frac{v_0 v_4}{\gamma_1} \pi^\dagger \pi \psi_{\bar{A}} - \frac{v_0^2}{\gamma_1} (\pi^\dagger)^2 \psi_B + \frac{v_0 v_4}{\gamma_1} \pi^\dagger \pi \psi_{\bar{A}} + v_3 \pi \psi_B$$

Colecionando os termos, temos que, de forma simplificada, Eq.(2.83) é:

$$\frac{U}{2} \left(1 - \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2} \pi^\dagger \pi \right) \psi_{\bar{A}} + \frac{2v_0 v_4}{\gamma_1} \pi^\dagger \pi \psi_{\bar{A}} - \frac{v_0^2}{\gamma_1} (\pi^\dagger)^2 \psi_B + v_3 \pi \psi_B \approx E(\mathbf{k}) \psi_{\bar{A}} \tag{2.84}$$

Seguindo os mesmo passos, a equação Eq.(2.77d) pode ser dado por:

$$\begin{aligned}
E(\mathbf{k})\psi_B &= v_3\pi^\dagger\psi_{\tilde{A}} - v_4\pi\psi_{\tilde{B}} + v_0\pi\psi_A - \frac{U}{2}\psi_B \\
E(\mathbf{k})\psi_B &= v_3\pi^\dagger\psi_{\tilde{A}} + \frac{Uv_4}{2\gamma_1^2}\pi \left[\left(v_0\pi - \frac{2\gamma_1v_4}{U}\pi \right)\psi_{\tilde{A}} + \left(\frac{2\gamma_1v_0}{U}\pi^\dagger - v_4\pi^\dagger \right)\psi_B \right] \\
&+ \frac{Uv_0}{2\gamma_1^2}\pi \left[- \left(v_4\pi + \frac{2\gamma_1v_0}{U}\pi \right)\psi_{\tilde{A}} + \left(\frac{2\gamma_1v_4}{U}\pi^\dagger + v_0\pi^\dagger \right)\psi_B \right] - \frac{U}{2}\psi_B \\
E(\mathbf{k})\psi_B &= v_3\pi^\dagger\psi_{\tilde{A}} + \frac{Uv_4v_0}{2\gamma_1^2}(\pi)^2\psi_{\tilde{A}} - \frac{v_4^2}{\gamma_1}(\pi)^2\psi_{\tilde{A}} + \frac{v_0v_4}{\gamma_1}\pi\pi^\dagger\psi_B - \frac{U}{2\gamma_1^2}v_4^2\pi\pi^\dagger\psi_B \\
&- \frac{Uv_4v_0}{2\gamma_1^2}(\pi)^2\psi_{\tilde{A}} - \frac{v_0^2}{\gamma_1}(\pi)^2\psi_{\tilde{A}} + \frac{U}{2\gamma_1^2}v_0^2\pi\pi^\dagger\psi_B + \frac{v_0v_4}{\gamma_1}\pi\pi^\dagger\psi_B - \frac{U}{2}\psi_B \quad (2.85)
\end{aligned}$$

Com isso, da mesma forma que Eq.(2.83), sendo $v_4^2 \ll v_0^2$ e sabendo que $\gamma_1 \gg v_0\rho$ (McCann e Koshino, 2013), temos:

$$E(\mathbf{k})\psi_B \approx v_3\pi^\dagger\psi_{\tilde{A}} + \frac{2v_0v_4}{\gamma_1}\pi\pi^\dagger\psi_B - \frac{v_0^2}{\gamma_1}(\pi)^2\psi_{\tilde{A}} + \frac{U}{\gamma_1^2}v_0^2\pi\pi^\dagger\psi_B - \frac{U}{2}\psi_B$$

Colecionando os termos, temos que, de forma simplificada, Eq.(2.85) é:

$$v_3\pi^\dagger\psi_{\tilde{A}} - \frac{v_0^2}{\gamma_1}(\pi)^2\psi_{\tilde{A}} + \frac{2v_0v_4}{\gamma_1}\pi\pi^\dagger\psi_B + \frac{U}{2}\left(-1 + \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2}\pi\pi^\dagger\right)\psi_B \approx E(\mathbf{k})\psi_B \quad (2.86)$$

Tomando as equações Eq.(2.84) e Eq.(2.86), podemos criar um sistema de equações da forma:

$$\begin{cases} \frac{U}{2}\left(1 - \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2}\pi^\dagger\pi\right)\psi_{\tilde{A}} + \frac{2v_0v_4}{\gamma_1}\pi^\dagger\pi\psi_{\tilde{A}} - \frac{v_0^2}{\gamma_1}(\pi^\dagger)^2\psi_B + v_3\pi\psi_B = E(\mathbf{k})\psi_{\tilde{A}} \\ v_3\pi^\dagger\psi_{\tilde{A}} - \frac{v_0^2}{\gamma_1}(\pi)^2\psi_{\tilde{A}} + \frac{2v_0v_4}{\gamma_1}\pi\pi^\dagger\psi_B + \frac{U}{2}\left(-1 + \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2}\pi\pi^\dagger\right)\psi_B = E(\mathbf{k})\psi_B \end{cases} \quad (2.87)$$

Podemos representar a Eq.(2.87) em uma forma matricial da forma:

$$\begin{aligned}
&\left\{ -\frac{v_0^2}{\gamma_1} \begin{pmatrix} 0 & (\pi^\dagger)^2 \\ (\pi)^2 & 0 \end{pmatrix} + v_3 \begin{pmatrix} 0 & \pi \\ \pi^\dagger & 0 \end{pmatrix} + \frac{2v_0v_4}{\gamma_1} \begin{pmatrix} \pi^\dagger\pi & 0 \\ 0 & \pi\pi^\dagger \end{pmatrix} \right. \\
&+ \left. \frac{U}{2} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2} \begin{pmatrix} \pi^\dagger\pi & 0 \\ 0 & -\pi\pi^\dagger \end{pmatrix} \right] \right\} \begin{pmatrix} \psi_{\tilde{A}} \\ \psi_B \end{pmatrix} = E(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} \psi_{\tilde{A}} \\ \psi_B \end{pmatrix} \quad (2.88)
\end{aligned}$$

No lado direito da Eq.(2.88), podemos associa-lo à um hamiltoniano \hat{H}_2 do tipo:

$$\hat{H}_2 = \hat{h}_0 + \hat{h}_3 + \hat{h}_4 + \hat{h}_U \quad (2.89)$$

onde os operadores \hat{h}_0 , \hat{h}_3 , \hat{h}_4 e \hat{h}_U são dados por:

$$\hat{h}_0 = -\frac{v_0^2}{\gamma_1} \begin{pmatrix} 0 & (\pi^\dagger)^2 \\ (\pi)^2 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.90a)$$

$$\hat{h}_3 = v_3 \begin{pmatrix} 0 & \pi \\ \pi^\dagger & 0 \end{pmatrix} \quad (2.90b)$$

$$\hat{h}_4 = \frac{2v_0v_4}{\gamma_1} \begin{pmatrix} \pi^\dagger\pi & 0 \\ 0 & \pi\pi^\dagger \end{pmatrix} \quad (2.90c)$$

$$\hat{h}_U = \frac{U}{2} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2} \begin{pmatrix} \pi^\dagger\pi & 0 \\ 0 & -\pi\pi^\dagger \end{pmatrix} \right] \quad (2.90d)$$

A Eq.(2.89) consiste no Hamiltoniano de duas bandas final. Vemos que tal hamiltoniano de dimensionalidade 2×2 , que consiste na consideração somente dos orbitais não dímeros $\tilde{A}B$, que implica no vetor coluna $(\psi_{\tilde{A}} \ \psi_B)^T$ (McCann e Koshino, 2013). Pelo o fato de termos uma matriz de ordem 2, quando resolvemos sua equação de auto-valor na forma $\det\{\hat{H}_2 - E(\mathbf{k})\mathbb{I}\} = 0$ e obtemos apenas dois autovalores possíveis, implicando nas duas bandas. A escrita do hamiltoniano Eq.(2.89) pode ficar ainda mais simplificada uma vez que podemos que escreve-lo na forma $\hat{S} \cdot \sigma$, onde σ são as matrizes de Pauli e \hat{S} um operador vetorial. Veremos que essa forma nos permite calcular as duas bandas e investigamos suas propriedades.

2.5.1 Hamiltoniano de duas bandas em termos de matrizes de Pauli ($\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$)

Baseado nas equações Eq.(2.90a)-Eq.(2.90d), sabendo que $\pi = \xi p_x + ip_y$, temos que os termos $(\pi)^2$, $(\pi^\dagger)^2$, $\pi^\dagger\pi$ e $\pi\pi^\dagger$, sabendo que p_x comuta com p_y , são dados por:

$$\begin{aligned} (\pi)^2 &= (\xi p_x + ip_y)(\xi p_x + ip_y) \\ &= \xi^2 p_x^2 + i\xi p_x p_y + i\xi p_y p_x - p_y^2 \\ &= p_x^2 - p_y^2 + 2i\xi p_x p_y \end{aligned} \quad (2.91)$$

onde $\xi^2 = 1$. O termo $(\pi^\dagger)^2$ é simplesmente o complexo conjugado de $(\pi)^2$ na Eq.(2.91), da forma:

$$(\pi^\dagger)^2 = p_x^2 - p_y^2 - 2i\xi p_x p_y \quad (2.92)$$

O termo $\pi^\dagger \pi$ pode ser dado por:

$$\begin{aligned}
 \pi^\dagger \pi &= (\xi p_x - i p_y)(\xi p_x + i p_y) \\
 &= \xi^2 p_x^2 + i \xi p_x p_y - i \xi p_y p_x + p_y^2 \\
 &= p_x^2 + p_y^2 \\
 &= p^2 = \pi \pi^\dagger
 \end{aligned} \tag{2.93}$$

onde, usando o complexo conjugado, vemos que $\pi^\dagger \pi = \pi \pi^\dagger$, onde $p = |\mathbf{p}|$. Com isso, substituindo os termos obtidos, podemos reescrever os operadores Eq.(2.90a)-Eq.(2.90d), começando por \hat{h}_0 , na forma:

$$\begin{aligned}
 \hat{h}_0 &= -\frac{v_0^2}{\gamma_1} \begin{pmatrix} 0 & p_x^2 - p_y^2 - 2i\xi p_x p_y \\ p_x^2 - p_y^2 + 2i\xi p_x p_y & 0 \end{pmatrix} \\
 \hat{h}_0 &= -\frac{v_0^2}{\gamma_1} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} (p_x^2 - p_y^2) + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} 2\xi p_x p_y \right]
 \end{aligned} \tag{2.94}$$

em que, usando as matrizes de Pauli, pode ser escrito de forma mais simples como:

$$\hat{h}_0 = -\frac{v_0^2}{\gamma_1} [(p_x^2 - p_y^2)\sigma_x + 2\xi p_x p_y \sigma_y] \tag{2.95}$$

O operador \hat{h}_3 Eq.(2.90b) pode ser escrito na forma:

$$\begin{aligned}
 \hat{h}_3 &= v_3 \begin{pmatrix} 0 & \xi p_x + i p_y \\ \xi p_x - i p_y & 0 \end{pmatrix} \\
 &= v_3 \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \xi p_x - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} p_y \right]
 \end{aligned} \tag{2.96}$$

sendo dado, com o uso das matrizes de Pauli, por:

$$\hat{h}_3 = v_3 (\xi p_x \sigma_x - p_y \sigma_y) \tag{2.97}$$

O operador \hat{h}_4 Eq.(2.90c) pode ser escrito na forma:

$$\begin{aligned}
 \hat{h}_4 &= \frac{2v_0 v_4}{\gamma_1} \begin{pmatrix} p^2 & 0 \\ 0 & p^2 \end{pmatrix} \\
 \hat{h}_4 &= \frac{2v_0 v_4}{\gamma_1} p^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{2.98}$$

Sendo dado por:

$$\hat{h}_4 = \frac{2v_0 v_4}{\gamma_1} p^2 \mathbb{I}_2 \tag{2.99}$$

onde \mathbb{I}_2 seria a matriz identidade 2×2 . O operador \hat{h}_U Eq.(2.90d) pode ser escrito na forma:

$$\begin{aligned}
\hat{h}_U &= \frac{U}{2} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2} \begin{pmatrix} \pi^\dagger \pi & 0 \\ 0 & -\pi \pi^\dagger \end{pmatrix} \right] \\
&= \frac{U}{2} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2} p^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \\
&= \frac{U}{2} \left[1 - \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2} p^2 \right] \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{2.100}$$

Logo, \hat{h}_U é dado por:

$$\hat{h}_U = \frac{U}{2} \left[1 - \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2} p^2 \right] \sigma_z \tag{2.101}$$

Então, com a representação dos termos em Eq.(2.95), Eq.(2.97), Eq.(2.99) e Eq.(2.101), podemos escrever o hamiltoniano de duas bandas Eq.(2.89), na forma:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_2 &= \hat{h}_0 + \hat{h}_3 + \hat{h}_4 + \hat{h}_U \\
&= -\frac{v_0^2}{\gamma_1} [(p_x^2 - p_y^2) \sigma_x + 2\xi p_x p_y \sigma_y] + v_3 (\xi p_x \sigma_x - p_y \sigma_y) + \frac{2v_0 v_4}{\gamma_1} p^2 \mathbb{I}_2 + \frac{U}{2} \left[1 - \frac{v_0^2}{\gamma_1^2} p^2 \right] \sigma_z \\
&= \left[-\frac{v_0^2}{\gamma_1} (p_x^2 - p_y^2) + v_3 \xi p_x \right] \sigma_x + \left[-\frac{2v_0^2}{\gamma_1} \xi p_x p_y - v_3 p_y \right] \sigma_y + \frac{U}{2} \left[1 - \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2} p^2 \right] \sigma_z + \frac{2v_0 v_4}{\gamma_1} p^2 \mathbb{I}_2
\end{aligned}$$

Logo, podemos supor um vetor $\mathbf{w}(\mathbf{p})$ e um campo escalar $F(\mathbf{p})$ tal que o hamiltoniano \hat{H}_2 seja dado por:

$$\hat{H}_2 = \mathbf{w}(\mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + F(\mathbf{p}) \mathbb{I}_2 \tag{2.102}$$

sendo $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, $F(\mathbf{p}) = \frac{2v_0 v_4}{\gamma_1} p^2$ e o vetor $\mathbf{w}(\mathbf{p})$ tendo componentes dadas por:

$$w_x(\mathbf{p}) = -\frac{v_0^2}{\gamma_1} (p_x^2 - p_y^2) + v_3 \xi p_x \tag{2.103a}$$

$$w_y(\mathbf{p}) = -\frac{2v_0^2}{\gamma_1} \xi p_x p_y - v_3 p_y \tag{2.103b}$$

$$w_z(\mathbf{p}) = \frac{U}{2} \left[1 - \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2} p^2 \right] \tag{2.103c}$$

A forma do hamiltoniano na Eq.(2.102), O vetor $\mathbf{w}(\mathbf{p})$ pode ser visto com um mapeamento do espaço de *momentum* para um novo espaço, através de uma mudança de variáveis, com os termos sendo proporcionais a p^2 , implicando em uma diferença de espaços

quando comparado ao o Hamiltoniano de monocamada, onde usamos momento proporcional a p .

Analisando a forma final da representação de Pauli do Hamiltoniano de duas bandas Eq.(2.102), podemos toma-la em uma forma análoga à equação de Dirac, na forma:

$$(\gamma^\mu w_\mu + F(\mathbf{p})\mathbb{I}_2) |\psi\rangle = 0 \quad (2.104)$$

onde $\gamma^\mu = \{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$. Na Eq.(2.104), $F(\mathbf{p})$ implica em um termo de massa especial. Na equação de Dirac convencional, o termo de massa refere-se à massa de repouso em que, na equação de Klein-Gordon, advém da energia relativística. A relação de γ_4 com $F(\mathbf{p})$, bem como a função de γ_3 nas propriedades eletrônicas serão vistas nas próximas seções.

2.5.2 O efeito Trigonal Warping

Usando a equação de auto-valor $\hat{H}_2 |\psi\rangle = E(\mathbf{p}) |\psi\rangle$, com o hamiltoniano da equação Eq.(2.102), temos que o cálculo do auto-valor de energia $E(\mathbf{p})$ é dado por:

$$\begin{aligned} 0 &= \det\{\hat{H}_2 - E(\mathbf{p})\mathbb{I}_2\} \\ 0 &= \det \left\{ \begin{pmatrix} w_z + F(\mathbf{p}) & w_x - iw_y \\ w_x + iw_y & -w_z + F(\mathbf{p}) \end{pmatrix} - E(\mathbf{p}) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\} \\ 0 &= \begin{vmatrix} w_z + F(\mathbf{p}) - E(\mathbf{p}) & w_x - iw_y \\ w_x + iw_y & -w_z + F(\mathbf{p}) - E(\mathbf{p}) \end{vmatrix} \\ 0 &= [F(\mathbf{p}) - E(\mathbf{p}) + w_z][F(\mathbf{p}) - E(\mathbf{p}) - w_z] - (w_x + iw_y)(w_x - iw_y) \\ 0 &= [F(\mathbf{p}) - E(\mathbf{p})]^2 - w_z^2 - w_x^2 - w_y^2 \\ 0 &= [E(\mathbf{p}) - F(\mathbf{p})]^2 - |\mathbf{w}(\mathbf{p})|^2 \end{aligned}$$

Logo, a energia $E(\mathbf{p})$ é dado por:

$$E(\mathbf{p}) = F(\mathbf{p}) \pm |\mathbf{w}(\mathbf{p})| \quad (2.105)$$

Calculando o módulo $|\mathbf{w}(\mathbf{p})|$, temos:

$$\begin{aligned}
|\mathbf{w}(\mathbf{p})| &= \sqrt{w_x^2 + w_y^2 + w_z^2} \\
&= \sqrt{\left[-\frac{v_0^2}{\gamma_1}(p_x^2 - p_y^2) + v_3 \xi p_x\right]^2 + \left[-\frac{2v_0^2}{\gamma_1} \xi p_x p_y - v_3 p_y\right]^2 + \frac{U^2}{4} \left[1 - \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2} p^2\right]^2} \\
&= \left(\frac{v_0^4}{\gamma_1^2}(p_x^4 - 2p_x^2 p_y^2 + p_y^4) - 2\xi \frac{v_0^2 v_3}{\gamma_1} p_x(p_x^2 - p_y^2) + v_3^2 p_x^2 + \frac{4v_0^4}{\gamma_1^2} p_x^2 p_y^2 + 4\xi \frac{v_0^2 v_3}{\gamma_1} p_x p_y^2\right. \\
&\quad \left.+ v_3^2 p_y^2 + \frac{U^2}{4} \left[1 - \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2} p^2\right]^2\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \sqrt{\frac{v_0^4}{\gamma_1^2}(p_x^4 + 2p_x^2 p_y^2 + p_y^4) + v_3^2(p_x^2 + p_y^2) - 2\xi \frac{v_0^2 v_3}{\gamma_1} p_x(p_x^2 - 3p_y^2) + \frac{U^2}{4} \left[1 - \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2} p^2\right]^2} \\
&= \sqrt{\frac{v_0^4}{\gamma_1^2}(p_x^2 + p_y^2)^2 + v_3^2(p_x^2 + p_y^2) - 2\xi \frac{v_0^2 v_3}{\gamma_1} p_x(p_x^2 - 3p_y^2) + \frac{U^2}{4} \left[1 - \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2} p^2\right]^2} \\
&= \sqrt{\frac{v_0^4}{\gamma_1^2} p^4 + v_3^2 p^2 - 2\xi \frac{v_0^2 v_3}{\gamma_1} p_x(p_x^2 - 3p_y^2) + \frac{U^2}{4} \left[1 - \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2} p^2\right]^2} \tag{2.106}
\end{aligned}$$

Usando coordenadas polares, fazemos $p_x = p \cos \phi$ e $p_y = p \sin \phi$. Substituindo em Eq.(2.106), temos:

$$\begin{aligned}
|\mathbf{w}(\mathbf{p})| &= \sqrt{\frac{v_0^4}{\gamma_1^2} p^4 + v_3^2 p^2 - 2\xi \frac{v_0^2 v_3}{\gamma_1} p^3 \cos \phi (\cos^2 \phi - 3 \sin^2 \phi) + \frac{U^2}{4} \left[1 - \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2} p^2\right]^2} \\
&= \sqrt{\frac{v_0^4}{\gamma_1^2} p^4 + v_3^2 p^2 - 2\xi \frac{v_0^2 v_3}{\gamma_1} p^3 (\cos^3 \phi - 3 \sin^2 \phi \cos \phi) + \frac{U^2}{4} \left[1 - \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2} p^2\right]^2}
\end{aligned}$$

Tendo que $\cos(3\phi) = \cos^3 \phi - 3 \sin^2 \phi \cos \phi$, temos que $|\mathbf{w}(\mathbf{p})|$ é dado por:

$$|\mathbf{w}(\mathbf{p})| = \sqrt{\frac{v_0^4}{\gamma_1^2} p^4 + v_3^2 p^2 - 2\xi \frac{v_0^2 v_3}{\gamma_1} p^3 \cos(3\phi) + \frac{U^2}{4} \left[1 - \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2} p^2\right]^2} \tag{2.107}$$

Logo, a energia $E(\mathbf{p})$ na Eq.(2.105) é dada por:

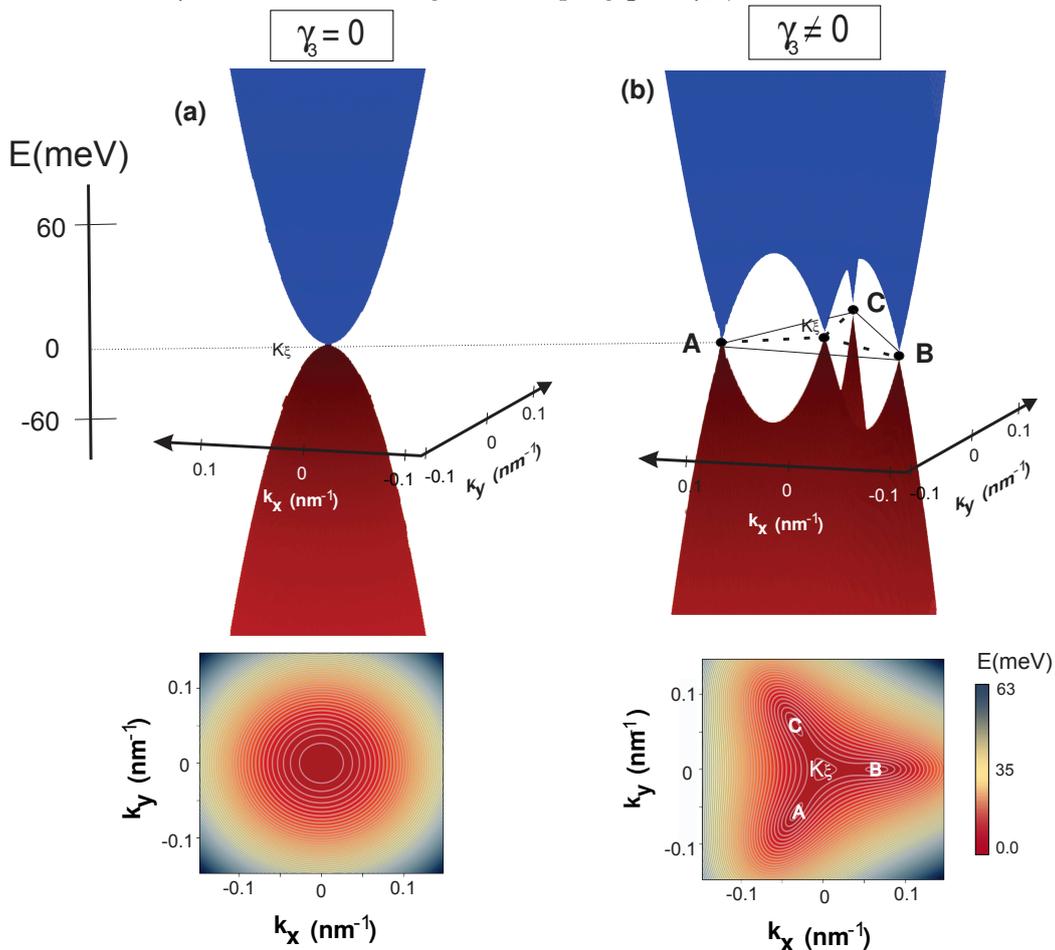
$$E(\mathbf{p}) = \frac{2v_0 v_4}{\gamma_1} p^2 \pm \sqrt{\frac{v_0^4}{\gamma_1^2} p^4 + v_3^2 p^2 - 2\xi \frac{v_0^2 v_3}{\gamma_1} p^3 \cos(3\phi) + \frac{U^2}{4} \left[1 - \frac{2v_0^2}{\gamma_1^2} p^2\right]^2} \tag{2.108}$$

Analisando a Eq.(2.108) (para $\gamma_4 = 0$), vemos que resulta em dois tipos de solução: uma com o sinal +, relativo à banda de condução, e outro com sinal -, relativo à banda de valência. Comparando os casos onde temos $\gamma_3 = 0$ e $\gamma_3 \neq 0$, mostrada na Fig.14, vemos que,

em $\gamma_3 = 0$, existe uma certa isotropia quando comparado com o caso não nulo, isotropia essa caracterizada pelo fato de que a dependência de um ângulo polar ϕ não é perceptiva, como mostrados nas representações de curvas de nível na Fig.14.

No caso $\gamma_3 \neq 0$, vemos a dependência angular mais evidente, com o surgimento de 3 "mini-vales", sendo que cada um possui um Cone de Dirac. O Cone de Dirac é bastante característico na monocamada de grafeno (Geim A.K. ; Novoselov, 2007). O cone em si representa uma dispersão linear de energia para regiões de baixas energias. O surgimento dos cone de Dirac na bicamada está condicionado à consideração do *hopping* γ_3 , como podemos ver na Fig.14, analisando tanto as bandas em si quanto a representação de curvas de nível.

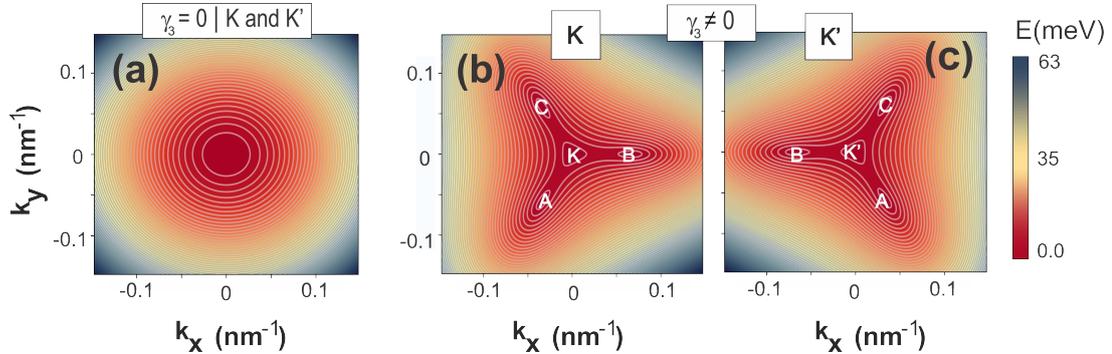
Figura 14 – Representação das bandas de energia, com base na Eq.(2.108), tomando $\gamma_4 = 0$ e $U = 0$, para os casos a-) $\gamma_3 = 0$ e b-) $\gamma_3 \neq 0$, como os destaques para a isotropia no caso $\gamma_3 = 0$ e o efeito *Trigonal Warping* para $\gamma_3 \neq 0$.



A presença dos 3 mini-vales A , B e C , mostrados na Fig.14, acompanhado da perda da isotropia nas bandas de energia, implicando em um formato triangular que é conhecido como efeito *Trigonal Warping* - TW. O formato trigonal (ou triangular) nas bandas é devido a deformação do níveis de fermi para baixas energias em que, na Eq.(2.108) é caracterizado pelo

termo proporcional à $\cos(3\phi)$.

Figura 15 – Comparação entre os casos $\gamma_3 = 0$ e $\gamma_3 \neq 0$ para os vales K e K' , mostrando a assimetria entre vales para $\gamma_3 \neq 0$ e a equivalência para $\gamma_3 = 0$



Outra consequência do efeito TW é a assimetria entre os vales K e K' , mostrados na Fig.15-b) e Fig.15-c). Como podemos ver, para o caso $\gamma_3 \neq 0$, os surgimento dos 3 mini-vales é assimétrico ao considerarmos o vale K ($\xi = 1$) ou o vale K' ($\xi = -1$), ou seja, o comportamento da bandas de um vale é o espelho do outro, com base na Eq.(2.108). Tal assimetria não é vista para $\gamma_3 = 0$, mostrado em Fig.15-a), pois trata-se do formato relativo as bandas para ambos os vales devido à isotropia comentado anteriormente.

A assimetria entre vales é outro efeito que o *hopping* γ_3 causa nas bandas quando é levado em conta. Tal efeito será analisado com mais detalhes na seção que irá tratar da filtragem de corrente de vale, onde iremos fazer toda a consideração sobre o vale escolhido.

2.5.3 Assimetria elétron-buraco

O papel do γ_4 está relacionado como na forma que vimos na Eq.(2.104) para o termo $F(\mathbf{p})$ no que diz respeito à um termo de massa. Contudo, sua relação com a massa em si no sistema é mais especial.

Ao analisarmos a segunda derivada da Eq.(2.108), agora tomando $\gamma_4 \neq 0$, vemos que há valores distintos entre banda de valência ($-$) e banda de condução ($+$) para $p \ll 1$. A segunda derivada da energia no *momentum* está relacionada à termos de massa, sendo que energias positivas remetem à elétrons e negativas, à buracos (anti-partícula do elétron). Isso implica dizer que há uma assimetria entre massas do elétron e do buraco (McCann e Koshino, 2013).

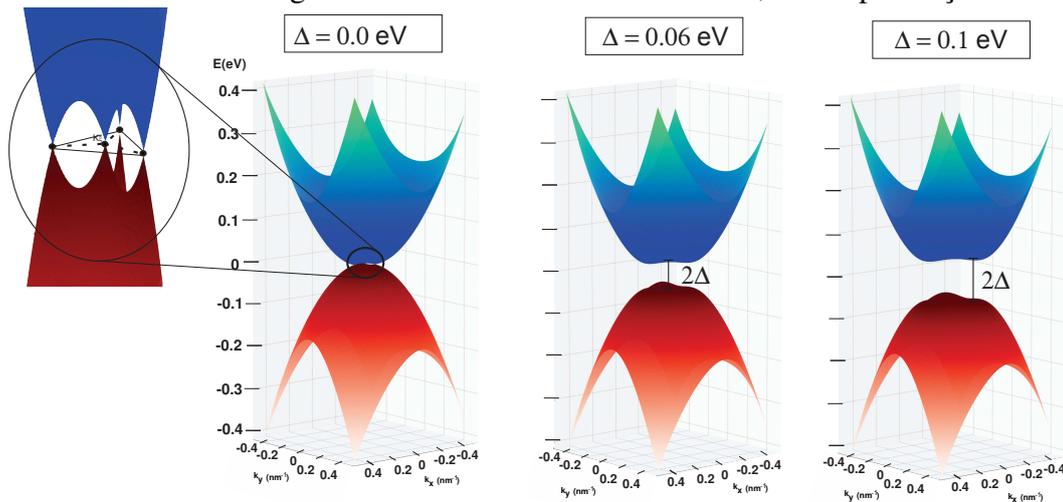
2.5.4 Efeito Trigonal Warping com GAP

Anteriormente, definimos as energias *on-site* em função da energia U . O parâmetro U , da forma como definimos, diz respeito a diferença de energia entre as camadas. U pode ser escrito em função do *hopping* γ_1 na forma da Eq.(2.109), onde Δ diz respeito ao GAP nas bandas de condução e valência (McCann e Koshino, 2013).

$$U = -\frac{\Delta\gamma_1}{\sqrt{\gamma_1^2 - \Delta^2}} \quad (2.109)$$

O GAP Δ surge nas bandas mediante à aplicação de um potencial no bicamada. Tal potencial aplicado induz um quebra da simetria de inversão espacial do sistema, ou seja, o operador paridade, quando aplicado, não implica na inversão do eixos coordenados

Figura 16 – Banda de energia do Hamiltoniano de duas banda, com a presença do GAP Δ .



2.5.5 Auto-estados do Hamiltoniano de duas bandas

Dado o hamiltoniano em termos de matrizes de pauli dado na Eq.(2.102), escrevemos na forma:

$$\hat{H}_2 = \begin{pmatrix} w_z + F(\mathbf{p}) & |\tilde{w}|e^{-i\theta_\xi(\mathbf{p})} \\ |\tilde{w}|e^{i\theta_\xi(\mathbf{p})} & -w_z + F(\mathbf{p}) \end{pmatrix} \quad (2.110)$$

onde o $|\tilde{w}| = \sqrt{w_x^2 + w_y^2}$ e $\theta_\xi(\mathbf{p})$ é dado por:

$$\theta_\xi(\mathbf{p}) = \arctan \left\{ \frac{2v_0^2\xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y}{v_0^2(p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x} \right\} \quad (2.111)$$

Sabendo que os auto-estados de \hat{H}_2 são dos da forma $|\psi\rangle = e^{\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}} [C_1 \ C_2]^T$, temos uma equação de auto-valor da forma matricial:

$$\begin{pmatrix} w_z + F(\mathbf{p}) & |\tilde{w}|e^{-i\theta_\xi(\mathbf{p})} \\ |\tilde{w}|e^{i\theta_\xi(\mathbf{p})} & -w_z + F(\mathbf{p}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = E(\mathbf{p}) \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad (2.112)$$

sendo $[C_1 \ C_2]^T$ o conhecidos *pseudospins*⁶ e $E(\mathbf{p})$ dado na Eq.(2.108). Simplificando, temos o sistema:

$$\begin{cases} [w_z + F(\mathbf{p}) - E(\mathbf{p})]C_1 + |\tilde{w}|e^{-i\theta_\xi(\mathbf{p})}C_2 = 0 \\ |\tilde{w}|e^{i\theta_\xi(\mathbf{p})}C_1 + [-w_z + F(\mathbf{p}) - E(\mathbf{p})]C_2 = 0 \end{cases} \quad (2.113)$$

Substituindo $E(\mathbf{p})$, temos:

$$\begin{cases} [\mp|\mathbf{w}| + w_z]C_1 + |\tilde{w}|e^{-i\theta_\xi(\mathbf{p})}C_2 = 0 \\ |\tilde{w}|e^{i\theta_\xi(\mathbf{p})}C_1 + [\mp|\mathbf{w}| - w_z]C_2 = 0 \end{cases} \quad (2.114)$$

onde $|\mathbf{w}| = \sqrt{w_x^2 + w_y^2 + w_z^2}$. Temos que C_2 é dado em função de C_1 na forma:

$$C_2 = \frac{|\tilde{w}|}{w_z \pm |\mathbf{w}|} e^{i\theta_\xi(\mathbf{p})} C_1 \quad (2.115)$$

Logo, os autoestado $|\psi_\xi^{\mathbf{p}}\rangle$ são dados por:

$$|\psi_\xi^{\mathbf{p}}\rangle = N \exp\left\{\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}\right\} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{|\tilde{w}|}{w_z \pm |\mathbf{w}|} e^{i\theta_\xi(\mathbf{p})} \end{pmatrix} \quad (2.116)$$

onde N consiste em uma constante de normalização. Nas seções seguintes, veremos a aplicação do auto-estado.

⁶A solução padrão para o vetor de um dado estado $|\psi\rangle$ na equação de Dirac original na relatividade restrita seria o chamado *spinor* que consiste em uma combinação linear dos *spin's up* e *down*, no caso do elétron. Como o vetor de estado $|\psi\rangle$, nesse caso, esta relacionado com características geométricas no que diz respeito a sub-rede $\tilde{A}(\tilde{B})$ e $A(B)$ da Bicamada de grafeno ao invés do *spin*, nos referindo à $|\psi\rangle$ como um *pseudospinor* ou *pseudospin*.

3 EVOLUÇÃO TEMPORAL

Supondo que temos um dado vetor de estado $|\Psi\rangle$ em uma região de baixas energias no grafeno, é necessário que saibamos como $|\Psi(t_0)\rangle$ se comporta em tempos posteriores para t_0 , ou seja, em um tempo t , $|\Psi(t)\rangle$ e assim podemos entender a evolução temporal dos vetores de estado que podem representar não apenas elétrons, mas também outras partículas.

3.1 O Operador de Evolução Temporal $\hat{U}(t_0, t)$

Tomando a equação de Schrödinger dependente do tempo como uma função do operador hamiltoniano \hat{H} para o estado $|\Psi(t)\rangle$, temos:

$$\hat{H}|\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle$$

Multiplicando ambos os lados pelo bra $\langle \mathbf{r}|$, que representa um vetor de estado para o espaço real na coordenada \mathbf{r} .

$$\langle \mathbf{r}|\hat{H}|\Psi(t)\rangle = i\hbar \langle \mathbf{r}|\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle, \quad (3.1)$$

Como \hat{H} é Hermitiano, então ele atua em $\langle \mathbf{r}|$. Onde \hat{H} é dado por:

$$\hat{H} = \hat{T}(\hat{\mathbf{p}}) + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}})$$

onde $\hat{T}(\hat{\mathbf{p}}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}$ é o operador de energia cinética em função do operador *momentum* $\hat{\mathbf{p}}$ e $\hat{V}(\hat{\mathbf{r}})$ o operador de energia potencial em função do operador de posição $\hat{\mathbf{r}}$. Como os operadores *momentum* e *position* têm a seguinte relação, quando atuam no ket $|\mathbf{r}\rangle$, na forma(??, ??):

$$\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{p}|\mathbf{r}\rangle, \quad \hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle, \quad (3.2)$$

onde $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}$, que pode ser entendido como o autovalor do operador $\hat{\mathbf{p}}$, bem como \mathbf{r} , que é o autovalor do operador $\hat{\mathbf{r}}$. Com isso, \hat{H} agindo sobre $\langle \mathbf{r}|$, como podemos ver na equação (3.1), pode ser dado por:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}|\hat{H} &= \langle \mathbf{r}| \left(\hat{T}(\hat{\mathbf{p}}) + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}) \right) \\ &= \langle \mathbf{r}|\hat{T}(\hat{\mathbf{p}}) + \langle \mathbf{r}|\hat{V}(\hat{\mathbf{r}}) \\ &= T(\mathbf{p})\langle \mathbf{r}| + V(\mathbf{r})\langle \mathbf{r}| \\ &= \left(T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{r}) \right) \langle \mathbf{r}| \\ &= H\langle \mathbf{r}|, \end{aligned} \quad (3.3)$$

onde H seria o autovalor do operador hamiltoniano \hat{H} . Substituindo $\langle \mathbf{r} | \hat{H}$ na Eq.(3.1), temos:

$$H \langle \mathbf{r} | \Psi(t) \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{r} | \Psi(t) \rangle$$

implicando, então, a equação de Schrödinger convencional no espaço real, ou seja, fora do espaço abstrato de Hilbert, onde vetores de estado como $|\Psi(t)\rangle$ e operadores como \hat{H} .

$$H\Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (3.4)$$

onde $\langle \mathbf{r} | \Psi(t) \rangle = \Psi(\mathbf{r}, t)$.

Assim, para calcular o $\Psi(\mathbf{r}, t)$ posteriormente, dividimos ambos os lados da equação Eq.(3.4) por $\Psi(\mathbf{r}, t)$.

$$\frac{1}{\Psi(\mathbf{r}, t)} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{i}{\hbar} H$$

Integrando no instante t_0 para um instante posterior t , temos:

$$\int_{t_0}^t \frac{1}{\Psi(\mathbf{r}, t')} \frac{\partial}{\partial t'} \Psi(\mathbf{r}, t') dt' = - \int_{t_0}^t \frac{i}{\hbar} H dt'$$

Assumindo que H é dependente do tempo, $H \equiv H(t)$, temos:

$$\ln[\Psi(\mathbf{r}, t)] - \ln[\Psi(\mathbf{r}, t_0)] = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt'$$

$$\ln[\Psi(\mathbf{r}, t)] = \ln[\Psi(\mathbf{r}, t_0)] - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt'$$

Chegamos a $\Psi(\mathbf{r}, t)$ para mais tarde t .

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt'} \Psi(\mathbf{r}, t_0) = \hat{U}(t_0, t) \Psi(\mathbf{r}, t_0)$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{U}(t_0, t) \Psi(\mathbf{r}, t_0), \quad (3.5)$$

Então o Operador de Evolução do Tempo $\hat{U}(t_0, t)$ é:

$$\hat{U}(t_0, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt'}, \quad (3.6)$$

Se H é independente do tempo, temos:

$$\hat{U}(t_0, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H \Delta t}, \quad (3.7)$$

onde $\Delta t = t - t_0$.

Temos então as duas formas do operador de evolução no tempo $\hat{U}(t_0, t)$ Eq.(3.6) e Eq.(3.7) onde eles diferem em termos de dependência do H hamiltoniano no tempo. Como o Hamiltoniano que vamos usar é como a equação Eq.(2.102), o hamiltoniano de duas bandas, por ser independente do tempo, usaremos o operador Eq.(3.7).

3.2 A técnica *Split Operator*

Tendo primeiro um estado em um determinado momento t_0 , $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$, queremos conhecê-lo em um dado instante após t como $t = t_0 + \Delta t$, então $\Psi(\mathbf{r}, t = t_0 + \Delta t)$, que é sua evolução no tempo usando o operador $\hat{U}(t_0, t)$.

A técnica Split Operator é baseada em um método de multiplicar computacionalmente o operador de evolução temporal $\hat{U}(t_0, t)$ em um dado Ψ que representa um elétron no grafeno e obtê-lo posteriormente (dinâmica). É importante fazer essa distinção de uma multiplicação simples porque estamos trabalhando com operadores, não no espaço de Hilbert, mas operadores normais que podem envolver não apenas matrizes, mas também derivadas, como o operador de energia cinética $T(\mathbf{p})$ Eq.(3.3). Portanto, em muitos casos, estes não são apenas produtos comutativos.

Sabendo que $H = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{r})$ como na equação Eq.(3.3), expandimos uma exponencial do tipo $e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})}$, onde \hat{A} e \hat{B} são operadores, até a 3ª ordem de λ (Bandrauk e Shen, 1991).

$$e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})} \approx S(\hat{A}, \hat{B}, \lambda) + S'(\hat{A}, \hat{B}, \lambda) + \mathcal{O}(\lambda^4)$$

onde S e S' são:

$$S(\hat{A}, \hat{B}, \lambda) = e^{\frac{\lambda}{2}\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}} e^{\frac{\lambda}{2}\hat{A}}, \quad (3.8a)$$

$$S'(\hat{A}, \hat{B}, \lambda) = \frac{1}{24}[\hat{A} + 2\hat{B}, [\hat{A} + \hat{B}]]\lambda^3 = \frac{1}{24}[\hat{B}, \hat{A}]\lambda^3, \quad (3.8b)$$

demonstrado no apêndice A, na Eq.(A.1). Para representar H , como na equação Eq.(3.3), fazemos $\hat{A} = V(\mathbf{r})$ e $\hat{B} = T(\mathbf{p})$. Com isso, resolvemos a Eq.(A.1), temos:

$$[\hat{B}, \hat{A}] = [T, V]$$

Tendo que $T(\mathbf{p}) = \frac{p_i^2}{2m}$ e a inidentidade $[\hat{A}, f(\hat{B})] = f'(\hat{B})[\hat{A}, \hat{B}]^2$, temos:

$$[T, V(\mathbf{r})] = -\frac{i\hbar}{m}\nabla V(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p} \quad (3.9)$$

com demonstração no apêndice A. Pelo o operador de evolução temporal, temos que $\lambda = -\frac{i}{\hbar}\Delta t$.

Logo, juntamente com a Eq.(A.5), temos que S' pode ser dado por:

¹Lembrando que $p_i^2 = p_x^2 + p_y^2$

²Demonstrado no apêndice A, na Eq.(A.4).

$$S' = \frac{\Delta t^3}{24\hbar^2 m} \nabla V(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p} \quad (3.10)$$

Analisando a Eq.(3.10), vemos que S' é da ordem de Δt^3 . Como iremos adotar valores da ordem de $\Delta t = 0,1 \text{ fs}^3$, temos que S' será praticamente irrelevante na aproximação do operador de evolução temporal por decomposições espectrais. Então, $e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})}$ pode ser aproximado para:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}(V(\mathbf{r})+T(\mathbf{p}))\Delta t} \approx S(T(\mathbf{p}), V(\mathbf{r}), -\frac{i}{\hbar}\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta t^3),$$

$$e^{-\frac{i}{\hbar}H\Delta t} \approx e^{-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar}T\Delta t} e^{-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^3), \quad (3.11)$$

A equação Eq.(3.11) consiste na aproximação de segunda ordem feita por M. Suzuki, com contribuições de Trotter, publicada no início dos anos 1990 usando decomposições espectrais de operadores exponenciais (Suzuki, 1990), destinado ao uso em teoria de muitos corpos e simulações usando Monte Carlo. Ignorando o erro \mathcal{O} , podemos simplesmente representar o operador de evolução no tempo como:

$$\hat{U}(t_0, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H\Delta t} \approx e^{-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar}T\Delta t} e^{-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^3), \quad (3.12)$$

A equação Eq.(3.12) é a base para a técnica *Split Operator*, onde seu algoritmo tem a forma de Fig.17 onde o operador de evolução temporal é aplicado N vezes.

$$\Psi(\mathbf{r}, t_0 + N\Delta t) = [\hat{U}(t_0, t)]^N \Psi(\mathbf{r}, t_0)$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t_0 + N\Delta t) \approx \left[e^{-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar}T\Delta t} e^{-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t} \right]^N \Psi(\mathbf{r}, t_0), \quad (3.13)$$

Dado um $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$, primeiro multiplicamos pelo termo de energia potencial $e^{-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t}$ e formamos a ocupação :

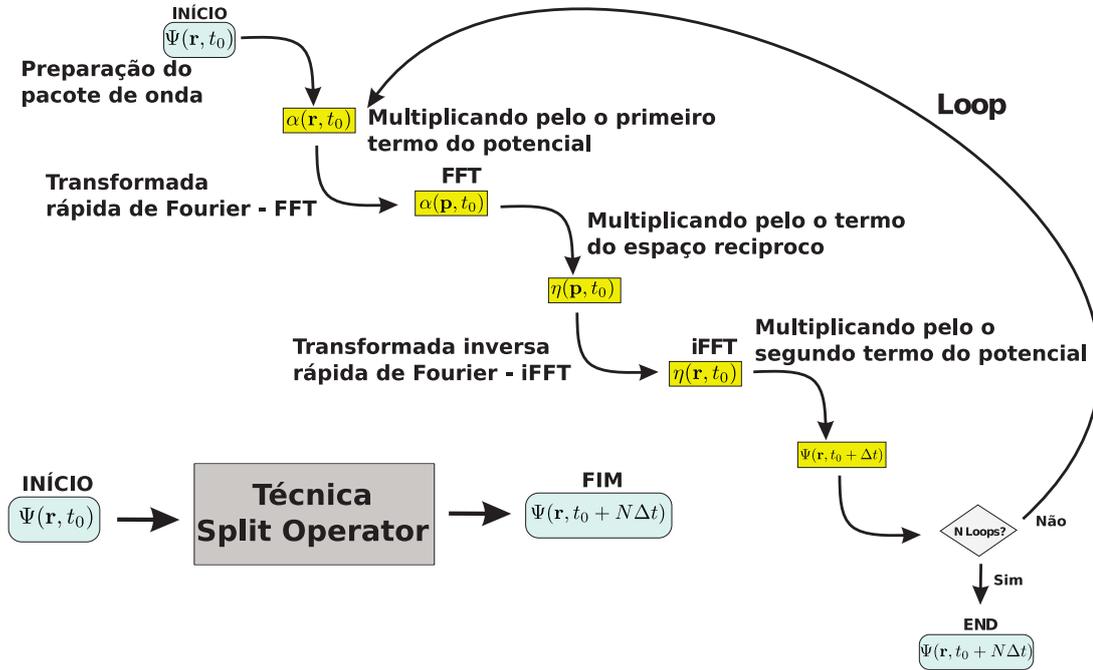
$$\alpha(\mathbf{r}, t_0) = e^{-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t} \Psi(\mathbf{r}, t_0)$$

Então fazemos uma Transformada Rápida de Fourier (FFT) em $\alpha(\mathbf{r}, t_0)$ para o espaço recíproco de \mathbf{p} .

$$\alpha(\mathbf{p}, t_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{\Omega} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \alpha(\mathbf{r}, t_0) d^2\mathbf{r}$$

³fs = femtosegundo = 10^{-15} s

Figura 17 – Algoritmo da técnica *Split Operator*, com ênfase nos passos que envolvem todas as operações no pacote de ondas. As transformadas FFT e iFFT lidam com algoritmos além de toda a trajetória original da técnica *Split Operator*.



Tendo então a FFT de $\alpha(\mathbf{r}, t_0)$, $\alpha(\mathbf{p}, t_0)$, multiplicamos pelo termo $e^{-\frac{i}{\hbar}T\Delta t}$ onde T está no espaço recíproco $T \equiv T(\mathbf{p})$.

$$\eta(\mathbf{p}, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}T\Delta t} \alpha(\mathbf{p}, t_0)$$

Com isso, fazemos a Transformada Inversa de Fourier Rápida (iFFT) em $\eta(\mathbf{p}, t_0)$ e voltamos ao espaço real.

$$\eta(\mathbf{r}, t_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{\Omega} e^{-i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}} \eta(\mathbf{p}, t_0) d^2\mathbf{p}$$

Finalmente, multiplicamos $\eta(\mathbf{r}, t_0)$ pelo último termo do espaço real $e^{-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t}$ e temos obter $\Psi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t)$.

$$\Psi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) = e^{-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t} \eta(\mathbf{r}, t_0)$$

Repetindo este processo $N - 1$ mais vezes, como no Loop da Fig.17, chegamos a $\Psi(\mathbf{r}, t_0 + N\Delta t)$. O uso de transformadas de Fourier é muito útil na multiplicação pelo termo cinético $e^{-\frac{i}{\hbar}T\Delta t}$ já que T , por estar no espaço recíproco, pode representar derivadas o que não seria muito interessante para o cálculo, computacionalmente falando.

3.3 Hamiltoniano de duas bandas na técnica *Split Operator*

Para uma primeira abordagem acerca da evolução temporal, usaremos o modelo de duas bandas com um potencial $V(\mathbf{r})$ aplicado. Adotaremos o Hamiltoniano \hat{H}_2 como na equação Eq.(2.102). Tendo o Hamiltoniano abaixo:

$$\hat{H}_2 = \mathbf{w}(\mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + F(\mathbf{p})\mathbb{I}_2 + V(\mathbf{r})\mathbb{I}_2, \quad (3.14)$$

Então fazemos \hat{H}_2 composto por uma parte no espaço recíproco $H_{\mathbf{p}}$ e outra parte no espaço real $H_{\mathbf{r}}$, todas mostradas abaixo.

$$\hat{H}_2 = H_{\mathbf{p}} + H_{\mathbf{r}},$$

$$H_{\mathbf{p}} = \mathbf{w}(\mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + F(\mathbf{p})\mathbb{I}_2, \quad H_{\mathbf{r}} = V(\mathbf{r})\mathbb{I}_2, \quad (3.15)$$

O operador de evolução no tempo Eq.(3.7) para o Hamiltoniano de Dirac ficaria assim:

$$\begin{aligned} \hat{U}_2(t_0, t) &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_2\Delta t} \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}(H_{\mathbf{p}}+H_{\mathbf{r}})\Delta t} \\ &\approx e^{-\frac{i}{2\hbar}H_{\mathbf{r}}\Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar}H_{\mathbf{p}}\Delta t} e^{-\frac{i}{2\hbar}H_{\mathbf{r}}\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^3), \end{aligned} \quad (3.16)$$

onde $H_{\mathbf{p}}$ e $H_{\mathbf{r}}$, dados na Eq.(3.15), referem-se, respectivamente, a espaços recíprocos e reais, bem como $T(\mathbf{p})$ e $V(\mathbf{r})$ na equação Eq.(3.12). Reescrevemos o operador $\hat{U}_2(t_0, t)$ como:

$$\hat{U}_2(t_0, t) \approx M_{\mathbf{r}}M_{\mathbf{p}}M_{\mathbf{r}} + \mathcal{O}(\Delta t^3),$$

onde $M_{\mathbf{r}}$ e $M_{\mathbf{p}}$ são:

$$M_{\mathbf{r}} = e^{-\frac{i}{2\hbar}H_{\mathbf{r}}\Delta t}, \quad M_{\mathbf{p}} = e^{-\frac{i}{\hbar}H_{\mathbf{p}}\Delta t}$$

$$M_{\mathbf{r}} = e^{-\frac{i}{2\hbar}V(\mathbf{r})\Delta t}\mathbb{I}_2, \quad M_{\mathbf{p}} = e^{-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{w}(\mathbf{p})\frac{\Delta t}{\hbar}} e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}F(\mathbf{p})}, \quad (3.17)$$

Assim, as matrizes $M_{\mathbf{r}}$ e $M_{\mathbf{p}}$ podem ser escritas como:

$$M_{\mathbf{r}} = e^{-\frac{i}{2\hbar}V(\mathbf{r})\Delta t}\mathbb{I}_2, \quad (3.18)$$

$$M_{\mathbf{p}} = \left[\cos(w') \mathbb{I}_2 + i \frac{\sin(w')}{w'} \begin{pmatrix} w'_z & w'_x - iw'_y \\ w'_x + iw'_y & -w'_z \end{pmatrix} \right] e^{-i \frac{\Delta t}{\hbar} F(\mathbf{p})}, \quad (3.19)$$

onde \mathbf{w}' é dado por:

$$\mathbf{w}' = -\frac{\Delta t}{\hbar} \mathbf{w}, \quad w' = |\mathbf{w}'| = \frac{\Delta t}{\hbar} |\mathbf{w}|,$$

Tomando a forma das matrizes $M_{\mathbf{r}}$ e $M_{\mathbf{p}}$ Eq.(3.18) e Eq.(3.19), temos que, após o operador de evolução temporal $\widehat{U}(t_0, t)$ sendo redefinido, um dado $\Psi(\mathbf{r}, t)$ de cada vez mais tarde $\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t)$, pode ser dado por:

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) \approx M_{\mathbf{r}} M_{\mathbf{p}} M_{\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (3.20)$$

Nas próximas seções, veremos a aplicação do operador de evolução no tempo, conforme mostrado na Eq.(3.20), na investigação do efeito *zitterbewegung* na bicamada de grafeno. Nessa situação, usaremos os mesmos Ψ 's iniciais, com relação à sua forma, e veremos seu comportamento de amplitude de probabilidade e trajetórias médias na bicamada de grafeno, ambos os casos tendo sua dinâmica de evolução temporal realizada pela técnica *Split Operator*, cujo algoritmo é mostrado na figura Fig.17.

3.4 Hamiltoniano de quatro bandas na técnica *Split Operator*

Nesta seção, abordaremos a técnica *Split Operator* sob a luz do modelo de 4 bandas. Tendo o Hamiltoniano Eq.(2.71), fazendo $E_{\bar{A}} = \frac{U}{2}$, $E_{\bar{B}} = \frac{U}{2}$, $E_A = -\frac{U}{2}$ e $E_B = -\frac{U}{2}$, temos que:

$$\hat{H}_4 = \begin{pmatrix} \frac{U}{2} & v_0 \pi^\dagger & -v_4 \pi^\dagger & v_3 \pi \\ v_0 \pi & \frac{U}{2} & \gamma_1 & -v_4 \pi^\dagger \\ -v_4 \pi & \gamma_1 & -\frac{U}{2} & v_0 \pi^\dagger \\ v_3 \pi^\dagger & -v_4 \pi & v_0 \pi & -\frac{U}{2} \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

Podemos escrever o hamiltoniano da forma:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_4 = & \frac{U}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \xi v_0 p_x \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} + v_0 p_y \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} \\
& + \gamma_1 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \xi v_3 p_x \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - v_3 p_y \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
& - \xi v_4 p_x \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} + v_4 p_y \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.22}$$

Temo que as matrizes pode ser dado por:

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} &= \sigma_z \otimes \mathbb{I}_2, & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} &= \mathbb{I}_2 \otimes \sigma_x, \\
\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} &= \mathbb{I}_2 \otimes \sigma_y, & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= M_z, \\
\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= M_x, & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= M_y, \\
\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= \sigma_x \otimes \mathbb{I}_2, & \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix} &= \sigma_y \otimes \mathbb{I}_2
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Logo, podemos escrever Eq.(3.21) da forma:

$$\begin{aligned}\hat{H}_4 &= \frac{U}{2}\sigma_z \otimes \mathbb{I}_2 + v_0(\xi p_x \mathbb{I}_2 \otimes \sigma_x + p_y \mathbb{I}_2 \otimes \sigma_y) + \gamma_1 M_z + v_3(\xi p_x M_x + p_y M_y) \\ &\quad - v_4(\xi p_x \sigma_x \otimes \mathbb{I}_2 + p_y \sigma_y \otimes \mathbb{I}_2) \\ &= \mathbb{I}_2 \otimes \left[v_0(\xi p_x \sigma_x + p_y \sigma_y) \right] + \gamma_1 M_z + v_3(\xi p_x M_x + p_y M_y) + \left[\frac{U}{2}\sigma_z - v_4(\xi p_x \sigma_x + p_y \sigma_y) \right] \otimes \mathbb{I}_2\end{aligned}$$

podendo ser escrito como:

$$\hat{H}_4 = \mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma} + \mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M} + \mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2 \quad (3.24)$$

em que $\mathbf{p}_0 = v_0 \mathbf{p}_\xi$, $\mathbf{p}_3 = (v_3 \mathbf{p}_\xi, \gamma_1)$ e $\mathbf{p}_4 = \left(-v_4 \mathbf{p}_\xi, \frac{U}{2} \right)$, onde $\mathbf{p}_\xi = (\xi p_x, p_y)$. Além disso, temos $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ e $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$, sendo as matrizes de Pauli, e as matrizes $\mathbb{M} = (M_x, M_y, M_z)$. A forma na equação Eq.(3.24) é bem familiar quando a comparamos com a forma em matrizes de Pauli no modelo de 2 bandas. Sabendo que $\sigma_z \otimes \mathbb{I}_2$ e $\mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma}$ comutam entre si (provado no apêndice A), aplicamos o hamiltoniano dado na Eq.(3.24) no operador de evolução temporal dado em Eq.(3.12).

$$\begin{aligned}\hat{U}_4(t_0, t) &= e^{-\frac{i\hat{H}_4 \Delta t}{\hbar}} \\ &= \exp \left\{ -\frac{i\Delta t}{\hbar} \mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma} - \frac{i\Delta t}{\hbar} \mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M} - \frac{i\Delta t}{\hbar} \mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2 \right\} \\ &\approx \exp \left\{ -\frac{i\Delta t}{2\hbar} \mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma} - \frac{i\Delta t}{2\hbar} \mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2 \right\} \exp \left\{ -\frac{i\Delta t}{\hbar} \mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M} \right\} \\ &\quad \times \exp \left\{ -\frac{i\Delta t}{2\hbar} \mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma} - \frac{i\Delta t}{2\hbar} \mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2 \right\}\end{aligned}$$

podendo ser escrito como:

$$\begin{aligned}\hat{U}_4(t_0, t) &\approx \exp \left\{ -\frac{i\Delta t}{2\hbar} \mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2 \right\} \exp \left\{ -\frac{i\Delta t}{2\hbar} \mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma} \right\} \exp \left\{ -\frac{i\Delta t}{\hbar} \mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M} \right\} \\ &\quad \times \exp \left\{ -\frac{i\Delta t}{2\hbar} \mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma} \right\} \exp \left\{ -\frac{i\Delta t}{2\hbar} \mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2 \right\}\end{aligned}$$

De uma forma mais compacta, podemos escrever o operador de evolução temporal da forma:

$$\hat{U}_4(t_0, t) \approx \hat{\sigma}_4 \hat{\sigma}_0 \hat{\sigma}_{3;1} \hat{\sigma}_0 \hat{\sigma}_4 \quad (3.25)$$

onde os operadores são dados por:

$$\hat{\mathcal{O}}_0 = \exp \left\{ -\frac{i\Delta t}{2\hbar} \mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma} \right\}, \quad \hat{\mathcal{O}}_{3;1} = \exp \left\{ -\frac{i\Delta t}{\hbar} \mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M} \right\}, \quad \hat{\mathcal{O}}_4 = \exp \left\{ -\frac{i\Delta t}{2\hbar} \mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2 \right\} \quad (3.26)$$

Calculados no apêndice A, os operadores na Eq.(3.26), temos que:

$$\hat{\mathcal{O}}_0 = \cos \left(\frac{p v_0 \Delta t}{2\hbar} \right) \mathbb{I}_4 - \frac{i}{p} \sin \left(\frac{p v_0 \Delta t}{2\hbar} \right) \mathbf{p}_\xi \cdot (\mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma}) \quad (3.27a)$$

$$\hat{\mathcal{O}}_{3;1} = \hat{\mathcal{O}}_3 + \hat{\mathcal{O}}_1 \quad (3.27b)$$

$$\hat{\mathcal{O}}_4 = \cos \left(\frac{p_4 \Delta t}{2\hbar} \right) \mathbb{I}_4 - \frac{i}{p_4} \sin \left(\frac{p_4 \Delta t}{2\hbar} \right) \mathbf{p}_4 \cdot (\vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2) \quad (3.27c)$$

onde $p = \sqrt{p_x^2 + p_y^2}$ e $p_4 = \sqrt{v_4^2 p^2 + \frac{U^2}{4}}$, e os operadores $\hat{\mathcal{O}}_3$ e $\hat{\mathcal{O}}_1$, dados por:

$$\hat{\mathcal{O}}_1 = \mathbb{I}_2^{(4)} \cos \left(\frac{\gamma_1 \Delta t}{\hbar} \right) - i \sin \left(\frac{\gamma_1 \Delta t}{\hbar} \right) M_z \quad (3.28a)$$

$$\hat{\mathcal{O}}_3 = \mathbb{I}_4^{(2)} \cos \left(\frac{p v_3 \Delta t}{\hbar} \right) - \frac{i}{p} \sin \left(\frac{p v_3 \Delta t}{\hbar} \right) \mathbf{p}_\xi \cdot \tilde{\mathbb{M}} \quad (3.28b)$$

Onde $\mathbb{I}_2^{(4)}$ e $\mathbb{I}_4^{(2)}$ são dados no apêndice A e $\tilde{\mathbb{M}} = (M_x, M_y)$. Logo, dado uma $\Psi(\mathbf{r}, t)$, para obtê-la em um tempo posterior $\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t)$, temos que:

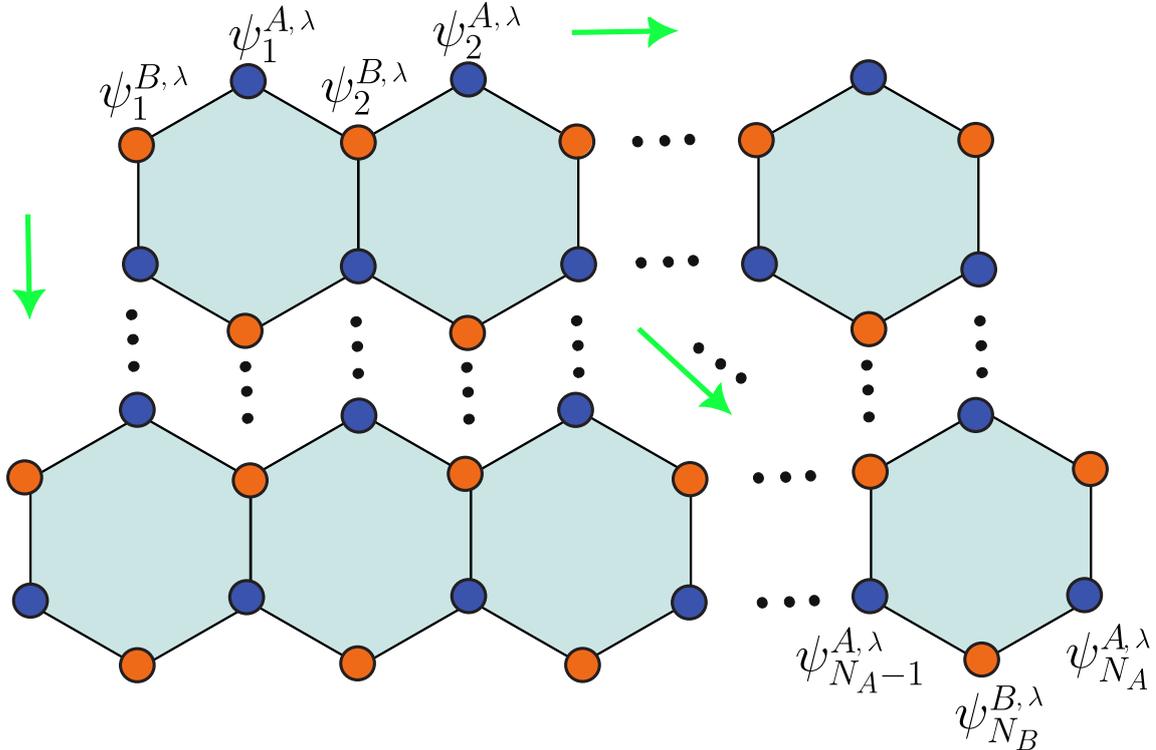
$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \hat{U}_4(t_0, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \\ &\approx \hat{\mathcal{O}}_4 \hat{\mathcal{O}}_0 \hat{\mathcal{O}}_{3;1} \hat{\mathcal{O}}_0 \hat{\mathcal{O}}_4 \Psi(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (3.29)$$

Nos próximos capítulos, investigaremos mais a fundo a dinâmica de pacotes de onda através do hamiltoniano de 4 bandas, comparando-o com o modelo de 2 bandas, no que diz respeito aos orbitais dímeros.

3.5 Hamiltoniano *tight binding* na técnica *Split Operator*

Finalmente, abordando o modelo Tight Binding, tomamos como base o Hamiltoniano escrito em segunda quantização na Eq.(2.51). Diferente dos casos anteriores em que tomávamos uma formulação para baixas energias relativo à um sistema infinito (ou bulk), nesse caso, adotaremos um método que está diretamente associado ao espectro real de energia para um sistema finito, conforme retratado na Fig.18.

Figura 18 – Representação da discretização da rede real por camada $\lambda = \{1, 2\}$ da BLG.



Para a construção do Hamiltoniano do sistema, tomamos os orbitais nos sítios atômicos ψ_i^μ , para μ -ésima subrede e i -ésimo sítio atômico, semelhante à interação de primeiros vizinhos feita para o hamiltoniano de segunda quantização. Sabendo da forma como os hoppings são inseridos no sistema, de acordo com Fig.8, temos que a interação entre os orbitais atômicos $\langle \psi_i^\mu | H | \psi_j^{\mu'} \rangle$ dentro da célula unitária podem ser dadas pela a tabela 2, com i, j -ésimos orbitais atômicos pertencentes à uma célula unitária, caracterizando uma interação de primeiros vizinhos conforme o hamiltoniano na Eq.(2.51).

Tabela 2 – Representação da interação entre orbitais atômicos dentro da célula unitária. Os traços representam a energia *onsite* relativa à sub-rede.

H	$ \psi_j^{\tilde{A}}\rangle$	$ \psi_j^{\tilde{B}}\rangle$	$ \psi_j^A\rangle$	$ \psi_j^B\rangle$
$\langle \psi_i^{\tilde{A}} $	-	γ_0	$-\gamma_4$	γ_3
$\langle \psi_i^{\tilde{B}} $	γ_0	-	γ_1	$-\gamma_4$
$\langle \psi_i^A $	$-\gamma_4$	γ_1	-	γ_0
$\langle \psi_i^B $	γ_3	$-\gamma_4$	γ_0	-

Com isso, conseguimos criar uma forma discretizada da equação de schrodinger para

a BLG, na forma:

$$\begin{pmatrix} \mathbb{H}_{N_{\tilde{A}} \times N_{\tilde{A}}} & \mathbb{H}_{N_{\tilde{A}} \times N_{\tilde{B}}} & \mathbb{H}_{N_{\tilde{A}} \times N_A} & \mathbb{H}_{N_{\tilde{A}} \times N_B} \\ \mathbb{H}_{N_{\tilde{B}} \times N_{\tilde{A}}} & \mathbb{H}_{N_{\tilde{B}} \times N_{\tilde{B}}} & \mathbb{H}_{N_{\tilde{B}} \times N_A} & \mathbb{H}_{N_{\tilde{B}} \times N_B} \\ \mathbb{H}_{N_A \times N_{\tilde{A}}} & \mathbb{H}_{N_A \times N_{\tilde{B}}} & \mathbb{H}_{N_A \times N_A} & \mathbb{H}_{N_A \times N_B} \\ \mathbb{H}_{N_B \times N_{\tilde{A}}} & \mathbb{H}_{N_B \times N_{\tilde{B}}} & \mathbb{H}_{N_B \times N_A} & \mathbb{H}_{N_B \times N_B} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{N_{\tilde{A}} \times 1} \\ \Psi_{N_{\tilde{B}} \times 1} \\ \Psi_{N_A \times 1} \\ \Psi_{N_B \times 1} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_{N_{\tilde{A}} \times 1} \\ \Psi_{N_{\tilde{B}} \times 1} \\ \Psi_{N_A \times 1} \\ \Psi_{N_B \times 1} \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

em que $\mathbb{H}_{N_{\mu} \times N_{\mu'}}$ consiste na matriz de blocos de tamanho $N_{\mu} \times N_{\mu'}$ que representa a interação da subrede μ com a μ' , $\Psi_{N_{\mu} \times 1}$ o vetor coluna relativo à subrede μ de tamanho $N_{\mu} \times 1$, com formato do tipo $\Psi_{N_{\mu} \times 1}^T = (\psi_1^{\mu}, \psi_2^{\mu}, \psi_3^{\mu}, \dots, \psi_{N_{\mu}}^{\mu})$, de acordo com a disposição dos orbitais na Fig.18 por camada λ .

Com isso, para a evolução temporal de um dado pacote de onda definido em sistema finito com na Fig.18, a técnica Split-Operator tem como base o cálculo do operador de evolução temporal fazendo uso da fórmula de Cayley como uma aproximação de primeira ordem para a exponencial (Chaves *et al.*, 2010b), resultando em:

$$\exp \left[-\frac{i}{\hbar} \mathbb{H} \Delta t \right] \approx \left(\mathbb{I} + \frac{i \Delta t}{4 \hbar} \mathbb{H} \right)^{-1} \left(\mathbb{I} - \frac{i \Delta t}{4 \hbar} \mathbb{H} \right) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (3.31)$$

onde \mathbb{H} é a representação discretizada do hamiltoniano na Eq.(3.30), de ordem $N_{\tilde{A}} + N_{\tilde{B}} + N_A + N_B$, \mathbb{I} a matriz identidade da mesma ordem de \mathbb{H} . Logo, para uma dada função $\Psi(\mathbf{r}, t)$ de onda definida sobre toda rede em um tempo t , a função de onda em um tempo posterior $t + \Delta t$ é dada por:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \mathbb{H} \Delta t \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \\ \left(\mathbb{I} + \frac{i \Delta t}{4 \hbar} \mathbb{H} \right) \Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \left(\mathbb{I} - \frac{i \Delta t}{4 \hbar} \mathbb{H} \right) \Psi(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (3.32)$$

A estrutura de $\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t)$ é bem semelhante a forma da Eq.(3.30). Com isso, seguindo a mesma lógica do modelo de 4 bandas por possuir o orbitais dímeros e não dímeros, a definição do pacote de onda gaussiano inicial no modelo tight binding é dado por:

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = N \begin{pmatrix} C_{\tilde{A}} f(\mathbf{R}_1^{\tilde{A}}) \\ \vdots \\ C_{\tilde{A}} f(\mathbf{R}_{N_{\tilde{A}}}^{\tilde{A}}) \\ C_{\tilde{B}} f(\mathbf{R}_1^{\tilde{B}}) \\ \vdots \\ C_{\tilde{B}} f(\mathbf{R}_{N_{\tilde{B}}}^{\tilde{B}}) \\ C_A f(\mathbf{R}_1^A) \\ \vdots \\ C_A f(\mathbf{R}_{N_A}^A) \\ C_B f(\mathbf{R}_1^B) \\ \vdots \\ C_B f(\mathbf{R}_{N_B}^B) \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

onde $f(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{r^2}{2\sigma^2} + i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}\right]$, de *momentum* \mathbf{k}_0 , \mathbf{R}_i^μ e C_μ a posição e o pseudospin (respectivamente) do i -ésimo átomo da subrede μ . Por conta da equivalência que existe com o modelo de 4 bandas, a definição dos pseudospins dos orbitais dímeros no modelo tight binding acaba sendo definido da mesmo em função dos orbitais não dímeros, conforme a Eq.(2.82) e Eq.(2.80), conforme veremos posteriormente.

A resolução da equação de evolução temporal na Eq.(3.32) combinado com o pacote gaussiano na Eq.(3.33) dar-se com solução numérica feita através de simulações computacionais, com a implementação da técnica *Split Operator* mostrada anteriormente. Simulações computacionais com a implementação da técnica *Split Operator* é feita também para o caso do modelo de 2 e 4 bandas, restando apenas o cálculo analítico para o propagadores com função de Green $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$. Nas próximas seções iremos mostrar a comparação entre os resultados dos modelos apresentados.

4 EFEITO DE DEFORMAÇÃO TRIGONAL DEVIDO AO ZITTERBEWEGUNG NA PROPAGAÇÃO DE PACOTES DE ONDAS EM BICAMADA DE GRAFENO

4.1 Introdução

O efeito *zitterbewegung* foi investigado por Erwin Schrodinger em 1930 (Rusin, 2011) na equação de Dirac. A equação de Dirac consiste num equação de onda relativística para partículas de *spin* $s = \frac{1}{2}$. Com isso, tem-se como solução estados com energias positivas e negativa. Os estados com energias positiva será características de elétrons e negativas, característica de buracos. o conceito do efeito *zitterbewegung* consiste na oscilação da trajetórias médias $\langle x \rangle$ ou $\langle y \rangle$, ou $\langle \mathbf{r} \rangle$, com consequência da combinação de estados com energia positivas (p) e negativas (n).

Nesse contexto, investigaremos tal efeito na bicamada de grafeno, sobre a luz do modelo de duas bandas, com a dispersão Eq.(2.108), com a forma dos 3 cones mostrados na Fig.14, obtidos à partir do hamiltoniano Eq.(2.104) de duas bandas. Neste trabalho, faremos $\gamma_4 = 0$ (portanto $F(\mathbf{p}) = 0$) e $U = 0$ pois não faremos a consideração da assimetria elétron-buraco, nem a consideração do GAP, com base na Eq.(2.109).

Com isso, o hamiltoniano de duas bandas que iremos trabalhar tem a forma:

$$\hat{H}_2 = \begin{pmatrix} 0 & |\tilde{w}|e^{-i\theta_\xi(\mathbf{p})} \\ |\tilde{w}|e^{i\theta_\xi(\mathbf{p})} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

com $|\tilde{w}| = \sqrt{w_x^2 + w_y^2}$, com w_x e w_y dados por Eq.(2.103a) e Eq.(2.103b), respectivamente, e $\theta_\xi(\mathbf{p})$ dado por Eq.(2.111). Os auto-estados à ser utilizados, semelhante a Eq.(2.116), é da forma:

$$\Phi_{\pm}^{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\hbar\pi\sqrt{2}} \exp\left[i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar} - i\frac{E_{\pm}(\mathbf{p})t}{\hbar}\right] \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{i\theta_\xi(\mathbf{p})} \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

já com a dependência temporal, onde $E_{\pm}(\mathbf{p})$, com base na Eq.(2.108), é dado por:

$$E_{\pm}(\mathbf{p}) = \pm \sqrt{\frac{v_0^4}{\gamma_1^2} p^4 + v_3^2 p^2 - 2\xi \frac{v_0^2 v_3}{\gamma_1} p^3 \cos(3\phi)} \quad (4.3)$$

que implica no efeito *Trigonal warping* mostrado na figura Fig.14.

4.2 Propagador $G_{\mu,\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ para a bicamada de grafeno

A evolução temporal de um dado estado inicial $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ em tempos posteriores é dado pela aplicação dos propagadores, como demonstrado no apêndice . Para este trabalho, tomamos um pacote de onda gaussiano como estado inicial $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ da forma:

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{|C_1|^2 + |C_2|^2}} \exp \left[-\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^2}{2\sigma^2} + i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} \right] \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

normalizado, onde C_1 e C_2 são os conhecidos *pseudospins*, σ o comprimento do pacote de onda, \mathbf{k}_0 o *momentum*¹ e \mathbf{r}_0 a posição inicial do pacote de onda. O pacote de onda em um tempo posterior $\Psi(\mathbf{r}, t)$ pode ser dado por:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int \mathbb{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \Psi(\mathbf{r}', 0) d^2\mathbf{r}' \quad (4.5)$$

onde $\mathbb{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ a função de Green, ou propagador, na forma matricial:

$$\mathbb{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \begin{pmatrix} G_{1,1} & G_{1,2} \\ G_{2,1} & G_{2,2} \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

cujo os termos $G_{\mu,\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ são dados por (Lavor *et al.*; Maksimova *et al.*; Cunha *et al.*, 2020b, 2008, 2019):

$$G_{\mu,\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \sum_{s=\{+,-\}} \int d^2\mathbf{p} \Phi_{s;\mu}^{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \Phi_{s;\nu}^{\mathbf{p}*}(\mathbf{r}', 0) \quad (4.7)$$

Sabendo que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ pode ser dado em um vetor coluna na forma $\Psi(\mathbf{r}, t) = [\Psi_1(\mathbf{r}, t) \ \Psi_2(\mathbf{r}, t)]^T$, substituindo Eq.(4.6) e Eq.(4.4) em Eq.(4.5), temos:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_2(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} &= \frac{1}{\sqrt{|C_1|^2 + |C_2|^2}} \int f(\mathbf{r}') \begin{pmatrix} G_{1,1} & G_{1,2} \\ G_{2,1} & G_{2,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} d^2\mathbf{r}' \\ &= \frac{1}{\sqrt{|C_1|^2 + |C_2|^2}} \int f(\mathbf{r}') \begin{pmatrix} G_{1,1}C_1 + G_{1,2}C_2 \\ G_{2,1}C_1 + G_{2,2}C_2 \end{pmatrix} d^2\mathbf{r}' \\ &= \frac{1}{\sqrt{|C_1|^2 + |C_2|^2}} \begin{pmatrix} C_1 \int G_{1,1}f(\mathbf{r}') d^2\mathbf{r}' + C_2 \int G_{1,2}f(\mathbf{r}') d^2\mathbf{r}' \\ C_1 \int G_{2,1}f(\mathbf{r}') d^2\mathbf{r}' + C_2 \int G_{2,2}f(\mathbf{r}') d^2\mathbf{r}' \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.8)$$

¹Também dado por $\frac{\mathbf{p}_0}{\hbar}$.

onde $f(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \exp \left[-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^2}{2\sigma^2} + i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} \right]$. A Eq.(4.8) pode ser representada por:

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_2(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{|C_1|^2 + |C_2|^2}} \begin{pmatrix} C_1\Phi_1(\mathbf{r}, t) + C_2\Phi_3(\mathbf{r}, t) \\ C_1\Phi_2(\mathbf{r}, t) + C_2\Phi_4(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

em que $\Phi_1(\mathbf{r}, t)$, $\Phi_2(\mathbf{r}, t)$, $\Phi_3(\mathbf{r}, t)$ e $\Phi_4(\mathbf{r}, t)$ são dados por:

$$\Phi_1(\mathbf{r}, t) = \int G_{1,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) f(\mathbf{r}') d^2\mathbf{r}' \quad (4.10a)$$

$$\Phi_2(\mathbf{r}, t) = \int G_{2,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) f(\mathbf{r}') d^2\mathbf{r}' \quad (4.10b)$$

$$\Phi_3(\mathbf{r}, t) = \int G_{1,2}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) f(\mathbf{r}') d^2\mathbf{r}' \quad (4.10c)$$

$$\Phi_4(\mathbf{r}, t) = \int G_{2,2}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) f(\mathbf{r}') d^2\mathbf{r}' \quad (4.10d)$$

Usando a equação Eq.(4.2), calculamos os termos Eq.(4.7). Calculando, primeiramente, o termo $G_{1,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$, temos:

$$\begin{aligned} G_{1,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= \sum_{s=\{+,-\}} \int d^2\mathbf{p} \Phi_{s;1}^{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \Phi_{s;1}^{\mathbf{p};*}(\mathbf{r}', 0) \\ &= \int d^2\mathbf{p} \Phi_{+;1}^{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \Phi_{+;1}^{\mathbf{p};*}(\mathbf{r}', 0) + \int d^2\mathbf{p} \Phi_{-;1}^{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \Phi_{-;1}^{\mathbf{p};*}(\mathbf{r}', 0) \\ &= \frac{1}{8\hbar^2\pi^2} \int d^2\mathbf{p} \left(\exp \left[i\frac{\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\hbar} - i\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right] + \exp \left[i\frac{\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\hbar} + i\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right] \right) \\ &= \frac{1}{(2\hbar\pi)^2} \int d^2\mathbf{p} \exp \left[i\frac{\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\hbar} \right] \cos \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \end{aligned} \quad (4.11)$$

onde $\varepsilon(\mathbf{p}) = \sqrt{\frac{v_0^4}{\gamma_1^2} p^4 + v_3^2 p^2 - 2\xi \frac{v_0^2 v_3}{\gamma_1} p^3 \cos(3\phi)}$. Calculando $G_{1,2}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$, temos:

$$\begin{aligned} G_{1,2}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= \sum_{s=\{+,-\}} \int d^2\mathbf{p} \Phi_{s;1}^{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \Phi_{s;2}^{\mathbf{p};*}(\mathbf{r}', 0) \\ &= \int d^2\mathbf{p} \Phi_{+;1}^{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \Phi_{+;2}^{\mathbf{p};*}(\mathbf{r}', 0) + \int d^2\mathbf{p} \Phi_{-;1}^{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \Phi_{-;2}^{\mathbf{p};*}(\mathbf{r}', 0) \\ &= \frac{1}{8\hbar^2\pi^2} \int d^2\mathbf{p} e^{-i\theta_\xi(\mathbf{p})} \left(\exp \left[i\frac{\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\hbar} - i\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right] \right. \\ &\quad \left. - \exp \left[i\frac{\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\hbar} + i\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right] \right) \\ &= -\frac{i}{(2\hbar\pi)^2} \int d^2\mathbf{p} e^{-i\theta_\xi(\mathbf{p})} \exp \left[i\frac{\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\hbar} \right] \sin \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \end{aligned} \quad (4.12)$$

Calculamos, agora, $G_{2,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$.

$$\begin{aligned}
G_{2,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= \sum_{s=\{+,-\}} \int d^2\mathbf{p} \Phi_{s;2}^{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \Phi_{s;1}^{\mathbf{p};*}(\mathbf{r}', 0) \\
&= \int d^2\mathbf{p} \Phi_{+;2}^{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \Phi_{+;1}^{\mathbf{p};*}(\mathbf{r}', 0) + \int d^2\mathbf{p} \Phi_{-;2}^{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \Phi_{-;1}^{\mathbf{p};*}(\mathbf{r}', 0) \\
&= \frac{1}{8\hbar^2\pi^2} \int d^2\mathbf{p} e^{i\theta_\xi(\mathbf{p})} \left(\exp \left[i \frac{\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\hbar} - i \frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right] \right. \\
&\quad \left. - \exp \left[i \frac{\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\hbar} + i \frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right] \right) \\
&= -\frac{i}{(2\hbar\pi)^2} \int d^2\mathbf{p} e^{i\theta_\xi(\mathbf{p})} \exp \left[i \frac{\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\hbar} \right] \sin \left(\frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \tag{4.13}
\end{aligned}$$

Calculamos, agora, $G_{2,2}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$.

$$\begin{aligned}
G_{2,2}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= \sum_{s=\{+,-\}} \int d^2\mathbf{p} \Phi_{s;2}^{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \Phi_{s;2}^{\mathbf{p};*}(\mathbf{r}', 0) \\
&= \int d^2\mathbf{p} \Phi_{+;2}^{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \Phi_{+;2}^{\mathbf{p};*}(\mathbf{r}', 0) + \int d^2\mathbf{p} \Phi_{-;2}^{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \Phi_{-;2}^{\mathbf{p};*}(\mathbf{r}', 0) \\
&= \frac{1}{8\hbar^2\pi^2} \int d^2\mathbf{p} \left(\exp \left[i \frac{\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\hbar} - i \frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right] + \exp \left[i \frac{\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\hbar} + i \frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right] \right) \\
&= \frac{1}{(2\hbar\pi)^2} \int d^2\mathbf{p} \exp \left[i \frac{\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\hbar} \right] \cos \left(\frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) = G_{1,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \tag{4.14}
\end{aligned}$$

Calculamos, agora, $\Phi_1(\mathbf{r}, t)$, $\Phi_2(\mathbf{r}, t)$, $\Phi_3(\mathbf{r}, t)$ e $\Phi_4(\mathbf{r}, t)$. Primeiramente, calculamos $\Phi_1(\mathbf{r}, t)$.

$$\begin{aligned}
\Phi_1(\mathbf{r}, t) &= \int G_{1,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) f(\mathbf{r}') d^2\mathbf{r}' \\
&= \frac{1}{(2\hbar\pi)^2} \int \left\{ \int d^2\mathbf{p} \exp \left[i \frac{\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\hbar} \right] \cos \left(\frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \right\} f(\mathbf{r}') d^2\mathbf{r}' \\
&= \frac{1}{(2\hbar\pi)^2} \int e^{\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}} \cos \left(\frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \left[\int d^2\mathbf{r}' e^{i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}'}{\hbar}} f(\mathbf{r}') \right] d^2\mathbf{p} \\
&= \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \frac{1}{(2\hbar\pi)^2} \int e^{\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}} \cos \left(\frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \left[\int d^2\mathbf{r}' e^{i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}'}{\hbar}} \exp \left(-\frac{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0|^2}{2\sigma^2} + i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}' \right) \right] d^2\mathbf{p} \\
&= \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \frac{e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_0}}{(2\hbar\pi)^2} \int e^{\frac{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{r}_0)}{\hbar}} \cos \left(\frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \left[\int d^2\mathbf{u} e^{i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{u}}{\hbar}} \exp \left(-\frac{|\mathbf{u}|^2}{2\sigma^2} + i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{u} \right) \right] d^2\mathbf{p} \\
&= \frac{\sigma e^{-\frac{k_0^2\sigma^2}{2}} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_0}}{2\hbar^2\sqrt{\pi^3}} \int e^{\frac{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{r}_0)}{\hbar}} \cos \left(\frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \exp \left(-\frac{p^2\sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar} \right) d^2\mathbf{p} \tag{4.15}
\end{aligned}$$

Calculamos, agora, a função $\Phi_2(\mathbf{r}, t)$.

$$\begin{aligned}
\Phi_2(\mathbf{r}, t) &= \int G_{2,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) f(\mathbf{r}') d^2\mathbf{r}' \\
&= -\frac{i}{(2\hbar\pi)^2} \int \left\{ \int d^2\mathbf{p} e^{i\theta_\xi(\mathbf{p})} \exp \left[i \frac{\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\hbar} \right] \sin \left(\frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \right\} f(\mathbf{r}') d^2\mathbf{r}' \\
&= -\frac{i}{(2\hbar\pi)^2} \int e^{i\theta_\xi(\mathbf{p})} e^{\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}} \cos \left(\frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \left[\int d^2\mathbf{r}' e^{i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}'}{\hbar}} f(\mathbf{r}') \right] d^2\mathbf{p} \\
&= -\frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \frac{i}{(2\hbar\pi)^2} \int e^{i\theta_\xi(\mathbf{p})} e^{\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}} \sin \left(\frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \\
&\quad \times \left[\int d^2\mathbf{r}' e^{i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}'}{\hbar}} \exp \left(-\frac{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0|^2}{2\sigma^2} + i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}' \right) \right] d^2\mathbf{p} \\
&= -\frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \frac{ie^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_0}}{(2\hbar\pi)^2} \int e^{i\theta_\xi(\mathbf{p})} e^{\frac{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{r}_0)}{\hbar}} \sin \left(\frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \\
&\quad \times \left[\int d^2\mathbf{u} e^{i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{u}}{\hbar}} \exp \left(-\frac{|\mathbf{u}|^2}{2\sigma^2} + i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{u} \right) \right] d^2\mathbf{p} \\
&= -\frac{i\sigma e^{-\frac{k_0^2\sigma^2}{2}} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_0}}{2\hbar^2\sqrt{\pi^3}} \int e^{i\theta_\xi(\mathbf{p})} e^{\frac{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{r}_0)}{\hbar}} \sin \left(\frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \\
&\quad \times \exp \left(-\frac{p^2\sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar} \right) d^2\mathbf{p} \tag{4.16}
\end{aligned}$$

Calculamos, agora, a função $\Phi_3(\mathbf{r}, t)$.

$$\begin{aligned}
\Phi_3(\mathbf{r}, t) &= \int G_{1,2}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) f(\mathbf{r}') d^2\mathbf{r}' \\
&= -\frac{i}{(2\hbar\pi)^2} \int \left\{ \int d^2\mathbf{p} e^{-i\theta_\xi(\mathbf{p})} \exp \left[i \frac{\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\hbar} \right] \sin \left(\frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \right\} f(\mathbf{r}') d^2\mathbf{r}' \\
&= -\frac{i}{(2\hbar\pi)^2} \int e^{-i\theta_\xi(\mathbf{p})} e^{\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}} \cos \left(\frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \left[\int d^2\mathbf{r}' e^{i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}'}{\hbar}} f(\mathbf{r}') \right] d^2\mathbf{p} \\
&= -\frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \frac{i}{(2\hbar\pi)^2} \int e^{-i\theta_\xi(\mathbf{p})} e^{\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}} \sin \left(\frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \\
&\quad \times \left[\int d^2\mathbf{r}' e^{i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}'}{\hbar}} \exp \left(-\frac{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0|^2}{2\sigma^2} + i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}' \right) \right] d^2\mathbf{p} \\
&= -\frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \frac{ie^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_0}}{(2\hbar\pi)^2} \int e^{-i\theta_\xi(\mathbf{p})} e^{\frac{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{r}_0)}{\hbar}} \sin \left(\frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \\
&\quad \times \left[\int d^2\mathbf{u} e^{i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{u}}{\hbar}} \exp \left(-\frac{|\mathbf{u}|^2}{2\sigma^2} + i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{u} \right) \right] d^2\mathbf{p} \\
&= -\frac{i\sigma e^{-\frac{k_0^2\sigma^2}{2}} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_0}}{2\hbar^2\sqrt{\pi^3}} \int e^{-i\theta_\xi(\mathbf{p})} e^{\frac{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{r}_0)}{\hbar}} \sin \left(\frac{\mathcal{E}(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \\
&\quad \times \exp \left(-\frac{p^2\sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar} \right) d^2\mathbf{p} \tag{4.17}
\end{aligned}$$

Sabendo que $G_{2,2}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = G_{1,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ (pela a Eq.(4.14)), temos que $\Phi_4(\mathbf{r}, t) = \Phi_1(\mathbf{r}, t)$.

$$\Phi_4(\mathbf{r}, t) = \frac{\sigma e^{-\frac{k_0^2 \sigma^2}{2}} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_0}}{2\hbar^2 \sqrt{\pi^3}} \int e^{\frac{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{r}_0)}{\hbar}} \cos\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar}\right) d^2\mathbf{p} \quad (4.18)$$

Dado as equações Eq.(4.15) à Eq.(4.18), na próxima seção, com os devidos parâmetros para o pacote de onda gaussiano Eq.(4.4), investigamos a evolução temporal do ponto vista analítico, calculando os valores médios de posição com o uso das funções de Green, com o uso da equação Eq.(4.9), e do ponto de vista numérico, com o uso da técnica *Split Operator*, descrito no capítulo 3, sendo tais feitas a partir da ótica que o modelo de 2 bandas pode prover.

4.3 Valores médios de posição $\langle \mathbf{r}(t) \rangle$ com o uso dos propagadores $G_{\mu,\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$

O calculo dos valores médios de trajetórias $\langle \mathbf{r}(t) \rangle$ é dado por (Lavor *et al.*; Maksimova *et al.*, 2020b, 2008):

$$\langle \mathbf{r}(t) \rangle = i\hbar \sum_{i=1}^2 \int \tilde{\Psi}_i^*(\mathbf{p}, t) \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Psi}_i(\mathbf{p}, t) d^2\mathbf{p} \quad (4.19)$$

onde $\tilde{\Psi}_i(\mathbf{p}, t)$ consiste na transformada de Fourier². A transformada de Fourier de $\Phi_1(\mathbf{r}, t)$, $\Phi_2(\mathbf{r}, t)$, $\Phi_3(\mathbf{r}, t)$ e $\Phi_4(\mathbf{r}, t)$ é dado por:

$$\tilde{\Phi}_1(\mathbf{p}, t) = \frac{\sigma e^{-\frac{k_0^2 \sigma^2}{2}} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_0}}{\hbar \sqrt{\pi}} e^{\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_0}{\hbar}} \cos\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar}\right), \quad (4.20a)$$

$$\tilde{\Phi}_2(\mathbf{p}, t) = -\frac{i\sigma e^{-\frac{k_0^2 \sigma^2}{2}} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_0}}{\hbar \sqrt{\pi}} e^{i\theta_{\xi}(\mathbf{p})} e^{\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_0}{\hbar}} \sin\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar}\right), \quad (4.20b)$$

$$\tilde{\Phi}_3(\mathbf{p}, t) = -\frac{i\sigma e^{-\frac{k_0^2 \sigma^2}{2}} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_0}}{\hbar \sqrt{\pi}} e^{-i\theta_{\xi}(\mathbf{p})} e^{\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_0}{\hbar}} \sin\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar}\right), \quad (4.20c)$$

$$\tilde{\Phi}_4(\mathbf{p}, t) = \frac{\sigma e^{-\frac{k_0^2 \sigma^2}{2}} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_0}}{\hbar \sqrt{\pi}} e^{\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_0}{\hbar}} \cos\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar}\right), \quad (4.20d)$$

Aproveitando as transformadas de Fourier, calculamos nas próximas seções os valores de posição para os 3 tipos de *pseudospin* $[1, 0]^T$, $[1, 1]^T$ e $[1, i]^T$.

²Para esse caso, temos que a transformada de Fourier $\mathcal{F}(\mathbf{p}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}} f(\mathbf{r}) d^2\mathbf{r}$ e inversa $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{-\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}} \mathcal{F}(\mathbf{p}) d^2\mathbf{p}$.

4.3.1 Pseudospin $[\mathbf{1}, \mathbf{0}]^T$

Para a polarização $C_1 = 1$ e $C_2 = 0$ no pacote de ondas, temos que a equação Eq.(4.9) fica da forma:

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_2(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Phi_1(\mathbf{r}, t) \\ \Phi_2(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

Com foco nas trajetórias médias, calculamos as mesmas a partir de Eq.(4.21).

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}(t) \rangle &= i\hbar \sum_{i=1}^2 \int \tilde{\Psi}_i^*(\mathbf{p}, t) \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Psi}_i(\mathbf{p}, t) d^2\mathbf{p} \\ &= i\hbar \left[\int \tilde{\Phi}_1^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_1 d^2\mathbf{p} + \int \tilde{\Phi}_2^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_2 d^2\mathbf{p} \right] \\ &= i\hbar e^{-k_0^2 \sigma^2} \left(\frac{\sigma}{\sqrt{\pi\hbar}} \right)^2 \left\{ \int \left[\cos\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar}\right) \right] \right. \\ &\quad \times \nabla_{\mathbf{p}} \left[\cos\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar}\right) \right] d^2\mathbf{p} \\ &\quad + \int \left[e^{-i\theta_{\xi}(\mathbf{p})} \sin\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar}\right) \right] \\ &\quad \left. \times \nabla_{\mathbf{p}} \left[e^{i\theta_{\xi}(\mathbf{p})} \sin\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar}\right) \right] d^2\mathbf{p} \right\}, \end{aligned}$$

Simplificando, temos:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}(t) \rangle &= i\hbar e^{-k_0^2 \sigma^2} \left(\frac{\sigma}{\sqrt{\pi\hbar}} \right)^2 \int \left\{ i \left[\nabla_{\mathbf{p}} \theta_{\xi}(\mathbf{p}) \right] \sin^2\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar}\right) - \frac{\mathbf{p}\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{\mathbf{k}_0 \sigma^2}{\hbar} \right\} \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{p^2 \sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar}\right) d^2\mathbf{p}, \end{aligned}$$

Sendo $\theta_{\xi}(\mathbf{p})$ dado por Eq.(2.111). Sendo a integral nula

$$\int \left\{ -\frac{\mathbf{p}\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{\mathbf{k}_0 \sigma^2}{\hbar} \right\} \exp\left(-\frac{p^2 \sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar}\right) d^2\mathbf{p} = 0, \quad (4.22)$$

como demonstrado no apêndice A, $\langle \mathbf{r}(t) \rangle$ é dado por:

$$\langle \mathbf{r}(t) \rangle = -\frac{\sigma^2}{\pi\hbar} e^{-k_0^2 \sigma^2} \int \left[\nabla_{\mathbf{p}} \theta_{\xi}(\mathbf{p}) \right] \sin^2\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{p^2 \sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar}\right) d^2\mathbf{p}, \quad (4.23)$$

Sendo as componentes de $\nabla_{\mathbf{p}} \theta_{\xi}(\mathbf{p})$ calculados nas Eq.(A.50a-A.50b), as médias $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ é dado por:

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= -\frac{\sigma^2}{\pi\hbar} e^{-k_0^2\sigma^2} \int \left[\frac{2v_0^2\xi p_y [v_0^2(p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x] + [2v_0^2\xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y] (2v_0^2 p_x - \gamma_1 \xi v_3)}{[v_0^2(p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x]^2 + [2v_0^2\xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y]^2} \right] \\ &\times \sin^2\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{p^2\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p}\cdot\mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar}\right) d^2\mathbf{p} \end{aligned} \quad (4.24a)$$

$$\begin{aligned} \langle y(t) \rangle &= -\frac{\sigma^2}{\pi\hbar} e^{-k_0^2\sigma^2} \int \left[\frac{(2v_0^2\xi p_x + \gamma_1 v_3) [v_0^2(p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x] - 2v_0^2\xi p_y [2v_0^2\xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y]}{[v_0^2(p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x]^2 + [2v_0^2\xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y]^2} \right] \\ &\times \sin^2\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{p^2\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p}\cdot\mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar}\right) d^2\mathbf{p} \end{aligned} \quad (4.24b)$$

Para $\gamma_3 = 0$, ou seja, sem a presença do efeito *trigonal warping*, temos que $\theta_\xi(\mathbf{p}) = 2\xi\phi^3$, de acordo com a Eq.(2.111), e $\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m}$, com $m = \frac{\gamma_1}{2v_0^2}$, de acordo com a Eq.(4.3). Logo, a Eq.(4.23) pode ser dada por:

$$\langle \mathbf{r}(t) \rangle = -\frac{2\xi\sigma^2}{\pi\hbar} e^{-k_0^2\sigma^2} \int \nabla_{\mathbf{p}}\phi \sin^2\left(\frac{p^2 t}{2m\hbar}\right) \exp\left(-\frac{p^2\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p}\cdot\mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar}\right) d^2\mathbf{p}, \quad (4.25)$$

Usando coordenadas polares, até mesmo o gradiente⁴. Sabendo que $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ e que $\mathbf{k}_0 = k_0(\cos\theta, \sin\theta)$, temos:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}(t) \rangle &= -\frac{2\xi\sigma^2}{\pi\hbar} e^{-k_0^2\sigma^2} \int \nabla_{\mathbf{p}}\phi \sin^2\left(\frac{p^2 t}{2m\hbar}\right) \exp\left(-\frac{p^2\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p}\cdot\mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar}\right) d^2\mathbf{p} \\ &= -\frac{2\xi\sigma^2}{\pi} e^{-k_0^2\sigma^2} \int_0^\infty k dk \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\hat{\phi}}{k} \sin^2\left(\frac{\hbar k^2 t}{2m}\right) \exp(-k^2\sigma^2 + 2\mathbf{k}\cdot\mathbf{k}_0\sigma^2) \\ &= -\frac{2\xi\sigma^2}{\pi} e^{-a^2} \int_0^\infty dk \int_0^{2\pi} d\phi \hat{\phi} \sin^2\left(\frac{\hbar k^2 t}{2m}\right) e^{-k^2\sigma^2} e^{2kk_0\cos(\phi-\theta)\sigma^2} \end{aligned}$$

onde $a = k_0\sigma$. Temos que os valores médios $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ pode ser dados por:

$$\langle x(t) \rangle = \frac{2\xi\sigma^2}{\pi} e^{-a^2} \int_0^\infty dk \int_0^{2\pi} d\phi \sin\phi \sin^2\left(\frac{\hbar k^2 t}{2m}\right) e^{-k^2\sigma^2} e^{2kk_0\cos(\phi-\theta)\sigma^2} \quad (4.26a)$$

$$\langle y(t) \rangle = -\frac{2\xi\sigma^2}{\pi} e^{-a^2} \int_0^\infty dk \int_0^{2\pi} d\phi \cos\phi \sin^2\left(\frac{\hbar k^2 t}{2m}\right) e^{-k^2\sigma^2} e^{2kk_0\cos(\phi-\theta)\sigma^2} \quad (4.26b)$$

Resolvendo as integrações, como demonstrado no apêndice A, temos que $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ é dado por:

³onde $\phi = \arctan\left(\frac{p_y}{p_x}\right)$

⁴dado por $\nabla_{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{p}}\frac{\partial}{\partial p} + \frac{\hat{\phi}}{p}\frac{\partial}{\partial\phi}$, onde $\hat{\mathbf{p}} = (\cos\phi, \sin\phi)$ e $\hat{\phi} = (-\sin\phi, \cos\phi)$.

$$\langle x(t) \rangle = \sigma \xi \sin \theta \left[\frac{1 - e^{-a^2}}{a} - 2e^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} \cos(2q^2 t') I_1(2qa) dq \right] \quad (4.27a)$$

$$\langle y(t) \rangle = -\sigma \xi \cos \theta \left[\frac{1 - e^{-a^2}}{a} - 2e^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} \cos(2q^2 t') I_1(2qa) dq \right] \quad (4.27b)$$

onde $q = k\sigma$, $t' = \frac{\hbar t}{2m\sigma^2}$ e I_1 a função de Bessel modificada de primeira ordem. Analisando as duas equações acima, podemos que a ausência do efeito *trigonal warping* influência bastante na forma final das trajetórias médias. Analisaremos nas próximas seções de forma mais profunda a influencia do *trigonal warping*.

4.3.2 Pseudospin $[\mathbf{1}, \mathbf{1}]^T$

Para a polarização $C_1 = 1$ e $C_2 = 1$ no pacote de ondas, temos que a equação Eq.(4.9) fica da forma:

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_2(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \Phi_1(\mathbf{r}, t) + \Phi_3(\mathbf{r}, t) \\ \Phi_2(\mathbf{r}, t) + \Phi_4(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

Com foco nas trajetórias médias, calculamos as mesmas a partir de Eq.(4.28).

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}(t) \rangle &= i\hbar \sum_{i=1}^2 \int \tilde{\Psi}_i^*(\mathbf{p}, t) \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Psi}_i(\mathbf{p}, t) d^2 \mathbf{p} \\ &= \frac{i\hbar}{2} \left[\int (\tilde{\Phi}_1^* + \tilde{\Phi}_3^*) \nabla_{\mathbf{p}} (\tilde{\Phi}_1 + \tilde{\Phi}_3) d^2 \mathbf{p} + \int (\tilde{\Phi}_2^* + \tilde{\Phi}_4^*) \nabla_{\mathbf{p}} (\tilde{\Phi}_2 + \tilde{\Phi}_4) d^2 \mathbf{p} \right] \\ &= \frac{i\hbar}{2} \left[\int \left(\tilde{\Phi}_1^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_1 + \tilde{\Phi}_1^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_3 + \tilde{\Phi}_3^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_1 + \tilde{\Phi}_3^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_3 \right) d^2 \mathbf{p} \right. \\ &\quad \left. + \int \left(\tilde{\Phi}_2^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_2 + \tilde{\Phi}_2^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_4 + \tilde{\Phi}_4^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_2 + \tilde{\Phi}_4^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_4 \right) d^2 \mathbf{p} \right] \quad (4.29) \end{aligned}$$

Sabendo que $\tilde{\Phi}_1 = \tilde{\Phi}_4$, pela a equação Eq.(4.18), e $\tilde{\Phi}_3 = -\tilde{\Phi}_2^*$, pela as equações Eq.(4.16) e Eq.(4.17), temos:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{r}(t) \rangle &= \frac{i\hbar}{2} \left[\int \left(\tilde{\Phi}_1^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_1 + \tilde{\Phi}_1^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_3 + \tilde{\Phi}_3^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_1 + \tilde{\Phi}_3^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_3 \right) d^2\mathbf{p} \right. \\
&\quad \left. + \int \left(\tilde{\Phi}_2^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_2 + \tilde{\Phi}_2^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_4 + \tilde{\Phi}_4^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_2 + \tilde{\Phi}_4^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_4 \right) d^2\mathbf{p} \right] \\
&= \frac{i\hbar}{2} \left[\int \nabla_{\mathbf{p}} \left(\tilde{\Phi}_1^* \tilde{\Phi}_1 \right) d^2\mathbf{p} + \int \nabla_{\mathbf{p}} \left(\tilde{\Phi}_3^* \tilde{\Phi}_3 \right) d^2\mathbf{p} + \int \tilde{\Phi}_3^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_1 d^2\mathbf{p} + \int \tilde{\Phi}_1 \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_3 d^2\mathbf{p} \right. \\
&\quad \left. - \int \tilde{\Phi}_3 \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_1 d^2\mathbf{p} - \int \tilde{\Phi}_1 \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_3^* d^2\mathbf{p} \right]
\end{aligned}$$

Substituindo as funções, temos

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{r}(t) \rangle &= \frac{i\hbar}{2} e^{-k_0^2 \sigma^2} \left(\frac{\sigma}{\hbar \sqrt{\pi}} \right)^2 \left\{ \int \nabla_{\mathbf{p}} \left[\cos^2 \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) \right] d^2\mathbf{p} \right. \\
&\quad + \int \nabla_{\mathbf{p}} \left[\sin^2 \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) \right] d^2\mathbf{p} + i \int \left[e^{i\theta_{\xi}(\mathbf{p})} \sin \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \right. \\
&\quad \times \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) \nabla_{\mathbf{p}} \left[\cos \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) \right] d^2\mathbf{p} \\
&\quad - i \int \left[\cos \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) \right] \nabla_{\mathbf{p}} \left[e^{-i\theta_{\xi}(\mathbf{p})} \sin \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \right. \\
&\quad \times \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) \left. \right] d^2\mathbf{p} + i \int \left[e^{-i\theta_{\xi}(\mathbf{p})} \sin \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) \right] \nabla_{\mathbf{p}} \left[\cos \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) \right] d^2\mathbf{p} - i \int \left[\cos \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \right. \\
&\quad \left. \times \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) \right] \nabla_{\mathbf{p}} \left[e^{i\theta_{\xi}(\mathbf{p})} \sin \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) \right] d^2\mathbf{p} \left. \right\}
\end{aligned}$$

Simplificando, temos:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{r}(t) \rangle &= \frac{i\hbar}{2} e^{-k_0^2 \sigma^2} \left(\frac{\sigma}{\hbar \sqrt{\pi}} \right)^2 \int \left[-\frac{2\mathbf{p}\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2\mathbf{k}_0\sigma^2}{\hbar} - \frac{2it}{\hbar} \nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p}) \cos \theta_{\xi}(\mathbf{p}) \right. \\
&\quad \left. + i \sin \theta_{\xi}(\mathbf{p}) \nabla_{\mathbf{p}} \theta_{\xi}(\mathbf{p}) \sin \left(\frac{2\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \right] \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) d^2\mathbf{p} \quad (4.30)
\end{aligned}$$

Assim como no caso anterior, como na Eq.(4.22), temos que $\langle \mathbf{r}(t) \rangle$ pode ser dado por:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{r}(t) \rangle &= e^{-k_0^2 \sigma^2} \frac{\sigma^2}{2\pi\hbar} \int \left[\frac{2t}{\hbar} \nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p}) \cos \theta_{\xi}(\mathbf{p}) - \sin \theta_{\xi}(\mathbf{p}) \nabla_{\mathbf{p}} \theta_{\xi}(\mathbf{p}) \right. \\
&\quad \left. \times \sin \left(\frac{2\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \right] \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) d^2 \mathbf{p}
\end{aligned} \tag{4.31}$$

Sendo as componentes de $\nabla_{\mathbf{p}} \theta_{\xi}(\mathbf{p})$ e $\nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p})$ calculados nas Eq.(A.50a-A.50b) e Eq.(A.52a-A.52b), temos que $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ é dado por:

$$\begin{aligned}
\langle x(t) \rangle &= e^{-k_0^2 \sigma^2} \frac{\sigma^2}{2\pi\hbar} \int \left\{ \frac{2t \cos \theta_{\xi}(\mathbf{p})}{\hbar \varepsilon(\mathbf{p})} \left[\frac{v_0^4}{\gamma_1^2} p^2 p_x + v_3 p_x - 3\xi \frac{v_0^2 v_3}{\gamma_1} p^2 \cos(2\phi) \right] \right. \\
&\quad \left. - \left[\frac{2v_0^2 \xi p_y [v_0^2 (p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x] + [2v_0^2 \xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y] (2v_0^2 p_x - \gamma_1 \xi v_3)}{[v_0^2 (p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x]^2 + [2v_0^2 \xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y]^2} \right] \sin \theta_{\xi}(\mathbf{p}) \right. \\
&\quad \left. \times \sin \left(\frac{2\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \right\} \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) d^2 \mathbf{p},
\end{aligned} \tag{4.32a}$$

$$\begin{aligned}
\langle y(t) \rangle &= e^{-k_0^2 \sigma^2} \frac{\sigma^2}{2\pi\hbar} \int \left\{ \frac{2t \cos \theta_{\xi}(\mathbf{p})}{\hbar \varepsilon(\mathbf{p})} \left[\frac{v_0^4}{\gamma_1^2} p^2 p_y + v_3 p_y - 3\xi \frac{v_0^2 v_3}{\gamma_1} p^2 \sin(2\phi) \right] \right. \\
&\quad \left. - \left[\frac{(2v_0^2 \xi p_x + \gamma_1 v_3) [v_0^2 (p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x] - 2v_0^2 \xi p_y [2v_0^2 \xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y]}{[v_0^2 (p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x]^2 + [2v_0^2 \xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y]^2} \right] \sin \theta_{\xi}(\mathbf{p}) \right. \\
&\quad \left. \times \sin \left(\frac{2\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \right\} \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) d^2 \mathbf{p},
\end{aligned} \tag{4.32b}$$

Assim como o caso anterior, analisamos a Eq.(4.31) sem a influência do *trigonal warping*, ou seja $\gamma_3 = 0$. Com $\theta_{\xi}(\mathbf{p}) = 2\xi\phi$ e $\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m}$, temos:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{r}(t) \rangle &= e^{-k_0^2 \sigma^2} \frac{\sigma^2}{2\pi\hbar} \int \left[\frac{2t}{\hbar} \nabla_{\mathbf{p}} \left(\frac{p^2}{2m} \right) \cos(2\phi) - 2 \sin(2\phi) \nabla_{\mathbf{p}} \phi \right. \\
&\quad \left. \times \sin \left(\frac{p^2 t}{m\hbar} \right) \right] \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) d^2 \mathbf{p}
\end{aligned} \tag{4.33}$$

$$\langle \mathbf{r}(t) \rangle = e^{-k_0^2 \sigma^2} \frac{\sigma^2}{2\pi\hbar} \int \left[\frac{2t}{\hbar} \frac{\mathbf{p}}{m} \cos(2\phi) - 2 \frac{\hat{\phi}}{p} \sin(2\phi) \sin \left(\frac{p^2 t}{m\hbar} \right) \right] \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) d^2 \mathbf{p} \tag{4.34}$$

Usando $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ e usando coordenadas polares, temos:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}(t) \rangle &= e^{-k_0^2 \sigma^2} \frac{\sigma^2}{2\pi} \int_0^\infty dk \int_0^{2\pi} d\phi \left[\frac{2t\hbar k^2}{m} \hat{\mathbf{k}} \cos(2\phi) - 2\hat{\phi} \sin(2\phi) \sin\left(\frac{\hbar k^2 t}{m}\right) \right] \\ &\quad \times \exp\left(-k^2 \sigma^2 + 2kk_0 \sigma^2 \cos(\phi - \theta)\right) \end{aligned} \quad (4.35)$$

Sendo $a = k_0 \sigma$, temos:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}(t) \rangle &= e^{-a^2} \frac{\sigma^2}{\pi} \left\{ \frac{t\hbar}{m} \int_0^\infty dk k^2 e^{-k^2 \sigma^2} \left[\int_0^{2\pi} \hat{\mathbf{k}} \cos(2\phi) e^{2k\sigma a \cos(\phi - \theta)} d\phi \right] \right. \\ &\quad \left. - \int_0^\infty dk \sin\left(\frac{\hbar k^2 t}{m}\right) e^{-k^2 \sigma^2} \left[\int_0^{2\pi} \hat{\phi} \sin(2\phi) e^{2k\sigma a \cos(\phi - \theta)} d\phi \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.36)$$

as médias $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ é dada por:

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= e^{-a^2} \frac{\sigma^2}{\pi} \left\{ \frac{t\hbar}{m} \int_0^\infty dk k^2 e^{-k^2 \sigma^2} \left[\int_0^{2\pi} \cos \phi \cos(2\phi) e^{2k\sigma a \cos(\phi - \theta)} d\phi \right] \right. \\ &\quad \left. + \int_0^\infty dk \sin\left(\frac{\hbar k^2 t}{m}\right) e^{-k^2 \sigma^2} \left[\int_0^{2\pi} \sin \phi \sin(2\phi) e^{2k\sigma a \cos(\phi - \theta)} d\phi \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.37a)$$

$$\begin{aligned} \langle y(t) \rangle &= e^{-a^2} \frac{\sigma^2}{\pi} \left\{ \frac{t\hbar}{m} \int_0^\infty dk k^2 e^{-k^2 \sigma^2} \left[\int_0^{2\pi} \sin \phi \cos(2\phi) e^{2k\sigma a \cos(\phi - \theta)} d\phi \right] \right. \\ &\quad \left. - \int_0^\infty dk \sin\left(\frac{\hbar k^2 t}{m}\right) e^{-k^2 \sigma^2} \left[\int_0^{2\pi} \cos \phi \sin(2\phi) e^{2k\sigma a \cos(\phi - \theta)} d\phi \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.37b)$$

Pelo o *software* Mathematica®(Inc.,), temos que as integrais em colchetes assim são dadas por:

$$\int_0^{2\pi} \cos \phi \cos(2\phi) e^{2k\sigma a \cos(\phi - \theta)} d\phi = \pi \cos \theta \left[2I_3(2qa) \cos(2\theta) + qa {}_0F_1(3; q^2 a^2) \right] \quad (4.38a)$$

$$\int_0^{2\pi} \sin \phi \sin(2\phi) e^{2k\sigma a \cos(\phi - \theta)} d\phi = qa\pi \cos \theta \left[(2 \cos(2\theta) - 1) {}_0F_1(3; q^2 a^2) + 4 {}_0F_1(2; q^2 a^2) \sin^2 \theta \right] \quad (4.38b)$$

$$\int_0^{2\pi} \sin \phi \cos(2\phi) e^{2k\sigma a \cos(\phi - \theta)} d\phi = qa\pi \left[2 \cos(2\theta) \sin \theta {}_0F_1(2; q^2 a^2) - \sin(3\theta) {}_0F_1(3; q^2 a^2) \right] \quad (4.38c)$$

$$\int_0^{2\pi} \cos \phi \sin(2\phi) e^{2k\sigma a \cos(\phi - \theta)} d\phi = 4\pi I_1(2qa) \cos \theta \sin(2\theta) - qa\pi \sin(3\theta) {}_0F_1(3; q^2 a^2) \quad (4.38d)$$

onde $q = k\sigma$, I_3 é a função de Bessel modificada de terceira ordem e ${}_0F_1(n; z)$ a função hipergeométrica confluyente de ordem n . Temos que as médias $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ é dada por:

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle = & \sigma \cos \theta e^{-a^2} \left\{ 2t' \int_0^\infty dq q^2 e^{-q^2} \left[2I_3(2qa) \cos(2\theta) + qa {}_0F_1(3; q^2 a^2) \right] \right. \\ & \left. + a \int_0^\infty dq q \sin(2q^2 t') e^{-q^2} \left[(2 \cos(2\theta) - 1) {}_0F_1(3; q^2 a^2) + 4 {}_0F_1(2; q^2 a^2) \sin^2 \theta \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.39a)$$

$$\begin{aligned} \langle y(t) \rangle = & \sigma e^{-a^2} \left\{ 2t' \int_0^\infty dq q^3 e^{-q^2} \left[2 \cos(2\theta) \sin \theta {}_0F_1(2; q^2 a^2) - \sin(3\theta) {}_0F_1(3; q^2 a^2) \right] \right. \\ & \left. - \int_0^\infty dq \sin(2q^2 t') e^{-q^2} \left[4I_1(2qa) \cos \theta \sin(2\theta) - qa \sin(3\theta) {}_0F_1(3; q^2 a^2) \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.39b)$$

onde $t' = \frac{\hbar t}{2m\sigma^2}$. Para um caso específico onde $\theta = \frac{\pi}{2}$ (polarização de *momentum* no eixo y), temos que a integral Eq.(4.38c) é dada por (Inc.,):

$$\int_0^{2\pi} \sin \phi \cos(2\phi) e^{2k\sigma a \cos(\phi - \theta)} d\phi \Big|_{\theta = \frac{\pi}{2}} = -2\pi \left[I_1(2aq) - \left(\frac{1}{aq} \right) I_2(2aq) \right], \quad (4.40)$$

Onde I_2 é a função de Bessel modificada de segunda ordem. Logo, tendo que $\langle x(t) \rangle = 0$, $\langle y(t) \rangle$ pode ser dado por:

$$\begin{aligned} \langle y(t) \rangle = & -e^{-a^2} \sigma \left\{ 4t' \int_0^\infty dq e^{-q^2} \left[q^2 I_1(2aq) - \left(\frac{q}{a} \right) I_2(2aq) \right] \right. \\ & \left. + a \int_0^\infty dq q \sin(2q^2 t') e^{-q^2} {}_0F_1(3; q^2 a^2) \right\} \end{aligned} \quad (4.41)$$

Nas próximas seções abordaremos os resultados para a polarização $[1, 1]^T$.

4.3.3 Pseudospin $[1, i]^T$

Para a polarização $C_1 = 1$ e $C_2 = i$ no pacote de ondas, temos que a equação Eq.(4.9) fica da forma:

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_2(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \Phi_1(\mathbf{r}, t) + i\Phi_3(\mathbf{r}, t) \\ \Phi_2(\mathbf{r}, t) + i\Phi_4(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \quad (4.42)$$

Com foco nas trajetórias médias, calculamos as mesmas a partir de Eq.(4.42).

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{r}(t) \rangle &= i\hbar \sum_{i=1}^2 \int \tilde{\Psi}_i^*(\mathbf{p}, t) \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Psi}_i(\mathbf{p}, t) d^2\mathbf{p} \\
&= \frac{i\hbar}{2} \left[\int (\tilde{\Phi}_1^* - i\tilde{\Phi}_3^*) \nabla_{\mathbf{p}} (\tilde{\Phi}_1 + i\tilde{\Phi}_3) d^2\mathbf{p} + \int (\tilde{\Phi}_2^* - i\tilde{\Phi}_4^*) \nabla_{\mathbf{p}} (\tilde{\Phi}_2 + i\tilde{\Phi}_4) d^2\mathbf{p} \right] \\
&= \frac{i\hbar}{2} \left[\int \left(\tilde{\Phi}_1^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_1 + i\tilde{\Phi}_1^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_3 - i\tilde{\Phi}_3^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_1 + \tilde{\Phi}_3^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_3 \right) d^2\mathbf{p} \right. \\
&\quad \left. + \int \left(\tilde{\Phi}_2^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_2 + i\tilde{\Phi}_2^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_4 - i\tilde{\Phi}_4^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_2 + \tilde{\Phi}_4^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_4 \right) d^2\mathbf{p} \right] \quad (4.43)
\end{aligned}$$

Da mesma forma que no caso anterior, sabendo que $\tilde{\Phi}_1 = \tilde{\Phi}_4$, pela a equação Eq.(4.18), e $\tilde{\Phi}_3 = -\tilde{\Phi}_2^*$, pela as equações Eq.(4.16) e Eq.(4.17), temos:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{r}(t) \rangle &= \frac{i\hbar}{2} \left[\int \nabla_{\mathbf{p}} \left(\tilde{\Phi}_1^* \tilde{\Phi}_1 \right) d^2\mathbf{p} + \int \nabla_{\mathbf{p}} \left(\tilde{\Phi}_3^* \tilde{\Phi}_3 \right) d^2\mathbf{p} - i \int \tilde{\Phi}_3^* \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_1 d^2\mathbf{p} + i \int \tilde{\Phi}_1 \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_3 d^2\mathbf{p} \right. \\
&\quad \left. - i \int \tilde{\Phi}_3 \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_1 d^2\mathbf{p} + i \int \tilde{\Phi}_1 \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Phi}_3^* d^2\mathbf{p} \right]
\end{aligned}$$

Substituindo as funções, temos

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{r}(t) \rangle &= \frac{i\hbar}{2} e^{-k_0^2 \sigma^2} \left(\frac{\sigma}{\hbar \sqrt{\pi}} \right)^2 \left\{ \int \nabla_{\mathbf{p}} \left[\cos^2 \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) \right] d^2\mathbf{p} \right. \\
&\quad + \int \nabla_{\mathbf{p}} \left[\sin^2 \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) \right] d^2\mathbf{p} + \int \left[e^{i\theta_{\xi}(\mathbf{p})} \sin \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \right. \\
&\quad \times \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) \nabla_{\mathbf{p}} \left[\cos \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) \right] d^2\mathbf{p} \\
&\quad + \int \left[\cos \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) \nabla_{\mathbf{p}} \left[e^{-i\theta_{\xi}(\mathbf{p})} \sin \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \right. \right. \\
&\quad \times \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) \left. \right] d^2\mathbf{p} - \int \left[e^{-i\theta_{\xi}(\mathbf{p})} \sin \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \right. \\
&\quad \times \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) \nabla_{\mathbf{p}} \left[\cos \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) \right] d^2\mathbf{p} \\
&\quad \left. - \int \left[\cos \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) \nabla_{\mathbf{p}} \left[e^{i\theta_{\xi}(\mathbf{p})} \sin \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \times \exp \left(-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar} \right) \right] d^2\mathbf{p} \right\}
\end{aligned}$$

Simplificando, temos:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{r}(t) \rangle &= \frac{i\hbar}{2} e^{-k_0^2 \sigma^2} \left(\frac{\sigma}{\hbar \sqrt{\pi}} \right)^2 \int \left[-\frac{2\mathbf{p}\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2\mathbf{k}_0\sigma^2}{\hbar} - \frac{2it}{\hbar} \nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p}) \sin \theta_{\xi}(\mathbf{p}) \right. \\
&\quad \left. - i \cos \theta_{\xi}(\mathbf{p}) \nabla_{\mathbf{p}} \theta_{\xi}(\mathbf{p}) \sin \left(\frac{2\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \right] \exp \left(-\frac{p^2\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar} \right) d^2\mathbf{p} \quad (4.44)
\end{aligned}$$

Assim como no caso anterior, como na Eq.(4.22), temos que $\langle \mathbf{r}(t) \rangle$ pode ser dado por:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{r}(t) \rangle &= e^{-k_0^2 \sigma^2} \frac{\sigma^2}{2\pi\hbar} \int \left[\frac{2t}{\hbar} \nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p}) \sin \theta_{\xi}(\mathbf{p}) + \cos \theta_{\xi}(\mathbf{p}) \nabla_{\mathbf{p}} \theta_{\xi}(\mathbf{p}) \right. \\
&\quad \left. \times \sin \left(\frac{2\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \right] \exp \left(-\frac{p^2\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar} \right) d^2\mathbf{p} \quad (4.45)
\end{aligned}$$

Sendo as componentes de $\nabla_{\mathbf{p}} \theta_{\xi}(\mathbf{p})$ e $\nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p})$ calculados nas Eq.(A.50a-A.50b) e Eq.(A.52a-A.52b), temos que $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ é dado por:

$$\begin{aligned}
\langle x(t) \rangle &= e^{-k_0^2 \sigma^2} \frac{\sigma^2}{2\pi\hbar} \int \left\{ \frac{2t \sin \theta_{\xi}(\mathbf{p})}{\hbar \varepsilon(\mathbf{p})} \left[\frac{v_0^4}{\gamma_1^2} p^2 p_x + v_3 p_x - 3\xi \frac{v_0^2 v_3}{\gamma_1} p^2 \cos(2\phi) \right] \right. \\
&\quad + \left[\frac{2v_0^2 \xi p_y [v_0^2 (p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x] + [2v_0^2 \xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y] (2v_0^2 p_x - \gamma_1 \xi v_3)}{[v_0^2 (p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x]^2 + [2v_0^2 \xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y]^2} \right] \cos \theta_{\xi}(\mathbf{p}) \\
&\quad \left. \times \sin \left(\frac{2\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \right\} \exp \left(-\frac{p^2\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar} \right) d^2\mathbf{p} \quad (4.46a)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle y(t) \rangle &= e^{-k_0^2 \sigma^2} \frac{\sigma^2}{2\pi\hbar} \int \left\{ \frac{2t \sin \theta_{\xi}(\mathbf{p})}{\hbar \varepsilon(\mathbf{p})} \left[\frac{v_0^4}{\gamma_1^2} p^2 p_y + v_3 p_y - 3\xi \frac{v_0^2 v_3}{\gamma_1} p^2 \sin(2\phi) \right] \right. \\
&\quad + \left[\frac{(2v_0^2 \xi p_x + \gamma_1 v_3) [v_0^2 (p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x] - 2v_0^2 \xi p_y [2v_0^2 \xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y]}{[v_0^2 (p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x]^2 + [2v_0^2 \xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y]^2} \right] \cos \theta_{\xi}(\mathbf{p}) \\
&\quad \left. \times \sin \left(\frac{2\varepsilon(\mathbf{p})t}{\hbar} \right) \right\} \exp \left(-\frac{p^2\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar} \right) d^2\mathbf{p} \quad (4.46b)
\end{aligned}$$

Assim como o caso anterior, analisamos a Eq.(4.45) sem a influência do *trigonal warping*, ou seja $\gamma_3 = 0$. Com $\theta_{\xi}(\mathbf{p}) = 2\xi\phi$ e $\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m}$, temos:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}(t) \rangle &= e^{-k_0^2 \sigma^2} \frac{\sigma^2}{2\pi\hbar} \int \left[\xi \frac{2t}{\hbar} \nabla_{\mathbf{p}} \left(\frac{p^2}{2m} \right) \sin(2\phi) + 2\xi \cos(2\phi) \nabla_{\mathbf{p}} \phi \right. \\ &\quad \left. \times \sin\left(\frac{p^2 t}{m\hbar}\right) \right] \exp\left(-\frac{p^2 \sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar}\right) d^2 \mathbf{p} \end{aligned} \quad (4.47)$$

$$\langle \mathbf{r}(t) \rangle = e^{-k_0^2 \sigma^2} \xi \frac{\sigma^2}{2\pi\hbar} \int \left[\frac{2t}{\hbar} \frac{\mathbf{p}}{m} \cos(2\phi) + 2 \frac{\hat{\phi}}{p} \sin(2\phi) \sin\left(\frac{p^2 t}{m\hbar}\right) \right] \exp\left(-\frac{p^2 \sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_0) \sigma^2}{\hbar}\right) d^2 \mathbf{p} \quad (4.48)$$

Usando $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ e usando coordenadas polares, temos:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}(t) \rangle &= - = e^{-k_0^2 \sigma^2} \frac{\sigma^2}{2\pi} \int_0^\infty dk \int_0^{2\pi} d\phi \left[\frac{2t\hbar k^2}{m} \hat{\mathbf{k}} \cos(2\phi) + 2\hat{\phi} \sin(2\phi) \sin\left(\frac{\hbar k^2 t}{m}\right) \right] \\ &\quad \times \exp\left(-k^2 \sigma^2 + 2kk_0 \sigma^2 \cos(\phi - \theta)\right) \end{aligned} \quad (4.49)$$

Sendo $a = k_0 \sigma$ e $q = k \sigma$, temos:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}(t) \rangle &= e^{-a^2} \frac{\xi}{\pi} \left\{ \frac{t\hbar}{m\sigma} \int_0^\infty dq q^2 e^{-q^2} \left[\int_0^{2\pi} \hat{\mathbf{k}} \sin(2\phi) e^{2qa \cos(\phi - \theta)} d\phi \right] \right. \\ &\quad \left. + \sigma \int_0^\infty dq \sin\left(\frac{\hbar t}{m\sigma^2} q^2\right) e^{-q^2} \left[\int_0^{2\pi} \hat{\phi} \cos(2\phi) e^{2qa \cos(\phi - \theta)} d\phi \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.50)$$

sendo $t' = \frac{\hbar t}{2m\sigma^2}$, temos que:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}(t) \rangle &= e^{-a^2} \xi \frac{\sigma}{\pi} \left\{ 2t' \int_0^\infty dq q^2 e^{-q^2} \left[\int_0^{2\pi} \hat{\mathbf{k}} \sin(2\phi) e^{2qa \cos(\phi - \theta)} d\phi \right] \right. \\ &\quad \left. + \int_0^\infty dq \sin(2q^2 t') e^{-q^2} \left[\int_0^{2\pi} \hat{\phi} \cos(2\phi) e^{2qa \cos(\phi - \theta)} d\phi \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.51)$$

as médias $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ é dada por:

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= e^{-a^2} \xi \frac{\sigma}{\pi} \left\{ 2t' \int_0^\infty dq q^2 e^{-q^2} \left[\int_0^{2\pi} \cos \phi \sin(2\phi) e^{2qa \cos(\phi - \theta)} d\phi \right] \right. \\ &\quad \left. - \int_0^\infty dq \sin(2q^2 t') e^{-q^2} \left[\int_0^{2\pi} \sin \phi \cos(2\phi) e^{2qa \cos(\phi - \theta)} d\phi \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.52a)$$

$$\begin{aligned} \langle y(t) \rangle &= - e^{-a^2} \xi \frac{\sigma}{\pi} \left\{ 2t' \int_0^\infty dq q^2 e^{-q^2} \left[\int_0^{2\pi} \sin \phi \sin(2\phi) e^{2qa \cos(\phi - \theta)} d\phi \right] \right. \\ &\quad \left. + \int_0^\infty dq \sin(2q^2 t') e^{-q^2} \left[\int_0^{2\pi} \cos \phi \cos(2\phi) e^{2qa \cos(\phi - \theta)} d\phi \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.52b)$$

Tendo as integrais Eq.(4.38a)-(4.38d) resolvidas na polarização anterior, temos que $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ são dados por:

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle = e^{-a^2} \xi \sigma \left\{ 2t' \int_0^\infty dq q^2 e^{-q^2} \left[4I_1(2qa) \cos \theta \sin(2\theta) - qa \sin(3\theta) {}_0F_1(3; q^2 a^2) \right] \right. \\ \left. - a \int_0^\infty dq q \sin(2q^2 t') e^{-q^2} \left[2 \cos(2\theta) \sin \theta {}_0F_1(2; q^2 a^2) - \sin(3\theta) {}_0F_1(3; q^2 a^2) \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.53a)$$

$$\begin{aligned} \langle y(t) \rangle = e^{-a^2} \xi \sigma \cos \theta \left\{ 2at' \int_0^\infty dq q^3 e^{-q^2} \left[(2 \cos(2\theta) - 1) {}_0F_1(3; q^2 a^2) + 4 {}_0F_1(2; q^2 a^2) \sin^2 \theta \right] \right. \\ \left. + \int_0^\infty dq \sin(2q^2 t') e^{-q^2} \left[2I_3(2qa) \cos(2\theta) + qa {}_0F_1(3; q^2 a^2) \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.53b)$$

Da mesma forma que no caso anterior, para $\theta = \frac{\pi}{2}$, polarizado no eixo y, temos que $\langle y(t) \rangle = 0$. Para calcular $\langle x(t) \rangle$, temos que as integrais Eq.(4.38c) e Eq.(4.38d)⁵ são dados por:

$$\int_0^{2\pi} \sin \phi \cos(2\phi) e^{2qa \cos(\phi - \theta)} d\phi \Big|_{\theta = \frac{\pi}{2}} = 2\pi \left[-I_1(2qa) + \frac{I_2(2qa)}{qa} \right] \quad (4.54a)$$

$$\int_0^{2\pi} \cos \phi \sin(2\phi) e^{2qa \cos(\phi - \theta)} d\phi \Big|_{\theta = \frac{\pi}{2}} = 2\pi \frac{I_2(2qa)}{qa} \quad (4.54b)$$

Temos que $\langle x(t) \rangle$ para esse caso em específico, é dado por:

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle = e^{-a^2} \xi \sigma \left\{ 4t' \int_0^\infty dq e^{-q^2} \left(\frac{q}{a} \right) I_2(2qa) \right. \\ \left. - 2 \int_0^\infty dq \sin(2q^2 t') e^{-q^2} \left[-I_1(2qa) + \frac{I_2(2qa)}{qa} \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.55)$$

Nessa seção, vimos uma abordagem analítica à cerca do valores médios utilizando o modelo de 2 bandas. Percebemos que em todas as trajetórias médias dependem do parâmetro a . Na próxima seção, abordaremos com mais detalhes a função do parâmetro a , bem como a comparação do modelo analítico com um abordagem numérica.

⁵Calculadas pelo o software *Mathematica* ®(Inc.,)

4.4 Resultados para o Hamiltoniano de 2 bandas

Utilizando o pacote de onda gaussiano inicial dado na equação Eq.(4.4), aplicamos sobre o mesmo o operador de evolução temporal para o modelo de 2 bandas para a bicamada de grafeno $\widehat{U}_2(t_0, t)$ descritos na equação Eq.(3.16). Fazendo essa análise do ponto de vista do modelo de 2, primeiramente, lidamos com o efeito *trigonal warping* de maneira mais direta, como veremos mais adiante.

Para a abordagem numérica, o *momentum* do pacote de onda \mathbf{k}_0 assumirá duas formas: polarização no eixo x e no eixo y , conforme descrito na tabela 3. Em ambas as polarizações, investigaremos os 3 casos de *pseudospins* $[C_1, C_2]^T$, como $[1, 0]^T$, $[1, 1]^T$ e $[1, i]^T$, comparando os valores médios com o cálculo analítico feito com o propagador $G_{\mu, \nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ feito na seção anterior.

Tabela 3 – Tabela de parâmetro usados na construção do pacote de onda na Eq.(4.4), com a polarização no eixo x ou y .

Polarização	<i>momentum</i> \mathbf{k}_0	Posição inicial \mathbf{r}_0	θ ($^\circ$)
Eixo x	$\mathbf{k}_0 = (k_0, 0)$	$\mathbf{r}_0 = (0, 0)$	$\theta = 0^\circ$
Eixo y	$\mathbf{k}_0 = (0, k_0)$	$\mathbf{r}_0 = (0, 0)$	$\theta = 90^\circ$

4.4.1 Polarização no eixo x

Para efeito de comparação com o caso analítico, obtido anteriormente com o uso dos propagadores $G_{\mu, \nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$, tomamos $\mathbf{k}_0 = (k_0, 0)$ nas equações da posição média $\langle \hat{\mathbf{r}}(t) \rangle$, dada nas equações Eq.(4.23), para o *pseudospin* $[1, 0]^T$, Eq.(4.31), para $[1, 1]^T$ e Eq.(4.45) para o *pseudospin* $[1, i]^T$.

Na seção anterior, vimos casos específicos para a polarização no eixo y , com $\theta = \frac{\pi}{2}$, para a ausência do efeito *trigonal warping*. Para a polarização no eixo x ($\theta = 0^\circ$), temos que $\langle x(t) \rangle = 0$ e $\langle y(t) \rangle \neq 0$, para o *pseudospin* $[1, 0]^T$, $\langle x(t) \rangle \neq 0$ e $\langle y(t) \rangle = 0$, para o *pseudospin* $[1, 1]^T$, $\langle x(t) \rangle = 0$ e $\langle y(t) \rangle \neq 0$, para o *pseudospin* $[1, i]^T$. Os valores médios não nulos são dados por pelas as equações Eq.(4.56a-4.56c), para os *pseudospins* $[1, 0]^T$, $[1, 1]^T$ e $[1, i]^T$, respectivamente.

$$\langle y(t) \rangle = -\sigma \xi \left[\frac{1 - e^{-a^2}}{a} - 2e^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} \cos(2q^2 t') I_1(2qa) dq \right] \quad (4.56a)$$

$$\langle x(t) \rangle = \sigma e^{-a^2} \int_0^\infty dq e^{-q^2} \left\{ 2t' q^2 \left[2I_3(2qa) + qa {}_0F_1(3; q^2 a^2) \right] - aq \sin(2q^2 t') {}_0F_1(3; q^2 a^2) \right\} \quad (4.56b)$$

$$\langle y(t) \rangle = e^{-a^2} \xi \sigma \int_0^\infty dq e^{-q^2} \left\{ -2at' q^3 {}_0F_1(3; q^2 a^2) + \sin(2q^2 t') \left[2I_3(2qa) + qa {}_0F_1(3; q^2 a^2) \right] \right\} \quad (4.56c)$$

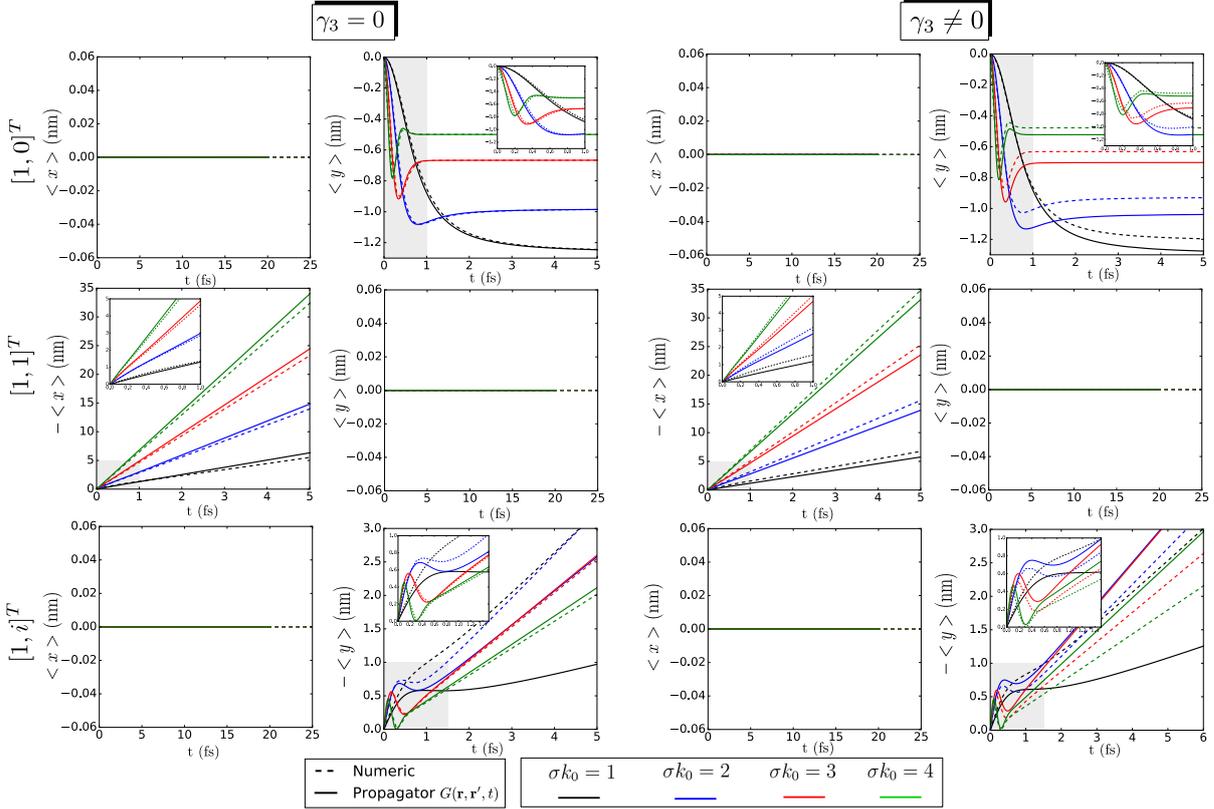
Além de uma abordagem analítica, tomamos agora a simulação com o da técnica *split operator* para o modelo de 2 bandas, conforme exposto na Eq.(3.20). Com isso, através do algoritmo da técnica mencionada (Fig.17), tomamos a propagação de um dado pacote de onda, como na Eq.(4.4), com as 3 possibilidade de *pseudospins* mencionadas.

Na simulação pela a técnica *Split operator*, analisamos, primeiramente, os valores médios do *pseudospin* $[1, 0]^T$, $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$. Vemos que para γ_3 nulo ou não nulo para o eixo x , o valor médio permanece constante. Isso pode ser visto analisando as equações Eq.(4.56a) e Eq.(4.24a-4.24b), que resulta $\langle x \rangle = 0$, em conformidade com a simulação na Fig. 19 pela a técnica *Split Operator* (explanado no capítulo 3) e pelo o propagador $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$. Como podemos ver na figura, as oscilações dos valores médios $\langle y \rangle$ são bastante perceptivas para os 4 valores de $\sigma k_0 = a$, com um comportamento mais intenso em $\sigma k_0 = 4$, para ambos os casos de γ_3 nulo ou não nulo, sendo perceptível o efeito *zitterbewegung* no pacote de onda ao longo do tempo.

A análise da densidade de probabilidade na figura Fig.20 para o caso do *pseudospin* $[1, 0]^T$, vemos que ao considerarmos o *hopping* γ_3 , o efeito *trigonal warping* possui pouca influência sobre o pacote de onda ao longo do tempo em que o pacote vai evoluindo. Tal percepção é vista para duas simulações: $\sigma k_0 = 1$ e $\sigma k_0 = 2$. Outro aspecto interessante à se ressaltar é a tendência do pacote de onde de dividir-se em dos sub-pacotes.

Analisando, agora, o caso do *pseudospin* $[1, 1]^T$, vemos que para γ_3 nulo ou não nulo para o eixo y , o valor médio permanece constante. Isso pode ser visto analisando a equação Eq.(4.56b) e Eq.(4.32a-4.32b), que resulta $\langle y \rangle = 0$, em conformidade com a simulação na Fig. 19 pela a técnica *Split Operator* e pelo o propagador $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$. As oscilações dos valores médios $\langle x \rangle$ praticamente não existem para os 4 valores de $\sigma k_0 = a$, para ambos os casos de γ_3 nulo ou não nulo, sendo inexistente o efeito *zitterbewegung* no pacote de onda ao longo de sua evolução temporal.

Figura 19 – **Polarização em x ($\theta = 0^\circ$)**: Utilizando um pacote de ondas gaussiano na forma da Eq.(4.4), analisamos sua evolução temporal na bicamada de grafeno sob a perspectiva dos propagadores $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ (linhas sólidas) e da técnica *Split Operator* (linhas tracejadas). Tomamos $\sigma = 2, nm$, $\mathbf{k}_0 = (k_0, 0), nm^{-1}$, onde analisamos quatro produtos $a = \sigma k_0 = 1, 2, 3, 4$, e $\mathbf{r}_0 = (0, 0)$ para o momento e a posição inicial. O efeito *zitterbewegung* é perceptível devido às oscilações nas trajetórias ao longo do tempo ($\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$).

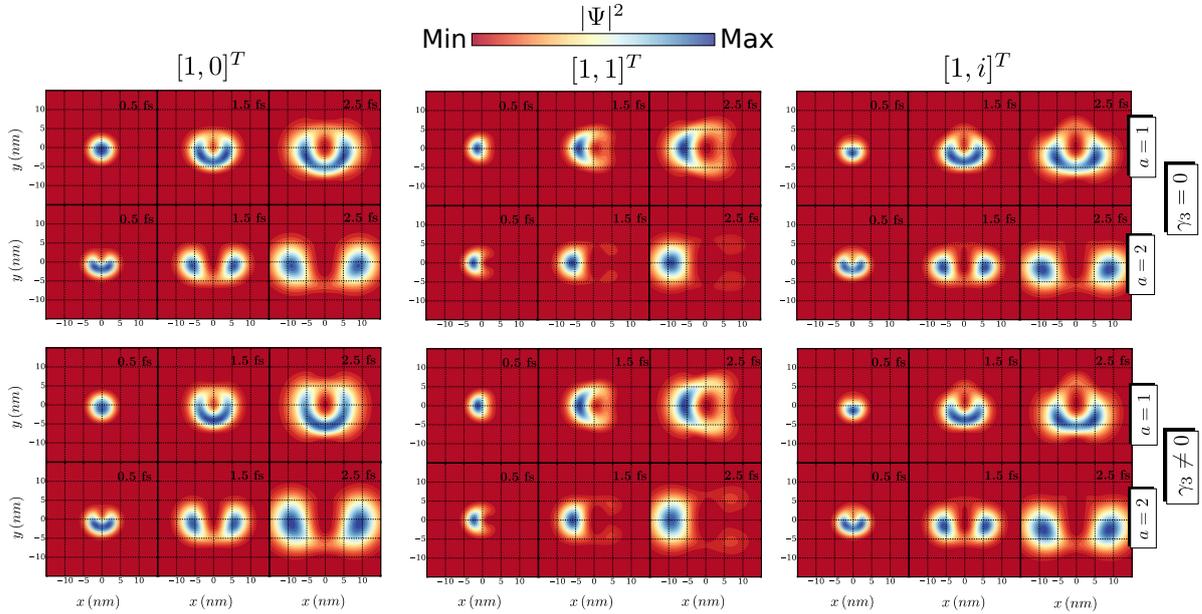


Analisando a densidade de probabilidade na figura Fig.20 para o *pseudospin* $[1, 1]^T$, vemos que ao considerarmos o *hopping* γ_3 , o efeito *trigonal warping* possui pouca (ou quase nenhuma) influência sobre o pacote de onda ao longo do tempo em que o pacote vai evoluindo. A influência ainda é menor quando comparamos com a simulação anterior para o *pseudospin* $[1, 0]^T$. Tal percepção é vista para duas simulações: $a = \sigma k_0 = 1$ e $a = \sigma k_0 = 2$. Outro aspecto interessante a se ressaltar é que, diferente da simulação anterior, nesse caso, não temos a tendência do pacote de onda de dividir-se em dois sub-pacotes.

O caso para o *pseudospin* $[1, 0]^T$, em particular, representa um ótimo caso para a implementação de dispositivos de transporte devido ao fato de que o fluxo eletrônico ocorre de maneira harmoniosa e uniforme, sem situação não desejadas decorrentes das oscilações provocadas pelo o efeito *zitterbewegung*.

Por ultimo, analisando a figura Fig.19 para o *pseudospin* $[1, i]^T$, vemos que para

Figura 20 – (**Polarização em x**): Utilizando um pacote de ondas gaussiano na forma da Eq.(4.4), analisamos sua evolução temporal na bicamada de grafeno, observando os instantes da densidade de probabilidade $|\Psi|^2$ para as 3 polarizações $[C_1, C_2]^T$. Tomamos $\sigma = 20, nm$, momentum $\mathbf{k}_0 = (k_0, 0), nm^{-1}$, onde analisamos dois produtos $a = \sigma k_0 = 1, 2$. A posição inicial é $\mathbf{r}_0 = (0, 0)$.



γ_3 nulo ou não nulo para o eixo x , o valor médio permanece constante, semelhante aos casos anteriores para um dos eixos x ou y . Isso pode ser visto analisando a equação Eq.(4.56c) e Eq.(4.46a-4.46b), onde simplificando, resulta $\langle x \rangle = 0$, em conformidade com a simulação na Fig. 19 pela a técnica *Split operator* e pelo o propagador $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$. Nos instantes iniciais, vemos que as oscilações dos valores médios $\langle y \rangle$ são perceptíveis para os 4 valores de $\sigma k_0 = a$, para ambos os casos de γ_3 nulo ou não nulo, sendo a incidência do efeito *zitterbewegung* um fato no pacote de onda ao longo do tempo.

A análise da densidade de probabilidade na figura Fig.20 para o *pseudospin* $[1, i]^T$, vemos que ao considerarmos o *hopping* γ_3 , o efeito *trigonal warping* possui pouca influência sobre o pacote de onda ao longo do tempo em que o pacote vai evoluindo, sendo muito forte nos instantes iniciais como mencionado anteriormente. A influência do efeito *zitterbewegung* ainda é menor quando comparamos com a simulação de *pseudospin* $[1, 0]^T$, mas um tanto intensa quando comparamos com o caso anterior $[1, 0]^T$. Tal percepção é vista para duas simulações: $a = \sigma k_0 = 1$ e $a = \sigma k_0 = 2$. Outro aspecto interessante à se ressaltar é que, diferente da simulação anterior, nesse caso, nós temos a tendência do pacote de onda dividir-se em dois sub-pacotes, propagando-se em velocidades opostas no eixo- x .

Nas três simulações vistas até para a polarização no eixo x , vimos em todos os casos

que o pacote de onda pode ou não dividir em dois sub-pacotes no decorrer do tempo para algumas polarizações de *pseudospins*, como nos casos $[1, 0]^T$ e $[1, i]^T$. A divisão do pacote de onda em dois sub-pacotes torna-se mais intensa no decorrer do tempo com valores mais altos do produto $a = \sigma k_0$ maior (como na Fig.20 para $[1, 0]^T$ e $[1, i]^T$), que implicaria necessariamente em um *momentum* k_0 maior, implicando também em energias mais altas para o pacote. Outro aspecto é o fato de todas as representações de trajetórias do centro do pacote de onda ($\langle x \rangle, \langle y \rangle$) ser retilíneo (como mostrado na Fig.19). Além da questão de divisão de sub-pacotes e trajetórias retilíneas, temos que os resultados das simulações para os valores de *hoppings* γ_3 nulo e não nulo são muito semelhantes. Veremos a explicação dessa semelhança após a realização da mesma simulação, mas para o eixo y , onde faremos uma comparação.

4.4.2 Polarização no eixo y

Figura 21 – **Polarização em y e $\phi = 90^\circ$** : Os mesmos parâmetros da polarização em x (Fig.19), mas agora para a polarização do eixo y do *momentum*.

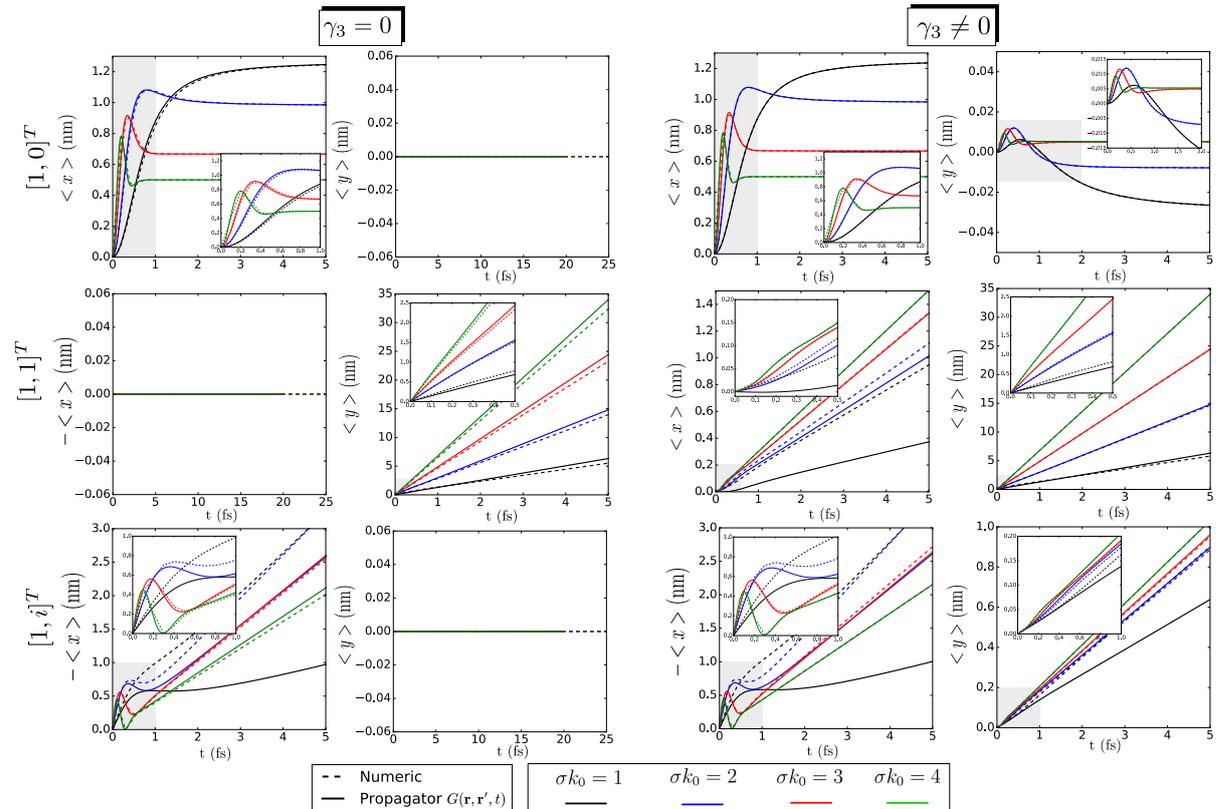
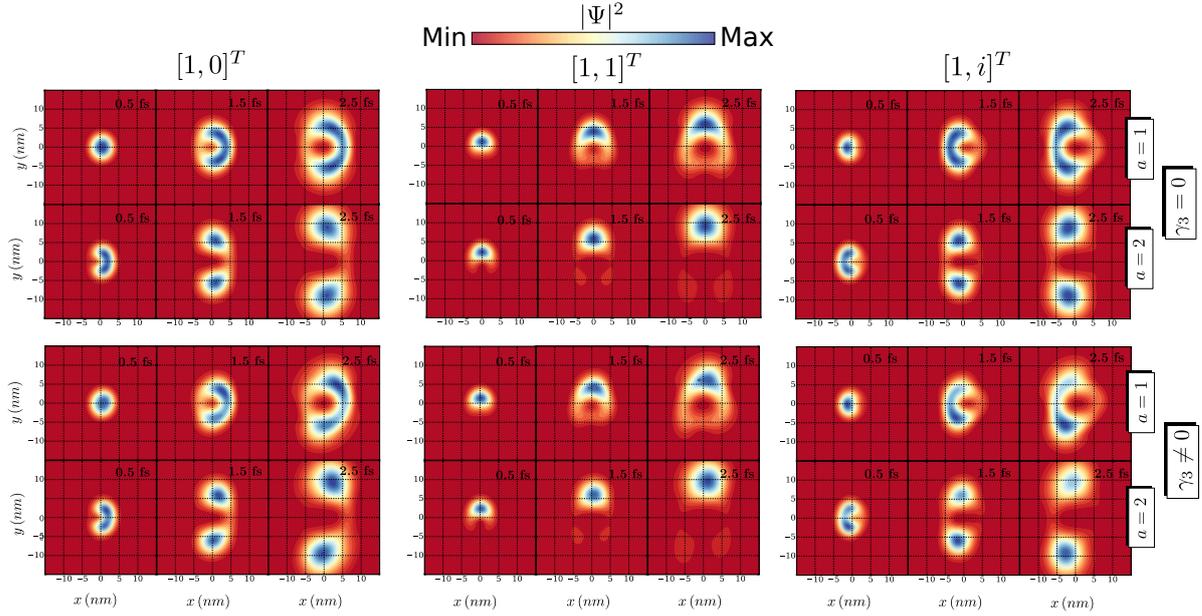


Figura 22 – (Polarização em y): Os mesmos parâmetros da polarização x (Fig.20), mas para a polarização do eixo y do *momentum*, com $\mathbf{k}_0 = (0, k_0)$.



$$\langle x(t) \rangle = \sigma \xi \left[\frac{1 - e^{-a^2}}{a} - 2e^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} \cos(2q^2 t') I_1(2qa) dq \right] \quad (4.57a)$$

$$\langle y(t) \rangle = -e^{-a^2} \sigma \int_0^\infty dq \left\{ 4t' e^{-q^2} \left[q^2 I_1(2aq) - \left(\frac{q}{a}\right) I_2(2aq) \right] + aq \sin(2q^2 t') e^{-q^2} {}_0F_1(3; q^2 a^2) \right\} \quad (4.57b)$$

$$\langle x(t) \rangle = e^{-a^2} \xi \sigma \int_0^\infty dq \left\{ 4t' e^{-q^2} \left(\frac{q}{a}\right) I_2(2qa) - 2 \sin(2q^2 t') e^{-q^2} \left[-I_1(2qa) + \frac{I_2(2qa)}{qa} \right] \right\} \quad (4.57c)$$

Assim como na seção anterior, como vimos para a polarização no eixo x ($\theta = 0^\circ$), temos as expressões analítica para os valores médios. Para a polarização no eixo y ($\theta = \frac{\pi}{2}$), como calculado anteriormente com a ausência do efeito *trigonal warping* pela as equações Eq.(4.57a) e Eq.(4.41-4.55), temos que $\langle y(t) \rangle = 0$ e $\langle x(t) \rangle \neq 0$, para o *pseudospin* $[1, 0]^T$, $\langle y(t) \rangle \neq 0$ e $\langle x(t) \rangle = 0$, para o *pseudospin* $[1, 1]^T$, $\langle y(t) \rangle = 0$ e $\langle x(t) \rangle \neq 0$, para o *pseudospin* $[1, i]^T$. Os valores médios não nulos são dados por pelas as equações Eq.(4.57a-4.57c), para os *pseudospins* $[1, 0]^T$, $[1, 1]^T$ e $[1, i]^T$, respectivamente.

Na seção anterior, vimos as devidas simulações com a dinâmica de pacotes de ondas com a polarização do *momentum* \mathbf{k}_0 polarizado no eixo x. Agora, realizando novamente uma simulação para o modelo de duas bandas, adotamos os parâmetros do pacote de onda gaussiano na Eq.(4.4), descritos na tabela 3, com o *momentum* \mathbf{k}_0 polarizado no eixo-y, investigando para

3 casos de *pseudospins*: $[1,0]^T$, $[1,1]^T$ e o caso $[1,i]^T$, semelhante aos caso anteriores para a polarização no eixo x .

Analisando, primeiramente de forma breve a Fig. 21, para o *pseudospin* $[1,0]^T$, vemos que para γ_3 não nulo, temos a oscilação dos valores médios de $\langle x \rangle$ e $\langle y \rangle$, fazendo com as trajetórias tenha aspectos quase circulares. Isso é um evidência da existência do efeito *zitterbewegung*. No caso γ_3 nulo, temos que $\langle y \rangle$ é sempre nulo, evidenciando uma simetria no pacote de onda ao longo do tempo. Isso pode ser visto analisando as equações Eq.(4.24a-4.24b), onde simplificando, resulta $\langle y \rangle = 0$ (para $\gamma_3 = 0$), em conformidade com a simulação na Fig. 21 pela a técnica *Split Operator* e pelo o propagador $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$, mantendo a simetria mencionado. As oscilações dos valores médios $\langle y \rangle$ são bastante perceptivas para os 4 valores de $\sigma k_0 = a$, com um comportamento mais intenso em $a = \sigma k_0 = 4$, para ambos os casos de γ_3 nulo ou não nulo, sendo perceptível o efeito *zitterbewegung* no pacote de onda ao longo do tempo.

A análise da densidade de probabilidade para o *pseudospin* $[1,0]^T$ na figura Fig.22, vemos que ao considerarmos o *hopping* γ_3 , levando em conta o efeito *trigonal warping*, vemos que a densidade sofre um mudança no seu formato, ao longo do tempo em que o pacote vai evoluindo. Com γ_3 nulo temos uma densidade de probabilidade com simetria em relação ao eixo- x . Essa simetria é perdida ao considerarmos o efeito *trigonal warping* ($\gamma_3 \neq 0$). Tal percepção é vista para duas simulações: $\sigma k_0 = 1$ e $\sigma k_0 = 2$. Outro aspecto interessante à se ressaltar é a tendência do pacote de onde de dividir-se em dos sub-pacotes.

Analisando a figura Fig. 21, agora para o *pseudospin* $[1,1]^T$, analisando primeiramente o caso $\gamma_3 \neq 0$, vemos que o papel do efeito *trigonal warping* é mais evidente um vez que, diferente do caso $\gamma_3 = 0$, as trajetórias perdem totalmente a simetria, sendo que no caso $\gamma_3 = 0$, apenas $\langle x \rangle$ é zero ao longo de toda a trajetória, como mostra a figura Fig. 21, para as simulações com a técnica *Split Operator* e o caso analítico com os propagadores $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$. Comparando com o caso anterior, nesse não existe uma presença clara do efeito *zitterbewegung*, tendo um comportamento quase linear nas trajetórias ao longo de todo o tempo.

Para densidade de probabilidade na figura Fig.22 no que diz respeito ao *pseudospin* $[1,1]^T$, vemos que ao considerarmos o *hopping* γ_3 , o efeito *trigonal warping* tem influência sobre o pacote de onda ao longo do tempo em que o pacote vai evoluindo. A influência é semelhante ao caso anterior, onde temos uma perda de simetria, mas agora em relação ao eixo- y . Tal percepção é vista para duas simulações: $a = \sigma k_0 = 1$ e $a = \sigma k_0 = 2$. Outro aspecto interessante à se ressaltar é que, diferente da simulação anterior, nesse caso, não temos a tendência do pacote de onda de dividir-se em dois sub-pacotes.

Assim como na polarização no eixo x , o caso $[1, 1]^T$ para a polarização em y , em particular, também representa um ótimo caso para a implementação de dispositivos de transporte devido ao fato de que o fluxo eletrônico ocorre de maneira harmoniosa e uniforme, sem situação não desejadas decorrentes das oscilações provocadas pelo o efeito *zitterbewegung*.

Por último, analisando de forma breve a Fig. 21, para o *pseudospin* $[1, i]^T$, vemos que há uma evidência do efeito *zitterbewegung*, principalmente nas trajetórias médias de $\langle x \rangle$, sendo que, para $\gamma_3 = 0$, temos que $\langle y \rangle$ é nulo ao longo de todo o tempo, mostrando uma simetria no pacote frente ao caso onde o efeito *trigonal warping* está presente no sistema. Isso pode ser visto analisando a equação Eq.(4.46a-4.46b), onde simplificando, resulta $\langle y \rangle = 0$ (para $\gamma_3 = 0$), em conformidade com a simulação na Fig. 21 pela a técnica *Split Operator* e pelo o propagador $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$, como todas as simulações tratadas até aqui. As oscilações dos valores médios $\langle y \rangle$ são perceptíveis para os 4 valores de $\sigma k_0 = a$, para ambos os casos de γ_3 nulo ou não nulo, sendo a incidência do efeito *zitterbewegung* um fato no pacote de onda ao longo do tempo.

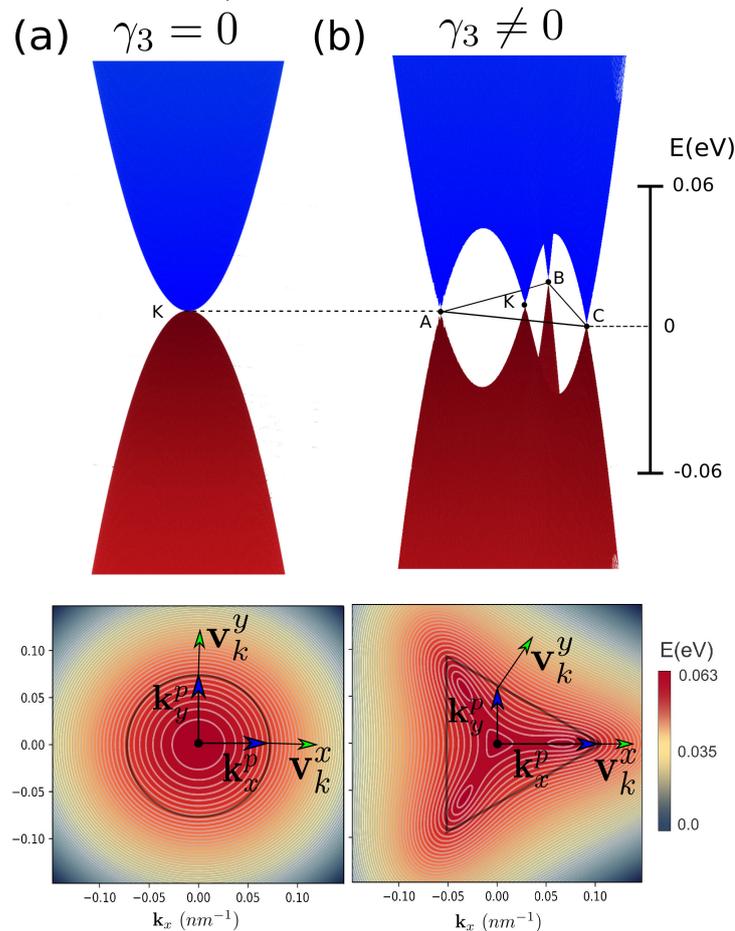
Analisando a densidade de probabilidade na figura Fig.22, vemos que ao considerarmos o *hopping* γ_3 , o efeito *trigonal warping* possui uma forte influência sobre o pacote de onda ao longo do tempo em que o pacote vai evoluindo, diferente. A influência ainda é menor quando comparamos com as simulações anteriores, para o *pseudospin* $[1, 0]^T$ e $[1, 1]^T$, onde temos uma perda da simetria do pacote de onda ainda mais intensa, com a consideração do efeito *trigonal warping* ($\gamma_3 \neq 0$). Tal percepção é vista para duas simulações: $a = \sigma k_0 = 1$ e $a = \sigma k_0 = 2$. Outro aspecto interessante à se ressaltar é que, diferente da simulação anterior, nesse caso, nós temos a tendência do pacote de onda dividir-se em dois sub-pacotes, propagando-se em velocidades opostas no eixo- y .

Para efeito de comparação, analisando os dois gráficos Fig.19 e Fig.21, vemos uma certa semelhança entre a simulação numérica da técnica *Split Operator* e o calculo analítico com o propagadores $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$. Vemos que os valores médios da técnica *Split Operator* exibem o mesmo perfil dos resultados com o propagadores. Contudo, percebemos que alguns resultado numéricos não coincidem com aqueles advindos das funções de Green, dependendo do protudo $a = \sigma k_0$ e da polarização de *pseudo spin*. Isso se deve pelo o fato da aproximação da segunda ordem feita sobre o operador de evolução temporal do hamiltoniano de 2 bandas $\hat{U}_2(t, t_0)$ e, sendo o resultado da função de green mais exato, temos um certo destoamento entre as duas situações.

Essas foram as simulações para a polarização no eixo y . Um aspecto que diferencia bastante os casos de polarização no eixo x e y é o fato da direção de propagação do pacote de

onda poder (ou não) corresponder à da polarização do *momentum* escolhida. Na figura Fig.23, temos uma comparação das velocidades de grupo⁶ em situações onde consideramos o efeito *trigonal warping* ($\gamma_3 \neq 0$) ou não ($\gamma_3 = 0$). No caso da ausência do efeito *trigonal warping*, vemos que a velocidade de grupo é sempre na mesma direção da polarização de *momentum* escolhida. Isso implica em trajetórias na mesma direção do *momentum* escolhido, como visto nas trajetórias para o eixo x na figura Fig.19 e para o eixo- y na figura Fig.21, ao vermos o caso $\gamma_3 = 0$ em todos.

Figura 23 – Comparação entre as velocidades de grupo sem a presença do efeito *trigonal warping* ($\gamma_3 = 0$) (a) e com a presença do mesmo ($\gamma_3 \neq 0$) (b). Vemos que no caso $\gamma_3 = 0$ (a), a velocidade de grupo v_x^p é na mesma direção da polarização escolhida no eixo- x (k_x^p) ou no eixo- y (k_y^p), sendo a velocidade v_y^p . O mesmo não acontece para o caso $\gamma_3 \neq 0$ (b) para o eixo- y , com o efeito *trigonal warping*, onde a velocidade de grupo não está na direção de k_y^p e sim na diagonal.



O mesmo não acontece para quando consideramos o efeito *trigonal warping* ($\gamma_3 \neq 0$). Ao levarmos em conta o efeito, vemos que, em situações quando temos o *momentum* polarizado no eixo y , vemos que a velocidade de grupo não está na mesma direção do *momentum*. Isso faz

⁶É dado, em função da estrutura de bandas $E(\mathbf{k})$, da forma $\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$.

com que tenhamos trajetória do pacote de onda na diagonal, como mostra as simulações feitas nas para o eixo y . A incidência do efeito *zitterbewegung* com o efeito *trigonal warping* é visto com a presença de curvas nas trajetórias, como no caso $[1, 0]^T$, leves oscilações, como no caso $[1, 1]^T$ ou fortes oscilações, como no caso $[1, i]^T$.

4.5 Resultados para o Hamiltoniano de 4 bandas e *Tight Binding*

Da mesma forma como no caso do modelo de 2 bandas, tomamos a propagação de um pacote de onda gaussiano usando o hamiltoniano de 4 bandas e o modelo *tight binding*. Para tal simulação numérica, usamos o hamiltoniano de 4 bandas como na forma da Eq.(3.24), escrita na forma de matrizes de Pauli. Com isso, aplicamos o operador de evolução temporal descrito para o modelo de 4 bandas (dado na Eq.(3.25)) em um pacote de onda dado da forma:

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = N \exp \left[-\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^2}{2\sigma^2} + i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} \right] \begin{pmatrix} C_{\tilde{A}} \\ C_{\tilde{B}} \\ C_A \\ C_B \end{pmatrix} \quad (4.58)$$

onde N seria a constante de normalização, \mathbf{k}_0 o *momentum* do pacote, \mathbf{r}_0 a posição inicial, σ o comprimento do pacote e $C_{\tilde{A}(\tilde{B})}$ e $C_{A(B)}$ os conhecidos *pseudospins*. Para efeito de comparação com o modelo de 2 bandas, tomamos os orbitais dímeros, isto é $C_{\tilde{B}}$ e C_A , em função dos não dímeros, da forma:

$$C_{\tilde{B}} = -\frac{U}{2\gamma_1^2} \left[\left(v_0\pi - \frac{2\gamma_1 v_4}{U}\pi \right) C_{\tilde{A}} + \left(\frac{2\gamma_1 v_0}{U}\pi^\dagger - v_4\pi^\dagger \right) C_B \right] \quad (4.59a)$$

$$C_A = \frac{U}{2\gamma_1^2} \left[-\left(v_4\pi + \frac{2\gamma_1 v_0}{U}\pi \right) C_{\tilde{A}} + \left(\frac{2\gamma_1 v_4}{U}\pi^\dagger + v_0\pi^\dagger \right) C_B \right] \quad (4.59b)$$

onde $\pi = \xi p_x - i p_y$. Para uma situação mais comprável com a situação do modelo de 2 bandas realizado na seção anterior, tomamos $U = 0$ e $\gamma_4 = 0$, refletindo a ausência de uma diferença de potencial entre as duas camadas e desconsiderando a assimetria elétron-buraco. Logo, Eq.(4.59a) e Eq.(4.59b) transforma-se em:

$$C_{\tilde{B}} = -\frac{v_0\pi^\dagger}{\gamma_1} C_B \quad (4.60a)$$

$$C_A = -\frac{v_0\pi}{\gamma_1} C_{\tilde{A}} \quad (4.60b)$$

Com isso, fazemos as simulações para as polarizações x e y com os mesmos parâmetros de pacotes de onda dado na tabela 3. Analisaremos as posições médias para as 3 polarizações de *pseudospin* $[C_{\tilde{A}}, C_B]^T = [1, 0]^T$, $[C_{\tilde{A}}, C_B]^T = [1, 1]^T$ e $[C_{\tilde{A}}, C_B]^T = [1, i]^T$ que investigamos anteriormente para o caso do modelo de 2 bandas.

Para a dinâmica de pacotes de onda no modelo *tight binding*, tomamos uma evolução temporal da forma da equação Eq.(3.32), com o pacote de ondas definido como Eq.(3.33). Na definição do pacote de onda, temos que, da mesma forma como os orbitais dímeros são escritos em função dos não dímeros, no modelo *tight binding* é feito o mesmo, conforme a definição dos *pseudospins* Eq.(4.60a) e Eq.(4.60b). No caso do modelo *tight binding*, a resolução numérica basea-se na utilização do pacote computacional Pybinding(Moldovan *et al.*), em que é feita toda a construção do sistema finito com na Fig.18 utilizando o ferramentário disponível.

4.5.1 Polarização no eixo x

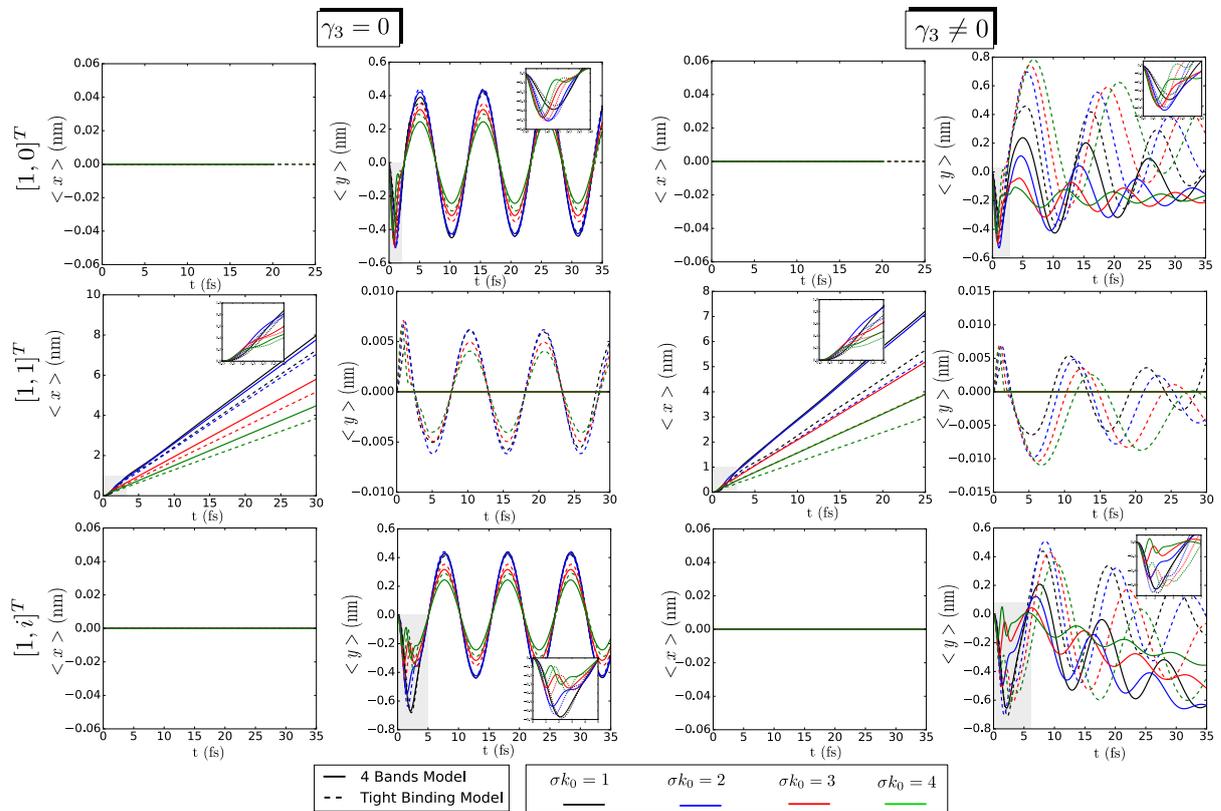


Figura 24 – **x** polarização $\phi = 0^\circ$: Usando um pacote de ondas gaussiano na forma da Eq.(4.58) e Eq.(3.33), analisamos sua evolução temporal no grafeno bicamada no ponto de vista do hamiltoniano de 4 bandas e hamiltoniano *Tight Binding*, respectivamente. Pegamos $\sigma = 2nm$, $\mathbf{k}_0 = (k_0, 0) nm^{-1}$, onde analisamos quatro produtos $\sigma k_0 = \{1, 2, 3, 4\}$ e $\mathbf{r}_0 = (0, 0)$ para o momento inicial e a posição. O efeito *zitterbewegung* é perceptível tendo em vista as oscilações nas trajetórias em função do tempo ($\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$) e as curvas no trajetória $\langle \mathbf{r} \rangle$.

Analisando as trajetórias médias para a polarização de *momentum* no eixo *x* (Fig.24), percebemos que a mesma repete o mesmo perfil do caso para o modelo de 2 bandas do ponto de vista da velocidade de grupo como mostrado na Fig.23, tanto para ausência do efeito *trigonal*

warping ($\gamma_3 = 0$) quanto considerando sua presença ($\gamma_3 \neq 0$).

Primeiramente, para a polarização $[C_{\tilde{A}}, C_B]^T = [1, 0]^T$ na Fig.24, percebemos fortes oscilações para o valor médio $\langle y(t) \rangle$, enquanto que $\langle x(t) \rangle = 0$ durante toda a dinâmica do pacote de onda para o caso onde desconsideramos o efeito *trigonal warping*, enquanto que, no caso considerando o efeito, temos oscilações menos intensas, porém ainda evidentes. Tais oscilações em $\langle y(t) \rangle$ muito grandes quando comparamos o mesmo caso para o modelo de 2 bandas. Essa oscilações, tanto as fortíssimas quanto as menos intensas, implica em uma clara evidência do efeito *zitterbewegung* desse caso para o modelo de 4 bandas.

Para o *pseudospin* $[C_{\tilde{A}}, C_B]^T = [1, 1]^T$ na Fig.24, percebemos um certo comportamento semelhante ao seu caso equivalente para o modelo de 2 bandas. Vemos que $\langle x(t) \rangle$ não é nulo enquanto que $\langle y(t) \rangle$ é nulo, para ambos os casos $\gamma_3 = 0$ e $\gamma_3 \neq 0$. Analisando $\langle x(t) \rangle$ possui o mesmo perfil de comportamento comprado ao modelo de 2 bandas, possui pouca incidência do efeito *zitterbewegung* nos instantes iniciais, não sendo perceptíveis as fortes oscilações observadas anteriormente para o caso $[1, 0]^T$. Semelhantemente ao modelo de 2, percebemos que o caso $[1, 1]^T$, pelo o fato da incidência do efeito *zitterbewegung* ser pequena, temos uma certa viabilidade na implementação de dispositivos.

Por último, analisando o *pseudospin* $[C_{\tilde{A}}, C_B]^T = [1, i]^T$ na Fig.24, vemos que $\langle x(t) \rangle$ é nulo enquanto que $\langle y(t) \rangle$ é não nulo. Analisando o comportamento, vemos uma certa diferença entre o caso com e a ausência do efeito *trigonal warping*. Da mesma forma que o caso do *pseudospin* $[1, 0]^T$, vemos oscilações fortíssimas para o caso da ausência do efeito *trigonal warping*, ao contrário da sua presença, onde vemos, também, oscilações leves. Logo, temos que tantos as oscilações fortíssimas e leves implicam na existência do efeito *zitterbewegung*, fazendo uma correspondência direta com o caso do modelo de 2 bandas.

Do ponto de vista do modelo *tight binding*, analisando a figura Fig.24 para a polarização de *momentum* no eixo x , vemos que segue um perfil semelhante ao modelo de 4 bandas, também exibindo a incidência do efeito *zitterbewegung* para algumas situações. Assim como no caso do modelo de 2 e 4 bandas, as trajetórias médias no modelo *tight binding* não revelam uma assimetria espacial do pacote de onda à medida que o tempo evolui. No *pseudospin* $[1, 0]^T$, vemos que existe uma forte coincidência entre os modelo para a ausência de *trigonal warping*, sendo que o mesmo não acontece para quando incluímos o efeito, que possui forte influência sobre o modelo *tight binding*.

Para o *pseudospin* $[1, 1]^T$, na Fig.24, vemos uma coerência entre o perfil do *tight binding* para com o modelo de 4 bandas para o caso sem a presença do efeito *trigonal warping*,

inclusive tendo um comportamento semelhante ao mesmo caso de *pseudospin* para o modelo de 2 bandas e de propagadores, com exceção do fato de que os valores médios de y , que possui uma certa oscilação, embora baixíssima, em torno do valor médio relativo ao modelo de 4 bandas. Com a inclusão do efeito *trigonal warping*, vemos os mesmos comportamentos, no que diz respeito ao perfil e comportamento dos valores médio de y .

Por último, para o *pseudospin* $[1, i]^T$, na Fig.24, também existe uma coerência entre o perfil do *tight binding* para com o modelo de 4 bandas para o caso sem a presença do efeito *trigonal warping*, inclusive o fato de que, diferente do caso no modelo de 2 bandas, exibe o efeito *zitterbewegung* de maneira mais intensa, semelhante ao caso do *pseudospin* $[1, 0]^T$. Vemos que o influência do efeito *trigonal warping* nas trajetórias médias é bastante perceptível no modelo *tight warping* com oscilações mais intensas quando comparamos com o modelo de 4 bandas.

4.5.2 Polarização no eixo y

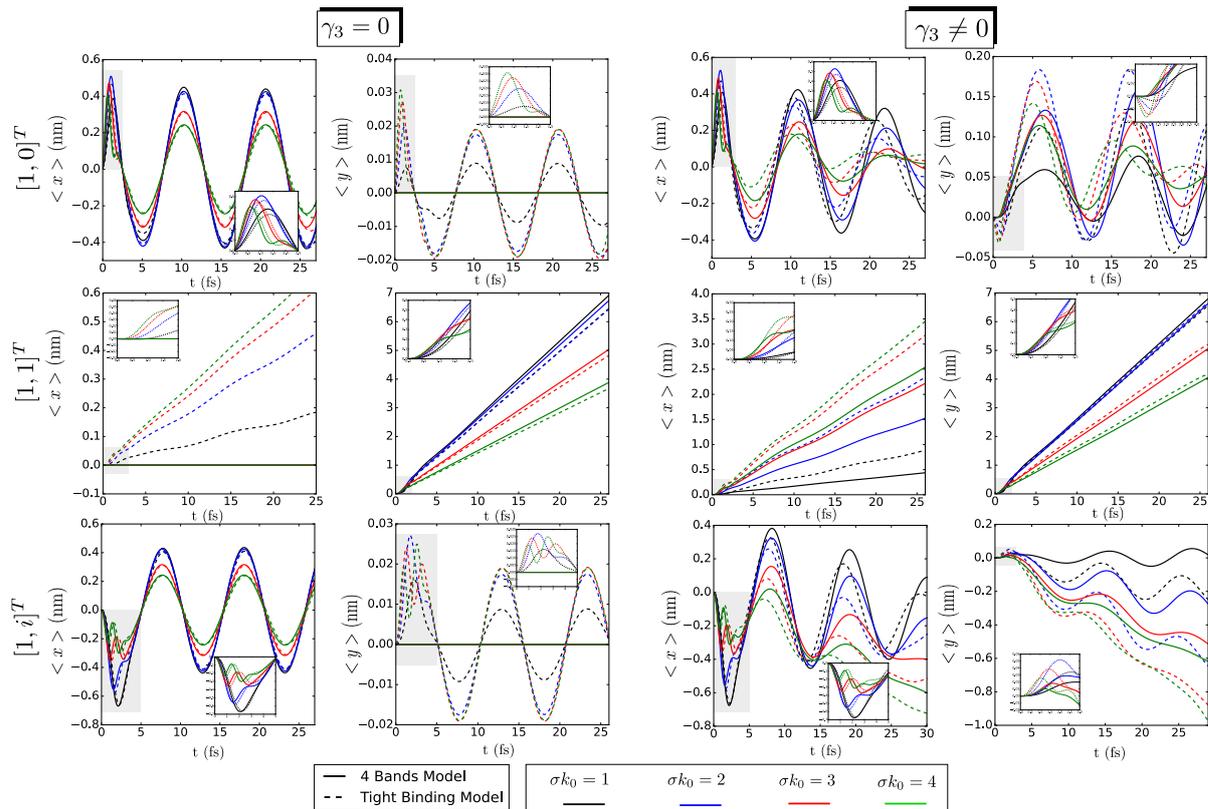


Figura 25 – Polarização em y e $\phi = 90^\circ$: Os mesmos parâmetros da polarização em x (Fig.24), mas agora considerando a polarização no eixo y do momento.

Por último, analisando as trajetórias médias para a polarização de *momentum* no eixo y (Fig.25), percebemos que também repete o mesmo perfil do caso para o modelo de 2 bandas do

ponto de vista da velocidade de grupo como mostrado na Fig.23, tanto para ausência do efeito *trigonal warping* ($\gamma_3 = 0$) quanto considerando sua presença ($\gamma_3 \neq 0$). Na figura Fig.23, vemos que as velocidades de grupo na polarização no eixo y , ao contrário da polarização no eixo x , não estão na mesma direção do *momentum*. Isso implica em valores médios de posição não nulos, semelhante aos que foram vistos para o modelo de 2 bandas e que veremos para o modelo de 4 bandas à seguir.

Para a polarização de *pseudospin* $[C_{\tilde{A}}, C_B]^T = [1, 0]^T$ na Fig.25, percebemos fortes oscilações para o valor médio $\langle y(t) \rangle$ e leves (quase amortecidas) para $\langle x(t) \rangle$ durante toda a dinâmica do pacote de onda para o caso onde consideramos o efeito *trigonal warping*, enquanto que, no caso desconsiderando o efeito, temos oscilações intensas para $\langle x(t) \rangle$, além de $\langle y(t) \rangle = 0$. Tais oscilações são muito grandes quando comparamos o mesmo caso para o modelo de 2 bandas. Essa oscilações, tanto as fortíssimas quanto as menos intensas, implica em uma clara evidência do efeito *zitterbewegung* desse caso para o modelo de 4 bandas.

Para o *pseudospin* $[C_{\tilde{A}}, C_B]^T = [1, 1]^T$ na Fig.25, percebemos um certo comportamento semelhante ao seu caso equivalente para o modelo de 2 bandas. Vemos que $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ são não nulos para a caso onde consideramos o efeito *trigonal warping*. Com a ausência do efeito *trigonal warping*, temos que $\langle x(t) \rangle$ é nulo enquanto que $\langle y(t) \rangle$ é não nulo. Analisando $\langle x(t) \rangle$ possui o mesmo perfil de comportamento comprado ao modelo de 2 bandas, que possui pouca incidência do efeito *zitterbewegung* nos instantes iniciais, não sendo perceptíveis as fortes oscilações observadas anteriormente para o caso $[1, 0]^T$. Semelhantemente ao modelo de 2 para a polarização no eixo y , percebemos que o caso $[1, 1]^T$, pelo o fato da incidência do efeito *zitterbewegung* ser pequena, temos uma certa viabilidade na implementação de dispositivos.

Por último, analisando o *pseudospin* $[C_{\tilde{A}}, C_B]^T = [1, i]^T$ na Fig.24, Vemos que $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ são não nulos para a caso onde consideramos o efeito *trigonal warping*. Analisando o comportamento, vemos uma certa diferença entre o caso com e a ausência do efeito *trigonal warping*. Da mesma forma que o caso do *pseudospin* $[1, 0]^T$, vemos oscilações fortíssimas para o caso da ausência do efeito *trigonal warping*, ao contrário da sua presença, onde vemos, também, oscilações leves, além do fato onde temos apenas $\langle y(t) \rangle$ nulo para o caso da ausência do efeito *trigonal warping*. Logo, temos que tantos as oscilações fortíssimas e leves implicam na existência do efeito *zitterbewegung*, fazendo uma correspondência direta com o caso do modelo de 2 bandas.

Dessa vez, do ponto de vista do modelo *tight binding*, analisando a figura Fig.25 para a polarização de *momentum* no eixo y , vemos que também há uma repetição de perfil para

o modelo *tight binding*, também exibindo a incidência do efeito *zitterbewegung* para algumas situações. Dessa vez, assim como no caso do modelo de 2 e 4 bandas, as trajetórias médias no modelo *tight binding* possuem uma assimetria espacial do pacote de onda à medida que o tempo evolui, devido o fato de ambos os valores médios de x e y serem não nulos. No *pseudospin* $[1, 0]^T$, vemos que existe uma forte coincidência entre os modelo para a ausência de *trigonal warping*, assim como no caso da polarização em x , sendo que o mesmo não acontece para quando incluímos o efeito, que possui forte influência sobre o modelo *tight binding*, além do fato de que os valores médios x e y serem não nulos.

Para o *pseudospin* $[1, 1]^T$, na Fig.25, também é visto uma coerência entre o perfil do *tight binding* para com o modelo de 4 bandas para o caso sem a presença do efeito *trigonal warping*. Para esse caso, temos ainda mais um comportamento semelhante ao mesmo caso de *pseudospin* para o modelo de 2 bandas e de propagadores, com exceção do fato de que o valor médio de x para o caso sem a inclusão do efeito *trigonal warping*, possui um valor não nulo, embora seja baixo comparado à outras trajetórias. Assim como o caso da polarização $[1, 0]^T$, também possuem uma assimetria espacial do pacote de onda à medida que o tempo evolui, devido o fato de ambos os valores médios de x e y serem não nulos.

Por último, para o *pseudospin* $[1, i]^T$, na Fig.25, também existe uma coerência entre o perfil do *tight binding* para com o modelo de 4 bandas para o caso sem a presença do efeito *trigonal warping*, inclusive o fato de que, diferente do caso no modelo de 2 bandas, exhibe o efeito *zitterbewegung*, semelhante ao caso do *pseudospin* $[1, 0]^T$. Da mesma forma que no caso de $[1, 1]^T$, percebemos que os valores médios para y é não nulo, embora baixo, quando o comparamos com o modelo de 4 bandas. A influência do efeito *trigonal warping* nas trajetórias médias é bastante perceptível no modelo *tight warping*, principalmente sobre o valores médios de y . Assim como nos casos anteriores, também possuem uma assimetria espacial do pacote de onda à medida que o tempo evolui, devido o fato de ambos os valores médios de x e y serem não nulos.

4.6 Equivalência entre os modelos

Analisando de maneira mais minuciosa as simulações para as polarizações \mathbf{x} e \mathbf{y} para o modelo de 2 e 4 bandas, percebemos que, dependendo do produto $a = k_0\sigma$, temos mais ou menos oscilações nas trajetórias médias $\langle x \rangle$ e $\langle y \rangle$, podendo deixar mais evidente (ou praticamente inexistente) o efeito *zitterbewegung*. Podemos associar a intensidade das oscilações com o fato

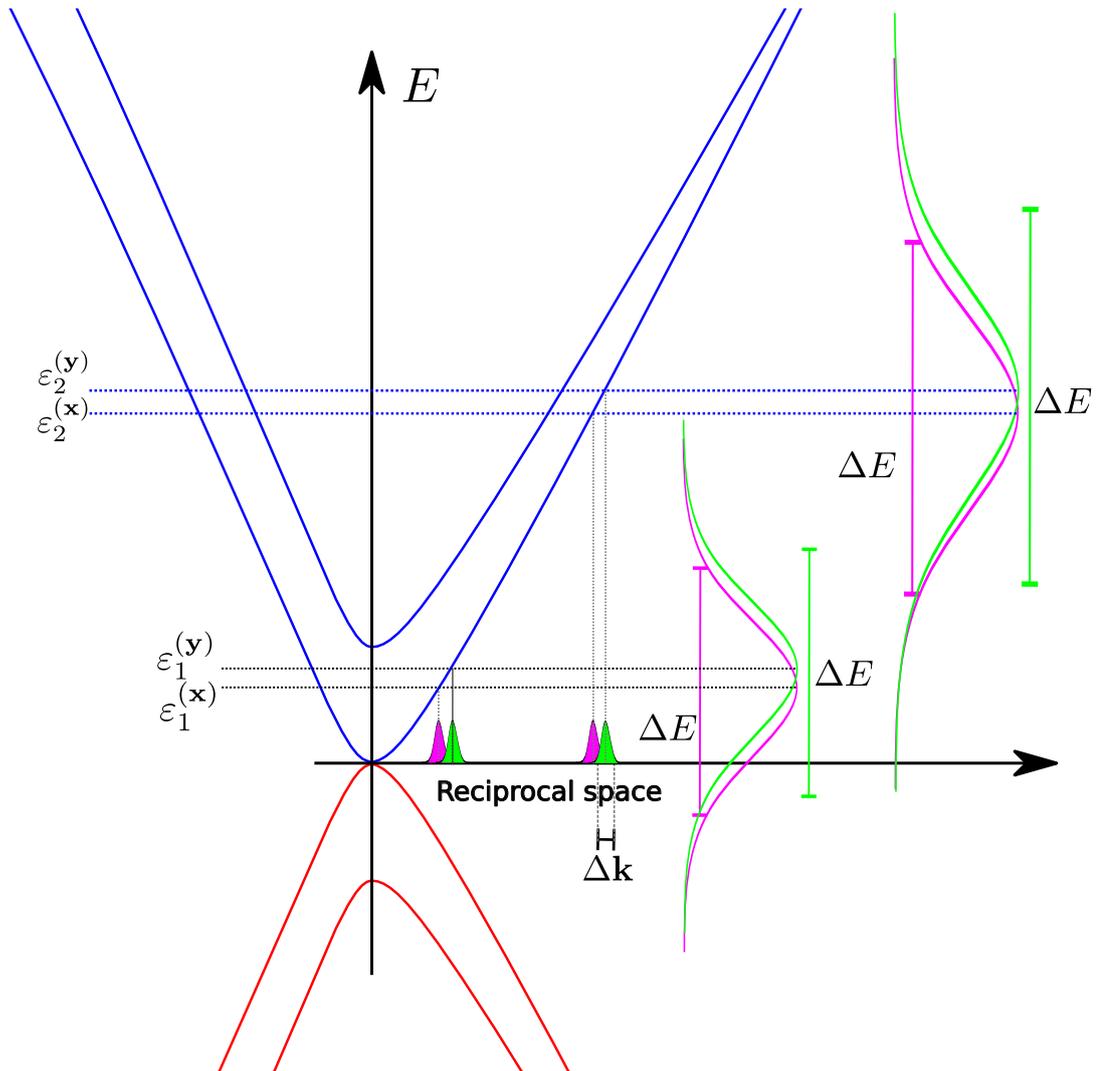


Figura 26 – Representação da estrutura de bandas do ponto de vista do modelo contínuo de 4 bandas, destacando as energias $\varepsilon_a^{(x)}$, para a polarização no eixo x e $\varepsilon_a^{(y)}$, para o eixo y , onde $a = k_0\sigma$. Além disso, temos a representação dos intervalos de *momentum* $\Delta\mathbf{k}$ e energia ΔE , calculados na tabela 4.

$a = \sigma k_0$	ε_a (eV)	ΔE (eV)	\mathbf{k}_0 (nm^{-1})	$\Delta\mathbf{k}$ (nm^{-1})
$a = 1$	0.256	0.732	(0.5, 0) polarização em x	(0.353, 0.353)
	0.300	0.784	(0, 0.5) polarização em y	(0.353, 0.353)
$a = 2$	1.108	1.139	(1, 0) polarização em x	(0.353, 0.353)
	1.19	1.215	(0, 1) polarização em y	(0.353, 0.353)

Tabela 4 – Representação de parâmetros de energia do pacote de onda gaussiano Eq.4.58 para o modelo de 4 bandas, como o *momentum* inicial \mathbf{k}_0 , a sua energia E_0 do ponto de vista do modelo de 2 bandas, e as distribuições ΔE e $\Delta\mathbf{k}$, para $a = 1$ e $a = 2$.

que é a principal diferença entre os modelos de 4 e 2 bandas: a quantidade de bandas. A mesma análise é feita quando comparamos os resultados da teoria dos propagadores com aqueles que foram obtidos via modelo *tight binding*.

Na Fig.26, temos uma representação da estrutura de bandas para o modelo contínuo de 4 bandas, como uma representação de situações de baixas energias, destacando as energias

ε_a , onde $a = k_0\sigma$. Tomando um pacote de onda de *momentum* \mathbf{k}_0 , como na Eq.(4.58), temos que da mecânica quântica que, pelo o fato do pacote de onda possuir uma certa distribuição gaussiana no espaço real ao redor de um posição média \mathbf{r}_0 , o mesmo também possui uma certa distribuição, também gaussiano, no espaço de *momentum*(ou recíproco) ao redor do *momentum* inicial \mathbf{k}_0 . Tal distribuição no espaço de *momentum* possui um certo comprimento $\Delta\mathbf{k}$ ⁷, que está associado ao um intervalo de energia ΔE . Isso significa que o pacote de onda pode migrar de um *momentum* \mathbf{k}_0 para outro \mathbf{k} , fazendo com que o pacote de onda caminhe pela a banda de energia que, porventura, possui a possibilidade de migrar para outra banda, seja para banda de elétron ou buracos (Rusin, 2011).

Tendo a possibilidade da transição entre bandas de energia, as oscilações são possíveis tendo em vista a energia do pacote de onda pode saltar de um certa banda de energia (baseado em sua energia inicial ε_a) para outra banda de energia que consiste em uma possibilidade de energia (e *momentum*) baseado no intervalo de energia ΔE e de *momentum* $\Delta\mathbf{k}$, calculado na tabela 4, e representados na Fig.26. Analisando de maneira conjunta tanto a tabela 4 quanto a Fig.26 percebemos que, enquanto que o intervalo $\Delta\mathbf{k}$ é sempre o mesmo para qualquer valor de a , mantendo o mesmo perfil da dispersão gaussiana, vemos que, quando aumentamos a , além do aumento de energia inicial do pacote, temos um crescimento colossal do intervalo de energia ΔE , fazendo com que a dispersão gaussiana abranja tranquilamente as duas bandas de elétrons.

Para $a = 1$, conforme a Fig.26, por está abrangendo uma certa região da banda energia (vermelho) para buracos, vemos que as oscilações são mais intensas conforme mostrado nas Fig.24 e Fig.25, ao contrário de quando aumentamos o parâmetro a , em que, restando apenas as duas bandas de elétrons (azul), temos que as mesmas são bastante próximas, fazendo com que as oscilações sejam menos intensas.

Analisando a Fig.27, percebemos que, para os instantes iniciais, até cerca de 0.3 fs, o valores são bastante próximos entre os modelo. Isso deve-se ao fato de que entre os modelo existe uma incerteza associada, proporcional ao tempo. Dentro dos modelos de 2 bandas: o próprio e a teoria de propagadores, percebemos que a técnica *Split Operator* aplicada ao operador de evolução temporal na forma da Eq.(3.16) torna o resultado mais exato quando comparamos com os advindos da teoria de propagadores, que carrega o erro relativo à integral numérica. A mesma coisa é vista para os modelos de 4 bandas: o próprio e o modelo *tight binding*, em que, embora seja uma abordagem discreta do sistema, possui mais exatidão que a aplicação

⁷O erro médio quadrático na mecânica quântica de um operador \hat{A} é dado por $\langle\Delta\hat{A}\rangle = \sqrt{\langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2}$.

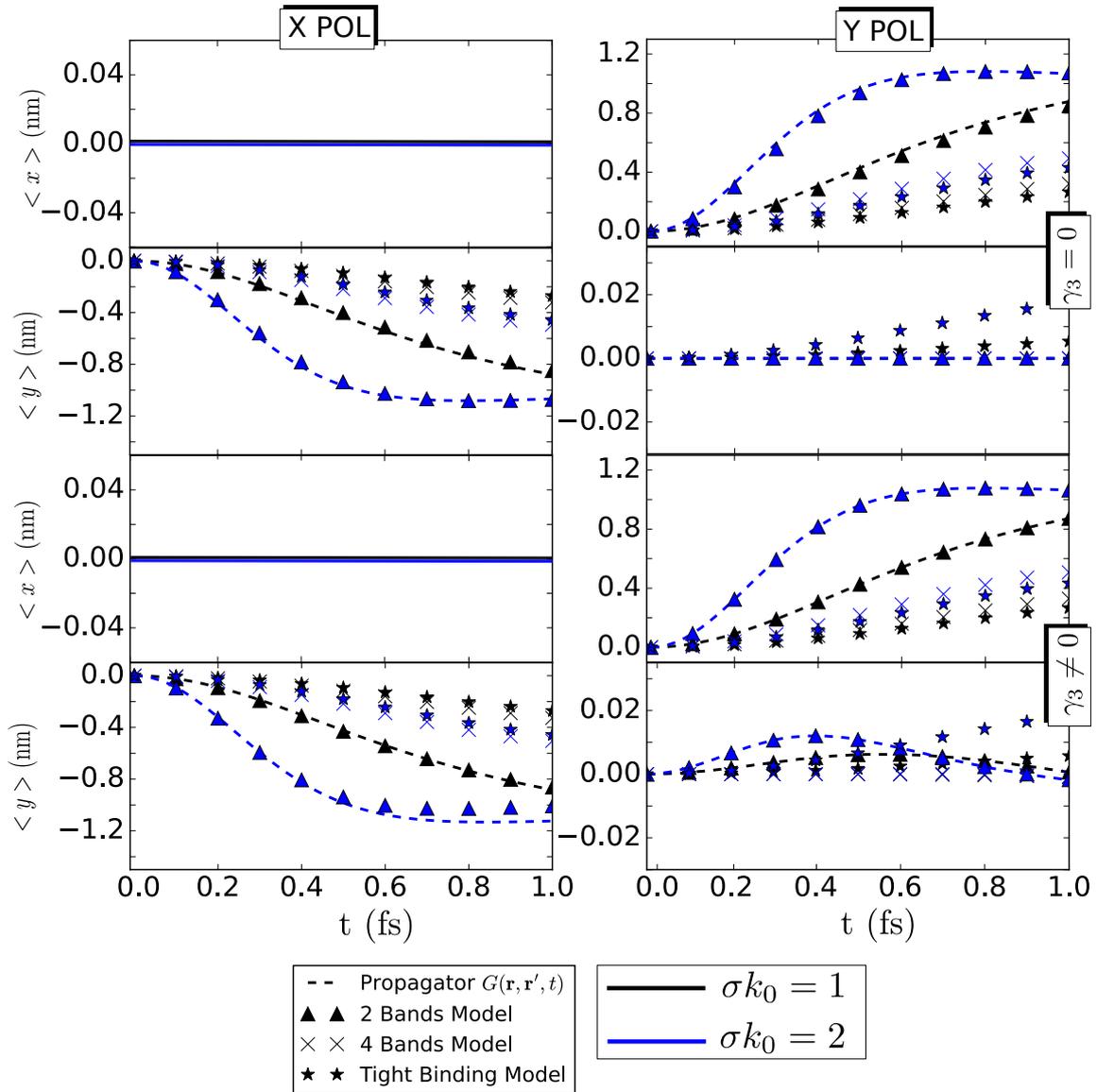


Figura 27 – Comparação de valores médios de x , $\langle x(t) \rangle$ e y , $\langle y(t) \rangle$, para os instantes iniciais para o pseudospin $[1, 0]^T$ com e sem a inclusão do efeito *trigonal warping* do ponto de vista da polarização no eixo x e no eixo y .

da técnica *Split Operator* do modelo contínuo de 4 bandas que, além de ser uma aproximação de primeira ordem ao redor dos vales K/K' , também carrega consigo o erro da ordem Δt^3 , conforme a Eq.(3.25), enquanto que no modelo *tight binding* tem-se apenas o erro da ordem de Δt^2 , conforme a Eq.(3.32).

5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Desde sua descoberta em 2004, o grafeno tem sido muito estudado, suas propriedades e seu "mistérios" analisados, rendendo vários artigos em muitas revistas de alto impacto anualmente. Nesse trabalho, nos lidamos com algumas dessas propriedades. Primeiramente, chegamos em uma equação análoga à Equação relativística de Dirac para a bicamada de grafeno no empilhamento *AB* na Eq.(2.104). Isso é graças à uma técnica muito familiarizada na Teoria de Estado Solido na Física, o modelo *Tight-Binding*. Com base nisso, percebemos o quão influente o *hopping* γ_3 pode ser sobre o sistema, como o efeito *trigonal warping*, com deformidade das isoenergias e a mudança da velocidade de grupo que nem sempre estará na mesma direção da polarização do *momentum* em virtude da anisotropia das bandas de energia. O surgimento de 3 mini-vales como Cones de Dirac representados na Fig.14 é de fato importantíssimo no tratamento da bicamada de grafeno pois vemos em nossa simulação que a perda da isotropia da energia com o efeito *trigonal warping*.

No capítulo 4, para o modelo de 2 bandas, vemos que o efeito *zitterbewegung* é perceptivo com o efeito *trigonal warping*, na bicamada de grafeno quando analisamos as simulações para caso do eixo-*x* (polarização em **x**), em que temos oscilações dos valores médios $\langle x \rangle$ e $\langle y \rangle$ em função do tempo, e do eixo-*y* (polarização em **y**), bem como a perda da simetria do pacote de onda ao longo de sua evolução temporal, seja para a simulação com o uso de técnica *Split Operator* ou com o uso dos propagadores da função de Green, sendo bastante perceptível a coincidência de ambas as técnicas, visto que ambas são construídas sobre o ponto de vista do modelo de 2-bandas, além da incidência do efeito *zitterbewegung* vista nos modelos de 4 bandas, como o modelo contínuo e modelo *tight binding*

Vemos em todas as simulações dos eixos **x** e **y** que há um intervalo onde as oscilações acontece, com um comportamento transiente (ou passageiro). Isso confirma a existência do efeito *zitterbewegung* com ou sem a consideração do efeito *trigonal warping*, entrando em um grupo seleto de materiais em que tais oscilações já fora observadas, como a própria monocamada de grafeno (Maksimova *et al.*, 2008), no fosforeno (Cunha *et al.*, 2019) e para multicamadas de grafeno (Lavor *et al.*, 2020a). Um aspecto importante acerca da polarização escolhida é o fato de, para uma determinada polarização, temos que a incidência do efeito *zitterbewegung* é pequena ou inexistente, como é o caso da polarização $[1, 1]^T$ para a polarização no eixo **x** (Fig.19) e no eixo **y** (Fig.21). Isso bastante importante para o estudo de propriedades de transporte e filtragem de vales na bicamada de grafeno com o efeito *trigonal warping*.

Outra simulação feita, trata-se da simulação de uma dinâmica de pacotes de ondas gaussiano mas do ponto de vista dos modelos de 4 bandas (contínuo e *tight binding*). Da mesma forma que nos modelos de 2 bandas (contínuo e Propagadores), analisando casos onde temos o *momentum* inicial do pacote de onda polarizado no eixo x e y , vemos resultados promissores do ponto de vista da incidência do efeito *zitterbewegung*. As oscilações de trajetórias médias são bem mais intensas do que nos modelos de 4 bandas, como podemos nas Fig.24 e Fig.25. Isso se deve ao fato de que a inclusão de 2 bandas à mais no espectro de energia aumenta as possibilidades de estados relativo à um dado *momentum* que o pacote de onda pode assumir. Logo, oscilações que antes era transientes nos modelos de 2 bandas, perduram por mais tempo nos modelos de 4 bandas.

Ainda na simulação do modelo de 4 bandas, um parâmetro que se faz bastante importante é o produto $a = k_0\sigma$, sendo k_0 o *momentum* do pacote inicial e σ o comprimento do pacote. O parâmetro a desempenha o mesmo papel do caso do modelo de 2 bandas no que diz respeito a energia. Pela a Fig.26, percebemos que, quanto maior a , maior energia. Contudo, vendo as trajetórias médias, percebemos que as oscilações são menos intensas para valores maiores de a . Tal fato deve-se à questão da proximidade da bandas abrangidas pelo o intervalo de energia ΔE já discutido na tabela 4, fazendo com que, quanto mais próximas as bandas, menos intensas as oscilações e vice versa. Além disso, o efeito *trigonal warping* se faz bastante presente nas trajetórias médias, repetindo o mesmo perfil de velocidade de grupo do modelo de 2 bandas, conforme mostrado na Fig.23.

Outro aspecto importante à cerca da propagação de pacotes de onda com o efeito *trigonal warping* na bicamada de grafeno, seja no modelo de 2 ou de 4 bandas, é o fato de que, ao investigarmos uma propagação com uma polarização de *momentum* no eixo y é o fato da propagação se dar sempre na diagonal, em um trajetória praticamente retilínea, para a polarização de *pseudospin* $[1, 1]^T$, não sendo na mesma direção do *momentum* escolhido, conforme a figura Fig.23. Isso é um fato interessante pois, ainda que existe um efeito *zitterbewegung* transiente nos instantes iniciais para ambos os modelos, vemos características únicas causada pela a consideração do efeito *trigonal warping*, que é bem distinto quando olhamos as outras polarizações de *pseudospins*, onde a incidência do efeito *zitterbewegung* é bem mais intenso.

Isso faz com que a polarização de *pseudospin* $[1, 1]^T$ seja bastante vantajosa para implementação de dispositivos baseado em transporte eletrônico, visto que a incidência do efeito *zitterbewegung* ser baixo, ou praticamente inexistente.

A técnica *Split Operator*, tanto para o modelo de 4 bandas quanto para o 2 bandass,

foi de extrema importância para esse trabalho pois nos permitiu fazer uma abordagem numérica de uma evolução através de sua aproximação de Suzuki-Trotter, como o uso da Transformada Rápida de Fourier (FFT), cujo o algoritmo foi retirado do livro Numerical Recipes (Press *et al.*, 1992). Com perspectiva final de todos os trabalhos, temos como objetivo a realização de mais simulação afim de lapidar nossos resultados, culminando em um publicação para alguma revista.

5.1 Perspectivas

Uma perspectiva futura, baseada principalmente nos resultados obtidos para o *pseudospin* $[1, 1]^T$, por conta da baixa incidência do efeito *zitterbewegung*, existe uma possibilidade de aplicação para dispositivos eletrônicos, ainda com a aplicação de filtragem de vales visto que existe uma certa assimetria entre os vales K e K' quando analisamos a Fig.15.

REFERÊNCIAS

- AKHTAR, M.; ANDERSON, G.; ZHAO, R.; ALRUQI, A.; MROCZKOWSKA, J. E.; SUMANASEKERA, G.; JASINSKI, J. B. Recent advances in synthesis, properties, and applications of phosphorene. **npj 2D Materials and Applications**, v. 1, n. 1, p. 5, 2017. ISSN 2397-7132. Disponível em: <https://doi.org/10.1038/s41699-017-0007-5>. Acesso em: 18 jul. 2024. 9, 24
- ASHCROFT N.W. ; MERMIN, N. **Solid State Physics**. [S.l.]: Cengage Learning, 2011. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=x_syAAACAAJ>. Acesso em: 18 jul. 2024. ISBN 9788131500521. 9, 13, 20, 21, 35, 38, 150, 151
- BANDRAUK, A. D.; SHEN, H. Improved exponential split operator method for solving the time-dependent schrödinger equation. **Chemical Physics Letters**, v. 176, n. 5, p. 428–432, 1991. ISSN 0009-2614. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/000926149190232X>. Acesso em: 18 jul. 2024. 74
- BARUT A. O. ; BRACKEN, A. J. Zitterbewegung and the internal geometry of the electron. **Phys. Rev. D**, American Physical Society, v. 23, p. 2454–2463, 1981. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.23.2454>. Acesso em: 18 jul. 2024. 25
- BEGGI, A.; SILOI, I.; BENEDETTI, C.; PICCININI, E.; RAZZOLI, L.; BORDONE, P.; PARIS, M. G. A. Back to 2d: Remarkable role of defects in the photoluminescence of ws2 monolayers. **Nanomaterials**, v. 8, n. 2, p. 95, 2018. Disponível em: <https://www.mdpi.com/2079-4991/8/2/95>. Acesso em: 18 jul. 2024. 47
- BENA, C.; MONTAMBAUX, G. Remarks on the tight-binding model of graphene. **New Journal of Physics**, v. 11, n. 9, p. 095003, 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/11/9/095003>. Acesso em: 18 jul. 2024. 47
- BRUUS, H.; FLENSBERG, K. **Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction**. [S.l.]: OUP Oxford, 2004. (Oxford Graduate Texts). Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=v5vhg1tYLC8C>. Acesso em: 18 jul. 2024. ISBN 9780198566335. 48
- CASTRO, E. G.; ACOSTA, M. R.; FERRAZ, I. Redes de bravais. sep 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.13140/RG.2.1.2644.2324>. Acesso em: 18 jul. 2024. 13, 149, 150
- CHAVES, A.; COVACI, L.; RAKHIMOV, K. Y.; FARIAS, G. A.; PEETERS, F. M. Wave-packet dynamics and valley filter in strained graphene. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 82, n. 20, p. 205430, Nov 2010. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.205430>. Acesso em: 18 jul. 2024. 28
- CHAVES, A.; COVACI, L.; RAKHIMOV, K. Y.; FARIAS, G. A.; PEETERS, F. M. Wave-packet dynamics and valley filter in strained graphene. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 82, p. 205430, Nov 2010. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.205430>. Acesso em: 18 jul. 2024. 83, 132
- CHAVES, A.; FARIAS, G. A.; PEETERS, F. M.; SZAFRAN, B. Wave packet dynamics in semiconductor quantum rings of finite width. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 80, n. 12, p. 125331, Sep 2009. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.125331>. Acesso em: 18 jul. 2024. 28

CSERTI, J.; DÁVID, G. Unified description of zitterbewegung for spintronic, graphene, and superconducting systems. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 74, p. 172305, 2006. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.172305>. Acesso em: 18 jul. 2024. 26

CUNHA, S. M.; COSTA, D. R. da; SOUSA, G. O. de; CHAVES, A.; PEREIRA, J. M.; FARIAS, G. A. Wave-packet dynamics in multilayer phosphorene. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 99, p. 235424, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.235424>. Acesso em: 18 jul. 2024. 10, 26, 28, 30, 86, 121

DEMIKHOVSKII, V. Y.; MAKSIMOVA, G. M.; FROLOVA, E. V. Wave packet dynamics in hole luttinger systems. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 81, p. 115206, Mar 2010. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.81.115206>. Acesso em: 18 jul. 2024. 27

DREISOW, F.; HEINRICH, M.; KEIL, R.; TUNNERMANN, A.; NOLTE, S.; LONGHI, S.; SZAMEIT, A. Classical simulation of relativistic zitterbewegung in photonic lattices. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 105, p. 143902, Sep 2010. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.105.143902>. Acesso em: 18 jul. 2024. 27

EICHFELD, S. M.; HOSSAIN, L.; LIN, Y.-C.; PIASECKI, A. F.; KUPP, B.; BIRDWELL, A. G.; BURKE, R. A.; LU, N.; PENG, X.; LI, J.; AZCATL, A.; MCDONNELL, S.; WALLACE, R. M.; KIM, M. J.; MAYER, T. S.; REDWING, J. M.; ROBINSON, J. A. Highly scalable, atomically thin wse₂ grown via metal–organic chemical vapor deposition. **ACS Nano**, American Chemical Society, v. 9, n. 2, p. 2080–2087, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/nn5073286>. Acesso em: 18 jul. 2024. 9, 24

GEIM A.K. ; NOVOSELOV, K. The rise of graphene. **Nature Materials**, v. 6, p. 183–191, 2007. Disponível em: <https://doi.org/10.1038/nmat1849>. Acesso em: 18 jul. 2024. 9, 21, 22, 25, 30, 34, 36, 68

GERRITSMAN, R.; KIRCHMAIR, G.; ZÄHRINGER, F.; SOLANO, E.; BLATT, R.; ROOS, C. F. Quantum simulation of the dirac equation. **Nature**, v. 463, n. 7277, p. 68–71, Jan 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1038/nature08688>. Acesso em: 18 jul. 2024. 27

GIRI, A.; PARK, G.; YANG, H.; PAL, M.; KWAK, J.; JEONG, U. Synthesis of 2d metal chalcogenide thin films through the process involving solution-phase deposition. **Advanced Materials**, Wiley Online Library, v. 30, n. 25, p. 1707577, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/adma.201707577>. Acesso em: 18 jul. 2024. 24

GRØNBORG, S. S.; ULSTRUP, S.; BIANCHI, M.; DENDZIK, M.; SANDERS, C. E.; LAURITSEN, J. V.; HOFMANN, P.; MIWA, J. A. Synthesis of epitaxial single-layer mos₂ on au(111). **Langmuir**, American Chemical Society, v. 31, n. 35, p. 9700–9706, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.5b02533>. Acesso em: 18 jul. 2024. 9, 24

INC., W. R. **Mathematica, Version 12.0**. Disponível em: <https://www.wolfram.com/mathematica/new-in-12/>. Acesso em: 18 jul. 2024. 96, 97, 101

JOAEXP. **Etapas para a construção de uma célula de Wigner-Seitz 2D**. [S.l.], 2011. Disponível em: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Construcao_da_celula_de_wigner_-_seitz.png/media/Ficheiro:Construcao_da_celula_de_wigner_-_seitz.png. Acesso em: 18 jul. 2024. 13, 150

JUNG, E.; PARK, D.; PARK, C.-S. Zitterbewegung in bilayer graphene: Effects of trigonal warping and electric field. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 87, n. 11, p. 115438, Mar 2013. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.115438>. Acesso em: 18 jul. 2024. 31

KUZMENKO, A. B.; CRASSE, I.; MAREL, D. van der; BLAKE, P.; NOVOSELOV, K. S. Determination of the gate-tunable band gap and tight-binding parameters in bilayer graphene using infrared spectroscopy. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 80, n. 16, p. 165406, Oct 2009. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.165406>. Acesso em: 18 jul. 2024. 14, 36, 37

LAVINSKY, R. **Fluorita roxa**. [S.l.], 2010. Disponível em: <https://pt.wikipedia.org/wiki/Fluorita/media/Ficheiro:Fluorite-191782.jpg>. Acesso em: 18 jul. 2024. 9, 21

LAVOR, I. R.; COSTA, D. R. da; CHAVES, A.; SENA, S. H. R.; FARIAS, G. A.; DUPPEN, B. V.; PEETERS, F. M. Effect of zitterbewegung on the propagation of wave packets in abc-stacked multilayer graphene: an analytical and computational approach. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 33, n. 9, p. 095503, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1088/1361-648x/abcd7f>. Acesso em: 18 jul. 2024. 121

LAVOR, R.; COSTA, D. D.; CHAVES, A.; SENA, S.; FARIAS, G.; DUPPEN, B. V.; PEETERS, F. Effect of zitterbewegung on the propagation of wave packets in abc-stacked multilayer graphene. 03 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1088/1361-648x/abcd7f>. Acesso em: 18 jul. 2024. 10, 26, 28, 29, 86, 90

LEIDUS, I. **Enxofre**. [S.l.], 2021. Disponível em: <https://pt.wikipedia.org/wiki/Enxofre>. Acesso em: 18 jul. 2024. 9, 21

LIA, J. M.; TAMBORENEA, P. I.; CYGOREK, M.; AXT, V. M. Dynamics of the angular momentum in narrow quantum rings with rashba and dresselhaus spin-orbit interactions. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 105, p. 115426, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.115426>. Acesso em: 18 jul. 2024. 26

LIMA, W.; ARAÚJO, F.; COSTA, D. D.; SENA, S.; PEREIRA, J. Tight-binding model in first and second quantization for band structure calculations. **Brazilian Journal of Physics**, v. 52, 04 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s13538-021-01027-x>. Acesso em: 18 jul. 2024. 54

LOCK, J. A. The zitterbewegung of a free localized dirac particle. **Am. J. Phys.**, v. 47, p. 797–802, 1979. Disponível em: <https://doi.org/10.1119/1.11697>. Acesso em: 18 jul. 2024. 25

MAKSIMOVA, G. M.; DEMIKHOVSKII, V. Y.; FROLOVA, E. V. Wave packet dynamics in a monolayer graphene. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 78, p. 235321, Dec 2008. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.235321>. Acesso em: 18 jul. 2024. 10, 26, 27, 29, 86, 90, 121

MCCANN, E.; KOSHINO, M. The electronic properties of bilayer graphene. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, v. 76, n. 5, p. 056503, apr 2013. Disponível em: <https://doi.org/10.1088/0034-4885/76/5/056503>. Acesso em: 18 jul. 2024. 14, 31, 33, 36, 37, 41, 55, 57, 60, 61, 62, 63, 69, 70

- MOHAMMADI, Y. Tunable plasmon modes in doped aa-stacked bilayer graphene. **Superlattices and Microstructures**, v. 156, p. 106955, 2021. ISSN 0749-6036. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0749603621001531>. Acesso em: 18 jul. 2024. 14, 37
- MOLDOVAN, D.; ANđELKOVIĆ, M.; PEETERS, F. M. **Pybinding: a Python package for tight-binding calculations**. Disponível em: Zenodo. (2020). Acesso em: 18 jul. 2024. 113
- PARK, C.-S. Klein tunneling and valley-polarized scattering in bilayer graphene with trigonal warping. **Solid State Communications**, v. 152, n. 22, p. 2018–2022, Aug 2012. ISSN 0038-1098. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0038109812004796>. Acesso em: 18 jul. 2024. 31
- POLLARD, A. J.; CLIFFORD, C. A. Terminology: the first step towards international standardisation of graphene and related 2d materials. **Journal of Materials Science**, v. 52, n. 24, p. 13685–13688, 2017. ISSN 1573-4803. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s10853-017-1567-7>. Acesso em: 18 jul. 2024. 9, 23
- PRESS, W. H.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T.; FLANNERY, B. P. **Numerical Recipes in C**. Second. Cambridge, USA: Cambridge University Press, 1992. Disponível em: search.library.wisc.edu. Acesso em: 18 jul. 2024. 123
- RAWAT, A.; JENA, N.; SARKAR, A. D. *et al.* A comprehensive study on carrier mobility and artificial photosynthetic properties in group vi b transition metal dichalcogenide monolayers. **Journal of Materials Chemistry A**, Royal Society of Chemistry, v. 6, n. 18, p. 8693–8704, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1039/C8TA01846C>. Acesso em: 18 jul. 2024. 25
- REN, X.; PANG, L.; ZHANG, Y.; REN, X.; FAN, H.; LIU, S. F. One-step hydrothermal synthesis of monolayer mos 2 quantum dots for highly efficient electrocatalytic hydrogen evolution. **Journal of Materials Chemistry A**, Royal Society of Chemistry, v. 3, n. 20, p. 10693–10697, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1039/C5TA02198G>. Acesso em: 18 jul. 2024. 24
- RUSIN, T. M.; ZAWADZKI, W. Zitterbewegung of relativistic electrons in a magnetic field and its simulation by trapped ions. **Phys. Rev. D**, American Physical Society, v. 82, p. 125031, Dec 2010. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.82.125031>. Acesso em: 18 jul. 2024. 27
- RUSIN, W. Z. . T. M. Zitterbewegung (trembling motion) of electrons in semiconductors: a review. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 23, n. 14, p. 143201, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/23/14/143201>. Acesso em: 18 jul. 2024. 9, 25, 26, 27, 30, 85, 119
- SCHLIEMANN, J.; LOSS, D.; WESTERVELT, R. M. Zitterbewegung of electronic wave packets in iii-v zinc-blende semiconductor quantum wells. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 94, p. 206801, 2005. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.94.206801>. Acesso em: 18 jul. 2024. 9, 26, 27
- William Schockley. **Method and apparatus for controlling electric current**. 1951. US Patent 2,569,347. Disponível em: <https://patents.google.com/patent/US2569347A/en>. Acesso em: 18 jul. 2024. 19

- SHI, L.-k.; ZHANG, S.-c.; CHANG, K. Anomalous electron trajectory in topological insulators. **arXiv**, 2011. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/1109.4771>. Acesso em: 18 jul. 2024. 27
- SHI, L.-k.; ZHANG, S.-c.; CHANG, K. Anomalous electron trajectory in topological insulators. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 87, p. 161115, Apr 2013. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.161115>. Acesso em: 18 jul. 2024. 27
- SHOCKLEY, W. **Circuit element utilizing semiconductive material**. [S.l.]: Google Patents, 1948. US Patent 2,569,347. Disponível em: <https://patents.google.com/patent/US2569347A>. Acesso em: 18 jul. 2024. 19
- SINGH, S.; VERMA, K.; PRAKASH, C. **Advanced Applications of 2D Nanostructures: Emerging Research and Opportunities**. [S.l.]: Springer Singapore, 2021. (Materials Horizons: From Nature to Nanomaterials). Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=kuc-EAAQBAJ>. Acesso em: 18 jul. 2024. ISBN 9789811633225. 21, 22, 23, 24
- SPARKS, M.; TEAL, G. K. **Method of making p-n junctions**. [S.l.]: Google Patents, 1950. US Patent 2,631,356. Disponível em: <https://patents.google.com/patent/US2631356A>. Acesso em: 18 jul. 2024. 19
- SUZUKI, M. Fractal decomposition of exponential operators with applications to many-body theories and monte carlo simulations. **Phys. Lett. A**, v. 146, n. 6, p. 319–323, 1990. ISSN 0375-9601. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037596019090962N>. Acesso em: 18 jul. 2024. 75
- TIWARI, J. N.; TIWARI, R. N.; KIM, K. S. Zero-dimensional, one-dimensional, two-dimensional and three-dimensional nanostructured materials for advanced electrochemical energy devices. **Progress in Materials Science**, v. 57, n. 4, p. 724–803, 2012. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0079642511001034>. Acesso em: 18 jul. 2024. 9, 21
- VAISHNAV, J. Y.; CLARK, C. W. Observing zitterbewegung with ultracold atoms. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 100, p. 153002, Apr 2008. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.153002>. Acesso em: 18 jul. 2024. 27
- WALLACE, P. R. The band theory of graphite. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 71, n. 9, p. 622–634, May 1947. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.71.622>. Acesso em: 18 jul. 2024. 33
- WAN, X.; CHEN, K.; CHEN, Z.; XIE, F.; ZENG, X.; XIE, W.; CHEN, J.; XU, J. Controlled electrochemical deposition of large-area mos2 on graphene for high-responsivity photodetectors. **Advanced Functional Materials**, Wiley Online Library, v. 27, n. 19, p. 1603998, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/adfm.201603998>. Acesso em: 18 jul. 2024. 24
- WANG, L.; ZHU, S.-N.; WU, X.; GUO, G.-C.; ZHANG, X. Zitterbewegung of optical pulses near the dirac point in metamaterials. **Appl. Phys. Lett.**, AIP Publishing, v. 94, p. 081112, Feb 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.3080114>. Acesso em: 18 jul. 2024. 27
- WANG, Z.-Q.; Lü, T.-Y.; WANG, H.-Q.; FENG, Y. P.; ZHENG, J.-C. Review of borophene and its potential applications. **Frontiers of Physics**, v. 14, n. 3, p. 33403, 2019. ISSN 2095-0470. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11467-019-0884-5>. Acesso em: 18 jul. 2024. 9, 24

WINKLER, R.; ZÜLICHE, U.; BOLTE, J. Oscillatory multiband dynamics of free particles: The ubiquity of zitterbewegung effects. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 75, p. 205314, May 2007. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.75.205314>. Acesso em: 18 jul. 2024. 27

ZAWADZKI, W. Zitterbewegung and its effects on electrons in semiconductors. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 72, n. 8, p. 085217, Aug 2005. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.72.085217>. Acesso em: 18 jul. 2024. 26

ZHANG, K.; FENG, Y.; WANG, F.; YANG, Z.; WANG, J. Two dimensional hexagonal boron nitride (2d-hbn): synthesis, properties and applications. **Journal of Materials Chemistry C**, Royal Society of Chemistry, v. 5, n. 46, p. 11992–12022, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1039/C7TC03498E>. Acesso em: 18 jul. 2024. 9, 24

ZHANG, X. Observing zitterbewegung for photons near the dirac point of a two-dimensional photonic crystal. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 100, p. 113903, Mar 2008. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.113903>. Acesso em: 18 jul. 2024. 27

ZHANG, X.; LIU, Z. Extremal transmission and beating effect of acoustic waves in two-dimensional sonic crystals. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 101, p. 264303, Dec 2008. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.101.264303>. Acesso em: 18 jul. 2024. 27

ZHANG, Y.-C.; SONG, S.-W.; LIU, C.-F.; LIU, W.-M. Zitterbewegung effect in spin-orbit-coupled spin-1 ultracold atoms. **Phys. Rev. A**, American Physical Society, v. 87, p. 023612, Feb 2013. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.87.023612>. Acesso em: 18 jul. 2024. 27

ZOMER, P.; DASH, S.; TOMBROS, N.; WEES, B. V. A transfer technique for high mobility graphene devices on commercially available hexagonal boron nitride. **Applied Physics Letters**, American Institute of Physics, v. 99, n. 23, p. 232104, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.3665405>. Acesso em: 18 jul. 2024. 25

APÊNDICE A – PROVA DE IDENTIDADES

Comutador $[A + 2B, [A + B]]$

Calculando o comutador $[A + 2B, [A + B]]$, temos:

$$\begin{aligned}
 [\widehat{A} + 2\widehat{B}, [\widehat{A} + \widehat{B}]] &= [\widehat{A}, [\widehat{A} + \widehat{B}]] + 2[\widehat{B}, [\widehat{A} + \widehat{B}]] \\
 &= \widehat{A}[\widehat{A} + \widehat{B}] - [\widehat{A} + \widehat{B}]\widehat{A} + 2\widehat{B}[\widehat{A} + \widehat{B}] - \\
 &= [\widehat{A} + \widehat{B}]\widehat{B} \\
 &= \widehat{A}^2 + \widehat{A}\widehat{B} - \widehat{A}^2 - \widehat{B}\widehat{A} + 2\widehat{B}\widehat{A} + 2\widehat{B}^2 - \\
 &\quad 2\widehat{A}\widehat{B} - 2\widehat{B}^2 \\
 &= \widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A} + 2\widehat{B}\widehat{A} - 2\widehat{A}\widehat{B} \\
 &= \widehat{B}\widehat{A} - \widehat{A}\widehat{B} \\
 &= [\widehat{B}, \widehat{A}], \quad \blacksquare
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

Identidade $[\widehat{A}, \widehat{B}^n] = n\widehat{B}^{n-1}[\widehat{A}, \widehat{B}]$

Para $n = 1$, temos:

$$[\widehat{A}, \widehat{B}] = [\widehat{A}, \widehat{B}] \tag{A.2}$$

para $n = 2$, sendo $[A, BD] = [A, B]D + B[A, D]$, temos:

$$\begin{aligned}
 [\widehat{A}, \widehat{B}^2] &= [\widehat{A}, \widehat{B}\widehat{B}] \\
 &= [\widehat{A}, \widehat{B}]\widehat{B} + \widehat{B}[\widehat{A}, \widehat{B}] \\
 &= [\widehat{A}, \widehat{B}]\widehat{B} + \widehat{B}[\widehat{A}, \widehat{B}] + \widehat{B}[\widehat{A}, \widehat{B}] - \widehat{B}[\widehat{A}, \widehat{B}] \\
 &= [[\widehat{A}, \widehat{B}], \widehat{B}] + 2\widehat{B}[\widehat{A}, \widehat{B}] \\
 &\approx 2\widehat{B}[\widehat{A}, \widehat{B}]
 \end{aligned} \tag{A.3}$$

para $n = 3$, temos:

$$\begin{aligned}
[\hat{A}, \hat{B}^3] &= [\hat{A}, \hat{B}^2 \hat{B}] \\
&= [\hat{A}, \hat{B}^2] \hat{B} + \hat{B}^2 [\hat{A}, \hat{B}] \\
&= [\hat{A}, \hat{B}^2] \hat{B} + \hat{B}^2 [\hat{A}, \hat{B}] + \hat{B}^2 [\hat{A}, \hat{B}] - \hat{B}^2 [\hat{A}, \hat{B}] \\
&\approx 2\hat{B} [\hat{A}, \hat{B}] \hat{B} + 2\hat{B}^2 [\hat{A}, \hat{B}] - \hat{B}^2 [\hat{A}, \hat{B}] \\
&\approx 2\hat{B} [\hat{A}, \hat{B}] \hat{B} + 2\hat{B}^2 [\hat{A}, \hat{B}] - \hat{B}^2 [\hat{A}, \hat{B}] - \hat{B}^2 [\hat{A}, \hat{B}] + \hat{B}^2 [\hat{A}, \hat{B}] \\
&\approx 2\hat{B} [[\hat{A}, \hat{B}], \hat{B}] + 3\hat{B}^2 [\hat{A}, \hat{B}] \\
&\approx 3\hat{B}^2 [\hat{A}, \hat{B}]
\end{aligned}$$

Logo, por indução, para um n qualquer, temos:

$$[\hat{A}, \hat{B}^n] = n\hat{B}^{n-1} [\hat{A}, \hat{B}], \quad \blacksquare \tag{A.4}$$

Identidade $[T, V(\mathbf{r})]$

Tendo em vista a identidade anterior, temos:

$$\begin{aligned}
[T, V(\mathbf{r})] &= \nabla V(\mathbf{r}) \cdot [T, \mathbf{r}] \\
&= \frac{1}{2m} \nabla V(\mathbf{r}) \cdot [p_i^2, \mathbf{r}] \\
&= -\frac{1}{2m} \nabla V(\mathbf{r}) \cdot [\mathbf{r}, p_i^2] \\
&= -\frac{1}{2m} \nabla V(\mathbf{r}) \cdot [\mathbf{r}, p_i^2] \\
&= -\frac{1}{m} \nabla V(\mathbf{r}) \cdot p_i [\mathbf{r}, p_i] \\
&= -\frac{1}{m} \nabla V(\mathbf{r}) \cdot p_i \delta_{ij} i\hbar \hat{e}_j \\
&= -\frac{i\hbar}{m} \nabla V(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p}, \quad \blacksquare
\end{aligned} \tag{A.5}$$

onde $[\mathbf{r}, p_i] = \delta_{ij} i\hbar \hat{e}_j$.

Identidade $[\hat{A}, f(\hat{B})] = f'(\hat{B}) [\hat{A}, \hat{B}]$

Sabendo que $f(x)$ ¹ pode ser expandido em um série de potências em um ponto x_0 ,
como:

¹sendo $f(x)$ uma função contínua e infinitamente diferenciável

$$f(x) = c_0 + c_1(x - x_0) + c_2(x - x_0)^2 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(x - x_0)^n, \quad (\text{A.6})$$

Tomando $x_0 = 0$ e um dado operador \hat{B} , temos:

$$f(\hat{B}) = c_0 + c_1\hat{B} + c_2\hat{B}^2 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\hat{B}^n, \quad (\text{A.7})$$

temos que $[\hat{A}, f(\hat{B})]$ é dado por:

$$[\hat{A}, f(\hat{B})] = \sum_{n=0}^{\infty} c_n[\hat{A}, \hat{B}^n] \quad (\text{A.8})$$

Tendo a identidade na (A.4), temos:

$$\begin{aligned} [\hat{A}, f(\hat{B})] &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n[\hat{A}, \hat{B}^n] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n n \hat{B}^{n-1} [\hat{A}, \hat{B}] \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n n \hat{B}^{n-1} [\hat{A}, \hat{B}] \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Logo, fica provado a identidade.

$$[\hat{A}, f(\hat{B})] = f'(\hat{B})[\hat{A}, \hat{B}], \quad \blacksquare \quad (\text{A.10})$$

Identidade $e^{i\sigma \cdot \mathbf{S}}$

Exponenciais como operações usando matrizes Pauli do tipo $e^{i\sigma \cdot \mathbf{S}}$, que podem ser representadas com a identidade (CHAVES *et al.*, 2010b)(??) como:

$$e^{i\sigma \cdot \mathbf{S}} = \cos(S)\mathbb{I} + i \frac{\sin(S)}{S} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S}), \quad (\text{A.11})$$

onde \mathbf{S} seria um vetor como \mathbf{p} e \mathbf{A} e S seu módulo $S = |\mathbf{S}|$, onde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$. A equação Eq.(A.11) ainda pode ser escrita como:

$$e^{i\sigma \cdot \mathbf{S}} = \cos(S)\mathbb{I}_2 + i \frac{\sin(S)}{S} \begin{pmatrix} S_z & S_x - iS_y \\ S_x + iS_y & -S_z \end{pmatrix}, \quad (\text{A.12})$$

onde S_x e S_y são componentes de \mathbf{S} . Para provar tal identidade, temos que considerar a expansão de $e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$. Temos que:

$$e^{i\sigma \cdot \mathbf{S}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S})^n}{n!} \quad (\text{A.13})$$

Separando em partes pares e ímpares, temos:

$$\begin{aligned} e^{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{S}} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{S})^n}{n!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{S})^{2n}}{(2n)!} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{S})^{2n+1}}{(2n+1)!} \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Tendo que:

$$(i\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{S})^{2n} = (-1)^n S^{2n} \mathbb{I}_2, \quad (i\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{S})^{2n+1} = i(-1)^n S^{2n} \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{S}, \quad (\text{A.15})$$

onde \mathbb{I}_2 é a matriz identidade 2×2 . Temos que:

$$e^{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{S}} = \mathbb{I}_2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n S^{2n}}{(2n)!} + i \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{S}}{S} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n S^{2n+1}}{(2n+1)!} \quad (\text{A.16})$$

Sabendo que:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n S^{2n}}{(2n)!} = \cos(S), \quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n S^{2n+1}}{(2n+1)!} = \sin(S), \quad (\text{A.17})$$

Fica provado então que:

$$\begin{aligned} e^{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{S}} &= \cos(S) \mathbb{I}_2 + i \frac{\sin(S)}{S} (\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{S}), \\ e^{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{S}} &= \cos(S) \mathbb{I}_2 + i \frac{\sin(S)}{S} \begin{pmatrix} S_z & S_x - iS_y \\ S_x + iS_y & -S_z \end{pmatrix}, \quad \blacksquare \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Comutação das matrizes em Eq.(3.22)

Tendo as matrizes abaixo:

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} &= \sigma_z \otimes \mathbb{I}_2, & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} &= \mathbb{I}_2 \otimes \sigma_x, \\
\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} &= \mathbb{I}_2 \otimes \sigma_y, & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= M_z, \\
\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= M_x, & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= M_y, \\
\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= \sigma_x \otimes \mathbb{I}_2, & \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix} &= \sigma_y \otimes \mathbb{I}_2
\end{aligned} \tag{A.19}$$

Sendo $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ e $\vec{\tilde{\sigma}} = (\tilde{\sigma}_x, \tilde{\sigma}_y)$, calculamos os comutadores:

$$\begin{aligned}
[\vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2, \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\tilde{\sigma}}] &= (\vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2) \cdot (\mathbb{I}_2 \otimes \vec{\tilde{\sigma}}) - (\mathbb{I}_2 \otimes \vec{\tilde{\sigma}}) \cdot (\vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2) \\
&= (\vec{\sigma} \mathbb{I}_2 \otimes \mathbb{I}_2 \vec{\tilde{\sigma}}) - (\mathbb{I}_2 \vec{\tilde{\sigma}} \otimes \vec{\sigma} \mathbb{I}_2) \\
&= (\vec{\sigma} \otimes \vec{\tilde{\sigma}}) - (\vec{\sigma} \otimes \vec{\tilde{\sigma}}) = 0 \text{ COMUTA!}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma}, M_z] &= (\vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2)M_z - M_z(\vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2) \\
&= \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&\quad - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} \right] \\
&= \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \\
&\quad - \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \neq 0 \text{ **NÃO COMUTA!**}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma}, M_x] &= (\vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2)M_x - M_x(\vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2) \\
&= \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&\quad - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \\
&\quad - \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \neq 0 \text{ NÃO COMUTA!}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma}, M_y] &= (\vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2)M_y - M_y(\vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2) \\
&= \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&\quad - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} \right] \\
&= \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \\
&\quad - \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \neq 0 \text{ NÃO COMUTA!}
\end{aligned}$$

Da mesma forma que $\mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma}$, temos que $\vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2$ possui as mesmas relações de comutação com as matrizes M_x , M_y e M_z . ■

Cálculo do operadores Eq.(2.52)

Tendo os operadores são dados por:

$$\hat{\mathcal{O}}_0 = \exp \left\{ -\frac{i\Delta t}{2\hbar} \mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma} \right\}, \quad \hat{\mathcal{O}}_{3;1} = \exp \left\{ -\frac{i\Delta t}{\hbar} \mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M} \right\}, \quad \hat{\mathcal{O}}_4 = \exp \left\{ -\frac{i\Delta t}{2\hbar} \mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2 \right\} \quad (\text{A.20})$$

Usando $e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$, calculamos $\hat{\mathcal{O}}_0$, primeiramente.

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{O}}_0 &= \exp \left\{ -\frac{i\Delta t}{2\hbar} \mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma} \right\} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar} \mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma} \right]^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-i)^n \left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \right)^n (\mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma})^n \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Separando o somatório em termos pares e ímpares, temos que:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{O}}_0 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-i)^n \left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \right)^n (\mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma})^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{2n}}{(2n)!} \left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \right)^{2n} (\mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma})^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{2n+1}}{(2n+1)!} \left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \right)^{2n+1} (\mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma})^{2n+1} \end{aligned}$$

Tendo que $(-i)^{2n} = (-1)^n$ e $(-i)^{2n+1} = -i(-1)^n$, temos:

$$\hat{\mathcal{O}}_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \right)^{2n} (\mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma})^{2n} - i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \right)^{2n+1} (\mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma})^{2n+1} \quad (\text{A.22})$$

Tendo que:

$$\mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma} = v_0 \begin{pmatrix} 0 & \xi p_x - ip_y & 0 & 0 \\ \xi p_x + ip_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \xi p_x - ip_y \\ 0 & 0 & \xi p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.23})$$

Calculando $(\mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma})^2$, temos:

$$\begin{aligned}
(\mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma})^2 &= v_0^2 \begin{pmatrix} 0 & \xi p_x - ip_y & 0 & 0 \\ \xi p_x + ip_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \xi p_x - ip_y \\ 0 & 0 & \xi p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \\
&\quad \times \begin{pmatrix} 0 & \xi p_x - ip_y & 0 & 0 \\ \xi p_x + ip_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \xi p_x - ip_y \\ 0 & 0 & \xi p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \\
&= v_0^2 p^2 \mathbb{I}_4
\end{aligned} \tag{A.24}$$

Com isso, temos que $(\mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma})^3$ é dado por:

$$(\mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma})^3 = v_0^2 p^2 (\mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma}) = \frac{1}{p} v_0^3 p^3 (\mathbf{p}_\xi \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma}) \tag{A.25}$$

Com isso, temos que $(\mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma})^{2n}$ e $(\mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma})^{2n+1}$ são dados por:

$$(\mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma})^{2n} = v_0^{2n} p^{2n} \mathbb{I}_4, \quad (\mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma})^{2n+1} = \frac{1}{p} v_0^{2n+1} p^{2n+1} (\mathbf{p}_\xi \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma}) \tag{A.26}$$

Voltando para Eq.(A.22), temos:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{O}}_0 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \right)^{2n} (\mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma})^{2n} - i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \right)^{2n+1} (\mathbf{p}_0 \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma})^{2n+1} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \right)^{2n} v_0^{2n} p^{2n} \mathbb{I}_4 - \frac{i}{p} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \right)^{2n+1} v_0^{2n+1} p^{2n+1} (\mathbf{p}_\xi \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma}) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left(\frac{v_0 p \Delta t}{2\hbar} \right)^{2n} \mathbb{I}_4 - \frac{i}{p} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left(\frac{v_0 p \Delta t}{2\hbar} \right)^{2n+1} (\mathbf{p}_\xi \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma})
\end{aligned} \tag{A.27}$$

Pela a equação Eq.(A.17), temos que $\hat{\mathcal{O}}_0$ pode ser finalmente dado por:

$$\hat{\mathcal{O}}_0 = \cos\left(\frac{v_0 p \Delta t}{2\hbar}\right) \mathbb{I}_4 - \frac{i}{p} \sin\left(\frac{v_0 p \Delta t}{2\hbar}\right) (\mathbf{p}_\xi \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma}), \quad \blacksquare \tag{A.28}$$

Calculando $\hat{\mathcal{O}}_{3;1}$, temos:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{O}}_{3;1} &= \exp \left\{ -\frac{i\Delta t}{\hbar} \mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M} \right\} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[-\frac{i\Delta t}{\hbar} \mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M} \right]^n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} \left[-\frac{i\Delta t}{\hbar} \mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M} \right]^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left[-\frac{i\Delta t}{\hbar} \mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M} \right]^{2n+1} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{2n}}{(2n)!} \left[\frac{\Delta t}{\hbar} \right]^{2n} (\mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M})^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{2n+1}}{(2n+1)!} \left[\frac{\Delta t}{\hbar} \right]^{2n+1} (\mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M})^{2n+1} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left[\frac{\Delta t}{\hbar} \right]^{2n} (\mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M})^{2n} - i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left[\frac{\Delta t}{\hbar} \right]^{2n+1} (\mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M})^{2n+1}
\end{aligned} \tag{A.29}$$

separando em termos pares e ímpares, como no caso anterior. Temos que $\mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M}$ é dado por:

$$\mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & v_3(\xi p_x + ip_y) \\ 0 & 0 & \gamma_1 & 0 \\ 0 & \gamma_1 & 0 & 0 \\ v_3(\xi p_x - ip_y) & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{A.30}$$

Temos que $(\mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M})^2$ e $(\mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M})^3$ são dados por:

$$\begin{aligned}
(\mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M})^2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & v_3(\xi p_x + ip_y) \\ 0 & 0 & \gamma_1 & 0 \\ 0 & \gamma_1 & 0 & 0 \\ v_3(\xi p_x - ip_y) & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & v_3(\xi p_x + ip_y) \\ 0 & 0 & \gamma_1 & 0 \\ 0 & \gamma_1 & 0 & 0 \\ v_3(\xi p_x - ip_y) & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} v_3^2 p^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_1^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v_3^2 p^2 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{A.31}$$

$$\begin{aligned}
(\mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M})^3 &= (\mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M})^2 (\mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M}) \\
&= \begin{pmatrix} v_3^2 p^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_1^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v_3^2 p^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & v_3(\xi p_x + ip_y) \\ 0 & 0 & \gamma_1 & 0 \\ 0 & \gamma_1 & 0 & 0 \\ v_3(\xi p_x - ip_y) & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \frac{v_3^3 p^3}{p}(\xi p_x + ip_y) \\ 0 & 0 & \gamma_1^3 & 0 \\ 0 & \gamma_1^3 & 0 & 0 \\ \frac{v_3^3 p^3}{p}(\xi p_x - ip_y) & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{A.32}
\end{aligned}$$

Por indução, temos que $(\mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M})^{2n}$ e $(\mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M})^{2n+1}$ são dado por:

$$(\mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M})^{2n} = \begin{pmatrix} v_3^{2n} p^{2n} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_1^{2n} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_1^{2n} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v_3^{2n} p^{2n} \end{pmatrix}, \tag{A.33a}$$

$$(\mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M})^{2n+1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \frac{v_3^{2n+1} p^{2n+1}}{p}(\xi p_x + ip_y) \\ 0 & 0 & \gamma_1^{2n+1} & 0 \\ 0 & \gamma_1^{2n+1} & 0 & 0 \\ \frac{v_3^{2n+1} p^{2n+1}}{p}(\xi p_x - ip_y) & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{A.33b}$$

Substituindo em Eq.(A.29), temos:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{O}}_{3;1} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left[\frac{\Delta t}{\hbar} \right]^{2n} (\mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M})^{2n} - i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left[\frac{\Delta t}{\hbar} \right]^{2n+1} (\mathbf{p}_3 \cdot \mathbb{M})^{2n+1} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left[\frac{\Delta t}{\hbar} \right]^{2n} \begin{pmatrix} v_3^{2n} p^{2n} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_1^{2n} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_1^{2n} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v_3^{2n} p^{2n} \end{pmatrix} \\
&\quad - i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left[\frac{\Delta t}{\hbar} \right]^{2n+1} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \frac{v_3^{2n+1} p^{2n+1}}{p} (\xi p_x + i p_y) \\ 0 & 0 & \gamma_1^{2n+1} & 0 \\ 0 & \gamma_1^{2n+1} & 0 & 0 \\ \frac{v_3^{2n+1} p^{2n+1}}{p} (\xi p_x - i p_y) & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left[\frac{v_3 p \Delta t}{\hbar} \right]^{2n} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left[\frac{v_3 p \Delta t}{\hbar} \right]^{2n} \end{pmatrix} \\
&\quad - i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \frac{1}{p} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left[\frac{v_3 p \Delta t}{\hbar} \right]^{2n+1} (\xi p_x + i p_y) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{p} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left[\frac{v_3 p \Delta t}{\hbar} \right]^{2n+1} (\xi p_x - i p_y) & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&\quad + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left[\frac{\gamma_1 \Delta t}{\hbar} \right]^{2n} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left[\frac{\gamma_1 \Delta t}{\hbar} \right]^{2n} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&\quad - i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left[\frac{\gamma_1 \Delta t}{\hbar} \right]^{2n+1} & 0 \\ 0 & \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left[\frac{\gamma_1 \Delta t}{\hbar} \right]^{2n+1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{A.34}
\end{aligned}$$

Da mesma forma que o caso anterior, pela Eq.(A.17), temos que:

$$\hat{\mathcal{O}}_{3;1} = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{v_3 p \Delta t}{\hbar}\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cos\left(\frac{v_3 p \Delta t}{\hbar}\right) \end{pmatrix} - \frac{i}{p} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \sin\left(\frac{v_3 p \Delta t}{\hbar}\right) \hat{\pi} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sin\left(\frac{v_3 p \Delta t}{\hbar}\right) \hat{\pi}^\dagger & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$+ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\left(\frac{\gamma_1 \Delta t}{\hbar}\right) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\left(\frac{\gamma_1 \Delta t}{\hbar}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sin\left(\frac{\gamma_1 \Delta t}{\hbar}\right) & 0 \\ 0 & \sin\left(\frac{\gamma_1 \Delta t}{\hbar}\right) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

onde $\pi = \xi p_x + i p_y$. Podemos representar ainda da forma:

$$\hat{\mathcal{O}}_{3;1} = \mathbb{I}_4^{(2)} \cos\left(\frac{p v_3 \Delta t}{\hbar}\right) - \frac{i}{p} \sin\left(\frac{p v_3 \Delta t}{\hbar}\right) \mathbf{p}_\xi \cdot \tilde{\mathbb{M}}$$

$$+ \mathbb{I}_2^{(4)} \cos\left(\frac{\gamma_1 \Delta t}{\hbar}\right) - i \sin\left(\frac{\gamma_1 \Delta t}{\hbar}\right) M_z$$

onde $\tilde{\mathbb{M}} = (M_x, M_y)$, $\mathbb{I}_4^{(2)}$ e $\mathbb{I}_2^{(4)}$ são dados por:

$$\mathbb{I}_4^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbb{I}_2^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Podemos ainda representar $\hat{\mathcal{O}}_{3;1}$ como:

$$\hat{\mathcal{O}}_{3;1} = \hat{\mathcal{O}}_3 + \hat{\mathcal{O}}_1 \tag{A.35}$$

chegando em suas representações finais, como:

$$\hat{\mathcal{O}}_1 = \mathbb{I}_2^{(4)} \cos\left(\frac{\gamma_1 \Delta t}{\hbar}\right) - i \sin\left(\frac{\gamma_1 \Delta t}{\hbar}\right) M_z \tag{A.36a}$$

$$\hat{\mathcal{O}}_3 = \mathbb{I}_4^{(2)} \cos\left(\frac{p v_3 \Delta t}{\hbar}\right) - \frac{i}{p} \sin\left(\frac{p v_3 \Delta t}{\hbar}\right) \mathbf{p}_\xi \cdot \tilde{\mathbb{M}}, \quad \blacksquare \tag{A.36b}$$

Calculando $\hat{\mathcal{O}}_4$

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{O}}_4 &= \exp \left\{ -\frac{i\Delta t}{2\hbar} (\mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2) \right\} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar} (\mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2) \right]^n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-i)^n \left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \right)^n (\mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2)^n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{2n}}{(2n)!} \left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \right)^{2n} (\mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2)^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{2n+1}}{(2n+1)!} \left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \right)^{2n+1} (\mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2)^{2n+1} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \right)^{2n} (\mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2)^{2n} - i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \right)^{2n+1} (\mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2)^{2n+1}
\end{aligned} \tag{A.37}$$

Tendo que:

$$\mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2 = \begin{pmatrix} \frac{U}{2} & 0 & \xi p_x - ip_y & 0 \\ 0 & \frac{U}{2} & 0 & \xi p_x - ip_y \\ \xi p_x + ip_y & 0 & -\frac{U}{2} & 0 \\ 0 & \xi p_x + ip_y & 0 & -\frac{U}{2} \end{pmatrix} \tag{A.38}$$

Temos que $(\mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2)^{2n}$ e $(\mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2)^{2n+1}$ são dados por:

$$(\mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2)^{2n} = p_4^{2n} \mathbb{I}_4, \quad (\mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2)^{2n+1} = \frac{p_4^{2n+1}}{p_4} (\mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2)$$

onde $p_4^2 = v_4^2 p^2 + \frac{U^2}{4}$. Substituindo em Eq.(A.37), temos:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{O}}_4 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \right)^{2n} (\mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2)^{2n} - i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \right)^{2n+1} (\mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2)^{2n+1} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \right)^{2n} p_4^{2n} \mathbb{I}_4 - \frac{i}{p_4} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left(\frac{\Delta t}{2\hbar} \right)^{2n+1} p_4^{2n+1} (\mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left(\frac{p_4 \Delta t}{2\hbar} \right)^{2n} \mathbb{I}_4 - \frac{i}{p_4} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left(\frac{p_4 \Delta t}{2\hbar} \right)^{2n+1} (\mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2)
\end{aligned} \tag{A.39}$$

Pela a Eq.(A.17), temos a representação final:

$$\hat{\mathcal{O}}_4 = \cos \left(\frac{p_4 \Delta t}{2\hbar} \right) \mathbb{I}_4 - \frac{i}{p_4} \sin \left(\frac{p_4 \Delta t}{2\hbar} \right) (\mathbf{p}_4 \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2), \quad \blacksquare \tag{A.40}$$

Integral Eq.(4.22)

$$\begin{aligned}
0 &= \int \left\{ -\frac{\mathbf{p}\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{\mathbf{k}_0\sigma^2}{\hbar} \right\} \exp\left(-\frac{p^2\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p}\cdot\mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar}\right) d^2\mathbf{p} \\
&= \frac{1}{2} \int \nabla_{\mathbf{p}} \exp\left(-\frac{p^2\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p}\cdot\mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar}\right) d^2\mathbf{p} \\
&= \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{p^2\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p}\cdot\mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar}\right) \Bigg|_{-\infty}^{+\infty} \\
&= \frac{1}{2} \left[\exp\left(-\frac{(+\infty)^2\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p}\cdot\mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar}\right) - \exp\left(-\frac{(-\infty)^2\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{2(\mathbf{p}\cdot\mathbf{k}_0)\sigma^2}{\hbar}\right) \right] \\
&= 0, \quad \blacksquare
\end{aligned} \tag{A.41}$$

Integrais Eq.(4.26a) e Eq.(4.26b)

$$\langle x(t) \rangle = \frac{2\xi\sigma^2}{\pi} e^{-a^2} \int_0^\infty dk \int_0^{2\pi} d\phi \sin\phi \sin^2\left(\frac{\hbar k^2 t}{2m}\right) e^{-k^2\sigma^2} e^{2kk_0 \cos(\phi-\theta)\sigma^2} \tag{A.42a}$$

$$\langle y(t) \rangle = -\frac{2\xi\sigma^2}{\pi} e^{-a^2} \int_0^\infty dk \int_0^{2\pi} d\phi \cos\phi \sin^2\left(\frac{\hbar k^2 t}{2m}\right) e^{-k^2\sigma^2} e^{2kk_0 \cos(\phi-\theta)\sigma^2} \tag{A.42b}$$

Calculando $\langle x(t) \rangle$, temos:

$$\begin{aligned}
\langle x(t) \rangle &= \frac{2\xi\sigma^2}{\pi} e^{-a^2} \int_0^\infty dk \int_0^{2\pi} d\phi \sin\phi \sin^2\left(\frac{\hbar k^2 t}{2m}\right) e^{-k^2\sigma^2} e^{2kk_0 \cos(\phi-\theta)\sigma^2} \\
&= \frac{2\xi\sigma^2}{\pi} e^{-a^2} \int_0^\infty dk e^{-k^2\sigma^2} \sin^2\left(\frac{\hbar k^2 t}{2m}\right) \left[\int_0^{2\pi} \sin\phi e^{2kk_0 \cos(\phi-\theta)\sigma^2} d\phi \right] \\
&= \frac{2\xi\sigma^2}{\pi} e^{-a^2} \int_0^\infty dk e^{-k^2\sigma^2} \sin^2\left(\frac{\hbar k^2 t}{2m}\right) \left[\int_{-\theta}^{2\pi-\theta} \sin(\eta + \theta) e^{2kk_0 \cos\eta\sigma^2} d\eta \right],
\end{aligned}$$

Resolvemos a integral entre colchetes.

$$\begin{aligned}
\int_{-\theta}^{2\pi-\theta} \sin(\eta + \theta) e^{2kk_0 \cos\eta\sigma^2} d\eta &= \cos\theta \int_{-\theta}^{2\pi-\theta} \sin\eta e^{2kk_0 \cos\eta\sigma^2} d\eta \\
&+ \sin\theta \int_{-\theta}^{2\pi-\theta} \cos\eta e^{2kk_0 \cos\eta\sigma^2} d\eta
\end{aligned} \tag{A.43}$$

Tendo que:

$$\int_{-\theta}^{2\pi-\theta} \sin\eta e^{2kk_0 \cos\eta\sigma^2} d\eta = 0 \tag{A.44a}$$

$$\int_{-\theta}^{2\pi-\theta} \cos\eta e^{2kk_0 \cos\eta\sigma^2} d\eta = 2\pi I_1(2kk_0\sigma^2) \tag{A.44b}$$

onde I_1 consiste na função de Bessel modificada de primeira ordem (??). Temos então que Eq.(A.43) é dado por:

$$\int_{-\theta}^{2\pi-\theta} \sin(\eta + \theta) e^{2kk_0 \cos \eta \sigma^2} d\eta = 2\pi I_1(2kk_0\sigma^2) \sin \theta \quad (\text{A.45})$$

Temos que $\langle x(t) \rangle$ é dado por:

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= 4\xi \sin \theta \sigma^2 e^{-a^2} \int_0^\infty dk e^{-k^2 \sigma^2} \sin^2 \left(\frac{\hbar k^2 t}{2m} \right) I_1(2kk_0\sigma^2) \\ &= 2\xi \sin \theta \sigma^2 e^{-a^2} \left[\int_0^\infty dk e^{-k^2 \sigma^2} I_1(2kk_0\sigma^2) - \int_0^\infty dk e^{-k^2 \sigma^2} \cos \left(\frac{\hbar k^2 t}{m} \right) I_1(2kk_0\sigma^2) \right] \end{aligned}$$

Tendo que:

$$\int_0^\infty dk e^{-k^2 \sigma^2} I_1(2kk_0\sigma^2) = \frac{e^{a^2} - 1}{2k_0\sigma^2}$$

Temos:

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= 2\xi \sin \theta \sigma^2 e^{-a^2} \left[\frac{e^{a^2} - 1}{2k_0\sigma^2} - \int_0^\infty dk e^{-k^2 \sigma^2} \cos \left(\frac{\hbar k^2 t}{m} \right) I_1(2kk_0\sigma^2) \right] \\ &= \sigma \xi \sin \theta \left[\frac{1 - e^{-a^2}}{a} - 2\sigma e^{-a^2} \int_0^\infty dk e^{-k^2 \sigma^2} \cos \left(\frac{\hbar k^2 t}{m} \right) I_1(2kk_0\sigma^2) \right] \end{aligned}$$

onde $a = k_0\sigma$. Fazendo $q = k\sigma$ e $t' = t \frac{\hbar}{2m\sigma^2}$, Temos o resultado final para $\langle x(t) \rangle$.

$$\langle x(t) \rangle = \sigma \xi \sin \theta \left[\frac{1 - e^{-a^2}}{a} - 2e^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} \cos(2q^2 t') I_1(2qa) dq \right], \quad \blacksquare \quad (\text{A.46})$$

Para o calculo de $\langle y(t) \rangle$, temos:

$$\begin{aligned} \langle y(t) \rangle &= -\frac{2\xi \sigma^2}{\pi} e^{-a^2} \int_0^\infty dk \int_0^{2\pi} d\phi \cos \phi \sin^2 \left(\frac{\hbar k^2 t}{2m} \right) e^{-k^2 \sigma^2} e^{2kk_0 \cos(\phi - \theta) \sigma^2} \\ &= -\frac{2\xi \sigma^2}{\pi} e^{-a^2} \int_0^\infty dk e^{-k^2 \sigma^2} \sin^2 \left(\frac{\hbar k^2 t}{2m} \right) \left[\int_0^{2\pi} \cos \phi e^{2kk_0 \cos(\phi - \theta) \sigma^2} d\phi \right] \\ &= -\frac{2\xi \sigma^2}{\pi} e^{-a^2} \int_0^\infty dk e^{-k^2 \sigma^2} \sin^2 \left(\frac{\hbar k^2 t}{2m} \right) \left[\int_{-\theta}^{2\pi-\theta} \cos(\eta + \theta) e^{2kk_0 \cos \eta \sigma^2} d\eta \right], \end{aligned}$$

Da forma que o caso anterior, resolvemos a integral entre colchetes:

$$\begin{aligned} \int_{-\theta}^{2\pi-\theta} \cos(\eta + \theta) e^{2kk_0 \cos \eta \sigma^2} d\eta &= \cos \theta \int_{-\theta}^{2\pi-\theta} \cos \eta e^{2kk_0 \cos \eta \sigma^2} d\eta \\ &\quad - \sin \theta \int_{-\theta}^{2\pi-\theta} \sin \eta e^{2kk_0 \cos \eta \sigma^2} d\eta \\ &= \cos \theta \int_{-\theta}^{2\pi-\theta} \cos \eta e^{2kk_0 \cos \eta \sigma^2} d\eta \\ &= 2\pi I_1(2kk_0\sigma^2) \cos \theta \end{aligned} \quad (\text{A.47})$$

Da mesma forma que o caso anterior, temos que:

$$\langle y(t) \rangle = -\sigma \xi \cos \theta \left[\frac{1 - e^{-a^2}}{a} - 2e^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} \cos(2q^2 t') I_1(2qa) dq \right], \quad \blacksquare \quad (\text{A.48})$$

Cálculo $\nabla_{\mathbf{p}} \theta_\xi(\mathbf{p})$

Tendo que $\theta_\xi(\mathbf{p})$ é dada pela a Eq.(2.111), temos:

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{p}} \theta_\xi(\mathbf{p}) &= \nabla_{\mathbf{p}} \arctan \left\{ \frac{2v_0^2 \xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y}{v_0^2 (p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x} \right\} \\ &= \frac{[v_0^2 (p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x]^2}{[v_0^2 (p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x]^2 + [2v_0^2 \xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y]^2} \nabla_{\mathbf{p}} \left(\frac{2v_0^2 \xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y}{v_0^2 (p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x} \right) \\ &= \frac{[v_0^2 (p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x] \nabla_{\mathbf{p}} [2v_0^2 \xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y]}{[v_0^2 (p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x]^2 + [2v_0^2 \xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y]^2} \\ &\quad - \frac{[2v_0^2 \xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y] \nabla_{\mathbf{p}} [v_0^2 (p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x]}{[v_0^2 (p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x]^2 + [2v_0^2 \xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y]^2} \end{aligned} \quad (\text{A.49})$$

Temos os componentes x e y , temos:

$$[\nabla_{\mathbf{p}} \theta_\xi(\mathbf{p})]_x = \frac{2v_0^2 \xi p_y [v_0^2 (p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x] + [2v_0^2 \xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y] (2v_0^2 p_x - \gamma_1 \xi v_3)}{[v_0^2 (p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x]^2 + [2v_0^2 \xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y]^2} \quad (\text{A.50a})$$

$$[\nabla_{\mathbf{p}} \theta_\xi(\mathbf{p})]_y = \frac{(2v_0^2 \xi p_x + \gamma_1 v_3) [v_0^2 (p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x] - 2v_0^2 \xi p_y [2v_0^2 \xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y]}{[v_0^2 (p_x^2 - p_y^2) - \gamma_1 v_3 \xi p_x]^2 + [2v_0^2 \xi p_x p_y + \gamma_1 v_3 p_y]^2} \quad (\text{A.50b})$$

■

Cálculo $\nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p})$

Tendo a energia na Eq.(4.3), temos:

$$\begin{aligned}
\nabla_{\mathbf{p}}\varepsilon(\mathbf{p}) &= \nabla_{\mathbf{p}}\sqrt{\frac{v_0^4}{\gamma_1^2}p^4 + v_3^2p^2 - 2\xi\frac{v_0^2v_3}{\gamma_1}p^3\cos(3\phi)} \\
&= \frac{1}{2\sqrt{\frac{v_0^4}{\gamma_1^2}p^4 + v_3^2p^2 - 2\xi\frac{v_0^2v_3}{\gamma_1}p^3\cos(3\phi)}}\nabla_{\mathbf{p}}\left[\frac{v_0^4}{\gamma_1^2}p^4 + v_3^2p^2 - 2\xi\frac{v_0^2v_3}{\gamma_1}p^3\cos(3\phi)\right] \\
&= \frac{1}{2\varepsilon(\mathbf{p})}\left[\frac{4v_0^4}{\gamma_1^2}p^3\hat{\mathbf{p}} + 2v_3^2p\hat{\mathbf{p}} - 6\xi\frac{v_0^2v_3}{\gamma_1}p^2\cos(3\phi)\hat{\mathbf{p}} + 6\xi\frac{v_0^2v_3}{\gamma_1}p^2\sin(3\phi)\hat{\phi}\right]
\end{aligned}$$

Temos, então, as componentes de $\nabla_{\mathbf{p}}\varepsilon(\mathbf{p})$, dadas por:

$$[\nabla_{\mathbf{p}}\varepsilon(\mathbf{p})]_x = \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{p})}\left[\frac{2v_0^4}{\gamma_1^2}p^3\cos\phi + v_3^2p\cos\phi - 3\xi\frac{v_0^2v_3}{\gamma_1}p^2\cos(2\phi)\right] \quad (\text{A.51a})$$

$$[\nabla_{\mathbf{p}}\varepsilon(\mathbf{p})]_y = \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{p})}\left[\frac{2v_0^4}{\gamma_1^2}p^3\sin\phi + v_3^2p\sin\phi - 3\xi\frac{v_0^2v_3}{\gamma_1}p^2\sin(2\phi)\right] \quad (\text{A.51b})$$

podendo ser escrito ainda como:

$$[\nabla_{\mathbf{p}}\varepsilon(\mathbf{p})]_x = \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{p})}\left[\frac{2v_0^4}{\gamma_1^2}p^2p_x + v_3^2p_x - 3\xi\frac{v_0^2v_3}{\gamma_1}p^2\cos(2\phi)\right] \quad (\text{A.52a})$$

$$[\nabla_{\mathbf{p}}\varepsilon(\mathbf{p})]_y = \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{p})}\left[\frac{2v_0^4}{\gamma_1^2}p^2p_y + v_3^2p_y - 3\xi\frac{v_0^2v_3}{\gamma_1}p^2\sin(2\phi)\right] \quad (\text{A.52b})$$

■

APÊNDICE B – FÍSICA DO ESTADO SÓLIDO

Estrutura Cristalina

A Física do Estado sólido é uma área da física que estuda a morfologia, propriedades eletrônicas e geométricas de todos os materiais presentes na natureza, desde um simples cristal de sal de cozinha ($NaCl$) até uma complexidade como um diamante encontrado nas proximidades de um vulcão.

Todo material presente na natureza, no seu interior, possui uma estrutura geométrica de arranjo dos átomos que cria suas formas e o da estabilidade como pilares que, em um prédio, não só dão sua forma como também o sustentam. O arranjo de átomos em um cristal, como o sal de cozinha ou de metais, pode ser visto com a repetição de "tijolos" elementares, formando toda a estrutura cristalina. Tais "tijolos" são chamados de células unitárias 28-a.

Célula unitária e primitiva

A construção de uma célula unitária em uma estrutura cristalina dar-se pela a seleção de um conjunto de pontos (como em 28-a) que se repete em uma estrutura cristalina e por um conjunto de vetores, chamado de base, que a da direção e o sentido de replicação da célula. Esse conjunto de vetores \mathbf{a}_i , em 2 ($d = 2$) ou 3 ($d = 3$) dimensões, quando combinados linearmente entre si (como em um espaço vetorial visto em álgebra), formam todos os pontos \mathbf{r} presentes na rede (B.1).

$$\mathbf{r} = \sum_{i=1}^d n_i \mathbf{a}_i, \quad (\text{B.1})$$

Um célula unitária pode ser classificada também como primitiva quando seu volume v (em 3 dimensões) (B.2) ou área A (B.3) (em 2 dimensões), formada por seus vetores de base \mathbf{a}_i , é o menor possível. Isso leva crer que toda célula primitiva de uma rede é também unitária mas nem toda célula unitária é primitiva. Em uma estrutura cristalina, por causa de uma estrutura algébrica como um espaço vetorial, podemos adotar vários tipos de bases para representar os pontos de uma rede, conseqüentemente, varias células unitárias diferentes mas com área e volumes nem sempre iguais, muito menos o menor valor.

$$v = |\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)|, \quad (\text{B.2})$$

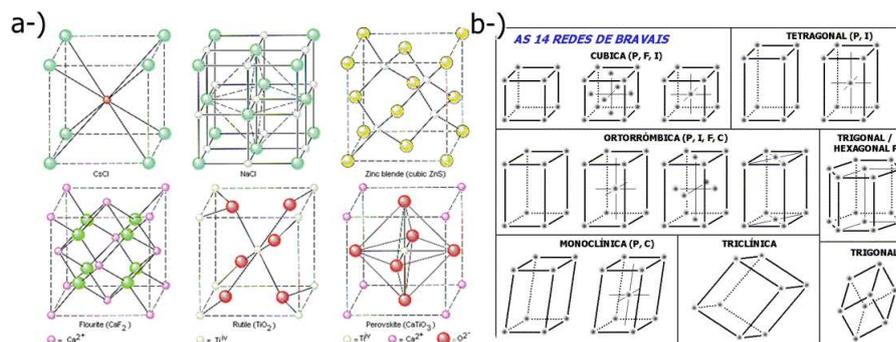


Figura 28 – a-) Representações de células unitárias ("tijolos") de materiais, como minérios, encontrados na natureza como Cloreto de Césio ($CsCl$), Cloreto de Sódio ou sal do cozinha ($NaCl$), Sulfeto de Zinco ou Esfalerita (ZnS), Fluoreto de Cálcio ou Fluorita (CaF_2), Dióxido de Titânio ou Rutilo (TiO_2) e o Óxido de Cálcio e Titânio ou Perovskita ($CaTiO_3$). b-) Os 14 tipos de Redes de Bravais em que são tipos de redes invariantes a traslações e rotações. Destaque para a rede hexagonal da forma ao grafeno. Figuras adaptadas de (Castro *et al.*, 2015).

$$A = |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|, \quad (\text{B.3})$$

Célula de Wigner-Seitz

A Célula de Wigner-Seitz consiste em um método de se construir uma célula unitária ou primitiva de uma estrutura cristalina seja ela em duas dimensões ou três.

A construção célula é feita tomando, no caso bidimensional, traçando retas perpendicularmente à ligações entre átomos vizinhos e, no final, unem-se a retas para formar o polígono que representa um célula unitária e primitiva por possuir a menor área A (B.3). No caso tridimensional, tomamos planos no lugar de retas, colocando-as perpendiculares à ligações entre átomos vizinhos na qual, quando unidos, formam a célula unitária de menor volume v (B.2) 29.

Redes de Bravais

Um conjunto de pontos em um material, também chamado rede, que é formado pela simples replicação de uma célula unitária tal que, quando feita operações de simetria como traslação e rotação, a forma elementar da célula não se altera, pode ser classificada como uma das já catalogadas Redes de Bravais 28-b como as células unitárias em 28-a também pode ser vista como uma rede de bravais ou composição de redes visto que são invariantes a tais operações de simetria.

As combinações entre os vetores da base \mathbf{a}_i deve ser feita tal que a replicação da seja

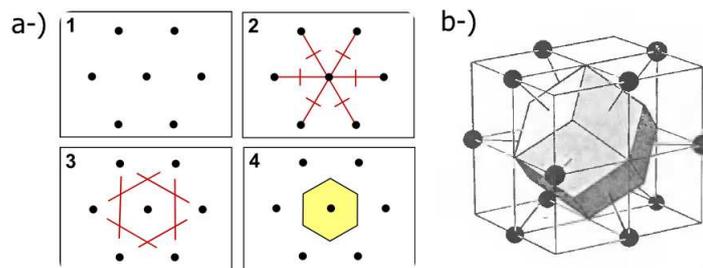


Figura 29 – (a) Representação de uma construção de uma célula de Wigner-Seitz bidimensional, trançando retas perpendiculares à ligações entre átomos. (b) Representação de uma construção de uma célula de Wigner-Seitz tridimensional para uma rede cúbica de face centrada. Vemos que, ao invés de traçarmos retas, colocamos planos perpendiculares a retas que ligam os átomos. Figura adaptada de (JoaoXP, 2011) e (Ashcroft N.W. ; Mermin, 2011).

feita de maneira sobreposta. Logo, os fatores n_i em (B.1) devem ser inteiros ($n_i \in \mathbb{Z}$). Com isso, chegamos em pontos de um rede, preenchendo todo o espaço, formando toda rede cristalina 30. Podemos resumir a teoria de Rede de Bravais na definição 3.

Definição 3 - Redes de Bravais: *Um conjunto infinito de pontos com arranjo e orientação que parecem exatamente os mesmos quando vistos de qualquer ponto da rede graças as simetrias da células unitárias. Os pontos de uma rede de Bravais são descritos em função da base de vetores \mathbf{a}_i como na equação (B.1).*

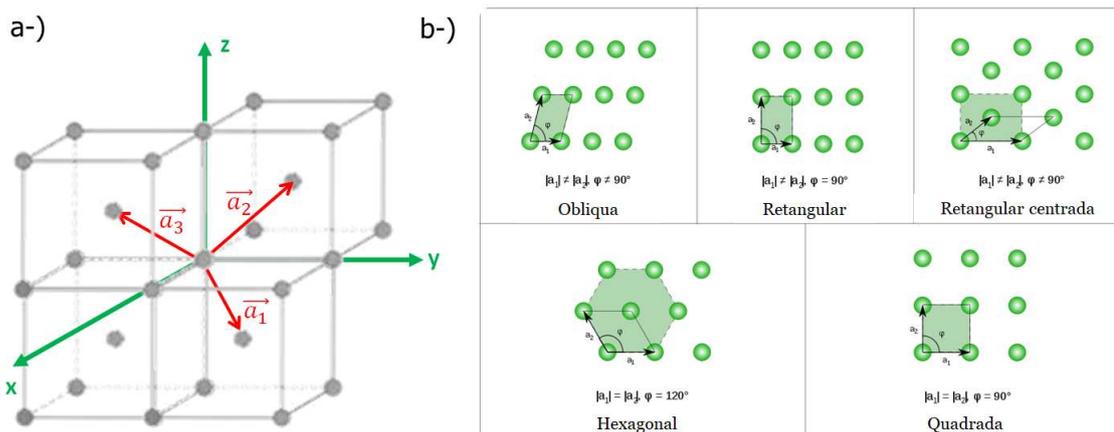


Figura 30 – a-) Representação da replicação de um célula unitária do tipo BCC (Cúbica de Corpo Centrado), um dos 14 tipos de Redes de Bravais 28, com seus vetores de base \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 e \mathbf{a}_3 . b-) Representação da replicação células unitárias bidimensionais (2D), que também são tipos de Redes de Bravais em duas dimensões, com os vetores de base \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 . Vemos que não há pontos sobrepostos, nem células, pelo o fato de n_i na equação (B.2) ser inteiro. Figura adaptada de (Castro *et al.*, 2015).

Redes Real e Recíproca

O conjunto de pontos em uma Rede de Bravais formados pelos os vetores \mathbf{a}_i em (B.1), visto na figura 30, é chamado de Rede Real ou, também chamada, rede direta em que o conjunto de vetores \mathbf{a}_i é chamada também de base real.

Em uma Rede Real, em 3 dimensões, podemos criar uma família de planos que englobam muitos pontos como 31 tais que os mesmo funcionam como uma crista de um onda no espaço. Supondo que a onda tenha um vetor \mathbf{k} de onda, escrevemos como uma onda plana $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$.

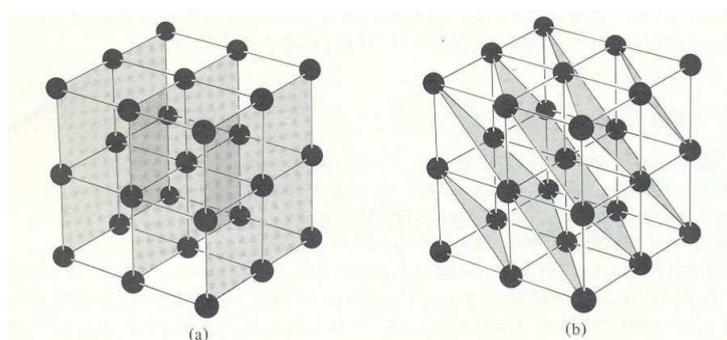


Figura 31 – Representação de Família de planos em rede cristalinas tridimensionais. Note que, em ambos, os planos estão sempre distanciados igualmente, funcionando como cristas de uma onda. Figura adaptada de (Ashcroft N.W. ; Mermin, 2011)

Pela a replicação da célula unitária para se formar a Rede Real, temos então uma periodicidade associado à rede devido a teoria de Redes de Bravais. Tal periodicidade implica em termos um vetor \mathbf{R} em que, pela a equação (B.4), não temos alteração na onda plana, fazendo de \mathbf{R} o nosso "período". Para que isso seja verdade, a equação (B.5) deve ser consistente.

$$e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (\text{B.4})$$

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = 1, \quad (\text{B.5})$$

A consistência de (B.5) implica que o produto escalar $\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}$ deve possuir valores bem definidos de maneira discreta (numero de valores finitos). Pela a equação (B.6), tais valores devem ser múltiplos pares de π ($2n\pi$), com n inteiro, graças a propriedade da exponencial complexa em (B.7). Isso faz com que (B.6) seja uma equação de uma família de planos na rede real com o mesmo vetor normal (perpendicular) \mathbf{k} , deslocados uns dos outros por valores de n distintos, como mostrado na figura 31.

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} = 2n\pi, \quad (\text{B.6})$$

$$e^{i2n\pi} = 1, \quad (\text{B.7})$$

Tendo que existem outros tipos de famílias de planos em uma rede (pela a figura 31), implica dizer que existe outros vetores \mathbf{k} para representarem tais planos. Temos, então, um conjunto de vetores \mathbf{k} discreto pelo o fato dos pontos em um cristal serem discretos também. O conjunto de vetores \mathbf{k} formam um espaço em que possui um base vetorial (como em um espaço vetorial) juntamente com um espécie de célula unitária para uma Rede Real.

Com isso, podemos classificar um conjunto de vetores \mathbf{k} como uma Rede de Bravais em que podemos escrever qualquer vetor \mathbf{k} como combinação de uma nova base \mathbf{b}_i , com k_i inteiro e d a dimensão (B.8). À essa nova Rede de Bravais, damos o nome de Rede Reciproca que tem como definição (5).

A nova base \mathbf{b}_i possui relação com a base real \mathbf{a}_i mostrado em (B.9), onde δ_{ij} é o famoso Delta de Kronecker¹. Com isso, podemos escrever a base reciproca \mathbf{b}_i , seja em duas dimensões ou três dimensões.

$$\mathbf{k} = \sum_{i=1}^d k_i \mathbf{b}_i, \quad (\text{B.8})$$

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}, \quad (\text{B.9})$$

Definição 4 - Rede Real: Conjunto de pontos \mathbf{r} que representa átomos em uma estrutura cristalina formado pela a replicação de uma célula unitária, sendo então um tipo de Rede de Bravais em que os pontos \mathbf{r} são escritos como combinação linear dos vetores \mathbf{a}_i (B.1).

Definição 5 - Rede Reciproca: Conjunto de vetores \mathbf{k} que representa vetores de ondas planas em estruturas cristalina cuja as cristas das ondas são família de planos com o mesmo vetor normal \mathbf{k} (como em 31) em que é dado em função de uma combinação linear \mathbf{b}_i como uma Rede de Bravais (B.8), que é formada também por uma replicação de uma célula unitária, chamada de 1ª zona de Brillouin, dando origem a todos os vetores \mathbf{k} .

¹Idealizado pelo o matemático alemão Leopold Kronecker (1823-1891), a função de Delta de Kronecker δ_{ij} só possui dois valores possíveis: 1 para $i = j$ e 0 para $i \neq j$.