



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

GRUPO DE TEORIA DA MATÉRIA CONDENSADA



Ícaro Rodrigues Lavor

Propagação de pacote de onda gaussiano em
monocamada e bicamada de grafeno

Fortaleza
2016

Ícaro Rodrigues Lavor

**Propagação de pacote de onda gaussiano em
monocamada e bicamada de grafeno**

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-graduação em Física da Universidade Federal do Ceará como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Andrey Chaves

Co-orientadores:

Dr. Diego Rabelo da Costa

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

**Fortaleza - CE
05 de julho de 2016**

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Universitária

Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

R617p Rodrigues Lavor, Ícaro.

Propagação de pacote de onda gaussiano em monocamada e bicamada de grafeno /
Ícaro Rodrigues Lavor. – 2016.
146 f. : il. color.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa
de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2016.

Orientação: Prof. Dr. Andrey Chaves.

Coorientação: Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa.

1. Grafeno. 2. Zitterbewegung. 3. Pacote de onda. 4. Pseudospin. 5. Física da matéria
condensada. I. Título.

CDD 530

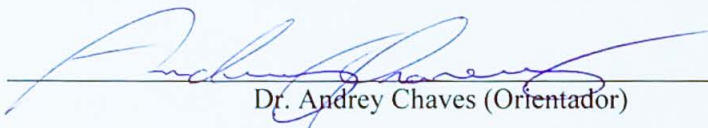
ICARO RODRIGUES LAVOR

**PROPAGAÇÃO DE PACOTES DE ONDA GAUSSIANO EM MONOCAMADA E
BICAMADA DE GRAFENO**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

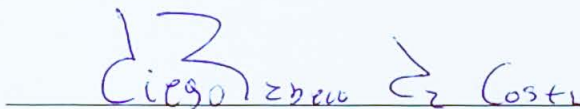
Aprovada em 05 / 08 / 2016 .

BANCA EXAMINADORA



Dr. Andrey Chaves (Orientador)

Universidade Federal do Ceará (UFC)



Dr. Diego Rabelo da Costa (Coorientador)

Universidade Federal do Ceará (UFC)



Dr.ª. Silvia Helena Roberto de Sena

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Braileira
(UNILAB)

*Aos meus Pais,
familiares
e amigos.*

Agradecimentos

Primeiramente gostaria de agradecer a voz sutil e silenciosa que nos dá *o sopro da vida*. Tão misteriosa e abstrata, mas que nos sustenta nos momentos mais difíceis e dolorosos, nos dando força para seguir *avante* e permitindo que tudo se realize no seu devido tempo.

Gostaria de agradecer também aos meus pais *Franciso de Assis* e *Jacinta Rodrigues*, que, com amor, inteligência, humildade e sabedoria, me ensinaram a viver de forma sábia.

Aos meus irmãos *Ítalo* e *Írvile Rodrigues*, a quem agradeço pelos constantes momentos nos quais tiveram paciência com minhas atitudes, e que inúmeras vezes contribuíram me apoiando e incentivando com os meus Sonhos.

À minha família, na qual sempre encontrei amparo e fortaleza em todos os momentos em que precisei. Em especial ao meu Avó *Antônio Rodrigues*, que aos 99 anos de idade me emociona com seus ensinamentos, mostrando-me que é possível viver de forma digna e humilde.

Ao Prof. *Ricardo César*, por despertar em mim a paixão pela Física, bem como ao Prof. *Célio Muniz* pela orientação na minha primeira apresentação acadêmica.

Não menos importante, ao meu orientador Prof. *Andrey Chaves* pela competência, paciência e dedicação na minha orientação desde a época da minha iniciação científica até os dias de hoje, bem como pelos ensinamentos, nos quais levarei pelo resto da vida. Serei eternamente grato por tudo.

Aos professores do Departamento de Física da UFC, em especial aos professores *Raimundo Nogueira*, *José Ramos*, *Ascânio Araújo*, *Josué Mendes Filho*, *Renan Landim*, *Marcos Antônio*, *Nildo Loiola*, *Carmona*, *Geová*, *Lenz*, *Jeanlex Soares*, *João Milton*, *Saulo D. Reis* e *Wandember Paiva*.

Aos meus colegas do Departamento de Física: *João Paulo Nogueira*, *Bruno Mesquista*, *Danilo Borges*, *Mardônio França*, *Wagner Sena*, *Daniel Linhares*, *Arilo Pinehiro*, *André Borba*, *William Moura*, *Maurisan Alves*, *Jonas Nascimento*, *Levi Leite*, *Nailson Vasconcelos* e *Ravenna Rodrigues*. Bem como a todos os outros que convivi durante todo esse tempo.

Eu agradeço ao *Luan Vieira*, *Gabriel Oliveira* e *Duarte José*, amigos que dividem o

mesmo espaço comigo todos os dias e que sempre estão dispostos a ajudar. A todos os alunos e professores que compõe o Grupo de Teoria da Matéria Condensada - GTMC.

Aos meus amigos (as) *Bruno Sena, Fabrício Oliveira, Danton Maknó, Rodrigo Matos, Rubens Batista e Raphaela Felix.*

Agradeço também à Prof^a. *Silvia Helena*, que de forma indireta me encorajou com o desenvolvimento deste trabalho. Ao Dr. *Diego Rabelo* pela sua paciência e demonstração de amor pelo que faz (sem dúvida alguma, você é o norte para muitas pessoas).

Gostaria de agradecer também à minha noiva, *Mayara Barbosa*, pelo amor, carinho e amizade, plenamente correspondidos. O seu apoio foi e é imprescindível. Obrigado por fazer parte dos meus sonhos.

Por fim, agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo suporte financeiro concedido durante todo o meu Mestrado.

*“Voici mon secret. Il est très simple: on ne voit bien qu’avec le coeur.
L’essentiel est invisible pour les yeux.”*

Le Petit Prince, Antoine de Saint-Exupéry

Resumo

Nas últimas décadas, a dinâmica de pacotes de ondas tem sido objeto de vários estudos teóricos e experimentais em diversos tipos de sistemas, tais como semicondutores, supercondutores, sólidos cristalinos e átomos frios. Com a descoberta do grafeno, surge agora um novo sistema para a comunidade científica investigar a evolução temporal de pacotes de onda e a possibilidade de observar-se o fenômeno *zitterbewegung* (ZBW), um movimento trêmulo previsto teoricamente por Schrödinger para pacotes de onda descrevendo partículas que obedecem à equação de Dirac, como é o caso de elétrons de baixa energia neste material.

Neste trabalho, apresentamos uma descrição detalhada da dinâmica de partículas carregadas descritas por um pacote de onda Gaussiano em monocamada e bicamada de grafeno de forma analítica. Primeiramente, obtivemos analiticamente um Hamiltoniano aproximado 2×2 para uma monocamada de grafeno, generalizando-o, em seguida, para o caso de n -camadas com empilhamento ABC . A partir deste Hamiltoniano, encontramos as funções de onda para as sub-redes A e B . Uma vez conhecidas as funções de onda, determinamos a densidade de probabilidade eletrônica e o valor médio das coordenadas do centro de massa com o objetivo de verificar o comportamento da propagação do pacote de onda, bem como as oscilações devido ao fenômeno ZBW. Foram analisados diferentes casos de polarização inicial de pseudo-spin, relacionados a diferentes amplitudes de probabilidade das funções de onda das sub-redes A e B que compõem as camadas do grafeno. Por fim, comparamos os resultados obtidos analiticamente com um método computacional *tight-binding*, encontrando um casamento perfeito entre os resultados para o caso da monocamada.

Palavras-chave: Grafeno, *Zitterbewegung*, Pacote de onda, Pseudospin, Física da matéria condensada.

Abstract

In the last few decades, the dynamics of wave packets has been subject of many theoretical and experimental studies in various types of systems such as semiconductors, superconductors, crystalline solids and cold atoms. With the discovery of graphene, now comes a new system for the scientific community to investigate the temporal evolution of wave packets and possibly observe the zitterbewegung phenomenon (ZBW), a trembling motion theoretically predicted by Schrödinger for wave packets describing particles that obey the Dirac equation, as is the case of low energy electrons in this material.

In this work, we present an analytical detailed description of the dynamics of charged particles described by a Gaussian wave packet in monolayer and bilayer graphene. First, we have obtained an approximate 2×2 Hamiltonian for a monolayer of graphene, generalizing it then for the case of n - ABC stacking layers. From this Hamiltonian, we find the wave functions for the sub-lattices A and B that compose graphene's honeycomb lattice. Once the wave functions are known, we determine the electron probability density and the average value of the center of mass coordinates in order to verify the behavior and spreading of the wave packet in real space, as well as variations due to ZBW phenomenon. We analyzed different cases of initial pseudo spin-polarization, related to different amplitudes of the probability density in sub-lattices A and B . Finally, we compare the results obtained analytically with those from a computational tight-binding method, observing a perfect agreement between the results for the monolayer case.

Palavras-chave: Graphene, *Zitterbewegung*, Wave Pack, Pseudospin, Physics of condensed matter.

Sumário

Lista de Figuras	xiv
Lista de Tabelas	xix
Lista de abreviaturas e siglas	xx
Lista de símbolos	xxi
1 Introdução	22
1.1 Motivações para o estudo do grafeno	22
1.2 Dinâmica de pacote de onda em grafeno e <i>Zitterbewegung</i>	24
1.3 Organização da dissertação	26
2 Carbono: do grafite ao grafeno.	27
2.1 O átomo de carbono	27
2.1.1 Hibridização sp	29
2.1.2 Hibridização sp^2	29
2.1.3 Hibridização sp^3	30
2.2 Formas alotrópicas do carbono	30
2.2.1 O grafite e o diamante	30
2.2.2 Fullerenos	33
2.2.3 Nanotubos de carbono	33
2.2.4 Nanoespumas de carbono	34
2.2.5 Grafeno	34
2.3 Técnicas de obtenção do grafeno	38
2.3.1 Esfoliação mecânica	38
2.3.2 Esfoliação em fase líquida	39
2.3.3 Deposição química na fase vapor	39
2.3.4 Sublimação de carbetos	40

2.4	Características do grafeno	40
2.4.1	Eletrônicas	40
2.4.2	Mecânicas	41
2.4.3	Ópticas	42
2.5	Aplicações do grafeno	43
2.5.1	Transistores baseado em grafeno	43
2.5.2	Sensores	44
2.5.3	Painéis flexíveis	46
3	Aspectos teóricos do grafeno	47
3.1	Propriedades eletrônicas do grafeno	47
3.1.1	Estrutura cristalina	47
3.1.2	Modelo <i>tight-binding</i> para o grafeno	48
3.1.3	Aproximação do contínuo para monocamada de grafeno	52
3.2	Bicamada de grafeno	53
3.2.1	Estrutura cristalina	53
3.2.2	Modelo <i>tight-binding</i> para a bicamada de grafeno	54
3.2.3	Aproximação do contínuo para bicamada de grafeno	56
3.3	Hamiltoniano para n -camadas de grafeno romboédrico	58
4	Propagação de pacote de onda gaussiano em camadas de grafeno	61
4.1	Representação de Heisenberg e ZBW	61
4.2	Solução analítica	62
4.2.1	Caso geral: n -camadas de grafeno	63
4.2.2	Monocamada de grafeno	74
4.2.3	Bicamada de grafeno	75
4.3	Solução numérica: split-operator	76
5	Resultados e discussões	82
5.1	Propagação de pacote de onda em monocamada de grafeno	82
5.1.1	Densidade de probabilidade e média de $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ para $C_1 = 1$ e $C_2 = 0$	82
5.1.2	Média de $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ e densidade de probabilidade para $C_1 = 1$ e $C_2 = 1$	87
5.1.3	Média de $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ e densidade de probabilidade para $C_1 = 1$ e $C_2 = i$	89
5.2	Propagação de pacote de onda em bicamada de grafeno	90
5.2.1	Densidade de probabilidade e média de $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ e para $C_1 = 1$ e $C_2 = 0$	90
5.2.2	Densidade de probabilidade e média de $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ e para $C_1 = 1$ e $C_2 = 1$	92

5.2.3	Densidade de probabilidade e média de $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ e para $C_1 = 1$ e $C_2 = i$	94
6	Conclusões e perspectivas	97
	Apêndice A	143
	Referências Bibliográficas	143

Lista de Figuras

1.1	(a) Número de patentes, (b) publicações mundiais de 2000 à 2014 e (c) publicações das principais Universidades brasileiras (até Julho de 2013) sobre grafeno. Adaptado das referências [9] e [10].	23
2.1	Ilustração da posição do átomo de carbono (C) na tabela periódica.	27
2.2	Configuração eletrônica para o estado fundamental e excitado do átomo de carbono. Adaptado da Ref. [24].	28
2.3	Estrutura cristalina do (a) grafite e do (b) diamante.	32
2.4	(a) Fulereno C_{60} , (b) cúpula geodésica e (c) projeto do B. Fuller.	33
2.5	Geometrias de NCPS's: (a) armchair, (b) zig-zag, (c) chiral. A estrutura esquemática de NC's desenrolado é mostrada em (d).	34
2.6	Utilização da técnica da clivagem micromecânica para produzir grafeno: (a) coloca-se um tipo especial de fita adesiva em um cristal de grafite, (b) a fim de se obter algumas camadas de grafeno. Em seguida (c) as camadas são pressionadas sobre um substrato (SiO_2) e ao remover a fita (d) algumas camadas ficam no substrato. Adaptado da referência [38].	35
2.7	(a) Imagem utilizando micrografia eletrônica de transmissão (MET) e (b) microscopia eletrônica de varredura (MEV). Adaptado da referência [37].	35
2.8	Linha do tempo até a preparação do Grafeno por Gaim e sua equipe. Adaptado da referência. [41]	36
2.9	Ilustração da adesão dos pêlos ceratinados das lagartixas: (a) sola da pata da lagartixa, (b) lâminas das pontas das patas com um zoom ilustrando as lamêlas e os pelos micrométricos, (c,d) pêlos micrométricos tocando a superfície e (e) ilustração da força de van der Waals-London. Adaptado da referência [42].	37

- 2.10 Filmes de grafeno: (a) fotografia de uma multicamada de grafeno relativamente grande com espessura ~ 3 nm sobre SiO₂, (b) imagem de AFM de uma área de $4 \mu\text{m}^2$ próximo da sua borda (SiO₂ na cor marrom e a cor laranja está 3 nm acima do SiO₂) e (c) imagem do grafeno obtida por AFM. Adaptado da referência [7]. 38
- 2.11 Formas mais comuns de produção do grafeno. Do lado esquerdo, temos um gráfico que avalia a qualidade do grafeno (G), custo (C; valores menores correspondem a maiores custos de produção), escalabilidade (S), pureza (P) e produção (Y) para quatro métodos de produção do grafeno. No lado direito temos um esquema para cada tipo de produção. Adaptado das referências [43] e [44]. 39
- 2.12 Imagens do experimento: (a) Imagem de micrografia eletrônica de um floco de grafeno sobre o substrato de Si com os seus furos. Na região I e II, temos um poro parcialmente e totalmente coberto por grafeno, respectivamente, e a região III mostra uma fratura devido a indentação. (b) Imagem do poro ainda sem ser perfurado, ou seja, antes de ocorrer a AFM sobre o floco de grafeno. A linha contínua, representa o perfil da altura da linha tracejada, que possui cerca de 2.5 nm. (c) Visão esquemática do procedimento de nanoindentação e da membrana de grafeno. Adaptado da referência [72]. 42
- 2.13 (a) Transmitância do grafeno para monocamada e bicamada de grafeno e (b) transmitância do grafeno para vários comprimentos de onda (em nm) comparada com outros compostos (ITO, ZnO/Ag/ZnO, TiO₂/Ag/TiO₂ e SWTNTs). Note que uma única camada absorve apenas 2.3 % da luz que incide, enquanto que a bicamada absorve ~ 4.6 %. Adaptado da referência [74]. 43
- 2.14 (a) Gráfico com a evolução do tamanho e de transistores MOSFET (os círculos vermelhos vazios são projeções), (b) esquema de um transistor de grafeno auto-alinhado de alta velocidade, (c) e (d) *zoom* no transistor de grafeno auto-alinhado. Adaptado das referências [75], [76] e [77]. 44
- 2.15 (a) Ilustração de uma molécula de DNA passando através de um nanoporo em uma monocamada de grafeno, (b) variação da corrente em função do tempo para uma molécula que passa através de um nanoporo (A-adenina, T-timina, G-guanina e C-citosina), (c) representação de um biosensor e (d) fotosensor baseados em grafeno. Adaptado das referências [86], [92], [93] e [94]. 45

2.16	(a) Filme de grafeno; (b) Janela transparente (<i>smart window</i>) que pode exibir informações ou não (c); (d) Filme fino de grafeno ilustrando a sua flexibilidade; (e) Filme fino condutor baseado em grafeno produzido pela empresa <i>2D Carbon Tech</i> (esquerda) e utilização do filme em um protótipo de <i>smartphone</i> (direita); e (f) Ilustração de um painel fotovoltaico flexível. Adaptado das referências [74], [95], [97], [98] e [104].	46
3.1	(a) Estrutura de rede do grafeno formada por duas sub-redes triangulares interpenetradas A e B. Os vetores unitários são definidos por \vec{a}_1 e \vec{a}_2 , os primeiros vizinhos são localizados por $\vec{\delta}_i$ ($i = 1, 2, 3$) e a distância entre os átomos de carbono é igual a 1.42 \AA . (b) Primeira zona de Brillouin. Os cones de Dirac, aos quais iremos nos reportar logo mais, estão localizados nos pontos K e K'	48
3.2	(a) Relação de dispersão eletrônica do grafeno enfatizando o ponto de Dirac e (b) estrutura de bandas em relação aos pontos de simetria ilustrados na Fig. 3.1, onde a figura menor mostra o resultado obtido experimentalmente utilizando espectroscopia de fotoemissão resolvida em ângulo (ARPES). Adaptado das referências [108], [109] e [110].	51
3.3	(a) Estrutura cristalina para uma bicamada de grafeno com empilhamento do tipo Bernal com os <i>hoppings</i> entre as duas camadas (γ_1 , γ_3 e γ_4) e entre os átomos da mesma rede (γ_0). A distância entre as camadas é $d \approx 3.35 \text{ \AA}$ e $a = 1.42 \text{ \AA}$ é a distância entre os átomos de carbono. A camada inferior é representada pelas linhas cheias cinzas com as sub-redes triangular formadas por A_1 (azul) e B_1 (vermelho), enquanto que a camada superior é representada pelas linhas pontilhadas (vermelhas) com sub-redes formadas por A_2 (preto) e B_2 (branco). (b) Visão superior do empilhamento do tipo bernal. (c) Bicamada de grafeno do tipo <i>AA</i> e (d) sua representação a partir de uma perspectiva superior.	53
3.4	Relação de dispersão de baixas energias para a bicamada de grafeno com empilhamento <i>AB</i> e <i>AA</i> , respectivamente, em duas dimensões. Adaptado da referência [124].	57
3.5	(a) Representação esquemática para n -camada de grafeno com empilhamento romboédrico (<i>ABC</i>), (b) posição dos sítios A_i e B_i das sub-redes de cada monocamada com o hopping entre os primeiros vizinhos γ_0 e entre os sítios A_i e B_{i+1} das camadas dado por γ e (c) relação de dispersão para $n = 2, 3, 4, 5$ obtidas a partir do Hamiltoniano (3.40), linhas pretas, e (3.42), linhas tracejadas vermelhas.	58
4.1	Coordenadas cilíndricas. O raio do círculo é dado por p e o ângulo que o mesmo forma com o eixo- x é dado por θ	69

- 4.2 Poços de potenciais periódicos com largura a representando uma linha de átomos. Quando o potencial é infinito (vermelho), a probabilidade do elétron tunelar é zero, logo, a função de onda fica confinada apenas dentro do poço. Por outro lado, se o poço de potencial for finito (cor azul) o elétron terá probabilidade não-nula de tunelar de um poço a outro. 77
- 4.3 Estrutura da matriz pentadiagonal correspondente ao modelo *tight-binding* para uma rede bidimensional-2D. A diagonal principal (linha contínua azul) e a sub-diagonal pontilhada azul possuem todos os termos diferentes de zero, enquanto que a sub-diagonal pontilhada vermelha possuem termos não-nulos e zeros de forma intercalada. Todos os outros elementos fora dessas diagonais são nulos. Cada bloco representa uma matriz quadrada de ordem I , o número de linhas dos sítios da rede. O número de colunas dos sítios da rede, define o número de blocos (J). Logo, o número total de elementos na matriz H_{TB} em duas dimensões será: $I \times I \times J \times J$ 79
- 4.4 Mapeamento da rede hexagonal em uma rede retangular. Equivalência topológica: cada sítio possui outros três primeiros vizinhos, a área das rede são iguais a $3\sqrt{3}a^2/2$ e os vetores unitários que geram as sub-redes são equivalentes para as duas redes. 80
- 5.1 Densidade de probabilidade eletrônica, $\rho(\vec{r}, t) = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$, para monocamada de grafeno com $C_1 = 1$ e $C_2 = 0$ para $a = k_0d = 1.2$ onde de (a) a (f) temos $t = 0, t = 1, t = 2, t = 3, t = 4, t = 5$, respectivamente (t possui unidades de d/v_f , onde v_f é a velocidade de Fermi). 83
- 5.2 Média da coordenada $\langle x(t) \rangle / d$ versus tempo ($\tau_0 = d/v_f$) para um pacote de onda que se propaga em uma monocamada de grafeno com $C_1 = 1$ e $C_2 = 0$ para diversos valores do parâmetro a , onde $a = k_0d$. As linhas (símbolos) representam os valores obtidos a partir do modelo analítico (*tight-binding*). 84
- 5.3 Densidade de probabilidade eletrônica, $\rho(\vec{r}, t) = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$, para monocamada de grafeno com $C_1 = 1$ e $C_2 = 1$ para $a = k_0d = 1.2$ onde de (a) a (f) temos $t = 0, t = 1, t = 2, t = 3, t = 4, t = 5$, respectivamente (t possui unidades de d/v_f , onde v_f é a velocidade de Fermi). 86
- 5.4 Média da coordenada $\langle x(t) \rangle / d$ versus tempo ($\tau_0 = d/u$) para um pacote de onda que se propaga em uma monocamada com $C_1 = 1$ e $C_1 = 1$ para diversos valores do parâmetro a , onde $a = k_0d$. As linhas (símbolos) representam os valores obtidos a partir do modelo analítico (*tight-binding*). A inserção mostra a média da coordenada $\langle y(t) \rangle / d$ obtida a partir do modelo TB. 87
- 5.5 Densidade de probabilidade eletrônica, $\rho(\vec{r}, t) = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$, para monocamada de grafeno com $C_1 = 1$ e $C_2 = i$ para $a = k_0d = 1.2$ onde de (a) a (f) temos $t = 0, t = 1, t = 2, t = 3, t = 4, t = 5$, respectivamente (t possui unidades de d/v_f , onde v_f é a velocidade de Fermi). 88

5.6	Média da coordenada $\langle x(t) \rangle / d$ versus tempo ($\tau_0 = d/v_f$) para um pacote de onda que se propaga em uma monocamada com $C_1 = 1$ e $C_1 = i$ para diversos valores do parâmetro a , onde $a = k_0d$. As linhas (símbolos) representam os valores obtidos a partir do modelo analítico (<i>tight-binding</i>). A inserção mostra a média da coordenada $\langle x(t) \rangle / d$ obtida a partir do modelo TB.	90
5.7	Densidade de probabilidade eletrônica, $\rho(\vec{r}, t) = \psi_1 ^2 + \psi_2 ^2$, para bicamada de grafeno com $C_1 = 1$ e $C_2 = 0$ para $a = k_0d = 1.2$ onde de (a) a (f) temos $t = 0, t = 1, t = 2, t = 3, t = 4, t = 5$, respectivamente (t possui unidades de d/v_f , onde v_f é a velocidade de Fermi).	91
5.8	Média da coordenada $\langle x(t) \rangle / d$ versus tempo ($\tau_0 = d/v_f$) para um pacote de onda que se propaga em uma bicamada com $C_1 = 1$ e $C_1 = 0$ para diversos valores do parâmetro a , onde $a = k_0d$	92
5.9	Densidade de probabilidade eletrônica, $\rho(\vec{r}, t) = \psi_1 ^2 + \psi_2 ^2$, para bicamada de grafeno com $C_1 = 1$ e $C_2 = 1$ para $a = k_0d = 1.2$ onde de (a) a (f) temos $t = 0, t = 1, t = 2, t = 3, t = 4, t = 5$, respectivamente (t possui unidades de d/v_f , onde v_f é a velocidade de Fermi).	93
5.10	Módulo da média da coordenada $\langle x(t) \rangle / d$ versus tempo ($\tau_0 = d/v_f$) para um pacote de onda que se propaga em uma bicamada com $C_1 = 1$ e $C_1 = 1$ para diversos valores do parâmetro a , onde $a = k_0d$	94
5.11	Densidade de probabilidade eletrônica, $\rho(\vec{r}, t) = \psi_1 ^2 + \psi_2 ^2$, para bicamada de grafeno com $C_1 = 1$ e $C_2 = i$ para $a = k_0d = 1.2$ onde de (a) a (f) temos $t = 0, t = 1, t = 2, t = 3, t = 4, t = 5$, respectivamente (t possui unidades de d/u , onde u é a velocidade de Fermi).	95
5.12	Média da coordenada $\langle x(t) \rangle / d$ versus tempo ($\tau_0 = d/v_f$) para um pacote de onda que se propaga em uma bicamada com $C_1 = 1$ e $C_1 = i$ para diversos valores do parâmetro a , onde $a = k_0d$. O painel enfatiza a convergência dos valores	96

Lista de Tabelas

- 2.1 Representação do arranjo dos orbitais híbridos, geometria e exemplos para os tipos de hibridização sp , sp^2 e sp^3 , respectivamente, do átomo de carbono. Adaptado das referências [27], [28] e [29]. 31
- 2.2 Alótropos do carbono em termos de sua dimensionalidade, bem como algumas características dos mesmos. Como a condutividade elétrica no grafite depende da posição, então “*” indica a direção “a” e “**” indica a direção “c”. Adaptado da referência [24, 30]. 32
- 2.3 Vantagens e desvantagens para se produzir o grafeno a partir da esfoliação mecânica, esfoliação química em fase líquida, deposição química em fase vapor e sublimação de carbetos. Adaptado da referência [24, 67]. 41
- 4.1 Tabela composta pelos resultados do $\langle x \rangle$ e $\langle y \rangle$ obtidos a partir da representação de Heisenberg para diferentes valores das constantes de C_1 e C_2 que determinam a polarização inicial do pseudo-spin. O símbolo de diferente (igual) significa dizer que o valor esperado não será (será) nulo. 62

Lista de abreviaturas e siglas

0D	Dimensão-zero
1D	Dimensão-um
2D	Dimensão-dois
3D	Dimensão-três
AFM	Microscopio de força atômica
ARPES	Espectroscopia de fotoemissão resolvida em ângulo
BLG	Bicamada de grafeno
CCD	Dispositivo de carga acoplada
CAPES	Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior
CVD	Deposição química na fase vapor
CMOS	Semicondutor de metal-óxido complementar
DNA	Ácido desoxirribonucleico
EQH	Efeito hall quântico
FLG	Grafeno de poucas camadas
LPE	Esfoliação em fase líquida
MEV	Microscopio eletrônico de varredura
MET	Microscopio eletrônico de transmissão
MLG	Monocamada de grafeno
MOSFET	Transistor de efeito de campo metal-óxido-semicondutor
NC's	Nanotubos de carbono
NCPS's	Nanotubos de carbono de parede simples
NCPM's	Nanotubos de carbono de paredes múltiplas
NFM	Microscópio de campo próximo
MC	Clivagem mecânica
RAM	<i>Random Access Memory</i>
STM	Microscópio eletrônico de varredura por tunelamento
SEM	Microscópios eletrônicos de varredura por emissão de campo
TB	<i>Tight-binding</i>
ZBW	<i>Zitterbewegung</i>

Lista de símbolos

v_f	Velocidade de Fermi
τ, γ_i	Parâmetro de <i>Hopping</i>
$\Psi_A(\Psi_B)$	Probabilidade de encontrar o elétron na sub-rede <i>A</i> ou <i>B</i>
e	Carga elementar do elétron
I	Matriz identidade
\vec{a}_i	Vetor <i>i</i> no espaço real
\vec{b}_i	Vetor <i>i</i> no espaço recíproco
H	Hamiltoniano
H_D	Hamiltoniano de Dirac
H_{bi}	Hamiltoniano da bicamada de grafeno
H_{TB}	Hamiltoniano <i>Tight-binding</i>
H_n	Hamiltoniano para <i>n</i> camadas de grafeno
\mathbf{a}_i^\dagger	Operador de criação de elétrons no sítio <i>i</i> da sub-rede <i>A</i>
\mathbf{a}_i	Operador de aniquilação de elétrons no sítio <i>i</i> da sub-rede <i>A</i>
\mathbf{b}_i^\dagger	Operador de criação de elétrons no sítio <i>i</i> da sub-rede <i>B</i>
\mathbf{b}_i	Operador de aniquilação de elétrons no sítio <i>i</i> da sub-rede <i>B</i>
$g(\vec{k})$	Fator de estrutura do cristal
\hbar	Constante de Plank
$I_\nu(z)$	Função de Bessel modificada de ordem ν
$J_\nu(z)$	Função de Bessel ordem ν
${}_0F_1[\nu, z]$	Função hipergeométrica confluyente regularizada de ordem ν
${}_0\tilde{F}_1[\nu, z]$	Função hipergeométrica confluyente de ordem ν
$G_{\mu\nu}(\vec{r}, \vec{r}', t)$	Função de Green ν
$\langle x(t) \rangle$	Valor médio da coordenada- <i>x</i>
$\langle y(t) \rangle$	Valor médio da coordenada- <i>y</i>
K	Ponto <i>K</i> do cone de Dirac
K'	Ponto <i>K'</i> do cone de Dirac
$\vec{\nabla}_p$	Operador momento em coordenadas cartesianas
$\vec{\rho}$	Densidade de probabilidade
k	Módulo do vetor de onda
θ	Ângulo incidente
Γ	Ponto gamma do centro da primeira zona de Brillouin
$\vec{\sigma}_i$	Matrizes de Pauli <i>i</i>

1.1 Motivações para o estudo do grafeno

Em dezembro de 1959, o físico Richard Feynman¹ proferiu uma palestra no Instituto de Tecnologia da Califórnia que viria a ser considerada o marco inicial da nanotecnologia², embora não tenha utilizado este termo durante o encontro. Em sua palestra, intitulada *There's Plenty of Room at the Bottom*³, Feynman sugeriu que os átomos poderiam ser manipulados e organizados individualmente, conforme necessidade, dando origem a novos materiais com propriedades inteiramente diferentes daquelas existentes [1].

A nanotecnologia, de forma simples e direta, pode ser compreendida como sendo o estudo da matéria em uma escala atômica e molecular, com capacidade de criar novos objetos úteis utilizando-se técnicas e ferramentas específicas. O desenvolvimento da nanotecnologia deu um passo muito importante em 1981, quando Gerd Binnig e Heinrich Rohrer, do laboratório da IBM em Zurique, desenvolveram o microscópio eletrônico de varredura por tunelamento (*scanning tunneling microscope* - STM), permitindo manipulações nanométricas. Tal feito rendeu a G. Binnig e H. Rober, juntamente com Ernst Ruska, o prêmio Nobel em física de 1986. Com o passar dos anos, outros microscópios foram sendo desenvolvidos, tais como: microscópio de varredura por sonda (SPM), de campo próximo (NFM) e de força atômica (AFM).

Em 1985, um grupo de pesquisadores descobriu uma série de compostos inteiramente feitos de carbono: os fulerenos [2]. O sonho de Feynman, começava a se tornar realidade. Isso porque os átomos de carbono do fulereno possuem hibridização sp^2 , tornando-os moléculas mais reativas do que os sistemas aromáticos comuns. Isso permite a adição de grupos funcionais aos fulerenos, dando origem a novas estruturas (fulerenos funcionalizados).

A descoberta dos fulerenos deixou a comunidade científica entusiasmada, de forma que

¹Richard Philips Feynman (Nova Iorque, 11 de maio de 1918 — Los Angeles, 15 de fevereiro de 1988) foi um renomado físico norte-americano do Séc. XX, um dos pioneiros da eletrodinâmica quântica e Nobel de Física de 1965.

²O termo nanotecnologia foi cunhado pela primeira vez por Norio Taniguchi em 1959, para descrever as tecnologias que permitiam a construção de materiais a uma escala de $1nm$.

³Em tradução livre: Há muito espaço no fundo.

em 1991 Sumio Iijima descobriu e caracterizou pela primeira vez os nanotubos de carbono [3], estruturas com dimensionalidades 1D e com características únicas. Até então, já se conhecia estruturas exclusivamente de carbono com dimensionalidades 0D (Fulerenos) e 3D (Grafite e Diamante). Durante muito tempo, acreditou-se que não era viável a existência de um material com dimensionalidade 2D. Segundo Rudolf E. Peierls [4] e Lev D. Landau [5], cristais estritamente bidimensionais (2D) eram termodinamicamente instáveis e não poderiam existir.

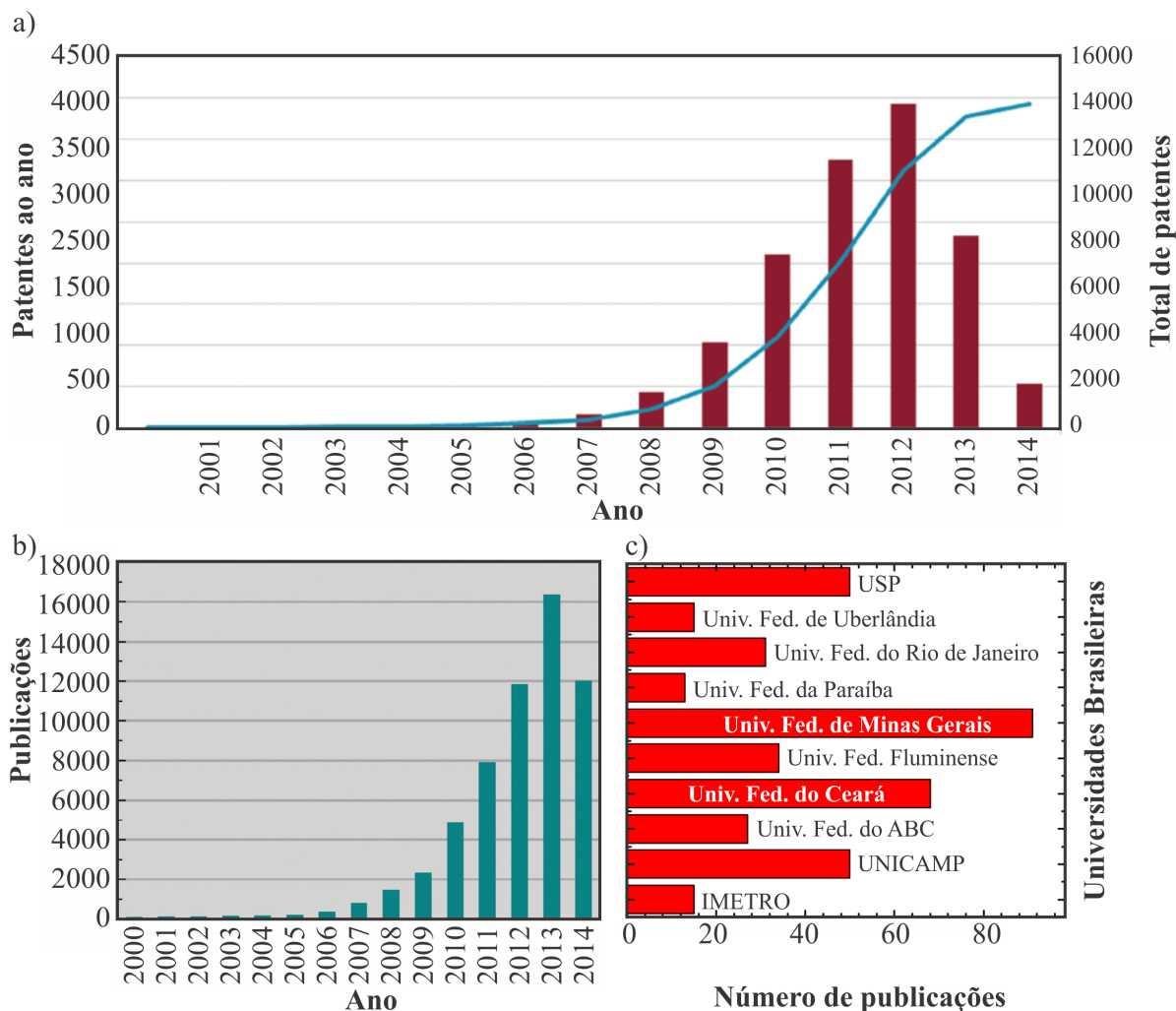


Figura 1.1: (a) Número de patentes, (b) publicações mundiais de 2000 à 2014 e (c) publicações das principais Universidades brasileiras (até Julho de 2013) sobre grafeno. Adaptado das referências [9] e [10].

Porém, em 5 de Outubro de 2010, Konstantin Novoselov e Andre Geim⁴ viriam a ganhar o Prêmio Nobel de Física pelo estudo pioneiro das propriedades eletrônicas do grafeno (estruturas bidimensionais-2D, em forma de favo de mel, ou, simplesmente, uma monocamada de grafite) [7]. Usando uma técnica experimental conhecida como clivagem

⁴Andre Geim, foi o primeiro cientista a ganhar o prêmio IgNobel [6], concedido a descobertas mais estranhas do ano, e o Nobel.

micromecânica, Novoselov e Geim, juntamente com o seu grupo, conseguiram obter uma única camada de grafite. Teoricamente, tudo começou em 1947 quando o físico canadense Philip Richard Wallace (1915-2006) estudou a estrutura de bandas do grafite [8]. A importância deste material se dá pelo fato do grafeno possuir propriedades eletrônicas, mecânicas, ópticas, térmicas e químicas únicas, tornando-o extremamente promissor para aplicações industriais.

Desde a descoberta do grafeno em 2004, houve um aumento significativo no número de patentes e publicações relacionadas ao grafeno. Para se ter ideia, do ano de 2000 até 2014 o número de patentes atingiu uma marca de aproximadamente 1400 patentes, como mostra a Fig. 1.1(a) [9]. O número de publicações pela comunidade científica mundial sobre grafeno também disparou desde sua descoberta, como mostra a Fig. 1.1(b). Nacionalmente, a Universidade Federal do Ceará é a segunda que mais publica artigos com o tema grafeno, como podemos ver na Fig. 1.1(c) [10].

1.2 Dinâmica de pacote de onda em grafeno e *Zitterbewegung*

Nas últimas décadas, o estudo da dinâmica de pacotes de ondas, bem como a constatação do fenômeno *zitterbewegung* (ou simplesmente movimento trêmulo, traduzido do alemão e abreviado por ZBW), tem sido objeto de vários estudos teóricos e experimentais em diversos tipos de sistemas, tais como semicondutores, supercondutores, gás de elétrons, e átomos frios [11, 12, 13, 14, 15, 16, 17].

O *zitterbewegung* foi descrito pela primeira vez em 1930 por Erwin Schrödinger [18]. Schrödinger utilizou a equação de Dirac para estudar elétrons relativísticos no vácuo e percebeu que os operadores de spin ($\vec{\sigma}$) correspondentes a componente da velocidade não comutavam com o Hamiltoniano. Como consequência, a velocidade do elétron não era uma constante do movimento, o que leva a crer que se tratasse de um fenômeno de natureza quântica, uma vez que violava a primeira lei de Newton da mecânica clássica⁵. Schrödinger calculou a velocidade e a posição do elétron no vácuo como função do tempo e concluiu que, além do seu movimento clássico, estas partículas tinham oscilações muito rápidas que ele chamou de *zitterbewegung*. A frequência de oscilação ($\hbar\omega_z \simeq 2m_0c^2 \simeq 1 \text{ MeV}$) prevista por Schrödinger é determinada pelo gap devido a interferência entre os estados de energia positiva e negativa que compõe o pacote de onda inicial e a amplitude de oscilação é da ordem do comprimento de Compton ($\lambda_c = \hbar/m_0c \simeq 3.86 \times 10^{-3} \text{ \AA}$). Caso o leitor queira saber mais detalhes sobre este fenômeno, favor consultar o artigo de revisão dado pela referência [19].

⁵Talvez o leitor conclua que por se tratar de um estudo da dinâmica de elétrons, era de se esperar que o ZBW fosse de natureza quântica. Porém, não podemos esquecer que a Mecânica Quântica era novidade naquela época, uma vez que a equação de Schrödinger foi publicada em 1926 e a de Dirac em 1928 [20, 21].

Com a descoberta do grafeno, surge agora um novo sistema para a comunidade científica investigar a evolução da dinâmica de pacote de onda e a presença do fenômeno ZBW, uma vez que, como veremos no capítulo 3, os elétrons no grafeno se comportam como partículas quase relativísticas sem massa que são regidas pela equação de Dirac. Inspirados por essa tendência, no ano de 2008 e 2010, respectivamente, Maksimova et al. e Chaves A. et al, investigaram a dinâmica de partículas carregadas descritas por um pacote de onda gaussiano em monocamada de grafeno de forma analítica e computacional [22, 23]. Como estudos análogos ao citado anteriormente ainda não foram desenvolvidos para mais de uma camada de grafeno, torna-se então interessante estudar a dinâmica de pacote de onda, a fim de verificar como se dá a evolução do mesmo quando se tem mais de uma camada, bem como verificar a existência do ZBW.

1.3 Organização da dissertação

Neste trabalho, estudamos a propagação de pacote de onda em monocamada e bicamada de grafeno (BLG, do inglês *bilayer graphene*) de forma analítica e computacional. Para realizar este estudo, dividimos nosso trabalho em seis partes:

- No capítulo 2 fizemos uma discussão das formas de hibridização do átomo de carbono, bem como os seus alótropos. Em seguida apresentamos as técnicas de obtenção do grafeno, as características deste material tão interessante e suas principais aplicações;
- Em seguida, no capítulo 3, começamos descrevendo a estrutura cristalina do grafeno para explorar as suas propriedades eletrônicas e obter o Hamiltoniano a partir do modelo *tight-binding*. Ainda neste mesmo capítulo, mostramos como o Hamiltoniano para a bicamada de grafeno pode ser obtido, mostrando-o em seguida para o caso em que temos n -camadas de grafeno com empilhamento *ABC* ou do tipo Bernal;
- No capítulo 4, desenvolvemos o modelo teórico utilizado nesta dissertação. Fizemos uma descrição detalhada da evolução do pacote de onda em monocamada e bicamada de grafeno, estudando também, o fenômeno ZBW do centro do pacote de onda. Investigamos também como a polarização inicial do pseudo-spin influencia nas características da dinâmica dos portadores de carga. Todos os resultados analíticos foram comparados com o modelo computacional utilizando o Hamiltoniano *tight-binding*;
- No capítulo seguinte, foram mostrados todos os resultados calculados no capítulo 4;
- Por fim, no capítulo 6, tivemos as conclusões e perspectiva.

Carbono: do grafite ao grafeno.

Neste capítulo, mostraremos as formas de hibridização que o átomo de carbono pode assumir e os seus principais alótropos, dentre eles o grafeno, objeto de estudo desta dissertação. Em seguida, iremos mostrar as principais técnicas de obtenção, características e aplicações do grafeno.

2.1 O átomo de carbono

O carbono, nome dado por Lavoisier em 1789, deriva do latim *carbone*, que significa carvão, é um elemento químico cujo símbolo é C, possui número atômico 6 (6 prótons e 6 elétrons), massa de 12 u e é sólido a temperatura ambiente. Na tabela periódica, está situado no segundo período da família 4A, ficando entre os metais e os não-metais, Fig. 2.1. O carbono é responsável pela existência de uma enorme variedade de compostos orgânicos e inorgânicos. Devido à sua estrutura atômica o carbono pode se unir de diversas formas, originando outras substâncias exclusivamente formadas por carbono, chamados de alótropos.

	1A							8A
1	H	2A	3A	4A	5A	6A	7A	He
2	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
	Metais				Não-metais			

Figura 2.1: Ilustração da posição do átomo de carbono (C) na tabela periódica.

O átomo de carbono, por possuir seis elétrons, tem sua configuração para o estado de menor energia, chamado também de estado fundamental, dado por $1s^2 2s^2 2p^2$. Os elétrons em um átomo podem ser divididos em elétrons de valência e elétrons das camadas internas. Os elétrons de valência são os elétrons das camadas mais externas e são os responsáveis pelas propriedades químicas do átomo, pois é devido a perda, ganho ou rearranjo destes que determinam as reações químicas. Os elétrons restantes, das camadas mais internas,

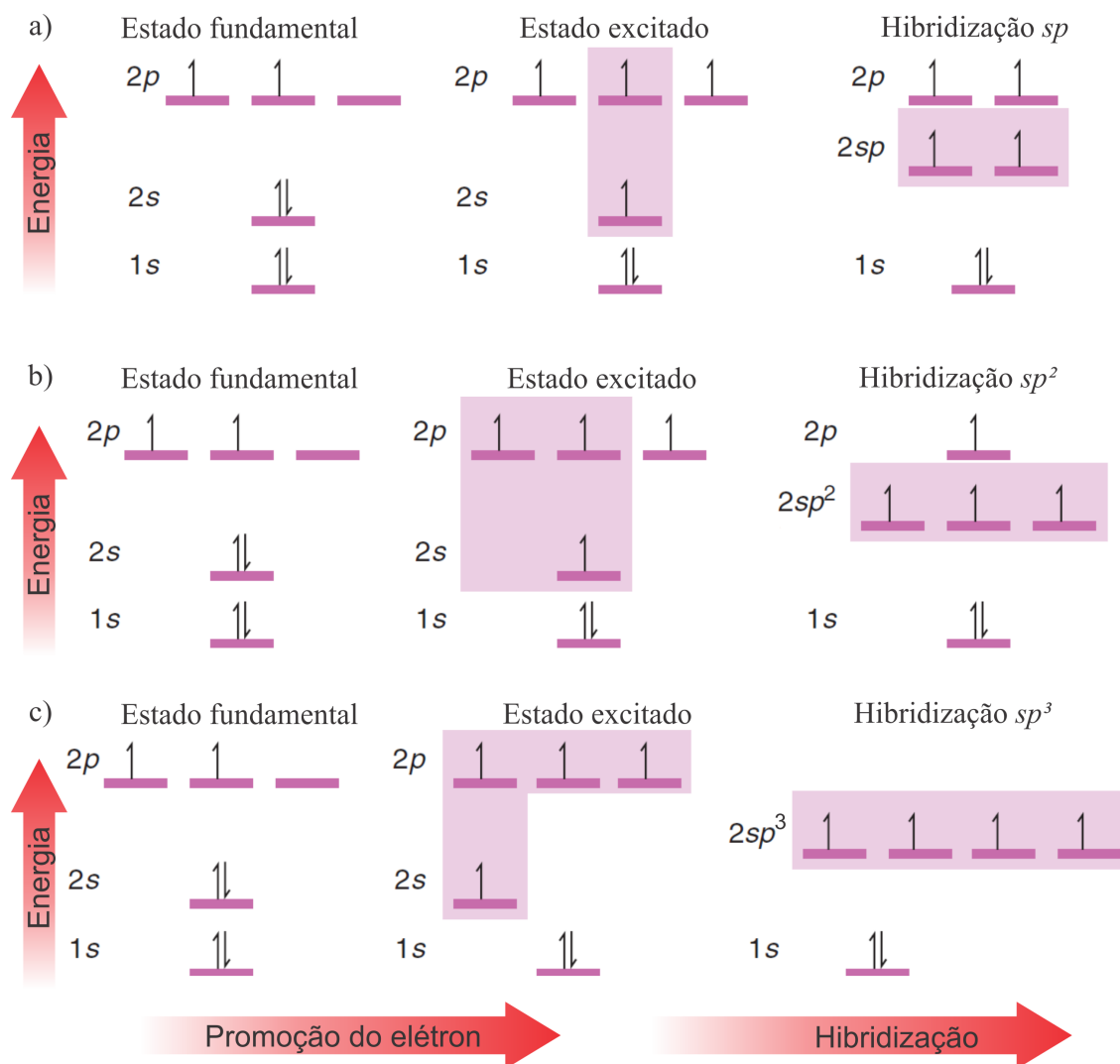


Figura 2.2: Configuração eletrônica para o estado fundamental e excitado do átomo de carbono. Adaptado da Ref. [24].

não contribuem para as reações químicas [25]. Desta forma, os dois elétrons do orbital $2s^2$ do átomo de carbono e os quatro últimos elétrons, que ocupam os orbitais $2s$, $2p_x$ e $2p_y$, são os elétrons de valência. Quando comparada com a energia de ligação química, a diferença de energia entre o nível superior $2p$ e inferior $2s$ é pequena. Com isso, as funções de onda dos quatro últimos elétrons podem se misturar umas com as outras mudando a ocupação dos orbitais $2s$ e $2p$ originando orbitais híbridos¹ [26]. Esses orbitais híbridos podem ser do tipo σ ou π . A ligação σ é formada devido à sobreposição de dois orbitais atômicos híbridos. Uma ligação sigma é cilíndricamente simétrica, ou seja, os elétrons na ligação são simetricamente distribuídos ao redor de uma linha imaginária conectando os centros dos átomos unidos pela ligação. Por outro lado, a ligação π se deve à sobreposição de dois orbitais p lado a lado.

¹O conceito de orbitais combinantes, chamado hibridização de orbitais, foi proposto pela primeira vez por Linus Pauling (1901-1994) em 1931.

2.1.1 Hibridização sp

Neste tipo de hibridização, um elétron da camada $2s$ e outro da camada $2p$ do carbono são hibridizados para formar dois orbitais sp , equivalentes entre si, Fig. 2.2(a). Os orbitais restantes ($2p$) não são hibridizados e ficam em posições perpendiculares entre si e aos orbitais sp . Por outro lado, os dois orbitais hibridizados estão situados sobre a mesma reta e opostos entre si, para minimizar a repulsão eletrônica, formando um ângulo de 180° em relação de um a outro (ver painel (a) na Tab. 2.1). Daí o motivo para que a geometria da hibridização sp seja denominada linear, painel (b) da Tab. 2.1.

Podemos utilizar o etino ($\text{HC}\equiv\text{CH}$), conhecido também como acetileno, para ilustrar este tipo de hibridização, painel (c) e (d) da Tab. 2.1. Os orbitais moleculares híbridos do etino são formados da seguinte forma: (i) dois átomos de carbono sobrepõe os orbitais sp para formar uma ligação σ_{sp-sp} entre eles (está é somente uma ligação da ligação tripla, $\text{C}\text{---}\text{C}$); (ii) os dois orbitais sp restante, um de cada átomo de carbono, sobrepõe-se ao orbitais s dos átomos de hidrogênio para formar duas ligações σ ($\text{C}\text{---}\text{H}$); (iii) os dois orbitais p de cada átomo de carbono se unem lateralmente para formar duas ligações π (estas são as outras duas ligações da ligação tripla); essas duas ligações π , que determinam dois planos nodais que passam pelos dois núcleos, faz com que o etino possua simetria circular ao longo da ligação tripla, conseqüentemente, ocorrendo a rotação, nenhum novo composto seria formado. O painel (c) da Tab. 2.1 mostra a configuração final depois dessas três etapas.

2.1.2 Hibridização sp^2

Na hibridização sp^2 , três elétrons da camada de valência do carbono (camadas $2s$ e $2p$), conforme a Fig. 2.2(b), se rearranjam, dando origem a três orbitais híbridos denominados sp^2 . Estes orbitais híbridos são equivalentes entre si, situam-se no mesmo plano e estão separados entre si por um ângulo de 120° , daí o nome trigonal planar para a geometria de hibridização sp^2 , (ver painéis (e) e (f) da Tab. 2.1). O elétron restante permanece no orbital p e fica em posição perpendicular ao plano dos três orbitais híbridos.

No modelo para o eteno ($\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$), cuja estrutura molecular é ilustrada no painel (g) da Tab. 2.1, os orbitais moleculares híbridos são formados da seguinte maneira: (i) um orbital sp^2 de cada átomo de carbono sobrepõe-se um ao outro formando um orbital molecular $\sigma_{sp^2-sp^2}$ ($\text{C}=\text{C}$); (ii) os demais orbitais sp^2 dos átomos de carbono se sobrepõe com os orbitais $1s$ dos átomos de hidrogênio formando ligações σ_{s-sp^2} ($\text{C}\text{---}\text{H}$); (iii) os dois elétrons restantes estão localizados nos orbitais p de cada átomo de carbono de forma que a sobreposição lateral destes dois orbitais resulta em uma ligação π ; o orbital π se assemelha a um nuvem eletrônica, situada em uma região acima e abaixo do plano determinado pelas ligações dupla. O painel (g) da Tab. 2.1 mostra a configuração final depois dessas três etapas.

Diferentemente do etino, a ligação dupla $\text{C}=\text{C}$ no etano não possui simetria de

rotação com relação ao eixo que une os dois átomos de carbono. Pois, como a sobreposição será máxima entre os orbitais p de uma ligação π ocorre exatamente quando os eixos dos orbitais p estão paralelos, girar o carbono de ligação dupla a 90° quebra a ligação π .

2.1.3 Hibridização sp^3

Por fim, a hibridização sp^3 ocorre quando um elétron da camada $2s$ e três da camada $2p$ do átomo de carbono se rearrumam originando quatro orbitais híbridos sp^3 , como mostra a Fig. 2.2(c). Esses quatro orbitais híbridos são equivalentes entre si e orientados para os vértices de um tetraedro, daí a origem do nome da geometria da hibridização sp^3 , ver painéis (i) e (j) da Tab. 2.1. Os orbitais hibridizados atraem os orbitais s dos hidrogênios até formarem os orbitais moleculares σ_{s-sp^3} (C—H).

O etano ($\text{H}_3\text{C—CH}_3$), pode ser utilizado como exemplo para ilustrar este tipo de hibridização, painéis (l) e (m) da Tab. 2.1. A formação dos orbitais atômicos ocorre da seguinte maneira: (i) primeiro, temos a formação da ligação σ_{s-sp^3} entre o átomo de carbono e o átomo de hidrogênio, descritos anteriormente; (ii) ocorre a sobreposição frontal dos orbitais sp^3 dos dois carbonos, formando uma ligação $\sigma_{sp^3-sp^3}$. A configuração final descrita anteriormente pode ser visualizada no painel (l) da Tab. 2.1.

Como a ligação $\sigma_{sp^3-sp^3}$ possui simetria cilíndrica ao longo do eixo de ligação (ou simetria de rotação, desde que o eixo central que une os dois átomos de carbono seja utilizado como referência), a rotação da ligação simples normalmente não requer grande quantidade de energia. Logo, grupos unidos por ligações simples giram relativamente livres em relação um com o outro.

2.2 Formas alotrópicas do carbono

Devido às formas de hibridização do átomo de carbono, uma série de outros compostos formados exclusivamente por carbono podem ser obtidos (encontrados na natureza ou sintetizados em laboratório). A Tab. 2.2 classifica o cinco alótropos que iremos descrever mais adiante de acordo com a sua dimensionalidade, trazendo ainda informações acerca da hibridização, densidade, comprimento da ligação e propriedades eletrônicas [24, 30].

2.2.1 O grafite e o diamante

Os dois alótropos do carbono mais estáveis e conhecidos são o grafite e o diamante, cujas estruturas cristalinas estão ilustradas nas Fig. 2.3(a) e Fig. 2.3(b), respectivamente. O grafite cristaliza-se no sistema hexagonal regular com simetria rômica, composto por diversas camadas de átomos com simetria sp^2 . É devido a esta forma de hibridização que o grafite conduz eletricidade. Outra característica que vale a pena ressaltar, é o fato do grafite possuir ligações do tipo π entre os planos paralelos. Como a interação planar é

Tabela 2.2: Alótropos do carbono em termos de sua dimensionalidade, bem como algumas características dos mesmos. Como a condutividade elétrica no grafite depende da posição, então “*” indica a direção “a” e “**” indica a direção “c”. Adaptado da referência [24, 30].

	0D	1D	2D	3D
Alótropo	Fulereo C_{60}	Nanotubo	Grafeno	Grafite; Diamante
Hibridização	sp^2	sp^2	sp^2	$sp^2; sp^3$
Densidade (g/cm^3)	1.72	1.20	2.26	~2,1;3.52
Tenacidade	Flexível; Elástico	Flexível; Elástico	Elástico	Flexível e Não-elástico; N/a
Condutividade elétrica (S/cm)	10^{-10}	Depende da estrutura	~2.000	~ $2.5 \times 10^{4*}$ e 6^{**} ; N/a

fraca, é possível isolar uma única camada do grafite, obtendo-se um dos mais promissores materiais dos últimos anos: o grafeno.

Diferentemente do grafite, o diamante possui orbitais híbridos do tipo sp^3 . A estrutura cristalina do diamante é constituída por uma rede de Bravais do tipo cúbica de face centrada (CFC) e uma base com dois átomos idênticos, um na origem e outro a $1/4$ da diagonal do cubo [31]. Perceba ainda que cada átomo fica no centro de um tetraedro formado por quatro vizinhos mais próximos, típico da hibridização sp^3 . Na escala de Mohs² o diamante é o material mais duro possuindo valor igual à 10, em uma escala que varia de 0 a 10.

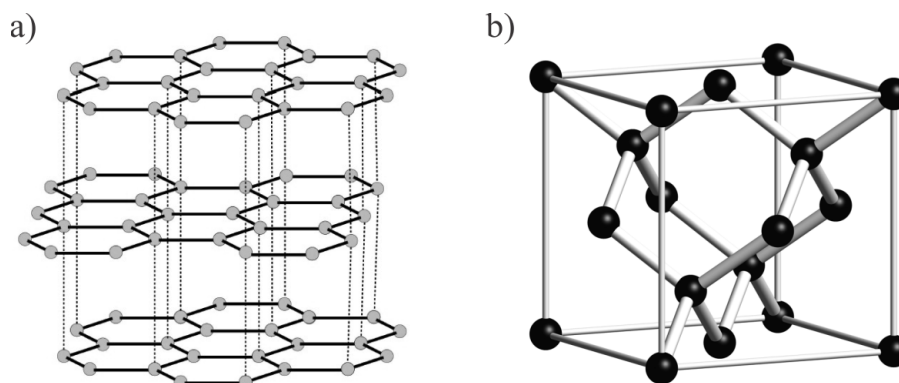


Figura 2.3: Estrutura cristalina do (a) grafite e do (b) diamante.

²A escala de Mohs quantifica a dureza dos minerais, isto é, a resistência que um determinado mineral oferece ao risco, ou seja, à retirada de partículas da sua superfície. O diamante risca o vidro, portanto, é mais duro que o vidro. Esta escala foi criada em 1812 pelo mineralogista alemão Friedrich Vilar Mohs com dez minerais de diferentes durezas existentes na crosta terrestre.

2.2.2 Fullerenos

Em 1985 Harold. W. Kroto, Robert F. Curl e Richard E. Smalley, obtiveram uma série de estruturas químicas formadas exclusivamente por carbonos, que viria a ser denominadas de fullerenos. De acordo com a literatura, Kroto e sua equipe buscavam compreender os mecanismos para a formação de longas cadeias de carbono observadas no espaço interestelar. O experimento consistia na vaporização de discos de grafite em rotação irradiando pontualmente laser de alta energia, em uma atmosfera de hélio, a uma temperatura aproximadamente de 10^{40} C. As amostras obtidas eram analisadas utilizando-se espectrometria de massa, permitindo a detecção de aglomerados de carbono com quantidade variada de átomos. Porém, a estrutura mais estável do fulereno é constituída por 60 átomos de carbono (C_{60}).

Devido a essas amostras de carbono possuírem forma geométrica semelhantes a de uma cúpula geodésica (Fig. 2.4), esses aglomerados de carbono foram rotulados de fullerenos, homenageando um dos maiores arquitetos do XX, o norte-americano Buckminster Fuller³, mentor das cúpulas geodésicas [32]. Essa foi a primeira nova forma alótropa do carbono a ser descoberta do século XX. Tal feito rendeu a H. W. Kroto, R, Curl e R. Smalley o Prêmio Nobel de Química de 1996.

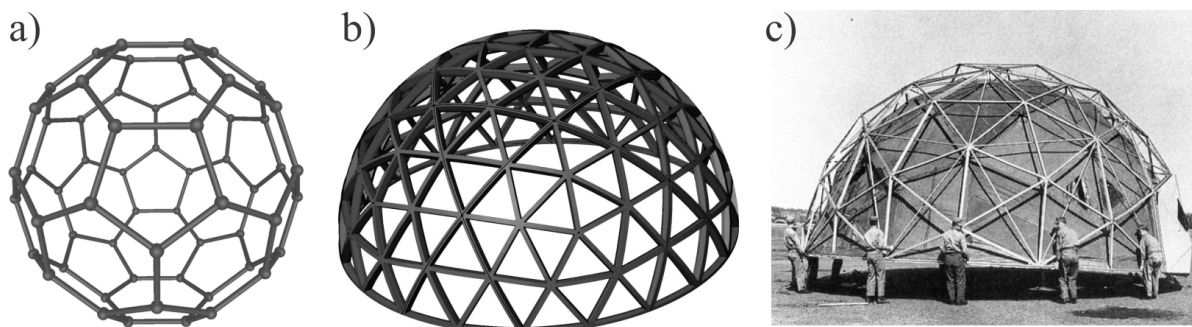


Figura 2.4: (a) Fulfereno C_{60} , (b) cúpula geodésica e (c) projeto do B. Fuller.

2.2.3 Nanotubos de carbono

A fronteira da física do carbono viria a ser expandida novamente em 1991, quando Sumio Iijima descobriu os nanotubos de carbono (NC's). Os NC's são formados de arranjos hexagonais de carbono que originam pequenos cilindros. Normalmente, possuem uma faixa de diâmetro de poucos angstroms a dezenas de nanômetros e podem ter comprimento acima de vários centímetros [33].

Estruturalmente, os NC's podem ser vistos como uma folha de grafite enrolada na forma cilíndrica, com dois tipos distintos: os de paredes simples (NCPS's) e os de paredes múltiplas (CNPM's). Quando dois sítios cristalograficamente equivalentes coincidem em

³Richard Buckminster Fuller (1895 - 1983) - Foi um visionário, designer, arquiteto, inventor e escritor estadunidense.

uma rede de grafite enrolada, temos um NCPS. O vetor \vec{C} , denominado *chiral*, define a posição relativa de dois sítios, sendo este definido por dois números inteiros (n, m) e pelos vetores unitários \hat{a}_1 e \hat{a}_2 ($\vec{C} = n\hat{a}_1 + m\hat{a}_2$) da rede hexagonal. Os valores de (n, m) determinam a classe do NCPS's, que podem ser: armchair, quando $n = m$ e $\varphi = 30^\circ$, zig-zag, $n = m = 0$ e $\varphi = 30^\circ$, ou chiral, $n \neq m \neq 0$ e $0 < \varphi < 30^\circ$. A Fig. 2.5 ilustra as geometrias dos NCPS's e a formação de nanotubos de carbono a partir de uma folha de grafite [34].

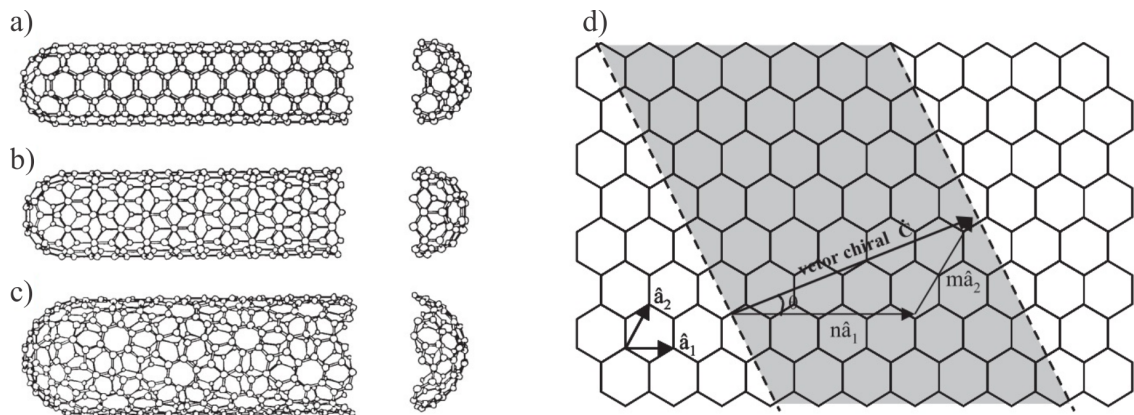


Figura 2.5: Geometrias de NCPS's: (a) armchair, (b) zig-zag, (c) chiral. A estrutura esquemática de NC's desenrolado é mostrada em (d).

2.2.4 Nanoespumas de carbono

Em 2002, uma equipe de físicos da Grécia, Austrália e Rússia, liderados por Andrei V. Rode, descobriram as nanoespumas de carbono [35, 36]. A nanoespuma de carbono é considerada o quinto alótropo do carbono e possui carbonos com hibridização sp^2 e sp^3 . Na Fig. 2.7, temos uma imagem utilizando microscopia eletrônica de transmissão (MET) e microscopia eletrônica de varredura (MEV) [37]. Esse novo material, é um aglomerado de carbonos interconectados de maneira aleatória com diâmetros médios entre 6 e 9 nanômetros, dispostos em uma estrutura em forma de teia. Dentre os sólidos, possui a menor densidade que se conhece (apenas dois miligramas por centímetro cúbico), baixa condutividade elétrica e é a primeira forma alotrópica do carbono a mostrar ferromagnetismo, ainda que temporário, a temperatura ambiente.

2.2.5 Grafeno

A obtenção do grafeno, última forma alotrópica do carbono, se deu em 2004. A Fig. 2.8 ilustra uma linha do tempo dos eventos desde sua preparação até a sua caracterização, feita por Geim, Novosolev e colaboradores em 2004 [7, 38]. A técnica utilizada pela equipe dos cientistas citados é relativamente simples e consiste em utilizar um tipo específico de

fita adesiva, para separar camadas do grafite, até se obter apenas uma camada, como mostra a Fig. 2.6.

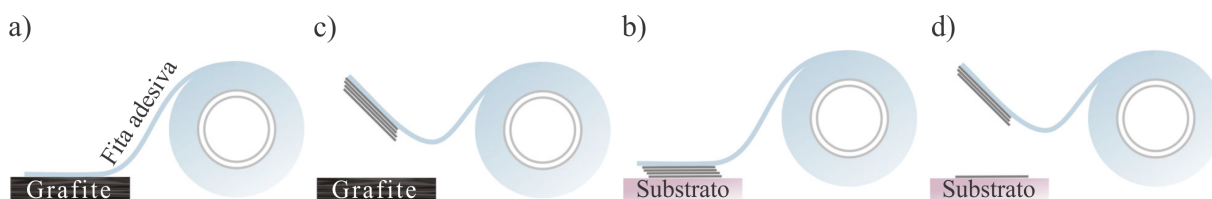


Figura 2.6: Utilização da técnica da clivagem micromecânica para produzir grafeno: (a) coloca-se um tipo especial de fita adesiva em um cristal de grafite, (b) a fim de se obter algumas camadas de grafeno. Em seguida (c) as camadas são pressionadas sobre um substrato (SiO_2) e ao remover a fita (d) algumas camadas ficam no substrato. Adaptado da referência [38].

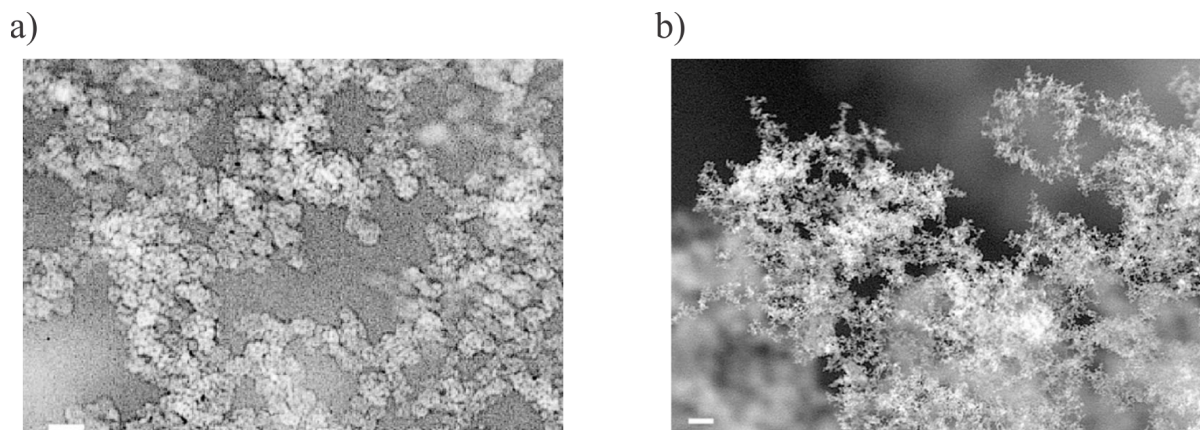


Figura 2.7: (a) Imagem utilizando micrografia eletrônica de transmissão (MET) e (b) microscopia eletrônica de varredura (MEV). Adaptado da referência [37].

O uso de colas de origem animal ou vegetal para unir interfaces remonta à pré-história. Na Grécia Antiga, o fenômeno de adesão que permite que lagartixas se fixem e locomovam em tetos e paredes, com velocidade, despertou a atenção de Aristóteles. Somente com o auxílio da Microscopia Eletrônica foi possível desvendar o fenômeno físico por trás da enorme capacidade de aderência dos pés das lagartixas: a sola da pata da lagartixa é constituída de “pêlos” micrométricos que aderem às superfícies por ligações não direcionais do tipo van der Waals-London (Fig. 2.9). Se considerarmos apenas um pêlo, a força suportada por este será pequena (10^{-7} N), por outro lado, milhões desses pêlos produzem uma adesão da ordem 10 N/cm^2 em decorrência de forças do tipo van der Waals-London [39]. Geim e sua esposa Irina V. Grigorieva, Novoselov, S. V. Dubonos, A. A. Zhukov e S. Yu. Shapoval desenvolveram em 2003 micrófitas biomiméticas que faziam o papel dos pés das lagartixas [40]. Esse foi, sem dúvida, um dos principais passos dado pela equipe de pesquisadores em busca da monocamada de grafeno.

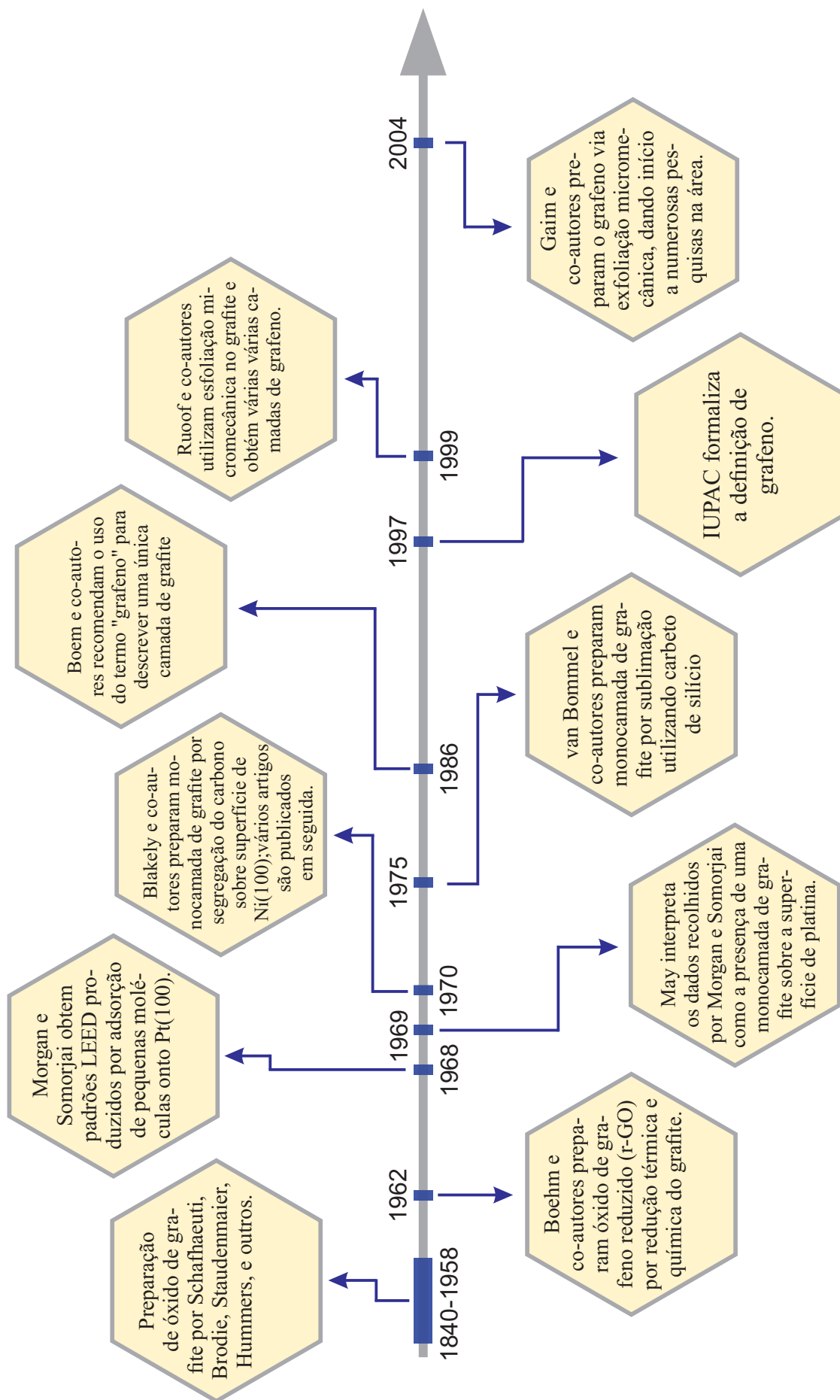


Figura 2.8: Linha do tempo até a preparação do Grafeno por Gaim e sua equipe. Adaptado da referência. [41]

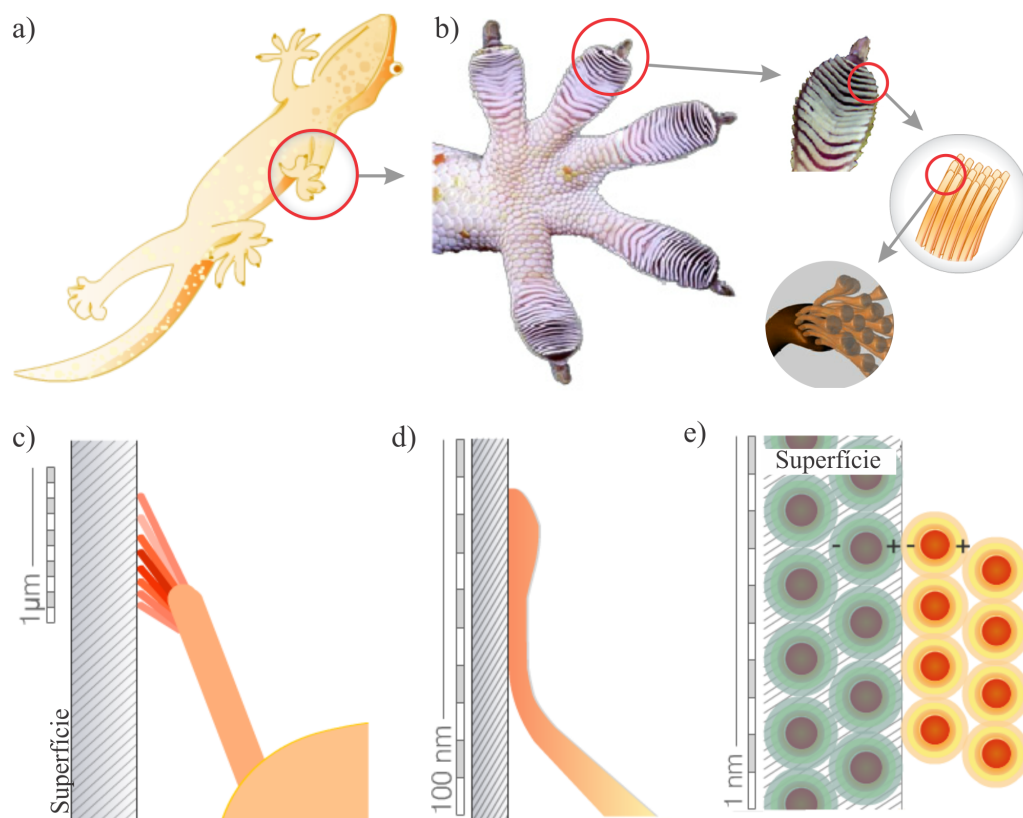


Figura 2.9: Ilustração da adesão dos pêlos ceratinados das lagartixas: (a) sola da pata da lagartixa, (b) lâminas das pontas das patas com um zoom ilustrando as lamêlas e os pelos micrométricos, (c,d) pêlos micrométricos tocando a superfície e (e) ilustração da força de van der Waals-London. Adaptado da referência [42].

Geim e sua equipe, esfoliaram camadas de um cristal de grafite com a fita adesiva, conseguindo obter flocos formado de algumas camadas de grafite e em seguida as depositaram sobre um substrato de óxido de silício (SiO_2) com espessura de 315 nm. Sabe-se que não é possível visualizar filmes de grafite com espessuras inferiores a 50 nm, pois os mesmos ficam transparentes. Porém, devido a uma adição no caminho ótico, camadas de diferentes espessuras produzem diferentes padrões de interferência sobre o substrato de SiO_2 , definindo a região onde a monocamada poderá ser encontrada utilizando microscopia de força atômica. No entanto, não era possível observar mudanças no padrão de interferência para filmes com espessuras aproximadamente iguais a 1,5 nm, separando os filmes em duas classes: grafeno de poucas camadas (FLG) e grafeno de muitas camadas (MLG). Por fim, a equipe de Geim e Novoselov utilizou microscopia eletrônica de varredura para identificar a monocamada a partir de amostras contendo FLG [7]. Uma adaptação das imagens obtidas pelo grupo de pesquisadores estão ilustradas na Fig. 2.10.

Uma vez que os pesquisadores conseguiram obter o grafeno utilizando esfoliação mecânica, o mesmo passou a ser obtido por cientistas do mundo todo utilizando diferentes técnicas experimentais já conhecidas pela comunidade científica. Na seção seguinte, ire-

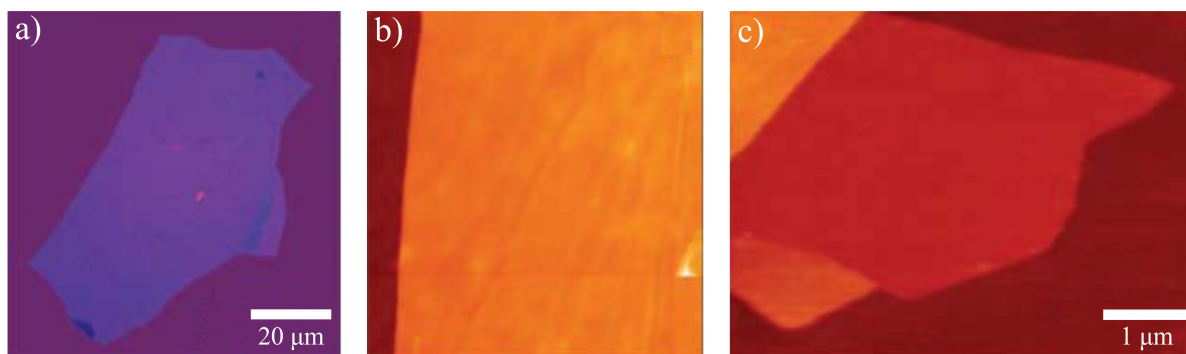


Figura 2.10: Filmes de grafeno: (a) fotografia de uma multicamada de grafeno relativamente grande com espessura ~ 3 nm sobre SiO_2 , (b) imagem de AFM de uma área de $4 \mu\text{m}^2$ próximo da sua borda (SiO_2 na cor marrom e a cor laranja está 3 nm acima do SiO_2) e (c) imagem do grafeno obtida por AFM. Adaptado da referência [7].

mos descrever um pouco sobre os métodos mais comuns de obtenção do grafeno.

2.3 Técnicas de obtenção do grafeno

O fator mais importante para que qualquer produto seja comercialmente viável para que seja produzido em larga escala é o seu custo de produção bem como a qualidade do produto que se deseja obter. Para o grafeno, o método adotado para que o mesmo seja produzido desempenha um papel fundamental nas propriedades do produto final.

Nesta seção, iremos falar de alguns aspectos quantitativos de alguns métodos de produção do grafeno, incluindo o processo utilizado por Geim et. al [7].

2.3.1 Esfoliação mecânica

A esfoliação mecânica, conhecida também como clivagem micromecânica (abreviado por MC, acrônimo de *Mechanical Cleavage*), é um método que já é utilizado a décadas por cientistas da área de cristalografia [45, 46]. No ano de 1999, este método foi aplicado ao grafite onde cientistas conseguiram obter algumas camadas de grafeno que foram comprovadas através de SEM e AFM [47].

Como já descrevemos anteriormente, a MC é um método simples, que consiste em utilizar uma fita adesiva para ir reduzindo o número de camadas do grafite, utilizando o óxido de silício (Si) como substrato, Fig. 2.11(e). Apesar desta técnica ser inviável para aplicação em larga escala, ainda é o método para obter o grafeno com o melhor nível de qualidade, sendo bastante utilizado para estudos fundamentais e em protótipos tecnológicos. A Fig. 2.11(a) mostra um gráfico que classifica este método de acordo com a qualidade do grafeno obtido, custo, escalabilidade, pureza e produção.

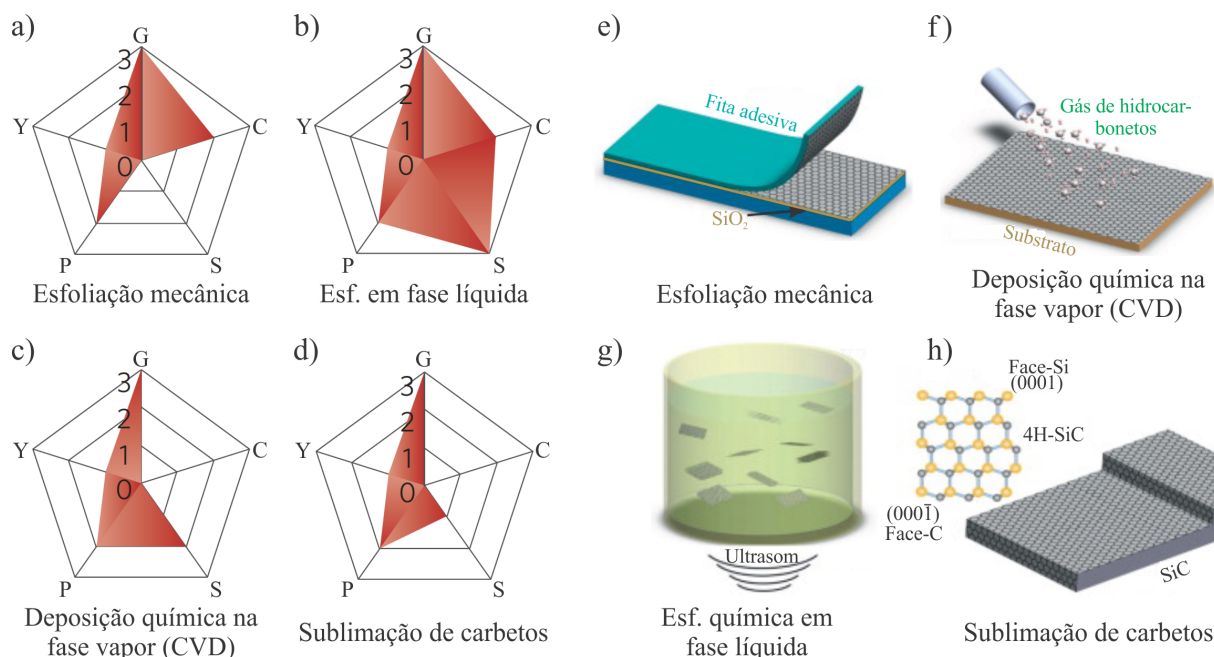


Figura 2.11: Formas mais comuns de produção do grafeno. Do lado esquerdo, temos um gráfico que avalia a qualidade do grafeno (G), custo (C; valores menores correspondem a maiores custos de produção), escalabilidade (S), pureza (P) e produção (Y) para quatro métodos de produção do grafeno. No lado direito temos um esquema para cada tipo de produção. Adaptado das referências [43] e [44].

2.3.2 Esfoliação em fase líquida

A esfoliação em fase líquida (ou LPE, acrônimo de *Liquid Phase Exfoliation*) é uma outra técnica de obtenção do grafeno. Consiste em esfoliar o grafite em soluções que podem ser aquosas ou não [48, 49, 50, 51, 52, 53]. Primeiramente, coloca-se o grafite na solução para reduzir a força de van der Waals de atração entre as camadas de grafeno. Em seguida, utiliza-se ondas ultrassônica ou campo elétrico para contribuir no processo de esfoliação do grafite [54].

Infelizmente esta técnica acaba deixando uma quantidade de grafite que não foi esfoliado, de forma que esse excesso precisa ser removido posteriormente [55]. No entanto, devido a alta escalabilidade e baixo custo, acabam fazendo com que esta técnica seja adequada para a produção do grafeno em larga escala [56]. A Fig. 2.11(g) e Fig. 2.11(b) ilustram o processo de obtenção e os dados relativos a esta técnica, respectivamente.

2.3.3 Deposição química na fase vapor

Neste método, abreviado por CVD, do inglês *chemical vapour deposition*, utiliza-se um substrato de silício com uma camada de metal (normalmente utiliza-se cobre ou níquel devido a baixa solubilidade do carbono) [57, 58, 59]. Utiliza-se um gás de hidrocarbonetos (metano) em atmosfera de hidrogênio. Com o aumento da temperatura, ocorre a quebra

da molécula de metano e o carbono é aderido ao substrato, formando o grafeno, como ilustrado na Fig. 2.11(f). Em seguida, o grafeno é transferido para um substrato de óxido de silício.

O resultado final é um grafeno de alta qualidade e puro. Apesar de ser viável a produção em larga escala, o custo desta técnica é alto. A Fig. 2.11(c) mostra alguns dados qualitativos a respeito desta forma de produção do grafeno.

2.3.4 Sublimação de carbetos

A produção de grafite a partir de SiC foi relatada em 1896 por Acheson para aplicações em lubrificantes [60]. É comum encontrar na literatura o termo “crescimento epitaxial” para este método [61].

A sublimação de carbetos consiste em utilizar algum carbeto, normalmente utiliza-se carbeto de silício (SiC), onde este material é tratado termicamente em vácuo ou em atmosfera inerte para que ocorra a sublimação do material ligado ao carbono dando origem ao grafeno, como ilustra a Fig. 2.11(h) [62, 63, 64]. O crescimento pode ser feito tanto na face carbono quanto na face silício. A vantagem desta técnica consiste em não haver a necessidade de transferir o grafeno para um substrato, porém, o ponto negativo é que ocorre a formação de zonas com variadas camadas de grafeno, caso o crescimento seja feita na face carbono (ou seja, o número de camadas que se deseja obter ainda não é controlada) e a mobilidade se torna menor caso o crescimento ocorra na face silício [65, 66]. A Fig. 2.11(d) mostra um gráfico com alguns aspectos desta técnica.

A Tab. 2.3 mostra as vantagens e desvantagens para se produzir o grafeno a partir dos quatro métodos descritos anteriormente.

2.4 Características do grafeno

2.4.1 Eletrônicas

Ainda em 2005, Novoselov e seu grupo demonstraram que os portadores de carga do grafeno, podem se comportar continuamente como elétrons e buracos em concentrações na ordem de 10^{13} cm^{-2} , e com uma mobilidade (μ) que pode ultrapassar os $15.000 \text{ cm}^2/\text{volts}$ mesmo estando a temperatura ambiente ($\sim 300 \text{ K}$) [68]. Porém, a dependência da mobilidade eletrônica do grafeno é limitado por impurezas, uma vez que a temperatura é afeta fracamente, dessa forma μ pode chegar a atingir valores da ordem de $100.000 \text{ cm}^2/\text{volts}$, superando alguns semicondutores, como por exemplo, o antimoniato de índio (InSb), que possui uma mobilidade μ em torno de $77.000 \text{ cm}^2/\text{volts}$ a temperatura ambiente [69].

No capítulo 3, iremos calcular analiticamente a relação de dispersão para os elétrons no grafeno e iremos mostrar que os mesmos se comportam como quase partículas relativísticas de spin $1/2$, sem massa, obedecendo a uma equação do tipo Dirac. Essa peculiaridade dos

Técnica	Vantagens	Desvantagens
Esf. Mecânica	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Excelente qualidade eletrônica; ✓ Superfície plana. 	<ul style="list-style-type: none"> ✗ Tamanho pequeno; ✗ Não escalável.
Esf. química em fase líquida	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Baixo custo; ✓ Pode ser produzido em larga escala. 	<ul style="list-style-type: none"> ✗ Pequenos fragmentos sobrepostos; ✗ Baixa qualidade eletrônica.
Deposição quím. em fase vapor	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Monocamada de grafeno; ✓ Excelente qualidade eletrônica; ✓ Áreas consideravelmente grandes; ✓ Fácil transferência para outros substratos; ✓ Pode ser produzido em larga escala. 	<ul style="list-style-type: none"> ✗ Pressão de vapor de Cu alta; ✗ Superfície rugosa; ✗ Precisa ser transferido para um substrato; ✗ Necessita de uma etapa para limpeza; ✗ Grande diferença de coeficiente de expansão com o substrato.
Sublimação de carbetos	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Excelente qualidade eletrônica; ✓ Superfície plana; ✓ Não precisa ser transferido para outro sustrato. 	<ul style="list-style-type: none"> ✗ Processo ocorre em altas temperaturas; ✗ Áreas limitadas de acordo com o tamanho do carbetos de silício.

Tabela 2.3: Vantagens e desvantagens para se produzir o grafeno a partir da esfoliação mecânica, esfoliação química em fase líquida, deposição química em fase vapor e sublimação de carbetos. Adaptado da referência [24, 67].

elétrons no grafeno, talvez a mais notável, foi observada por Novoselov e seu grupo ainda na Ref. [7]. Eles observaram que os portadores de cargas poderiam atingir velocidades da ordem da velocidade de Fermi, 10^6 m/s e sofriam pouco espalhamento, esse fato caracteriza um transporte balístico. Sendo assim, o tratamento dos elétrons no grafeno não mais poderiam ser tratadas pela equação de Schrödinger, mas sim pela equação de Dirac. Logo, eles concluíram que esses portadores de cargas se comportavam como férmions de Dirac sem massa. Diante dessas características, o grafeno pode ser utilizados para diversas observações experimentais da mecânica quântica, como por exemplo, o efeito Hall quântico (EQH) e a fase de Berry [70] e o tunelamento de Klein [71], e uma vasta gama de aplicações industriais.

2.4.2 Mecânicas

Em 2008, os pesquisadores Changgu Lee, Xiaoding Wei, Jerrey W. Kysar e James Hone, estudaram as propriedades elásticas do grafeno utilizando a técnica de indentação instrumentada⁴ através de um microscópio de força atômica [72]. O grupo colocou flocos

⁴Também conhecida como nanoindentação. Com essa técnica é possível medir a dureza (H) e o módulo de elasticidade (E). Para se medir a dureza, uma força P é aplicada a um indentador, que pode ser uma ponta de diamante com uma forma específica, em contato com a amostra e a partir daí, é possível medir o módulo de elasticidade da amostra.

de grafeno sobre um substrato de silício com vários furos circulares com diâmetros de $1.0 \mu\text{m}$ e $1.5 \mu\text{m}$, ambos com profundidade de 500.0 nm , distando 5.0 nm um do outro. Sobre o substrato, eles colocaram uma camada muito fina de óxido de silício (SiO_2), com aproximadamente 300.0 nm de espessura. Utilizando microscopia ótica, o grupo localizou uma região onde havia apenas uma monocamada de grafeno e utilizaram microscopia Raman para se certificarem que era de fato uma única camada de grafeno. Em seguida, a membrana de grafeno foi submetida a uma força até o limite de sua ruptura. A Fig. 2.12 mostra algumas imagens do experimento.

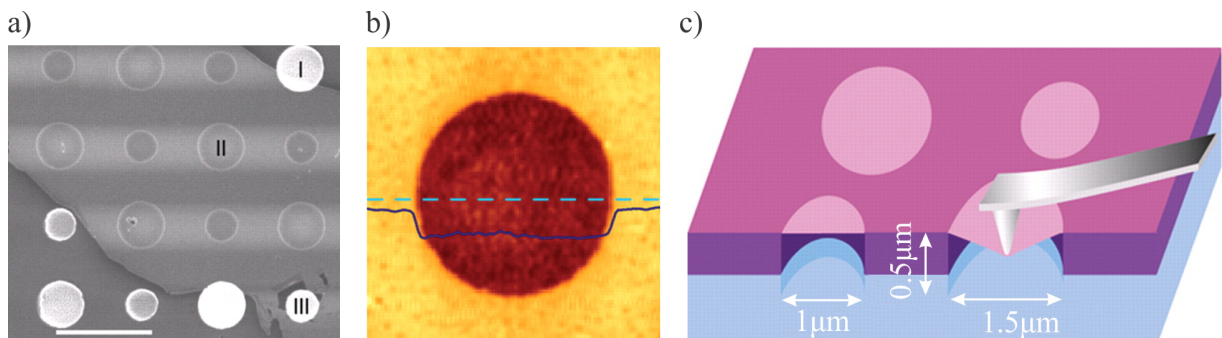


Figura 2.12: Imagens do experimento: (a) Imagem de micrografia eletrônica de um floco de grafeno sobre o substrato de Si com os seus furos. Na região I e II, temos um poro parcialmente e totalmente coberto por grafeno, respectivamente, e a região III mostra uma fratura devido a indentação. (b) Imagem do poro ainda sem ser perfurado, ou seja, antes de ocorrer a AFM sobre o floco de grafeno. A linha contínua, representa o perfil da altura da linha tracejada, que possui cerca de 2.5 nm . (c) Visão esquemática do procedimento de nanoindentação e da membrana de grafeno. Adaptado da referência [72].

Incrivelmente, o valor experimental encontrado pelos pesquisadores para o ponto de ruptura foi de 42 N/m , cerca de 10 vezes maior do que o aço, superando a de qualquer outro material existente.

2.4.3 Ópticas

Além das propriedades já citadas, o grafeno apresenta propriedades ópticas que o torna um material diferente de qualquer outro existente. Para começar, uma única camada de grafeno absorve apenas 2.3% da luz incidente [73], como mostra a Fig. 2.13, tornando-o um material transparente. A absorção da luz pela monocamada de grafeno cresce linearmente, de forma que é possível obter a constante de estrutura fina (α) experimentalmente. Isso porque $\pi\alpha$, que é o mesmo que $\pi e^2/\hbar c$, é aproximadamente igual a 2.3% (0.023).

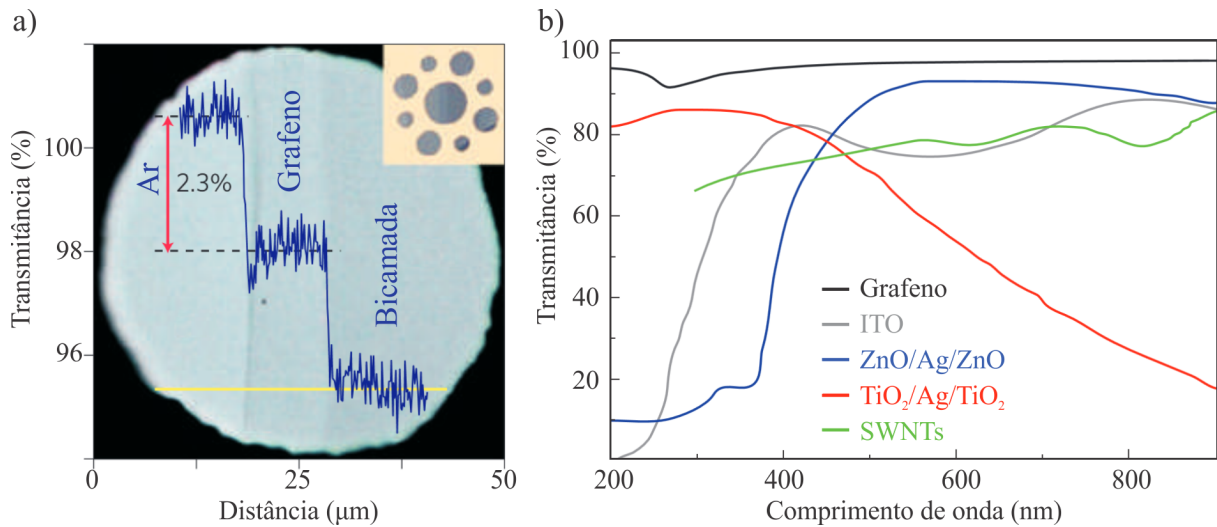


Figura 2.13: (a) Transmittância do grafeno para monocamada e bicamada de grafeno e (b) transmittância do grafeno para vários comprimentos de onda (em nm) comparada com outros compostos (ITO, ZnO/Ag/ZnO, TiO₂/Ag/TiO₂ e SWNTs). Note que uma única camada absorve apenas 2.3 % da luz que incide, enquanto que a bicamada absorve ~ 4.6 %. Adaptado da referência [74].

2.5 Aplicações do grafeno

Devido às suas propriedades, o grafeno é um dos materiais mais promissores da atualidade. A idealização das suas aplicações é bastante vasta e se aplica desde engenharia genética à indústria aeroespacial. Nesta seção, vamos fazer uma breve explanação qualitativa das aplicações do grafeno em algumas áreas.

2.5.1 Transistores baseado em grafeno

Devido às suas propriedades eletrônicas, o grafeno se torna um material bastante promissor para impulsionar o desenvolvimento direto das áreas relacionadas a tecnologia. Como o progresso dos circuitos integrados se baseia na redução da escala de dispositivos CMOS⁵ através da relação entre baixa voltagem, baixa potência e alta performance. Isto faz com que o grafeno seja um grande candidato para compor *chips* na era pós-silício. Uma vez que a miniaturização permite que uma maior quantidade de transistores sejam empregado para formar um determinado componente eletrônico, hoje é bastante comum que processadores de computadores pessoais possuam dois bilhões de transistores MOSFET⁶, com aproximadamente 30 nm. A Fig. 2.14(a) ilustra essa variação ao longo dos

⁵CMOS é a abreviação para *complementary metal-oxide-semiconductor*, ou seja, semicondutor de metal-óxido complementar. Esta tecnologia é empregada na fabricação de circuitos integrados, que abrange elementos de lógica digital (portas lógicas, flip-flops, contadores, decodificadores, dentre outros.), bem como microprocessadores, microcontroladores e memórias RAM.

⁶O transistor MOSFET, acrônimo de Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor, que em português significa transistor de efeito de campo metal - óxido - semicondutor, é o tipo mais comum de

anos [75].

Como exemplo das propriedades do grafeno para uso em transistores, pesquisadores mostraram recentemente que é possível atingir altas frequências com o grafeno que podem chegar a 427 GHz [76, 77, 78, 79, 80, 81]. As Fig. 2.14(b)-(d) mostram um transistor auto-alinhado de alta velocidade.

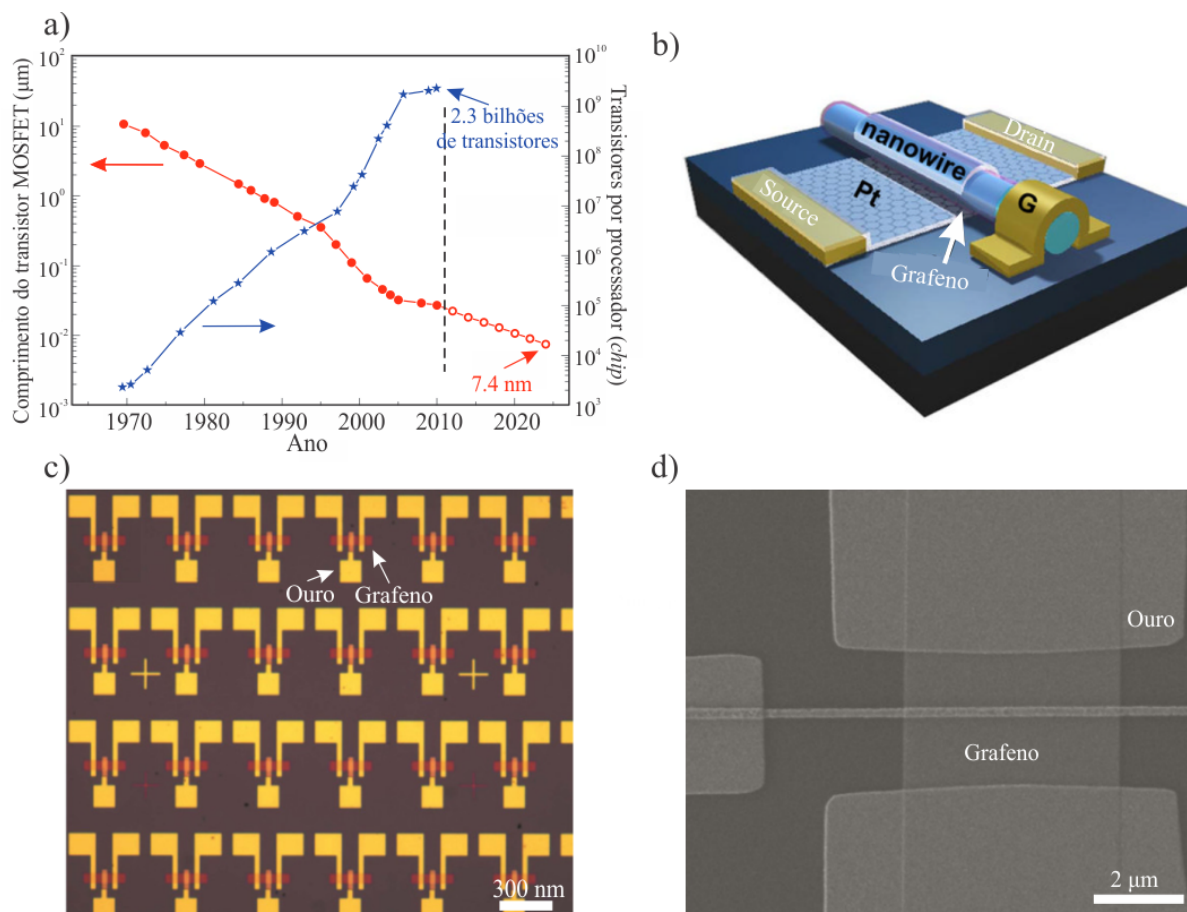


Figura 2.14: (a) Gráfico com a evolução do tamanho e de transistores MOSFET (os círculos vermelhos vazios são projeções), (b) esquema de um transistor de grafeno auto-alinhado de alta velocidade, (c) e (d) *zoom* no transistor de grafeno auto-alinhado. Adaptado das referências [75], [76] e [77].

2.5.2 Sensores

Os sensores eletrônicos são bastantes comuns em nossas vidas. Eles podem ser utilizados para detectar fumaças, luz, e outros. Atualmente os estudos que utilizam o grafeno como sensor estão a aumentar em muitos campos, tais como na eletroquímica, biologia e fotônica.

Em consequência da alta sensibilidade a estímulos externos (moléculas, campos elétricos, campos magnéticos, etc), o grafeno é capaz de detectar variações mínimas de corrente.

transistores de efeito de campo utilizado em circuitos digitais e analógicos.

Por exemplo, pesquisadores desenvolveram uma técnica promissora, na qual utilizam grafeno para fazer sequenciamento genético [82, 83, 84, 85]. Utilizando uma folha de grafeno, os pesquisadores fizeram passar uma molécula individual de DNA por um pequeno furo (nanoporo) na monocamada de grafeno, ilustrado na Fig. 2.15(a). À medida que a molécula de DNA deslizava pelo nanoporo, uma corrente era induzida e detectada por um chip, no qual era possível fazer o mapeamento genético, representado na Fig. 2.15(b), onde a adenina, timina, guanina e citosina são representados por *A*, *T*, *G* e *C*, respectivamente [86].

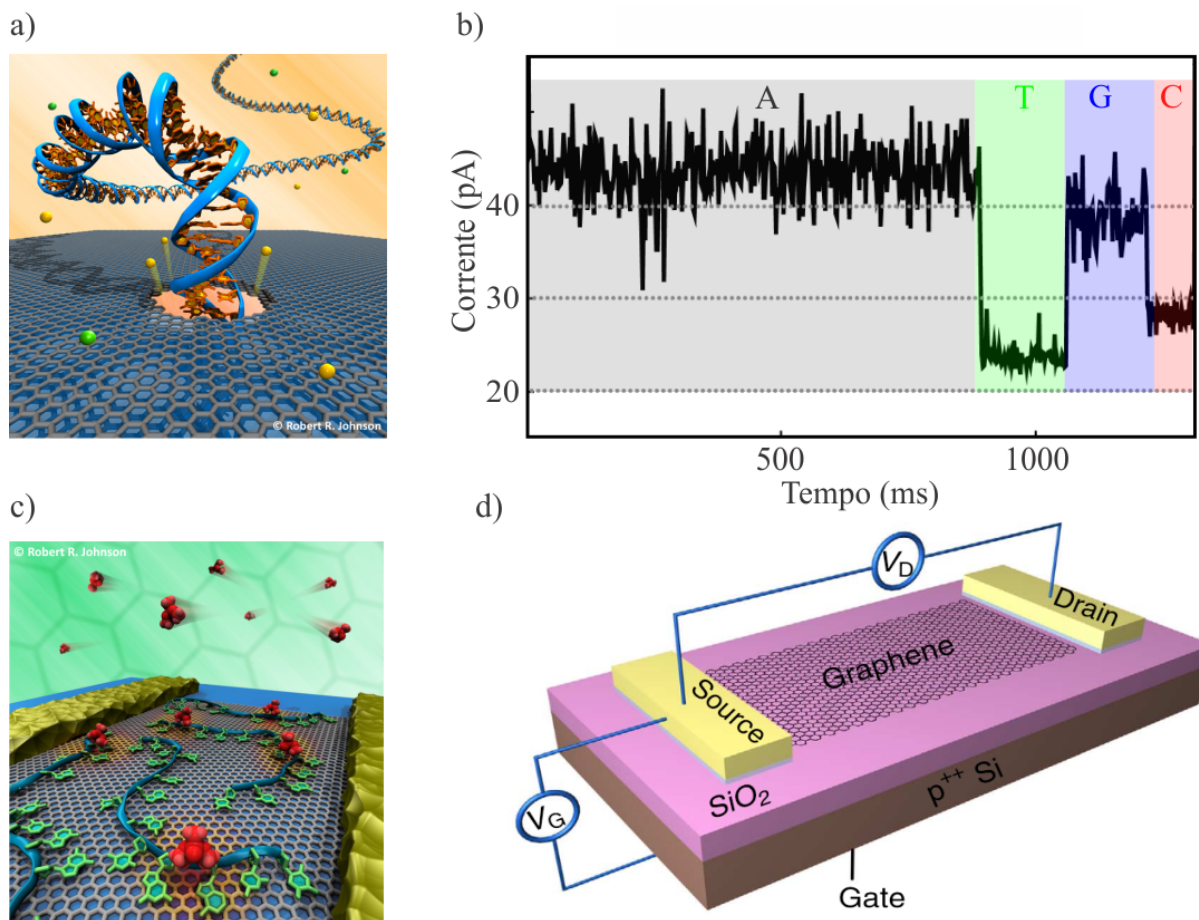


Figura 2.15: (a) Ilustração de uma molécula de DNA passando através de um nanoporo em uma monocamada de grafeno, (b) variação da corrente em função do tempo para uma molécula que passa através de um nanoporo (A-adenina, T-timina, G-guanina e C-citosina), (c) representação de um biosensor e (d) fotosensor baseados em grafeno. Adaptado das referências [86], [92], [93] e [94].

O grafeno pode ser utilizado também para criar biossensores capazes de identificar substâncias tóxicas, por exemplo, como ilustra a Fig. 2.15(c) [87, 88, 89, 90, 91]. O fotosensor da Fig. 2.15(d) foi desenvolvido para ser utilizado em câmeras digitais [92]. O mesmo é milhares de vezes mais sensível do que os sensores CCD⁷ e CMOS atuais e ainda

⁷CCD (acônimo de *Charge-Coupled Device*) ou simplesmente dispositivo de carga acoplada é um sensor

capturam em uma faixa mais larga do espectro magnético.

2.5.3 Painéis flexíveis

Devido à suas propriedades ópticas excelentes, aliadas com as propriedades eletrônicas e a sua capacidade de flexibilidade, o grafeno se torna um material bastante útil para o desenvolvimento de novos *displays touchscreen* vindo a substituir o óxido de índio-estanho, comumente usado em telas de celulares e TV's. Na Fig. 2.16(a) temos filmes finos de grafeno que medem aproximadamente 30 polegadas, ideal para ser utilizado em televisores da próxima geração [95].

O grafeno também pode ser utilizado em janelas transparentes (*smart window*) para exibir informações, Fig. 2.16(b). Uma vez que o painel baseado em grafeno for desligado, a janela volta a como era antes, Fig. 2.16(c) [74, 96]. A Fig. 2.16(d) ilustra a flexibilidade que os *displays* baseados em grafeno possuem [97].

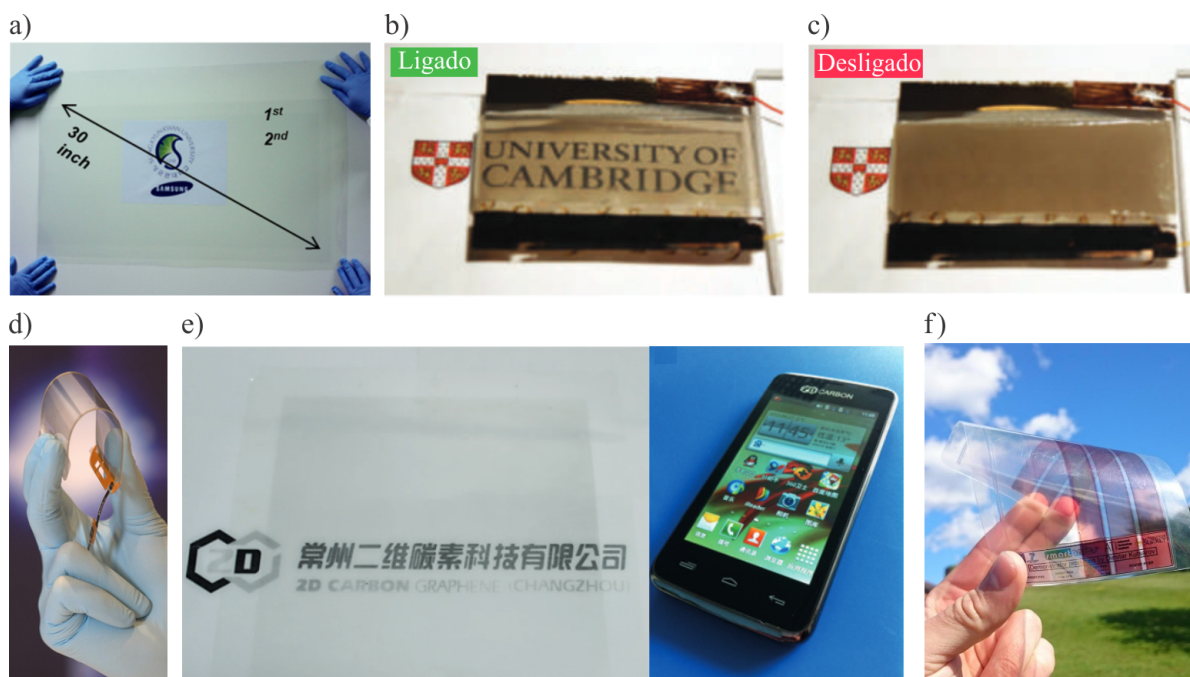


Figura 2.16: (a) Filme de grafeno; (b) Janela transparente (*smart window*) que pode exibir informações ou não (c); (d) Filme fino de grafeno ilustrando a sua flexibilidade; (e) Filme fino condutor baseado em grafeno produzido pela empresa 2D Carbon Tech (esquerda) e utilização do filme em um protótipo de *smartphone* (direita); e (f) Ilustração de um painel fotovoltaico flexível. Adaptado das referências [74], [95], [97], [98] e [104].

Recentemente, a empresa 2D Carbon Tech começou a produzir grafeno para que possa ser utilizado em *smartphones*. A Fig. 2.16(e) mostra (do lado esquerdo) um filme condutor baseado em grafeno (medindo cerca de $20 \times 20 \text{ cm}^2$) produzido pela 2D Carbon Tech e semicondutor para captação de imagens utilizado em câmeras digitais.

(do lado direito) um protótipo de um *smartphone* já utilizando o grafeno na composição da sua tela *touch* [98].

Por fim, o grafeno também pode ser utilizado em painéis fotovoltaicos. Pesquisas mostram que o grafeno é um dos materiais que apresentam o maior rendimento para este uso [9, 99, 100, 101, 102, 103].

Aspectos teóricos do grafeno

Neste capítulo, iremos descrever um pouco sobre as características estruturais e eletrônicas do grafeno. Mostraremos também como o Hamiltoniano para a monocamada, bicamada e n -camadas de grafeno do tipo ABC podem ser obtidos a partir do modelo *tight-binding*.

3.1 Propriedades eletrônicas do grafeno

3.1.1 Estrutura cristalina

Estruturalmente, o grafeno é definido como sendo uma monocamada de átomos de carbono organizados em uma rede do tipo favo de mel. A célula unitária do grafeno, descrita na Fig. 3.1(a), não é uma rede de Bravais, mas pode ser considerada como sendo duas redes triangulares interpenetradas A e B , onde podemos descrever os vetores da rede como:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} (3, \sqrt{3}) \quad \text{e} \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2} (3, -\sqrt{3}), \quad (3.1)$$

onde $a = 1.42 \text{ \AA}$ é o parâmetro de rede, ou seja, a distância entre C – C da rede do grafeno. Podemos perceber também que cada átomo da sub-rede A é rodeado por três vizinhos mais próximos da sub-rede B e vice-versa, onde os vetores que ligam um sítio específico aos vizinhos mais próximos são dados por:

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a}{2} (1, \sqrt{3}), \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a}{2} (1, -\sqrt{3}) \quad \text{e} \quad \vec{\delta}_3 = a (-1, 0). \quad (3.2)$$

Os vetores que definem a rede recíproca, mostrados na Fig. 3.1(b), são dados por:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} (1, \sqrt{3}) \quad \text{e} \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} (1, -\sqrt{3}), \quad (3.3)$$

O contorno da primeira zona de Brillouin do grafeno, Fig. 3.1(b), possui seis pontos e devido à simetria, apenas dois destes são independentes, chamados de K e K' . Esses pontos são de extrema importância para o grafeno, como veremos mais adiante. Suas

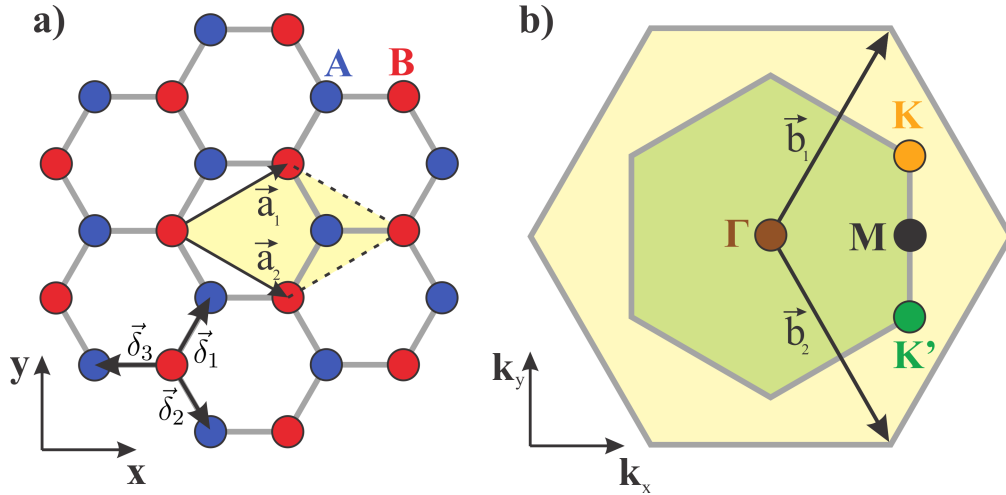


Figura 3.1: (a) Estrutura de rede do grafeno formada por duas sub-redes triangulares interpenetradas A e B. Os vetores unitários são definidos por \vec{a}_1 e \vec{a}_2 , os primeiros vizinhos são localizados por $\vec{\delta}_i$ ($i = 1, 2, 3$) e a distância entre os átomos de carbono é igual a 1.42 Å. (b) Primeira zona de Brillouin. Os cones de Dirac, aos quais iremos nos reportar logo mais, estão localizados nos pontos K e K' .

posições no espaço recíproco são dadas por:

$$\vec{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right) \quad \text{e} \quad \vec{K}' = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right). \quad (3.4)$$

Em um situação mais realística, as soluções da função de onda para um elétron em um cristal estão parcialmente localizadas em sítios da rede (que levam a uma descrição em termos dos orbitais atômicos) e outras que estão espalhadas pelo cristal e que são independentes das soluções anteriores¹. Diante dessas dificuldades, o modelo *tight-binding* é uma boa aproximação para descrever estados intermediários entre essas duas soluções. Desta forma, considera-se que cada elétron π , ou seja, do orbital p_z , associado a um átomo de carbono, possui probabilidade diferente de zero de ser encontrado nos vizinhos mais próximos. Logo, cada elétron pode migrar de um vizinho a outro ao longo da rede. Apesar de ser uma abordagem microscópica simples, o método *tight-binding* é amplamente usado em trabalhos teóricos sobre grafeno, uma vez que a interação entre os segundos vizinhos é bem menor [105].

3.1.2 Modelo *tight-binding* para o grafeno

Considerando apenas o *hopping* entre os primeiros vizinhos, o Hamiltoniano *tight-binding* para o grafeno, no formalismo de segunda quantização, pode ser escrito como:

¹Se fossemos estudar o problema nesta situação, teríamos que incluir termos que representariam a energia de interação entre os elétrons e os sítios atômicos, elétron-elétron, elétron-buraco, elétron-fônons, etc. Logo, seria extremamente complicado analisar o problema levando em considerações todas as estas interações.

$$H_{TB} = -\tau \sum_{i,j} (\mathbf{a}_i^\dagger \mathbf{b}_j + \mathbf{b}_j^\dagger \mathbf{a}_i), \quad (3.5)$$

onde $\tau \approx 2.8$ eV é o parâmetro de *hopping* associado à transição dos elétrons entre os primeiros vizinhos (sítios mais próximos), \mathbf{a}_i (\mathbf{a}_i^\dagger) e \mathbf{b}_i (\mathbf{b}_i^\dagger) aniquilam (criam) um elétron no i -ésimo sítio das sub-redes A e B, respectivamente. Tais operadores satisfazem as regras de anti-comutação de férmions: $\{\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j^\dagger\} = \delta_{i,j}$, $\{\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j\} = \{\mathbf{a}_i^\dagger, \mathbf{a}_j^\dagger\} = 0$ e $\{\mathbf{b}_i, \mathbf{b}_j^\dagger\} = \delta_{i,j}$, $\{\mathbf{b}_i, \mathbf{b}_j\} = \{\mathbf{b}_i^\dagger, \mathbf{b}_j^\dagger\} = 0$, $\forall i,j$.

Podemos obter a relação de dispersão do grafeno a partir de uma transformada de Fourier dos operadores de criação e destruição que será dado por

$$\mathbf{a}_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} \mathbf{a}_k, \quad \mathbf{a}_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} \mathbf{a}_k^\dagger, \quad (3.6)$$

$$\mathbf{b}_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} \mathbf{b}_{k'} \quad \text{e} \quad \mathbf{b}_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} \mathbf{b}_{k'}^\dagger. \quad (3.7)$$

onde $\vec{k} = (k_x, k_y)$ e N é o número de células unitárias. O estado eletrônico no espaço dos momentos pode ser obtido através da criação de um elétron, de vetor de onda \vec{k} , partindo do estado de vácuo em um sítio da rede cristalina

$$|\psi(k)\rangle = (A\mathbf{a}_k^\dagger + B\mathbf{b}_k^\dagger) |0\rangle, \quad (3.8)$$

onde as constantes A e B estão relacionadas com a amplitude de probabilidade. Os operadores de criação e destruição ainda satisfazem uma outra relação dada por: $\mathbf{a}_k |0\rangle = 0$ e $\mathbf{b}_k |0\rangle = 0$.

Assim, substituindo as Eq's. (3.6) e (3.7) no Hamiltoniano dado pela Eq. (3.5), teremos:

$$H_{TB} = -\tau \sum_{i,j} \left[\left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} \mathbf{a}_k^\dagger \right) \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} \mathbf{b}_{k'} \right) + \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} \mathbf{b}_{k'}^\dagger \right) \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} \mathbf{a}_k \right) \right], \quad (3.9)$$

$$H_{TB} = -\frac{\tau}{N} \sum_{i,j} \sum_{k,k'} \left[\left(e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} \cdot e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} \right) \left(\mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_{k'} \right) + \left(e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} \cdot e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} \right) \left(\mathbf{b}_{k'}^\dagger \mathbf{a}_k \right) \right], \quad (3.10)$$

que é equivalente a

$$H_{TB} = -\frac{\tau}{N} \sum_{i,j} \sum_{k,k'} \left[\left(e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}_j} \cdot e^{-i\vec{k}(\vec{r}_i-\vec{r}_j)} \right) \left(\mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_{k'} \right) + \left(e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}_j} \cdot e^{i\vec{k}(\vec{r}_i-\vec{r}_j)} \right) \left(\mathbf{b}_{k'}^\dagger \mathbf{a}_k \right) \right]. \quad (3.11)$$

Como dito anteriormente, cada átomo possui três primeiros vizinhos, então, considerando que a origem esteja situada em um sítio j qualquer e fazendo i variar sobre os três primeiros vizinhos, localizados pela Eq. (3.6), obtemos:

$$H_{TB} = -\frac{\tau}{N} \sum_{i,j} \sum_{k,k'} \left\{ \left[e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{r}_j} \left(e^{-ik_x(a/2)} e^{-ik_y(a\sqrt{3}/2)} + e^{-ik_x(a/2)} e^{-ik_y(-a\sqrt{3}/2)} \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + e^{-ik_x(-a)} \right) \right] \mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_{k'} + \left[e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{r}_j} \left(e^{ik'_x(a/2)} e^{ik'_y(a\sqrt{3}/2)} \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + e^{ik'_x(a/2)} e^{ik'_y(-a\sqrt{3}/2)} + e^{ik'_x(-a)} \right) \right] \mathbf{b}_{k'}^\dagger \mathbf{a}_k \right\}. \quad (3.12)$$

$$H_{TB} = -\frac{\tau}{N} \sum_i \sum_{k,k'} \left[e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{r}_j} \left(e^{-ik_x a/2} e^{-ik_y a\sqrt{3}/2} + e^{-ik_x a/2} e^{ik_y a\sqrt{3}/2} + e^{ik_x a} \right) \mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_{k'} \right. \\ \left. + e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{r}_j} \left(e^{ik'_x a/2} e^{ik'_y a\sqrt{3}/2} + e^{ik'_x a/2} e^{-ik'_y a\sqrt{3}/2} + e^{-ik'_x a} \right) \mathbf{b}_{k'}^\dagger \mathbf{a}_k \right] \quad (3.13)$$

Como

$$\frac{1}{N} \sum_i e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{r}_j} = \delta(\vec{k}-\vec{k}'), \quad (3.14)$$

onde $\delta(\vec{k}-\vec{k}')$ é conhecido como delta de Dirac, então teremos que:

$$H_{TB} = -\tau \sum_k \left[\left(e^{-ik_x a/2} e^{-ik_y a\sqrt{3}/2} + e^{-ik_x a/2} e^{ik_y a\sqrt{3}/2} + e^{ik_x a} \right) \mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_k \right. \\ \left. + \left(e^{ik_x a/2} e^{ik_y a\sqrt{3}/2} + e^{ik_x a/2} e^{-ik_y a\sqrt{3}/2} + e^{-ik_x a} \right) \mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{a}_k \right] \quad (3.15)$$

Lembrando que $\cos\theta$ pode ser escrito como $\cos\theta = (e^{i\theta} + e^{-i\theta})/2$ podemos escrever a Eq. (3.6) de uma forma mais sugestiva

$$H_{TB} = -\tau \sum_k \left\{ \left[2\cos(k_y a\sqrt{3}/2) e^{-ik_x a/2} + e^{ik_x a} \right] \mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_k \right. \\ \left. + \left[2\cos(k_y a\sqrt{3}/2) e^{ik_x a/2} + e^{-ik_x a} \right] \mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{a}_k \right\}, \quad (3.16)$$

$$H_{TB} = -\tau \sum_k \left[g(\vec{k}) \mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_k + g^*(\vec{k}) \mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{a}_k \right], \quad (3.17)$$

onde

$$g(\vec{k}) = 2\cos(k_y a\sqrt{3}/2) e^{-ik_x a/2} + e^{ik_x a} \quad (3.18)$$

é o fator de estrutura da rede cristalina.

O Hamiltoniano dado pela Eq. (3.17) nos permite escrever a equação de Schrödinger como

$$H_{TB} |\psi(k)\rangle = E(k) |\psi(k)\rangle. \quad (3.19)$$

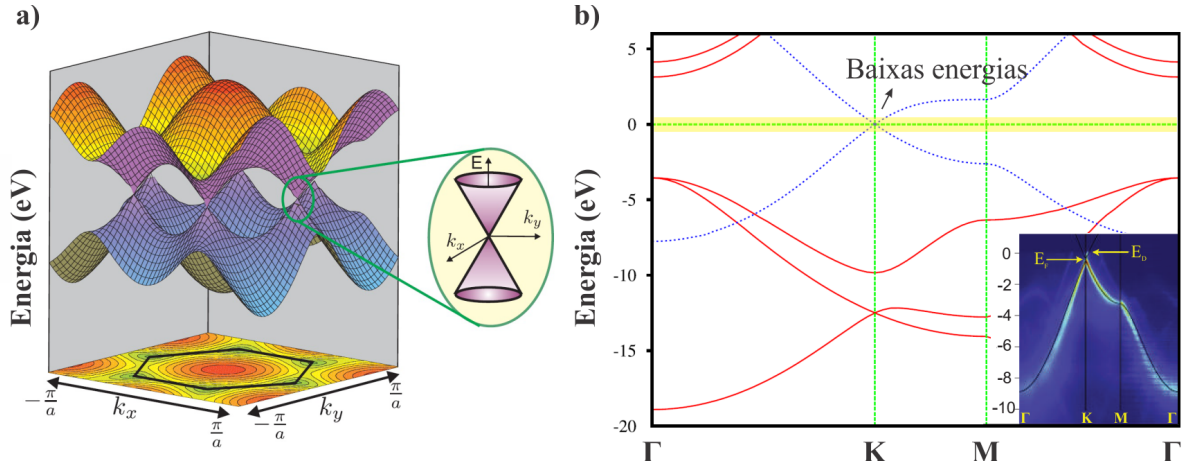


Figura 3.2: (a) Relação de dispersão eletrônica do grafeno enfatizando o ponto de Dirac e (b) estrutura de bandas em relação aos pontos de simetria ilustrados na Fig. 3.1, onde a figura menor mostra o resultado obtido experimentalmente utilizando espectroscopia de fotoemissão resolvida em ângulo (ARPES). Adaptado das referências [108], [109] e [110].

Logo, substituindo a Eq. (3.17) e o estado eletrônico dado pela Eq. (3.8) e utilizando as relações de anti-comutação entre os operadores fermiônicos, podemos obter duas equações que podem ser escritas na forma matricial, tal como:

$$\begin{pmatrix} 0 & -\tau g(\vec{k}) \\ -\tau g^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = E(k) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \quad (3.20)$$

Diagonalizando o Hamiltoniano dado por

$$H_k = \begin{pmatrix} 0 & -\tau g(\vec{k}) \\ -\tau g^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.21)$$

obtemos as autoenergias associadas a $\psi(k)$, de forma que

$$E_{\pm k} = \pm t \left| g(\vec{k}) \right| = \pm \sqrt{3 + f(\vec{k})}, \quad (3.22)$$

onde $f(\vec{k}) = 4\cos(3k_x a/2)\cos(3k_y a/2) + 2\cos(3k_y a/2)$ [107].

O gráfico da Fig. 3.2(a) nos mostra seis pontos localizados nos vértices da primeira zona de Brillouin no qual a banda de valência ($E < 0$) toca a banda de condução ($E > 0$) quando $E = 0$ [108]. Nesses pontos, conhecidos como pontos de Dirac, o gap é nulo e a relação de dispersão é cônica para pequenos valores de $|E|$. Na Fig. 3.2(b) temos a estrutura de bandas em relação aos pontos de simetria ilustrados na Fig. 3.1, onde a figura menor mostra o resultado obtido experimentalmente utilizando espectroscopia de fotoemissão resolvida em ângulo (ARPES) [109, 110]. Desta forma, para entender a dinâmica dos elétrons nesta região, é necessário considerar o operador Hamiltoniano do tipo de Dirac, também linear. É o que faremos na próxima seção.

3.1.3 Aproximação do contínuo para monocamada de grafeno

Para demonstrar que o elétron de baixa energia no grafeno se comporta como uma quasi-partícula sem massa de Dirac, vamos expandir o fator de estrutura $g(\vec{k})$, Eq. (3.18), em torno de \vec{K} , Eq. (3.4). Considerando apenas os termos até primeira ordem, temos [111]:

$$g(\delta\vec{k}) \approx g(\vec{K}) + \left. \frac{\partial g}{\partial k_x} \right|_{\vec{k}=\vec{K}} (k_x - K_x) + \left. \frac{\partial g}{\partial k_y} \right|_{\vec{k}=\vec{K}} (k_y - K_y), \quad (3.23)$$

onde $\delta\vec{k} = \vec{K} - \vec{k}$. Após avaliar $g(\vec{k})$ e suas derivadas de primeira ordem nos respectivos pontos, obtemos a seguinte expressão:

$$g(\delta\vec{k}) \approx \frac{3a}{2} \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} + i\frac{1}{2} \right) k'_x - \frac{3a}{2} \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} + i\frac{1}{2} \right) ik'_y, \quad (3.24)$$

logo

$$g(\delta\vec{k}) \approx \frac{3a}{2} (k'_x - ik'_y) e^{i5\pi/6}. \quad (3.25)$$

De forma análoga, podemos desenvolver o mesmo procedimento para \vec{K}' , assim:

$$g(\delta\vec{k}) \approx \frac{3a}{2} (-k'_x - ik'_y) e^{i5\pi/6}. \quad (3.26)$$

Comparando as Eq's. (3.25) e (3.26), podemos notar que as duas não são equivalentes devido aos sinais + e - no termo k_x tanto na Eq. (3.25) como na Eq. (3.26), respectivamente.

Desta forma, substituindo as Eq's. (3.25) e (3.26) no Hamiltoniano (3.21), temos o seguinte Hamiltoniano para uma monocamada de grafeno:

$$H_{mo}^{\pm} = \hbar v_f \begin{pmatrix} 0 & (\pm k'_x - ik'_y) \\ (\pm k'_x + ik'_y) & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.27)$$

onde $v_f = 3a\tau/2\hbar$ é a velocidade de Fermi e os sinais + e - representam elétrons de baixa energia em torno dos pontos K e K' , respectivamente. O Hamiltoniano acima é semelhante ao de Dirac, exceto que temos a velocidade de Fermi (v_f) ao invés da velocidade da luz (c). É por esse motivo, que costuma-se dizer que os elétrons no grafeno se comportam como férmions de Dirac sem massa.

O Hamiltoniano (3.27) ainda pode ser escrito como:

$$H_{mo}^{\pm} = \hbar v_f k_F \begin{pmatrix} 0 & e^{\mp i\phi} \\ e^{\pm i\phi} & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.28)$$

onde $k_F = \sqrt{(k'_x)^2 - (k'_y)^2}$ e $\phi = \arctg(k'_y/k'_x)$. A forma como o hamiltoniano (3.28) foi escrito será útil para o próximo capítulo.

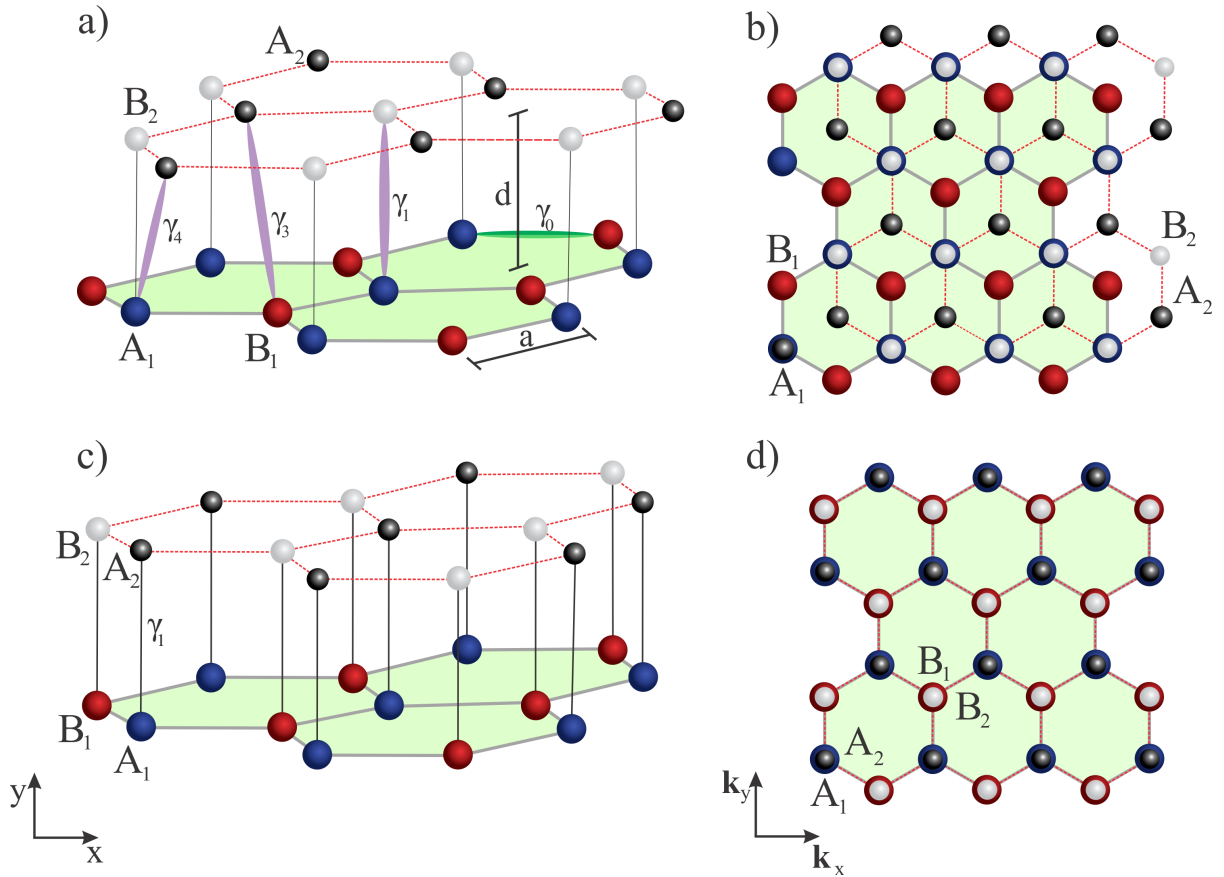


Figura 3.3: (a) Estrutura cristalina para uma bicamada de grafeno com empilhamento do tipo Bernal com os *hoppings* entre as duas camadas (γ_1 , γ_3 e γ_4) e entre os átomos da mesma rede (γ_0). A distância entre as camadas é $d \approx 3.35 \text{ \AA}$ e $a = 1.42 \text{ \AA}$ é a distância entre os átomos de carbono. A camada inferior é representada pelas linhas cheias cinzas com as sub-redes triangular formadas por A_1 (azul) e B_1 (vermelho), enquanto que a camada superior é representada pelas linhas pontilhadas (vermelhas) com sub-redes formas por A_2 (preto) e B_2 (branco). (b) Visão superior do empilhamento do tipo bernal. (c) Bicamada de grafeno do tipo AA e (d) sua representação a partir de uma perspectiva superior.

3.2 Bicamada de grafeno

3.2.1 Estrutura cristalina

Uma bicamada de grafeno, abreviado por BLG (do inglês *bilayer graphene*), consiste no empilhamento de duas monocamadas de grafeno que, como veremos a seguir, podem ser de dois tipos. A energia de interação entre as duas camadas é do tipo van der Waals e possui valor entre $15 \text{ eV} \sim 20 \text{ eV}$, valores típicos de heteroestruturas de van der Waals [112].

A bicamada de grafeno pode ser encontrada em duas disposições de empilhamento:

AB e AA . O empilhamento do tipo AB , também chamado de Bernal², é disposto de forma que os átomos da sub-rede A da camada superior (denominados A_2) fiquem exatamente acima dos átomos da sub-rede B da camada inferior (denominada B_1) e os átomos da sub-rede B da camada superior (denominadas B_2) ficam localizados exatamente acima do centro do hexágono formado pela camada de baixo. Podemos dizer também que a camada superior está rotacionada por um ângulo de 60° em relação a camada inferior. Assim, a bicamada de grafeno do tipo Bernal possui dois sítios atômicos não-equivalentes [113]. A distância entre os planos é aproximadamente $d \approx 3.35 \text{ \AA}$ [114]. Esse tipo de bicamada de grafeno é a mais comum [115]. A Fig. 3.3(a) representa um modelo ilustrativo da rede cristalina deste tipo de empilhamento e a Fig. 3.3(b) mostra uma visão a partir de uma perspectiva superior.

Por outro lado, o padrão de empilhamento AA também é possível, porém instável [116]. No padrão AA os átomos da sub-rede A da camada superior (A_2) estão diretamente acima dos átomos da sub-rede A da camada de baixo (A_1). Da mesma forma estão os átomos da sub-rede B da camada superior B_1 e inferior B_2 , como mostra a Fig. 3.3(c) e Fig. 3.3(d). A distância entre os planos com empilhamento AA é aproximadamente $d \approx 3.55 \text{ \AA}$.

Um observação importante que podemos fazer sobre multicamadas de grafeno diz respeito a sua simetria de inversão espacial $(x, y, z) \rightarrow (-x, -y, -z)$. Quando temos números pares de camadas de grafeno (bicamada, por exemplo) a simetria de inversão espacial é satisfeita. Por outro lado, quando temos um número ímpar (tricamada, por exemplo) a inversão espacial não é satisfeita [117].

3.2.2 Modelo *tight-binding* para a bicamada de grafeno

O modelo *tight-binding* desenvolvido para a grafeno pode ser facilmente estendido para camadas de grafeno com um número finito, porém com um grau de complexidade maior, uma vez que outros termos de *hopping* irão surgir ($\gamma_0, \gamma_1, \gamma_3$ e γ_4). O caso mais simples é quando temos uma bicamada de grafeno. Logo, o Hamiltoniano que descreve os elétrons da banda π para a bicamada de grafeno com empilhamento AB pode ser escrito como

²Em homenagem ao cientista Irlandês John Desmond Bernal por ter determinado em 1942 a estrutura molecular do grafite.

[118, 119, 107]:

$$\begin{aligned}
H_{TB} = & \sum_{i,j} \sum_{n=1}^2 \left(E_{A_n} \mathbf{a}_{i;n}^\dagger \mathbf{a}_{i;n} + E_{B_n} \mathbf{b}_{j;n}^\dagger \mathbf{b}_{j;n} \right) \\
& - \gamma_0 \sum_{i,j} \sum_{n=1}^2 \left(\mathbf{a}_{i;n}^\dagger \mathbf{b}_{j;n} + \mathbf{b}_{j;n}^\dagger \mathbf{a}_{i;n} \right) \\
& - \gamma_1 \sum_{i,j} \left(\mathbf{a}_{i;1}^\dagger \mathbf{b}_{j;2} + \mathbf{b}_{j;2}^\dagger \mathbf{a}_{i;1} \right) \\
& - \gamma_3 \sum_{i,j} \left(\mathbf{a}_{i;2}^\dagger \mathbf{b}_{j;1} + \mathbf{b}_{j;1}^\dagger \mathbf{a}_{i;2} \right) \\
& - \gamma_4 \sum_{i,j} \left(\mathbf{a}_{i;1}^\dagger \mathbf{a}_{j;2} + \mathbf{a}_{j;2}^\dagger \mathbf{a}_{i;2} + \mathbf{b}_{i;1}^\dagger \mathbf{b}_{j;2} + \mathbf{b}_{j;2}^\dagger \mathbf{b}_{i;2} \right), \quad (3.29)
\end{aligned}$$

onde $\mathbf{a}_{i;n}$ ($\mathbf{a}_{i;n}^\dagger$) destrói (cria) um elétron no sítio i da sub-rede A da n -ésima camada, enquanto que $\mathbf{b}_{j;n}$ ($\mathbf{b}_{j;n}^\dagger$) destrói (cria) no sítio j da sub-rede B também na n -ésima camada. A nomenclatura para os parâmetros de *hopping* da grafite foi utilizada aqui de forma que: (i) os termos E_{A_n} e E_{B_n} representam as energias nos sítios das sub-redes A_n e B_n ; (ii) a energia de *hopping* entre os átomos de uma mesma camada, ou seja, entre $A_1(A_2)$ e $B_1(B_2)$ é dado por $\gamma_0 = \tau \approx 2.8$ eV; (iii) entre os átomos A_1 e B_2 , ou seja, para os átomos que, a partir de uma visão superior como a da Fig. 3.3(b), ficam sobrepostos³ um aos outros o *hopping* é dado por $\gamma_1 = t_\perp \approx 0.4$ eV; (iv) $\gamma_3 \approx 0.3$ eV representa o *hopping* entre os átomos B_1 e B_2 ; (v) por fim, $\gamma_4 \approx 0.04$ eV é a energia de *hopping* entre A_1 e B_2 (A_2 e B_1) [120]. As interações entre os demais vizinhos são muito fracas, de forma que podemos desconsiderá-las. A Fig. 3.3(a) ilustra as energias de *hopping* descritas anteriormente.

Agora, vamos considerar apenas o *hopping* entre os átomos da mesma camada dado por τ (ou seja, somente entre os primeiros vizinhos, como desenvolvido na seção anterior) e o *hopping* entre as duas monocamadas de grafeno descrito por τ_\perp . Seguindo o mesmo raciocínio que desenvolvemos para a situação na qual tínhamos apenas uma monocamada de grafeno, podemos escrever o Hamiltoniano *tight-binding* como uma matriz 4×4 dada por:

$$H_{TB} = \begin{pmatrix} 0 & -\tau g(\vec{k}) & \tau_\perp & 0 \\ -\tau g^*(\vec{k}) & 0 & 0 & 0 \\ \tau_\perp & 0 & 0 & -\tau g^*(\vec{k}) \\ 0 & 0 & -\tau g(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.30)$$

Note que o Hamiltoniano (3.30) é composto por dois Hamiltonianos de uma monocamada, igual ao Hamiltoniano (3.21), em sua diagonal. Fora da diagonal temos dois blocos 2×2 que descrevem o acoplamento entre as duas camadas. Diagonalizando o Hamiltoniano

³Para o tipo de emparelhamento AA o *hopping* entre os átomos da camada superior e inferior é 0.2 eV.

(3.30), teremos o espectro de energia para o empilhamento do tipo Bernal (AB):

$$E_{\pm k}^{\pm} = \pm \frac{\tau_{\perp}}{2} \pm \left[\tau \left| g(\vec{k}) \right|^2 + \left(\frac{\tau_{\perp}}{2} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (3.31)$$

formado por quatro autovalores e, conseqüentemente, quatro bandas.

3.2.3 Aproximação do contínuo para bicamada de grafeno

Repetindo o mesmo procedimento desenvolvido para a monocamada de grafeno para obter o Hamiltoniano (3.27), ou seja, usando o modelo do contínuo para aproximação de baixa energia para os dois pontos de Dirac na zona de Brillouin (K e K'), podemos construir um Hamiltoniano análogo para a bicamada de grafeno dado por [121, 122]:

$$H_{bi} = \begin{pmatrix} 0 & \hbar v_F (\tau p_x + i p_y) & \tau_{\perp} & 0 \\ \hbar v_F (\tau p_x - i p_y) & 0 & 0 & 0 \\ \tau_{\perp} & 0 & 0 & \hbar v_F (\tau p_x - i p_y) \\ 0 & 0 & \hbar v_F (\tau p_x + i p_y) & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.32)$$

onde $p_{x,y} = \hbar k_{x,y}$ e $\tau = +1$ ($\tau = -1$) denota o Hamiltoniano correspondente para K (K'). As funções de onda correspondentes a este Hamiltoniano (3.32) são dadas por

$$\Psi_K = \begin{pmatrix} \varphi_A \\ \varphi_B \\ \varphi_{B'} \\ \varphi_{A'} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \Psi_{K'} = \begin{pmatrix} \varphi_B \\ \varphi_A \\ \varphi_{A'} \\ \varphi_{B'} \end{pmatrix}. \quad (3.33)$$

Para um elétron livre na bicamada de grafeno, a relação entre a energia ε e o momento total $k = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$ como descrito pelo Hamiltoniano consiste em quatro hipérbolas, definidas como [123]:

$$\varepsilon_{\pm}^{\pm} = \pm \frac{\tau_{\perp}}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} \tau_{\perp}^2 + k^2}. \quad (3.34)$$

Na Fig. 3.4 temos a dispersão de baixas energias em duas dimensões para a bicamada de grafeno do tipo AB (esquerdo) e AA (direito), respectivamente, permitindo visualizar as diferenças na dispersão de energia desses dois sistemas. Considerando o empilhamento AB , podemos notar que, para baixas energias, as bandas se tocam no ponto $K_x = 0$ enquanto que as duas bandas superiores que resultam do forte acoplamento entre as duas camadas possuem energias $E_+^+ \geq \tau_{\perp}$ e $E_-^- \leq -\tau_{\perp}$. Para a bicamada de grafeno com empilhamento AA o espectro é semelhante ao de duas monocamadas de grafeno não degeneradas [124]. A obtenção do espectro de energia para o empilhamento AA utilizando o método *tight-binding* pode ser encontrado no artigo de Rakhmanov et al. [116].

O Hamiltoniano (3.32) ainda pode ser escrito na forma de uma matriz 2×2 dado por [125]:

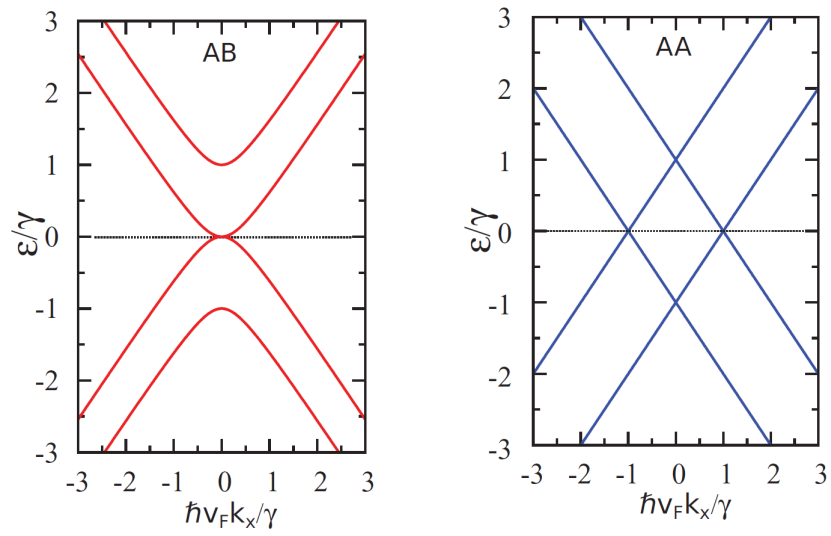


Figura 3.4: Relação de dispersão de baixas energias para a bicamada de grafeno com empilhamento AB e AA , respectivamente, em duas dimensões. Adaptado da referência [124].

$$H_{bi}^{\pm} = \frac{(\hbar v_f k_F)^2}{\tau_{\perp}} \begin{pmatrix} 0 & e^{-2i\phi} \\ e^{+2i\phi} & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.35)$$

com $k_F = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ e $\phi = \arctg(k_y/k_x)$.

3.3 Hamiltoniano para n -camadas de grafeno romboédrico

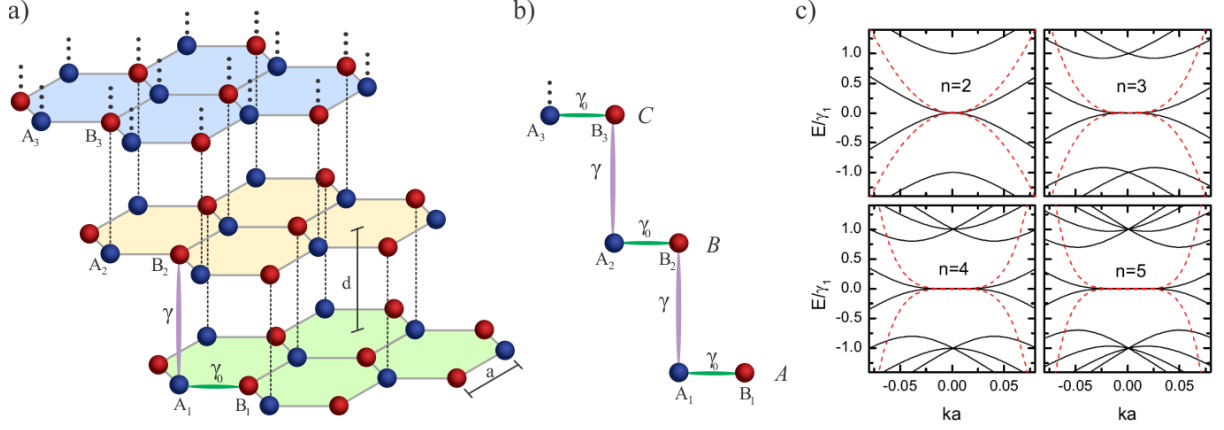


Figura 3.5: (a) Representação esquemática para n -camada de grafeno com empilhamento romboédrico (ABC), (b) posição dos sítios A_i e B_i das subredes de cada monocamada com o hopping entre os primeiros vizinhos γ_0 e entre os sítios A_i e B_{i+1} das camadas dado por γ e (c) relação de dispersão para $n = 2, 3, 4, 5$ obtidas a partir do Hamiltoniano (3.40), linhas pretas, e (3.42), linhas tracejadas vermelhas.

Para n -camadas de grafeno com empilhamento romboédrico (ABC), ilustrado na Fig. 3.5(a), o espectro consiste em duas bandas que tocam o ponto K e $2n - 2$ bandas que possuem energias maiores e que não se tocam. Considerando apenas os *hoppings* entre os primeiros vizinhos e o *hopping* entre camadas dos sítios A_i e B_{i+1} , representados na Fig. 3.5(b), o Hamiltoniano desse sistema próximo ao ponto K será dado por uma matriz $2n \times 2n$ [127]:

$$H_n = \hbar v_F \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{k} & \tau & 0 & \cdots & 0 \\ \tau^\dagger & \vec{\sigma} \cdot \vec{k} & \tau & \cdots & 0 \\ 0 & \tau^\dagger & \vec{\sigma} \cdot \vec{k} & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \tau \\ 0 & 0 & 0 & \tau^\dagger & \vec{\sigma} \cdot \vec{k} \end{pmatrix}, \quad (3.36)$$

com $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ são as matrizes de Pauli, $v_F \approx 10^6$ m/s é a velocidade de Fermi em multicamadas de grafeno, \vec{k} é o vetor de onda e τ é

$$\tau = \frac{1}{\hbar v_F} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \gamma & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.37)$$

onde γ é o parâmetro de *hopping* entre as camadas. Para este tipo de empilhamento, o Hamiltoniano para baixas energias será dado por [128]:

$$H_n = \frac{(\hbar v_f)^n}{\gamma^{n-1}} \begin{bmatrix} 0 & (k_x - ik_y)^n \\ (k_x + ik_y)^n & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.38)$$

onde n corresponde ao número de camadas de grafeno.

O Hamiltoniano (3.38) ainda pode ser escrito com a mesma estrutura dos Hamiltonianos (3.28) e (3.35), que corresponde ao Hamiltoniano do grafeno e da bicamada AB , respectivamente. Desta forma, teremos [129]:

$$H_n = \frac{(\hbar v_f k_F)^n}{\gamma^{n-1}} \begin{pmatrix} 0 & e^{-in\phi} \\ e^{+in\phi} & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.39)$$

onde $k_F = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ e $\phi = \arctg(k_y/k_x)$. A Fig. 3.5(c) mostra a relação de dispersão obtido para $n = 2, 3, 4, 5$ a partir do Hamiltoniano (3.40), que consiste em $2n$ bandas, representado pelas linhas pretas e a relação de dispersão obtida a partir do Hamiltoniano (3.43), representado pelas linhas tracejadas vermelhas. Para baixas energias, próximo ao ponto K , podemos notar a concordância entre as bandas.

Propagação de pacote de onda gaussiano em camadas de grafeno

Em 2008, Maksimova et al. estudaram a dinâmica de pacote de onda gaussiano em monocamada de grafeno [22]. Neste capítulo, iremos generalizar o estudo citado anteriormente visando obter um modelo analítico para n -camadas de grafeno. Começaremos utilizando o Hamiltoniano dado pela Eq. (3.39), ou seja, para o caso em que temos n -camadas de grafeno com empilhamento ABC . A partir deste Hamiltoniano, encontraremos as funções de onda para as sub-redes A e B . Uma vez conhecidas as funções de onda, iremos determinar a densidade de probabilidade eletrônica e o valor médio da coordenada $\langle \tilde{x}(t) \rangle$ e $\langle \tilde{y}(t) \rangle$ do centro de massa com o objetivo de verificar o comportamento da propagação do pacote de onda, bem como o fenômeno *zitterbewegung* (movimento trêmulo de partículas relativísticas). Uma proposta computacional utilizando o modelo TB e split-operator serão utilizados afim de verificar a coerência entre os resultados obtidos.

4.1 Representação de Heisenberg e ZBW

Antes de darmos início a obtenção da função de onda e dos valores médios da coordenada $\langle \tilde{x}(t) \rangle$ e $\langle \tilde{y}(t) \rangle$ do centro de massa do pacote de forma analítica, vamos utilizar a sutileza da representação de Heisenberg para prever para quais configurações iniciais dos pseudo-spin $\langle \tilde{x}(t) \rangle$ e $\langle \tilde{y}(t) \rangle$ será nulo ou não. Nesta formulação da mecânica quântica, os operadores (ou seja, os observáveis) são dependentes do tempo e o estados quânticos são independentes. Assim, podemos utilizar a velocidade de propagação do pacote para cada direção, para sabermos se o mesmo será uma constante do movimento ou não, de forma que este resultado está diretamente relacionado ao movimento trêmulo das funções de onda.

Na representação de Heisenberg, a velocidade de propagação do pacote de onda no grafeno tem a seguinte forma

$$\vec{v}(t) = \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\vec{r}, H] = v_f \vec{\sigma}, \quad (4.1)$$

onde $[\vec{r}, H]$ é o comutador do vetor posição com o Hamiltoniano a ser escolhido, v_f é a velocidade de fermi e $\vec{\sigma}$ são as matrizes de Pauli $\sigma_{x,y,z}$.

Por exemplo, vamos considerar o caso da monocamada de grafeno com hamiltoniano igual a $H_{mo} = \hbar v_f (k_x \sigma_x + k_y \sigma_y)$ e pseudo-spinor $C_1 = 1$ e $C_2 = 1$. Isso equivale a dizer que o pacote de onda irá se propagar ao longo do eixo- x , ou seja, teremos que $\langle \sigma_x \rangle \neq 0$ e $\langle \sigma_y \rangle = \langle \sigma_z \rangle = 0$. Desta forma, a partir da Eq. (4.1), vamos ter

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [x, H] \rangle = v_f \langle \sigma_x \rangle. \quad (4.2)$$

Como neste caso $\langle \sigma_x \rangle \neq 0$ para qualquer valor de t , podemos concluir que $\langle \dot{x}(t) \rangle$ também será diferente de zero, ou seja, $\langle x(t) \rangle$ não é uma constante de movimento. Logo, é de se esperar que exista ZBW para $\langle x(t) \rangle$. De forma análoga, podemos fazer isso para outras configurações de pseudo-spin, tanto para a monocamada quanto bicamada. Os passos sempre são os mesmos: (i) escolher o hamiltoniano (monocamada ou bicamada de grafeno), (ii) fazer o comutador da variável (x ou y) com o hamiltoniano, (iii) verificar se $d\langle \vec{\sigma} \rangle / dt$ que surgirá na equação correspondente continuará zero ou não com o passar do tempo. Caso $\langle \dot{x}(t) \rangle$ e $\langle \dot{y}(t) \rangle$ seja igual a zero, significa que $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ será constante do movimento, logo não existirá ZBW para a variável em questão.

A tabela 4.1 foi obtida utilizando a representação de Heisenberg para monocamada e bicamada de grafeno. Nela, temos $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ para diferentes valores das constantes C_1 e C_2 que determinam a polarização inicial do pseudo-spin.

	$\langle x(t) \rangle$			$\langle y(t) \rangle$		
C_1 e C_2	(1 0)	(1 1)	(1 i)	(1 0)	(1 1)	(1 i)
Monocamada	\neq	\neq	$=$	$=$	$=$	\neq
Bicamada	\neq	$=$	\neq	$=$	\neq	$=$

Tabela 4.1: Tabela composta pelos resultados do $\langle x \rangle$ e $\langle y \rangle$ obtidos a partir da representação de Heisenberg para diferentes valores das constantes de C_1 e C_2 que determinam a polarização inicial do pseudo-spin. O símbolo de diferente (igual) significa dizer que o valor esperado não será (será) nulo.

4.2 Solução analítica

Nesta seção, iremos determinar de forma analítica como as funções de onda das sub-redes A e B evoluem no tempo ($t > 0$), bem como calcular o valor médio da posição do centro de massa do pacote de onda.

4.2.1 Caso geral: n -camadas de grafeno

Primeiramente, vamos considerar o Hamiltoniano (3.39), dado por:

$$H_n(k) = \frac{(\hbar v_f k)^n}{\gamma_1^{n-1}} \begin{pmatrix} 0 & e^{-in\phi} \\ e^{in\phi} & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

onde $\gamma = t_1 \approx 0.4$ eV é o *hopping* entre as camadas, $v_f = 10^8$ cm/s é a velocidade de Fermi, $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, $\phi = \arctg(k_y/k_x)$ e n é o número de camadas.

Introduzindo a variável $s = 1$ ($s = -1$) para elétrons na banda de condução (valência) e sabendo que $p = \hbar k$, teremos que o espectro de energia será dado por

$$E_{p,s}^n = s \frac{(v_f p)^n}{\gamma_1^{n-1}}, \quad (4.4)$$

ou ainda

$$E_{p,s}^n = s \frac{p^n}{\gamma}, \quad (4.5)$$

onde chamamos $\gamma = \gamma_1^{n-1}/v_f^n$.

Como a equação de autovalores será dado por $H_n(k) |\psi_{p,s}^n\rangle = E_{p,s}^n |\psi_{p,s}^n\rangle$, teremos que as autofunções correspondentes serão dadas por

$$|\psi_{p,s}^n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s e^{in\phi} \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

Logo, as autofunções dependentes do tempo poderão ser escritas como

$$\Phi_{p,s}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left(i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - i \frac{E_{p,s}^n t}{\hbar}\right) |\psi_{p,s}^n\rangle, \quad (4.7)$$

com

$$e^{i\phi} = \frac{p_x + ip_y}{p}, \quad (4.8)$$

sendo ϕ a diferença de fase entre as componentes do *spinor*. Substituindo a Eq. (4.6) na Eq. (4.7), teremos:

$$\Phi_{p,s}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2\sqrt{2}\pi\hbar} \exp\left(i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - i \frac{E_{p,s}^n t}{\hbar}\right) \begin{pmatrix} 1 \\ s e^{in\phi} \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

onde ϕ é a direção de propagação.

A evolução temporal de um estado arbitrário $\psi(\vec{r}, 0)$, na representação de Schrödinger pode ser encontrado utilizando o método das funções de Green de tal forma que podemos escrever $\psi_\mu(\vec{r}, t)$ como sendo

$$\psi_\mu(\vec{r}, t) = \int G_{\mu\nu}(\vec{r}, \vec{r}', t) \psi_\nu(\vec{r}', 0) d\vec{r}', \quad (4.10)$$

onde $\mu, v = 1$ e 2 são os índices das matrizes correspondente as componentes superior e inferior de $|\psi_{p,s}^n\rangle$. O termo $G_{\mu,v}(\vec{r}, \vec{r}', t)$ da Eq. (4.10), é conhecido como função de Green e é definido como:

$$G_{\mu\nu}(\vec{r}, \vec{r}', t) = \sum_{s=\pm 1} \int d\vec{p} \Phi_{p,s,\mu}(\vec{r}, t) \Phi_{p,s,\nu}^\dagger(\vec{r}', 0). \quad (4.11)$$

Agora, vamos encontrar os termos $G_{\mu,v}(\vec{r}, \vec{r}', t)$ para $\mu, v = 1$ e 2 . A partir das Eq's. (4.9) e (4.11), teremos que:

$$G_{11}(\vec{r}, \vec{r}', t) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot \frac{1}{2\sqrt{2\pi\hbar}} \sum_{s=\pm 1} \int \left[\exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - i\frac{E_{p,s}^n t}{\hbar}\right) \right] \cdot \left[\exp\left(-i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar}\right) \right] d\vec{p} \quad (4.12)$$

$$G_{11}(\vec{r}, \vec{r}', t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \cdot \frac{1}{2} \int \left[\exp\left(i\frac{\vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')}{\hbar}\right) \right] \left[\sum_{s=\pm 1} \exp\left(-i\frac{E_{p,s}^n t}{\hbar}\right) \right] d\vec{p}, \quad (4.13)$$

como $E_{p,s}^n = sp^n/\gamma$, teremos

$$G_{11}(\vec{r}, \vec{r}', t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \cdot \frac{1}{2} \int \left[\exp\left(i\frac{\vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')}{\hbar}\right) \right] \left[\sum_{s=\pm 1} \exp\left(-i\frac{sp^n t}{\gamma\hbar}\right) \right] d\vec{p}. \quad (4.14)$$

Agora, podemos reescrever o somatório da Eq. (4.14) como sendo:

$$\sum_{s=\pm 1} \exp\left(-i\frac{sp^n t}{\gamma\hbar}\right) = \exp\left(-i\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) + \exp\left(i\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right), \quad (4.15)$$

ou simplesmente¹,

$$\sum_{s=\pm 1} \exp\left(-i\frac{sp^n t}{\gamma\hbar}\right) = \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) - i\text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) + \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) + i\text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \quad (4.16)$$

$$\sum_{s=\pm 1} \exp\left(-i\frac{sp^n t}{\gamma\hbar}\right) = 2\cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right). \quad (4.17)$$

Assim, substituindo a Eq. (4.17) na Eq. (4.13), teremos que:

$$G_{11}(\vec{r}, \vec{r}', t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \cdot \frac{1}{2} \int \left[\exp\left(i\frac{\vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')}{\hbar}\right) \right] \left[2\cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right] d\vec{p}, \quad (4.18)$$

$$G_{11}(\vec{r}, \vec{r}', t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int \exp\left[i\frac{\vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')}{\hbar}\right] \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p}. \quad (4.19)$$

¹Lembrando que $e^{i\theta} = \cos\theta + i\text{sen}\theta$.

De forma análoga, podemos obter $G_{22}(\vec{r}, \vec{r}', t)$, de tal forma que:

$$G_{22}(\vec{r}, \vec{r}', t) = G_{11}(\vec{r}, \vec{r}', t). \quad (4.20)$$

Por outro lado, para $G_{12}(\vec{r}, \vec{r}', t)$, teremos:

$$G_{12}(\vec{r}, \vec{r}', t) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot \frac{1}{2\sqrt{2\pi\hbar}} \sum_{s=\pm 1} \int \left[\exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - i\frac{E_{p,s}^n t}{\hbar}\right) \right] \cdot \left[\exp\left(-i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar}\right) \right] \cdot (se^{-in\phi}) d\vec{p} \quad (4.21)$$

$$G_{12}(\vec{r}, \vec{r}', t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \cdot \frac{1}{2} \int \left[\exp\left(i\frac{\vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')}{\hbar}\right) \right] \cdot \left[\sum_{s=\pm 1} s \cdot \exp\left(-i\frac{E_{p,s}^n t}{\hbar}\right) \right] \cdot e^{-in\phi} d\vec{p}, \quad (4.22)$$

como como $E_{p,s}^n = sp^n/\gamma$, teremos

$$G_{12}(\vec{r}, \vec{r}', t) = -\frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \cdot \frac{1}{2} \int \left[\exp\left(i\frac{\vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')}{\hbar}\right) \right] \cdot \left[\sum_{s=\pm 1} s \cdot \exp\left(-i\frac{sp^n t}{\gamma\hbar}\right) \right] \cdot e^{-in\phi} d\vec{p}, \quad (4.23)$$

Novamente, podemos escrever o somatório da Eq. (4.23) como:

$$\sum_{s=\pm 1} s \cdot \exp\left(-i\frac{sp^n t}{\gamma\hbar}\right) = \exp\left(-i\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) - \exp\left(i\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right), \quad (4.24)$$

$$\sum_{s=\pm 1} \exp\left(-i\frac{sp^n t}{\gamma\hbar}\right) = \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) - i\text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) - \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) - i\text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \quad (4.25)$$

$$\sum_{s=\pm 1} \exp\left(-i\frac{sp^n t}{\gamma\hbar}\right) = -2i\text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right). \quad (4.26)$$

Substituindo as Eq's. (4.7) e (4.26) na Eq. (4.23), teremos:

$$G_{12}(\vec{r}, \vec{r}', t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \cdot \frac{1}{2} \int \left[\exp\left(i\frac{\vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')}{\hbar}\right) \right] \left[-2i\text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right] \left(\frac{p_x - ip_y}{p}\right)^n d\vec{p}. \quad (4.27)$$

$$G_{12}(\vec{r}, \vec{r}', t) = \frac{-i}{(2\pi\hbar)^2} \int \exp\left[i\frac{\vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')}{\hbar}\right] \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \cdot \left(\frac{p_x - ip_y}{p}\right)^n d\vec{p}. \quad (4.28)$$

De forma análoga, podemos obter $G_{21}(\vec{r}, \vec{r}', t)$, de forma que

$$G_{21}(\vec{r}, \vec{r}', t) = \frac{-i}{(2\pi\hbar)^2} \int \exp\left[i\frac{\vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')}{\hbar}\right] \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \cdot \left(\frac{p_x + ip_y}{p}\right)^n d\vec{p}. \quad (4.29)$$

Note que $G_{12}(\vec{r}, \vec{r}', t)$, Eq. (4.28), difere de $G_{21}(\vec{r}, \vec{r}', t)$, Eq. (4.29), apenas pelo sinal negativo no termo $(p_x \mp ip_y/p)^n$.

Agora, vamos considerar que função de onda inicial será um pacote de onda gaussiano com largura d e momento não-nulo dado por $p_{0y} = \hbar k_0$

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{f(\vec{r})}{\sqrt{|C_1|^2 + |C_2|^2}} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}, \quad (4.30)$$

com $f(\vec{r})$ dado por

$$f(\vec{r}) = \frac{1}{d\sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{r^2}{2d^2} + ik_0y\right] \quad (4.31)$$

e os coeficientes C_1 e C_2 determinam a polarização inicial do pseudo-spin. Vamos supor que o pacote de onda com largura d seja muito maior do que o período da rede e consequentemente $\psi(\vec{r}, 0)$ será uma função suave. Vamos supor também que a maioria dos estados da banda de valência estão vazios, o que significa que a energia de Fermi está localizada longe do ponto de Dirac (para mais detalhes, consulte a Ref.[14]).

Agora, substituindo as Eq's. (4.30) e (4.31) na Eq. (4.10) e usando as Eq's. (4.19) e (4.28), teremos:

$$\psi_1(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{|C_1|^2 + |C_2|^2}} [C_1\phi_1(\vec{r}, t) + C_2\phi_3(\vec{r}, t)] \quad (4.32)$$

e

$$\psi_2(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{|C_1|^2 + |C_2|^2}} [C_2\phi_2(\vec{r}, t) + C_1\phi_4(\vec{r}, t)], \quad (4.33)$$

onde, por conveniência, $\phi_{1,2,3,4}(\vec{r}, t)$ representa as funções

$$\phi_1(\vec{r}, t) = \int G_{11}(\vec{r}, \vec{r}', t) f(\vec{r}', 0) d\vec{r}', \quad (4.34)$$

$$\phi_2(\vec{r}, t) = \int G_{12}(\vec{r}, \vec{r}', t) f(\vec{r}', 0) d\vec{r}' \quad (4.35)$$

$$\phi_3(\vec{r}, t) = \int G_{21}(\vec{r}, \vec{r}', t) f(\vec{r}', 0) d\vec{r}' \quad (4.36)$$

e

$$\phi_4(\vec{r}, t) = \int G_{22}(\vec{r}, \vec{r}', t) f(\vec{r}', 0) d\vec{r}'. \quad (4.37)$$

Como $G_{11}(\vec{r}, \vec{r}', t) = G_{22}(\vec{r}, \vec{r}', t)$, teremos que $\phi_1(\vec{r}, t) = \phi_4(\vec{r}, t)$. Logo, precisamos calcular apenas $\phi_1(\vec{r}, t)$, $\phi_2(\vec{r}, t)$ e $\phi_3(\vec{r}, t)$.

Substituindo as Eq's. (4.19) e (4.31) na Eq. (4.34), podemos obter ϕ_1 , assim:

$$\phi_1(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \cdot \frac{1}{d\sqrt{\pi}} \int \int \exp\left[i\frac{\vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')}{\hbar}\right] \cos\left(\frac{p^nt}{\gamma\hbar}\right) \cdot \exp\left[-\frac{r'^2}{2d^2} + ik_0y'\right] d\vec{p}d\vec{r}', \quad (4.38)$$

$$\phi_1(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \cdot \frac{1}{d\sqrt{\pi}} \int \int \exp\left[i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right] \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \cdot \exp\left[-i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar} - \frac{r'^2}{2d^2} + ik_0 y'\right] d\vec{p} d\vec{r}'. \quad (4.39)$$

Calculando primeiro a integral em \vec{r}' que chamaremos de $I_{\vec{r}'}$, teremos:

$$I_{\vec{r}'} = \int \exp\left[-i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar} - \frac{r'^2}{2d^2} + ik_0 y'\right] d\vec{r}', \quad (4.40)$$

$$I_{\vec{r}'} = \int \exp\left[-i\frac{(p_{x'}x' + p_{y'}y')}{\hbar} - \frac{(x'^2 + y'^2)}{2d} + ik_0\right] dx' dy' \quad (4.41)$$

$$I_{\vec{r}'} = \left\{ \int \exp\left[-\frac{x'^2}{2d^2} - i\frac{p_{x'}x'}{\hbar}\right] dx' \right\} \left\{ \int \exp\left[-\frac{y'^2}{2d^2} + \frac{i}{\hbar}(-p_{y'} + k_0\hbar)y'\right] dy' \right\}. \quad (4.42)$$

Novamente, vamos separar as integrais em duas. Dessa vez, chamaremos de $I_{y'}$ a integral na variável y' e $I_{x'}$ a integral na variável x' . Consultando a tabela de integrais disponível na Ref.[130], temos que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-p^2 a^2 \pm qa] da = \exp\left(\frac{q^2}{4p^2}\right) \frac{\sqrt{\pi}}{p}, \quad (4.43)$$

com $[\text{Re}(p^2) > 0]$. Desta forma, teremos que para $I_{x'}$:

$$I_{x'} = \int \exp\left[-\frac{x'^2}{2d^2} - i\frac{p_{x'}x'}{\hbar}\right] dx', \quad (4.44)$$

fazendo $p^2 = 1/2d^2$ e $q = ip_{x'}/\hbar$, teremos

$$I_{x'} = \exp\left[\frac{(ip_{x'}/\hbar)^2}{4(1/2d^2)}\right] \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{1/2d^2}}, \quad (4.45)$$

$$I_{x'} = \exp\left(\frac{-p_{x'}^2 d^2}{2\hbar^2}\right) d\sqrt{2\pi}. \quad (4.46)$$

De forma análoga, teremos para $I_{y'}$:

$$I_{y'} = \int \exp\left[-\frac{y'^2}{2d^2} + \frac{i}{\hbar}(-p_{y'} + k_0\hbar)y'\right] dx', \quad (4.47)$$

fazendo $p^2 = 1/2d^2$ e $q = i(-p_{y'} + k_0\hbar)/\hbar$, logo

$$I_{y'} = \exp\left[\frac{-(-p_{y'} + k_0\hbar)^2/\hbar^2}{4(1/2d^2)}\right] \frac{\sqrt{\pi}}{(1/d\sqrt{2})}, \quad (4.48)$$

$$I_{y'} = \exp\left[\frac{-(-p_{y'} + k_0\hbar)^2 d^2}{2\hbar^2}\right] d\sqrt{2\pi}. \quad (4.49)$$

Agora, vamos substituir as Eq's. (4.46) e (4.49) na Eq. (4.42):

$$I_{\vec{r}'} = \left[\exp\left(\frac{-p_{x'}^2 d^2}{2\hbar^2}\right) d\sqrt{2\pi} \right] \left\{ \exp\left[\frac{-(-p_{y'} + k_0\hbar)^2 d^2}{2\hbar^2}\right] d\sqrt{2\pi} \right\}, \quad (4.50)$$

$$I_{\vec{r}} = \exp\left(\frac{-p_{x'}^2 d^2}{2\hbar^2}\right) \exp\left[\frac{-(-p_{y'} + k_0 y')^2 d^2}{2\hbar^2}\right] 2\pi d^2, \quad (4.51)$$

$$I_{\vec{r}'} = \exp\left(\frac{-p_{x'}^2 d^2}{2\hbar^2}\right) \exp\left[\frac{-(p_{y'}^2 - 2p_{y'} k_0 \hbar + k_0^2 \hbar^2) d^2}{2\hbar^2}\right] 2\pi d^2, \quad (4.52)$$

$$I_{\vec{r}'} = \exp\left(\frac{-p_{x'}^2 d^2}{2\hbar^2}\right) \exp\left(-\frac{p_{y'}^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_{y'} k_0 d^2}{\hbar} - \frac{k_0^2 d^2}{2}\right) 2\pi d^2, \quad (4.53)$$

$$I_{\vec{r}'} = \exp\left[-\frac{(p_{x'}^2 + p_{y'}^2) d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_{y'} k_0 d^2}{\hbar} - \frac{k_0^2 d^2}{2}\right] 2\pi d^2, \quad (4.54)$$

$$I_{\vec{r}'} = \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_{y'} k_0 d^2}{\hbar} - \frac{k_0^2 d^2}{2}\right) 2\pi d^2. \quad (4.55)$$

Agora que já resolvemos a integral para a variável \vec{r}' , podemos substituir a Eq. (4.55) na Eq. (4.39), logo:

$$\begin{aligned} \phi_1(\vec{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \cdot \frac{1}{d\sqrt{\pi}} \int \exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \\ &\quad \cdot \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_{y'} k_0 d^2}{\hbar} - \frac{k_0^2 d^2}{2}\right) 2\pi d^2 d\vec{p}. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Como

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \cdot \frac{1}{d\sqrt{\pi}} \cdot 2\pi d^2 = \frac{d}{2\hbar^2\sqrt{\pi^3}} \quad (4.57)$$

e $\exp(-k_0^2 d^2/2)$ é apenas uma constante, finalmente, teremos que $\phi_1(\vec{r}, t)$ será:

$$\begin{aligned} \phi_1(\vec{r}, t) &= \frac{d}{2\hbar^2\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \\ &\quad \cdot \int \exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_{y'} k_0 d^2}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p}. \end{aligned} \quad (4.58)$$

De forma análoga, teremos que $\phi_2(\vec{r}, t)$, Eq. (4.37), será:

$$\phi_2(\vec{r}, t) = \int G_{12}(\vec{r}, \vec{r}', t) f(\vec{r}', 0) d\vec{r}'. \quad (4.59)$$

Substituindo as Eq's. (4.28) e (4.31) na Eq. (4.59), teremos:

$$\begin{aligned} \phi_2(\vec{r}, t) &= \frac{-i}{(2\pi\hbar)^2} \cdot \frac{1}{d\sqrt{\pi}} \int \int \left(\frac{p_x - ip_y}{p}\right)^n \exp\left[i\frac{\vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{\hbar}\right] \\ &\quad \cdot \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \exp\left[-\frac{r'^2}{2d^2} + ik_0 y'\right] d\vec{p} d\vec{r}'. \end{aligned} \quad (4.60)$$

$$\begin{aligned} \phi_2(\vec{r}, t) &= \frac{-i}{(2\pi\hbar)^2} \cdot \frac{1}{d\sqrt{\pi}} \int \int \left(\frac{p_x - ip_y}{p}\right)^n \exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \\ &\quad \cdot \exp\left[i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar} - \frac{r'^2}{2d^2} + ik_0 y'\right] d\vec{r}' d\vec{p}. \end{aligned} \quad (4.61)$$

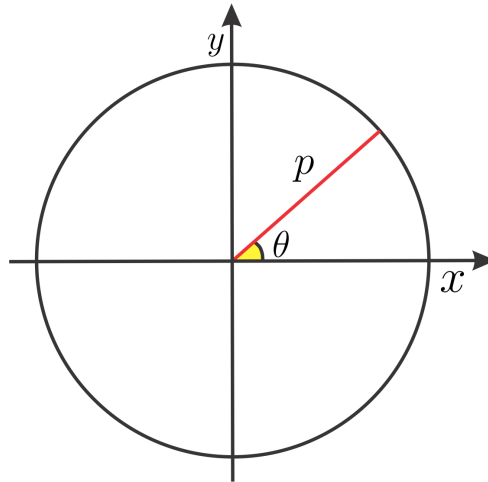


Figura 4.1: Coordenadas cilíndricas. O raio do círculo é dado por p e o ângulo que o mesmo forma com o eixo- x é dado por θ .

Como sabemos, a integral na variável \vec{r}' é dado pela Eq. (4.55), logo:

$$\phi_2(\vec{r}, t) = \frac{-i}{(2\pi\hbar)^2} \cdot \frac{1}{d\sqrt{\pi}} \int \left(\frac{p_x - ip_y}{p} \right)^n \exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \cdot \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar} - \frac{k_0^2 d^2}{2}\right) 2\pi d^2 d\vec{p}, \quad (4.62)$$

$$\phi_2(\vec{r}, t) = \frac{-id}{2\hbar^2\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \int \left(\frac{p_x - ip_y}{p} \right)^n \cdot \exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar} - \frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p}. \quad (4.63)$$

Agora, vamos fazer algumas substituições de variáveis e utilizar coordenadas cilíndricas, Fig. 4.1, a fim de reescrever as Eq. (4.58) e (4.63) em termos das funções de Bessel. Deste forma, teremos que:

$$a = k_0 d, \quad (4.64)$$

$$q^2 = \frac{p^2 d^2}{\hbar^2} \rightarrow q dq = \frac{p d^2}{\hbar^2} dp \quad (4.65)$$

e

$$\vec{p} = (p\cos\theta, p\text{sen}\theta). \quad (4.66)$$

Por questões de conveniência, vamos considerar as seguintes variáveis adimensionais:

$$t \rightarrow t' = \frac{\hbar^{n-1} t}{\gamma d^n}, \quad (4.67)$$

onde n é o número de camadas,

$$x \rightarrow x' = \frac{x}{d}, \quad (4.68)$$

$$y \rightarrow y' = \frac{y}{d}, \quad (4.69)$$

e

$$r \rightarrow r' = \frac{r}{d}. \quad (4.70)$$

Desta forma, substituindo as Eq's. (4.64) e (4.66) no termo $p_{y'}k_0d^2/\hbar$, teremos:

$$\frac{p_{y'}k_0d^2}{\hbar} = \frac{(psen\theta)(a)d}{\hbar}, \quad (4.71)$$

como $q = pd/\hbar$, Eq. (4.65), logo:

$$\frac{p_{y'}k_0d^2}{\hbar} = qasen\theta. \quad (4.72)$$

Agora, vamos substituir $q = pd/\hbar$, que pode ser obtido a partir da Eq. (4.65), no termo $q^{n't'}$, logo:

$$q^{n't'} = \left(\frac{pd}{\hbar}\right)^n t', \quad (4.73)$$

substituindo a Eq. (4.67) na Eq. (4.73), vamos ter

$$q^{n't'} = \left(\frac{pd}{\hbar}\right)^n \frac{\hbar^{n-1}t}{\gamma d^n}, \quad (4.74)$$

$$q^{n't'} = \frac{p^n t}{\gamma \hbar}. \quad (4.75)$$

Logo, teremos

$$\exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) = \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right), \quad (4.76)$$

onde utilizamos $a = k_0d$, Eq. (4.67), e

$$\exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_{y'}k_0d^2}{\hbar}\right) = \exp\left(i\frac{(p_x x + p_y y)}{\hbar} - \frac{q^2}{2} + qasen\theta\right), \quad (4.77)$$

onde, dessa vez, utilizamos o fato de que $q = pd/\hbar$, que pode ser obtido a partir da Eq. (4.65) e a Eq. (4.72).

Como

$$p_x x + p_y y = p \cos\theta x' d + p \sin\theta y' d \quad (4.78)$$

$$p_x x + p_y y = pd(x' \cos\theta + y' \sin\theta), \quad (4.79)$$

e $pd = q\hbar$, Eq. (4.65), então

$$p_x x + p_y y = q\hbar(x' \cos\theta + y' \sin\theta). \quad (4.80)$$

Substituindo a Eq. (4.80) na Eq. (4.77), teremos

$$\exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} - \frac{p_{y'}k_0d^2}{\hbar}\right) = \exp\left(iq(x' \cos\theta + y' \sin\theta) - \frac{q^2}{2} + qasen\theta\right). \quad (4.81)$$

A Eq. (4.81) é exatamente a exponencial que aparece na integral de $\phi_1(\vec{r}, t)$. Assim, substituindo as Eq's. (4.73), (4.76) e (4.81) na Eq. (4.58), e sabendo que $d\vec{p} = (\hbar^2/d^2) qdq d\theta$, podemos concluir que

$$\phi_1(\vec{r}, t) = \frac{1}{2d\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \int \int \exp\left[iq(x'\cos\theta + y'\sin\theta) - \frac{q^2}{2} + qas\sin\theta\right] \cos(q^n t') qdq d\theta, \quad (4.82)$$

onde

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{p} \rightarrow \int_0^{\infty} qdq \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta. \quad (4.83)$$

Finalmente, teremos

$$\phi_1(\vec{r}, t) = \frac{e^{-a^2/2}}{2d\sqrt{\pi^3}} \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{q^2}{2}\right) \cos(q^n t') \cdot \int_{-\pi}^{+\pi} \exp\left[iq(x'\cos\theta + y'\sin\theta) + qas\sin\theta\right] d\theta qdq. \quad (4.84)$$

De forma análoga, a Eq. (4.63) poderá ser reescrita como

$$\phi_2(\vec{r}, t) = \frac{-i}{2d\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \int \int \left(\frac{ip_x + ip_y}{p}\right)^n \cdot \exp\left[iq(x'\cos\theta + y'\sin\theta) - \frac{q^2}{2} + qas\sin\theta\right] \sin(q^n t') qdq d\theta, \quad (4.85)$$

$$\phi_2(\vec{r}, t) = \frac{-i}{2d\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{q^2}{2}\right) \sin(q^n t') \int_{-\pi}^{+\pi} e^{in\theta} \cdot \exp\left[iq(x'\cos\theta + y'\sin\theta) + qas\sin\theta\right] d\theta qdq. \quad (4.86)$$

Nesta parte, vamos primeiramente resolver a integral da Eq. (4.84) dada por

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \exp\left[iq[x'\cos\theta + (y' - ia)\sin\theta]\right] d\theta. \quad (4.87)$$

Vamos considerar a transformação usando um vetor complexo dado por: $z = (x', (y' - ia))$. Assim, podemos escrever z como

$$z = x' + i[(y' - ia)] \quad (4.88)$$

$$z = x' + iy' + a, \quad (4.89)$$

onde o módulo de z será dado por

$$|z| = \sqrt{r^2 - a^2 - 2ia y'}. \quad (4.90)$$

Uma outra transformação ainda será necessária, dessa vez, vamos considerar

$$x' \cos \theta + (y' - ia) \operatorname{sen} \theta = |z| \operatorname{sen} \alpha, \quad (4.91)$$

com

$$x' = |z| \cos \beta \quad \text{e} \quad (y' - ia) = |z| \operatorname{sen} \beta, \quad (4.92)$$

de modo que

$$\cos \beta \cos \theta + \operatorname{sen} \beta \operatorname{sen} \theta = \cos [(\pi/2) - \alpha]. \quad (4.93)$$

Utilizando a identidade trigonométrica $\cos(\beta - \theta) = \cos \beta \cos \theta + \operatorname{sen} \beta \operatorname{sen} \theta$ e o fato que $\operatorname{sen} \alpha = \cos(\pi/2 - \alpha)$, então teremos

$$\cos(\beta - \theta) = \cos\left(\frac{\pi}{2} - \alpha\right), \quad (4.94)$$

o que implica que

$$\beta - \theta = \frac{\pi}{2} - \alpha, \quad (4.95)$$

$$\alpha = \frac{\pi}{2} + \theta - \beta, \quad (4.96)$$

e

$$d\alpha = d\theta. \quad (4.97)$$

Multiplicando a Eq. (4.91) por iq teremos exatamente o integrando da Eq. (4.87) e como $d\theta = d\alpha$, teremos

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \exp[iq[x' \cos \theta + (y' - ia) \operatorname{sen} \theta]] d\theta = \int_{-\frac{\pi}{2}-\beta}^{\frac{3\pi}{2}-\beta} \exp[iq|z| \operatorname{sen} \alpha] d\alpha. \quad (4.98)$$

Da Ref.[130], temos que

$$J_n(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} e^{-ni\theta + iz \operatorname{sen} \theta} d\theta \quad (4.99)$$

$$J_n(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(n\theta - z \operatorname{sen} \theta) d\theta, \quad \text{com } n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.100)$$

Onde $J_n(z)$ é a função de Bessel de índice n . Utilizando a Eq. (4.98) e Eq. (4.100) podemos concluir que

$$\int_{-\frac{\pi}{2}-\beta}^{\frac{3\pi}{2}-\beta} \exp(i|z| \operatorname{sen} \alpha) d\alpha = 2\pi J_0(|z|) = 2\pi J_0\left(q\sqrt{r^2 - a^2 - 2ia y'}\right). \quad (4.101)$$

Como a Eq. (4.101) é equivalente a Eq. (4.87), podemos substituí-la na Eq. (4.84) e escrever $\phi_1(\vec{r}, t)$ como:

$$\phi_1(\vec{r}, t) = \frac{1}{2d\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \int_0^\infty \exp\left(-\frac{q^2}{2}\right) \cos(q^n t') \cdot 2\pi J_0\left(q\sqrt{r^2 - a^2 - 2ia y'}\right) q dq, \quad (4.102)$$

$$\phi_1(\vec{r}, t) = \frac{e^{-a^2/2}}{d\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{q^2}{2}\right) \cos(q^n t') \cdot J_0\left(q\sqrt{r^2 - a^2 - 2ia y'}\right) q dq. \quad (4.103)$$

Agora, vamos resolver a integral em θ da Eq. (4.86) dada por

$$\int_{-\pi}^{+\pi} e^{in\theta} \exp\{iq[x'\cos\theta + (y' - ia)\sin\theta]\} d\theta = \int_{-\frac{\pi}{2}-\beta}^{\frac{3\pi}{2}-\beta} e^{in\theta} \exp(i|z|\sin\alpha) d\alpha. \quad (4.104)$$

Reescrevendo $e^{in\theta}$ para que fique em função de α , teremos:

$$e^{in\theta} = e^{in(\alpha-\pi/2+\beta)} = e^{in\alpha} \cdot e^{-in\pi/2} \cdot e^{in\beta} \quad (4.105)$$

Por outro lado

$$e^{-in\pi/2} = \cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) - i\operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{2}\right) = (-i)^n \quad (4.106)$$

e

$$e^{in\beta} = (e^{i\beta})^n = (\cos\beta + i\operatorname{sen}\beta)^n, \quad (4.107)$$

utilizando x' e y' da Eq. (4.92), teremos

$$e^{in\beta} = \left[\frac{x'}{|z|} + i \frac{(y' - ia)}{|z|} \right], \quad (4.108)$$

$$e^{in\beta} = \left[\frac{x' + a + iy'}{\sqrt{r^2 - a^2 - 2ia y'}} \right]^n. \quad (4.109)$$

onde usamos $|z| = \sqrt{r^2 - a^2 + 2ia y'}$, Eq. (4.90). Então, a partir das Eq's. (4.105), (4.106) e (4.109), a integral da Eq. (4.104) será

$$\int_{-\pi}^{+\pi} e^{in\theta} \cdot \exp(i|z|\sin\alpha) d\alpha = (-i)^n \left[\frac{x' + a + iy'}{\sqrt{r^2 - a^2 - 2ia y'}} \right]^n \cdot \int_{-\pi}^{+\pi} \exp(in\alpha + i|z|\sin\alpha) d\alpha. \quad (4.110)$$

Utilizando a Eq. (4.100) novamente, teremos

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \exp(in\alpha + i|z|\sin\alpha) d\alpha = 2\pi J_{-n}(|z|). \quad (4.111)$$

Substituindo a Eq. (4.111) na Eq. (4.110) e utilizando a propriedade que relaciona $J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x)$, podemos concluir que

$$\int_{-\frac{\pi}{2}-\beta}^{\frac{3\pi}{2}-\beta} e^{in\theta} \cdot \exp(i|z|\sin\alpha) d\alpha = 2\pi (i)^n \left[\frac{x' + a + iy'}{\sqrt{r^2 - a^2 - 2ia y'}} \right]^n \cdot J_n\left(q\sqrt{r^2 - a^2 + 2ia y'}\right). \quad (4.112)$$

Como a Eq. (4.112) é equivalente a Eq. (4.104), podemos substituí-la na Eq. (4.86) e escrever $\phi_2(\vec{r}, t)$ como:

$$\phi_2(\vec{r}, t) = \frac{-i}{d\sqrt{\pi^3}} \left[\frac{ix' - y' + ia}{\sqrt{r^2 - a^2 + 2ia y'}} \right]^n \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \cdot \int_0^\infty \exp\left(-\frac{q^2}{2}\right) \text{sen}(q^n t') 2\pi J_n\left(q\sqrt{r^2 - a^2 - 2ia y'}\right) q dq, \quad (4.113)$$

$$\phi_2(\vec{r}, t) = \frac{-ie^{-a^2/2}}{d\sqrt{\pi}} \left[\frac{ix' - y' + ia}{\sqrt{r^2 - a^2 - 2ia y'}} \right]^n \cdot \int_0^\infty \exp\left(-\frac{q^2}{2}\right) \text{sen}(q^n t') J_n\left(q\sqrt{r^2 - a^2 - 2ia y'}\right) q dq. \quad (4.114)$$

De forma análoga ao que foi descrito anteriormente, podemos concluir que $\phi_3(\vec{r}, t) = -\phi_2(-x, y, t)$.

Logo, para o caso geral no qual temos n -camadas de grafeno, as funções de onda serão dadas pelas Eq's. (4.32) e (4.33), com $\phi_1(\vec{r}, t)$ e $\phi_2(\vec{r}, t)$ iguais a Eq. (4.103) e Eq. (4.114), respectivamente.

4.2.2 Monocamada de grafeno

Como a solução obtida na seção anterior possui caráter geral, podemos obter o Hamiltoniano e as funções de onda das sub-redes A e B para monocamada de grafeno de forma bem simples. Para isto, precisamos apenas fazer $n = 1$ na Eq. (4.3), ou seja:

$$H_1(k) = \hbar v_f k \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi} \\ e^{i\phi} & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.115)$$

Por outro lado, as funções de onda serão dadas pelas Eq's. (4.32) e (4.33) com

$$\phi_1(\vec{r}, t) = \frac{e^{-a^2/2}}{d\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-q^2/2} \cos(q^n t') J_0\left(q\sqrt{r^2 - a^2 - 2ia y'}\right) q dq \quad (4.116)$$

e

$$\phi_2(\vec{r}, t) = \frac{-ie^{-a^2/2}}{d\sqrt{\pi}} \left[\frac{ix' - y' + ia}{\sqrt{r^2 - a^2 - 2ia y'}} \right] \cdot \int_0^\infty e^{-q^2/2} \text{sen}(qt') J_1\left(q\sqrt{r^2 - a^2 - 2ia y'}\right) q dq. \quad (4.117)$$

onde fizemos $n = 1$ nas Eq's. (4.103) e Eq. (4.114).

Uma vez que já conhecemos as funções de onda, podemos obter os valores médios das coordenadas do centro do pacote utilizando a seguinte equação:

$$\langle \vec{r}(t) \rangle = \sum_{j=1}^2 \int \overline{\psi_j}^\dagger(\vec{p}, t) \left[i\hbar \vec{\nabla}_p \right] \overline{\psi_j}(\vec{p}, t) d\vec{p}. \quad (4.118)$$

Para verificar a existência do movimento trêmulo vamos utilizar a Tab.(4.1) como referência e as mesmas configurações iniciais do pseudo-spin, ou seja: (i) $C_1 = 1$ e $C_2 = 0$, (ii) $C_1 = 1$ e $C_2 = 1$ e (iii) $C_1 = 1$ e $C_2 = i$. O apêndice 6 desta dissertação mostra de forma detalhada como essas médias podem ser obtidas.

Para o caso (i), teremos que $\langle y(t) \rangle = 0$ e utilizando as Eq's. (4.32), (4.33), (4.116) e (4.117), podemos facilmente concluir que

$$\langle \tilde{x}(t) \rangle = \frac{1 - e^{-a^2}}{2a} - e^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} \cos(2qt') I_1(2aq) dq, \quad (4.119)$$

onde é simplesmente $\langle \tilde{x}(t) \rangle = \langle x(t) \rangle / d$.

Por outro lado, para o caso (ii), teremos novamente $\langle y(t) \rangle = 0$ e desta vez

$$\langle \tilde{x}(t) \rangle = \left(\frac{1 - e^{-a^2}}{2a^2} \right) t' + \frac{e^{-a^2}}{2a} \int_0^\infty e^{-q^2} \sin(2qt') \left[\frac{d}{dq} I_1(2aq) \right] dq. \quad (4.120)$$

Por fim, para (iii), teremos $\langle x(t) \rangle = 0$ e

$$\langle \tilde{y}(t) \rangle = \left(1 - \frac{1}{2a^2} + \frac{e^{-a^2}}{2a^2} \right) t' + \frac{e^{-a^2}}{2a} \int_0^\infty e^{-q^2} \sin(2qt') \frac{I_1(2aq)}{q} dq, \quad (4.121)$$

com $\langle \tilde{y}(t) \rangle = \langle y(t) \rangle / d$. Para os três casos, as integrais que surgem nas Eq's (4.119), (4.120) e (4.121) correspondem ao movimento trêmulo.

4.2.3 Bicamada de grafeno

Para a bicamada de grafeno, Fig. 3.3(a), teremos que o hamiltoniano será dado pela Eq. (4.3) quando $n = 2$, ou seja:

$$H_2(k) = \frac{(\hbar v_f k)^2}{\gamma_1} \begin{pmatrix} 0 & e^{-2i\phi} \\ e^{2i\phi} & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.122)$$

Neste caso, as funções de onda $\psi_1(\vec{r}, t)$ e $\psi_2(\vec{r}, t)$ serão dadas pelas Eq's. (4.32) e Eq. (4.33) com

$$\phi_1(\vec{r}, t) = \frac{e^{-a^2/2}}{d\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-q^2} \cos(q^n t') J_0\left(q\sqrt{r^2 - a^2 - 2ia y'}\right) \quad (4.123)$$

e

$$\begin{aligned} \phi_2(\vec{r}, t) = \frac{-ie^{-a^2/2}}{d\sqrt{\pi}} & \left[\frac{ix' - y' + ia}{\sqrt{r^2 - a^2 - 2ia y'}} \right]^2 \\ & \cdot \int_0^\infty \exp\left(-\frac{q^2}{2}\right) \sin(q^2 t') J_2\left(q\sqrt{r^2 - a^2 - 2ia y'}\right) q dq. \end{aligned} \quad (4.124)$$

Para o caso (i), teremos que $\langle y(t) \rangle = 0$ e utilizando as Eq's. (4.32), (4.33), (4.123) e (4.124), podemos facilmente concluir que

$$\langle \tilde{x}(t) \rangle = \frac{1 - e^{-a^2}}{a} - 2e^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} \cos(2q^2 t') I_1(2aq) dq. \quad (4.125)$$

Por outro lado, para o caso (ii), teremos novamente $\langle x(t) \rangle = 0$ e desta vez

$$\begin{aligned} \langle \tilde{y}(t) \rangle = & -ae^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} \left[q \text{sen}(2q^2 t') \cdot {}_0\tilde{F}_1[3, a^2 q^2] \right] dq - 4e^{-a^2} t' \int_0^\infty e^{-q^2} [q^2 I_1(2aq)] dq \\ & - \frac{4e^{-a^2}}{a} t' \int_0^\infty e^{-q^2} [q I_2(2aq)] dq, \end{aligned} \quad (4.126)$$

onde ${}_0\tilde{F}_1[b, z]$ são as funções hipergeométricas confluentes.

Por fim, para (iii), teremos $\langle y(t) \rangle = 0$ e

$$\begin{aligned} \langle y(t) \rangle = & 2de^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} [\text{sen}(2q^2 t') I_1(2aq)] dq \\ & - \frac{2de^{-a^2}}{a} \int_0^\infty e^{-q^2} \left[\frac{\text{sen}(2q^2 t') I_2(2aq)}{q} \right] dq \end{aligned} \quad (4.127)$$

e, considerando $\langle \tilde{x}(t) \rangle = \langle x(t) \rangle / d$,

$$\begin{aligned} \langle \tilde{x}(t) \rangle = & 2e^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} [\text{sen}(2q^2 t') I_1(2aq)] dq \\ & - \frac{2e^{-a^2}}{a} \int_0^\infty e^{-q^2} \left[\frac{\text{sen}(2q^2 t') I_2(2aq)}{q} \right] dq. \end{aligned} \quad (4.128)$$

4.3 Solução numérica: split-operator

Na representação Schrödinger, podemos descrever a dinâmica de uma partícula utilizando o operador de evolução temporal $\hat{U}(t, t_0)$. Considerando que o estado inicial seja representado por $\psi(\vec{r}, t_0)$, podemos obter o estado para um tempo posterior ($t > 0$) a partir de

$$\psi(\vec{r}, t) = \hat{U}(t, t_0) \psi(\vec{r}, t_0). \quad (4.129)$$

Para o caso no qual o Hamiltoniano não dependa explicitamente do tempo, teremos que o operador de evolução temporal poderá ser escrito como [132]:

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} H(t - t_0) \right]. \quad (4.130)$$

No modelo TB, podemos considerar os sítios atômicos como sendo um rede de poços de potencial em cada sítio que podem confinar um elétron, o qual possui probabilidade não-nula de tunelar de um poço a um outro primeiro vizinho.

Primeiramente, vamos considerar o caso em que temos uma linha periódica de átomos. Este sistema pode ser representado por uma rede unidimensional de poços quânticos. Considerando que as barreiras entre os poços possuem altura infinita, o elétron teria probabilidade zero de tunelar, e chamando o Hamiltoniano deste sistema de H_∞ , temos $H_\infty |\psi_i\rangle = E_0 |\psi_i\rangle$, ou seja, um elétron preso no i -ésimo poço é um autoestado do sistema, com energia do estado fundamental do poço E_0 , para qualquer valor de i . Mas se a

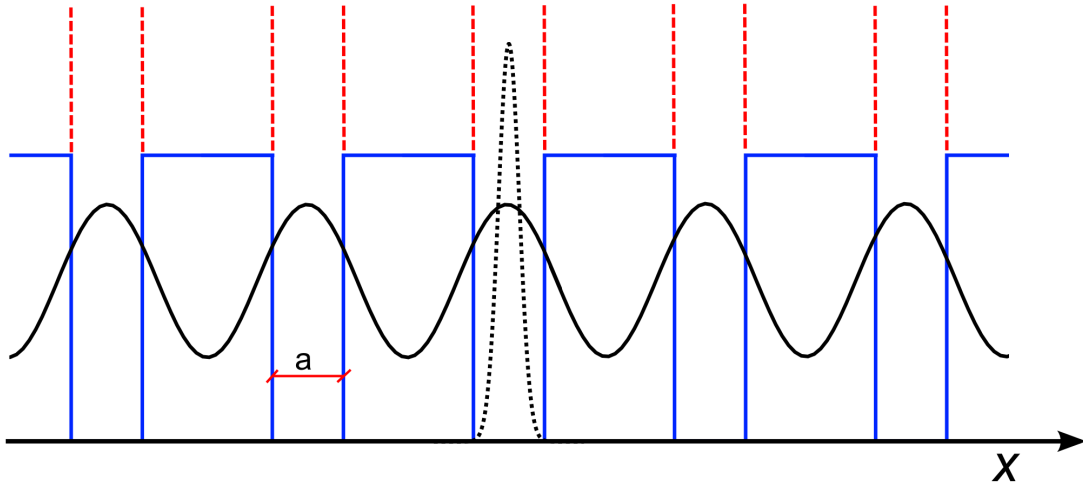


Figura 4.2: Poços de potenciais periódicos com largura a representando uma linha de átomos. Quando o potencial é infinito (vermelho), a probabilidade do elétron tunelar é zero, logo, a função de onda fica confinada apenas dentro do poço. Por outro lado, se o poço de potencial for finito (cor azul) o elétron terá probabilidade não-nula de tunelar de um poço a outro.

barreira entre os poços for finita (Fig.4.2), haverá uma probabilidade não-nula do elétron tunelar, de forma que não podemos mais garantir que $|\psi_i\rangle$ seja um autoestado do sistema. Porém, podemos estimar que aplicando-se H sobre $|\psi_i\rangle$, onde H é o Hamiltoniano do sistema com poços finitos, obtemos uma aproximação:

$$H |\psi_i\rangle = \dots + \tau_{i-1} |\psi_{i-1}\rangle + E_0 |\psi_i\rangle + \tau_{i+1} |\psi_{i+1}\rangle + \dots \quad (4.131)$$

onde τ_i representa a energia de *hopping* do elétron entre os poços i e j . Note que os estados $|\psi_i\rangle$, com $i = 1, 2, 3, \dots$, onde $|\psi_i\rangle$ representa um elétron confinado em cada poço, são ortogonais, pois no caso em que tínhamos poços infinitos, um elétron não poderia ocupar dois sítios simultaneamente. Logo, estes estados formam uma base ortonormal, de forma que podemos escrever qualquer estado do sistema com potencial finito, como $|\Psi\rangle = \sum_i a_i |\psi_i\rangle$. As autoenergias e os coeficientes a_i dos seus autoestados podem ser determinados escrevendo-se H nesta base e diagonalizando-o. Mas, como a Eq. (4.131) possui infinitos termos, essa diagonalização seria extremamente trabalhosa. Uma saída para contornar esta dificuldade, é levar em conta o *hopping* apenas para os primeiros vizinhos na Eq. (4.131) e descartar todos os outros. Assim, o Hamiltoniano será:

$$H |\psi_i\rangle \approx \tau_{i-1} |\psi_{i-1}\rangle + E_0 |\psi_i\rangle + \tau_{i+1} |\psi_{i+1}\rangle. \quad (4.132)$$

Logo, se tivermos a base $|\Psi\rangle = \sum_i a_i |\psi_i\rangle$, o Hamiltoniano H pode ser escrito como

uma matriz tridiagonal esparsa²:

$$H \approx H_{TB} = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \ddots & E_0 & \tau_{i-1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tau_{i-1} & E_0 & \tau_i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tau_i & E_0 & \tau_{i+1} & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \tau_{i+1} & E_0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (4.133)$$

Como o nosso problema de interesse é bidimensional, temos que reescrever o H_{TB} , Eq. (4.132), em duas dimensões. Para isso, basta considerar dois índices i e j , ao invés de apenas um i , para que se possa definir a posição atômica de maneira única. Se tomarmos a rede retangular da Fig. 3.1, i representaria a linha e j a coluna, por exemplo. Dessa forma, a Eq. (4.132) se torna:

$$H |\psi_{i,j}\rangle \approx +E_0 |\psi_{i,j}\rangle + \tau_{(i-1),j} |\psi_{(i-1),j}\rangle + \tau_{(i+1),j} |\psi_{(i+1),j}\rangle \\ + \tau_{i,(j-1)} |\psi_{i,(j-1)}\rangle + \tau_{i,(j+1)} |\psi_{i,(j+1)}\rangle. \quad (4.134)$$

Essa nova matriz, diferentemente da matriz unidimensional dado pela Eq. (4.132), irá conter cinco diagonais não nulas, ou seja, será uma matriz pentadiagonal esparsa, a qual podemos separar em blocos, como mostra a Fig.4.3. Note que cada termo das diagonais secundárias da matriz da Fig. 4.3 representa a ligação entre um átomo e seus vizinhos superior e inferior (com i 's diferentes), no caso das azuis, e da direita e esquerda (com j 's diferentes), no caso das vermelhas. Como as ligações para a direita e esquerda ocorrem de forma alternada (ver Fig. 4.4), as subdiagonais vermelhas terão valores nulos e não nulos de forma alternada.

Finalmente, desenvolveremos agora o método *split-operator* para sistemas descritos por Hamiltonianos do tipo TB em duas dimensões. De acordo com o procedimento desenvolvido no início desta seção, vamos mostrar como simplificar o problema no qual temos matrizes pentadiagonal em um problema no qual teremos matrizes tridiagonais. Logo, podemos reescrever a Eq. (4.134) como

$$H |\psi_{i,j}\rangle = H_i |\psi_{i,j}\rangle + H_j |\psi_{i,j}\rangle, \quad (4.135)$$

onde H_i e H_j são dados por

$$H_i |\psi_{i,j}\rangle = \left(\frac{E_0 + V_{i,j}}{2} \right) |\psi_{i,j}\rangle + \tau_{i,j-1} |\psi_{i,j-1}\rangle + \tau_{i,j+1} |\psi_{i,j+1}\rangle \quad (4.136)$$

e

$$H_j |\psi_{i,j}\rangle = \left(\frac{E_0 + V_{i,j}}{2} \right) |\psi_{i,j}\rangle + \tau_{i-1,j} |\psi_{i-1,j}\rangle + \tau_{i+1,j} |\psi_{i+1,j}\rangle. \quad (4.137)$$

²Matrizes esparsas, são matrizes nas quais a maioria das posições são iguais a zero. Neste tipo de estrutura, armazena-se apenas os valores significativos, afim de se obter um melhor desempenho na execução do cálculo numérico.

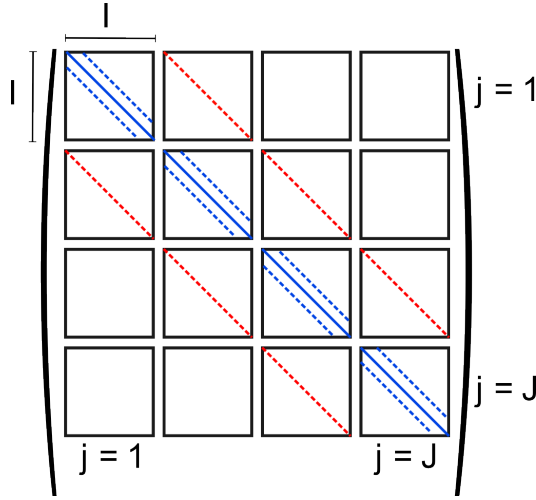


Figura 4.3: Estrutura da matriz pentadiagonal correspondente ao modelo *tight-binding* para uma rede bidimensional-2D. A diagonal principal (linha contínua azul) e a sub-diagonal pontilhada azul possuem todos os termos diferentes de zero, enquanto que a sub-diagonal pontilhada vermelha possuem termos não-nulos e zeros de forma intercalada. Todos os outros elementos fora dessas diagonais são nulos. Cada bloco representa uma matriz quadrada de ordem I , o número de linhas dos sítios da rede. O número de colunas dos sítios da rede, define o número de blocos (J). Logo, o número total de elementos na matriz H_{TB} em duas dimensões será: $I \times I \times J \times J$.

Da Ref.[24], podemos escrever o operador evolução temporal da seguinte forma

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right] = \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}H_j\Delta t\right] \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H_i\Delta t\right] \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}H_j\Delta t\right] + \mathcal{O}(\Delta t^3), \quad (4.138)$$

onde o erro vem da não comutatividade entre os operadores H_i e H_j [133].

Assim, a função de onda para um tempo infinitesimalmente posterior será dado por

$$|\psi_{i,j}\rangle_{t+\Delta t} \cong \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}H_j\Delta t\right] \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H_i\Delta t\right] \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}H_j\Delta t\right] |\psi_{i,j}\rangle_t. \quad (4.139)$$

A Eq. (4.139) pode ser resolvida em três passos, como se segue

$$\eta_{i,j} = \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}H_j\Delta t\right] |\psi_{i,j}\rangle_t, \quad (4.140)$$

$$|\psi_{i,j}\rangle_{t+\Delta t} = \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}H_j\Delta t\right] \xi_{i,j} \quad (4.141)$$

e

$$\eta_{i,j} = \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}H_j\Delta t\right] |\psi_{i,j}\rangle_t. \quad (4.142)$$

Utilizando a forma de Cayley³ para exponenciais, podemos reescrever a Eq's. (4.140), (4.141) e (4.142) como

$$\left(1 + \frac{i}{4\hbar}H_j\Delta t\right) \eta_{i,j} = \left(1 - \frac{i}{4\hbar}H_j\Delta t\right) |\psi_{i,j}\rangle_t, \quad (4.143)$$

³ $\exp\left[\epsilon\hat{A}\right] = \left[1 - \frac{\epsilon\hat{A}}{2}\right]^{-1} \left[1 + \frac{\epsilon\hat{A}}{2}\right] + \mathcal{O}(\epsilon^4)$

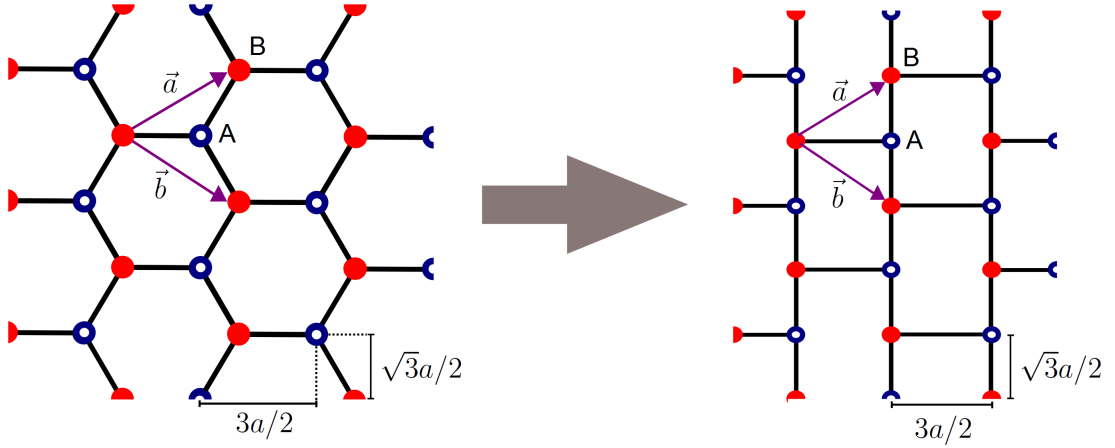


Figura 4.4: Mapeamento da rede hexagonal em uma rede retangular. Equivalência topológica: cada sítio possui outros três primeiros vizinhos, a área das rede são iguais a $3\sqrt{3}a^2/2$ e os vetores unitários que geram as sub-redes são equivalentes para as duas redes.

$$\left(1 + \frac{i}{4\hbar}H_i\Delta t\right)\xi_{i,j} = \left(1 - \frac{i}{4\hbar}H_i\Delta t\right)\eta_{i,j}, \quad (4.144)$$

e

$$\left(1 + \frac{i}{4\hbar}H_j\Delta t\right)|\psi_{i,j}\rangle_{t+\Delta t} = \left(1 - \frac{i}{4\hbar}H_j\Delta t\right)\xi_{i,j}. \quad (4.145)$$

Assim, teremos apenas matrizes tridiagonais em nosso problema.

Para tratar o problema da evolução do pacote de onda gaussiano em monocamada de grafeno, consideramos uma rede 2000×3601 átomos, com bordas *armchair* (*zigzag*) na direção x (y). O parâmetro de *hopping* e a distância entre os átomos de carbono foram considerados iguais a $\tau = -2.7$ eV e $a = 1.42$ Å, respectivamente.

Para o pacote de onda inicial, foi utilizado uma função gaussiana centrada em $\vec{r} = (x_0, y_0)$ no espaço real e $\vec{q} = (q_0^x, q_0^y)$ no espaço recíproco:

$$\psi_q(\vec{r}) = N \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \text{Exp} \left[-\frac{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}{2d^2} + i\vec{q} \cdot \vec{r} \right], \quad (4.146)$$

onde N é o fator de normalização e d é um parâmetro correspondente a largura da gaussiana. Veja que incluímo um pseudo-spinor $[C_1, C_2]^T$ no pacote de onda inicial e, como já dito anteriormente, C_1 e C_2 representando a probabilidade de encontrar o elétron na sub-rede A ou B , respectivamente. Em relação ao pseudo-spin, podemos reescrevê-lo como $[1, e^{i\theta}]^T$, de forma que o ângulo θ de polarização do pseudo-spin é mostrado de forma explícita.

Ao utilizar o modelo TB, consideramos o pacote de onda inicial com uma forma discreta dado pela Eq. (4.146) para a rede favo-de-mel do grafeno, onde multiplicamos a gaussiana por C_1 (C_2) nos sítios das sub-redes A (B) e o vetor de onda inicial dado por $\vec{q} = (k_0^x, k_0^y) + \vec{K}$ (ou seja, na vizinhança do ponto \vec{K}). Uma observação a ser feita é que temos que ficar bastante atento com a escolha do valor do produto $k_0^y d$. Na verdade, precisamos

escolher um k_0^i bem próximo ao cone de Dirac, uma vez que a relação de dispersão para o modelo TB deixa de ser linear para valores mais altos, diferenciando-se do modelo analítico utilizado, bem como escolher valores grandes para o parâmetro d . Enquanto que no modelo de Dirac, a relação de dispersão será sempre linear, de forma que podemos escolher valores do parâmetro a sem nos preocuparmos com o produto $k_0^i d$ [22].

Como o objetivo será comparar o modelo numérico (TB) com o analítico (Dirac) é importante também notar que, por exemplo, para o ponto $\vec{K} = (0, 4\pi/3\sqrt{3}a_0)$, o Hamiltoniano de Dirac é obtido rotacionando-se os eixos por um ângulo de 90° , o que significa que as coordenadas serão transformadas da seguinte forma: $x \rightarrow -y$ e $y \rightarrow x$. Como se trata apenas de uma redefinição, vamos considerar que as coordenadas x e y serão as mesmas para o modelo numérico e analítico, de forma que teremos que obter resultados consistentes nestes dois modelos.

Nos capítulos anteriores, estudamos a dinâmica de pacote de onda gaussiano no grafeno. Foi possível obter as funções de onda para n -camadas de grafeno, porém nos concentramos no caso em que temos $n = 1$ e $n = 2$. Neste capítulo, mostraremos os resultados obtidos a partir dos estudos desenvolvidos ao longo do Cap. 4.

5.1 Propagação de pacote de onda em monocamada de grafeno

Primeiramente, vamos analisar os resultados para monocamada de grafeno. Neste caso, as funções de onda podem ser obtidas a partir das Eq's. (4.32), (4.33), (4.116) e (4.117) e o valor médio de $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$, pelas Eq's. (4.119), (4.120) e (4.121). Como já sabemos, esses dois resultados dependem diretamente da direção de polarização do pseudo-spin.

5.1.1 Densidade de probabilidade e média de $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ para $C_1 = 1$ e $C_2 = 0$

Como sabemos, uma vez obtido as funções de onda é possível determinar a densidade de probabilidade eletrônica $\rho(\vec{r}, t) = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$. Desta forma, a Fig. 5.1 representa a densidade de probabilidade para uma função de onda inicial com pseudo-spin polarizado na direção perpendicular ao plano, ou seja, $\langle \sigma_z \rangle = 1$ e $\langle \sigma_x \rangle = \langle \sigma_y \rangle = 0$, com parâmetros $d = 2$ nm e $k_0 = 0.6$ nm⁻¹ para diversos valores do tempo (em unidades de d/v_f). No instante de tempo inicial ($t = 0$), temos exatamente a projeção de uma onda gaussiana centrada no plano xy , como ilustra a Fig. 5.1(a). Uma vez que o tempo vai passando ($t > 0$), o pacote de onda se divide em duas partes que se movem ao longo do eixo- y com velocidades opostas, Fig's. 5.1(b)-(f). Porém, a densidade de probabilidade é simétrica em relação ao eixo- y , ou seja, $\rho(x, y, t) = \rho(x, -y, t)$ e em relação ao eixo- x ($\rho(x, y, t) \neq \rho(-x, y, t)$) não possui simetria, o que significa que o centro do pacote irá

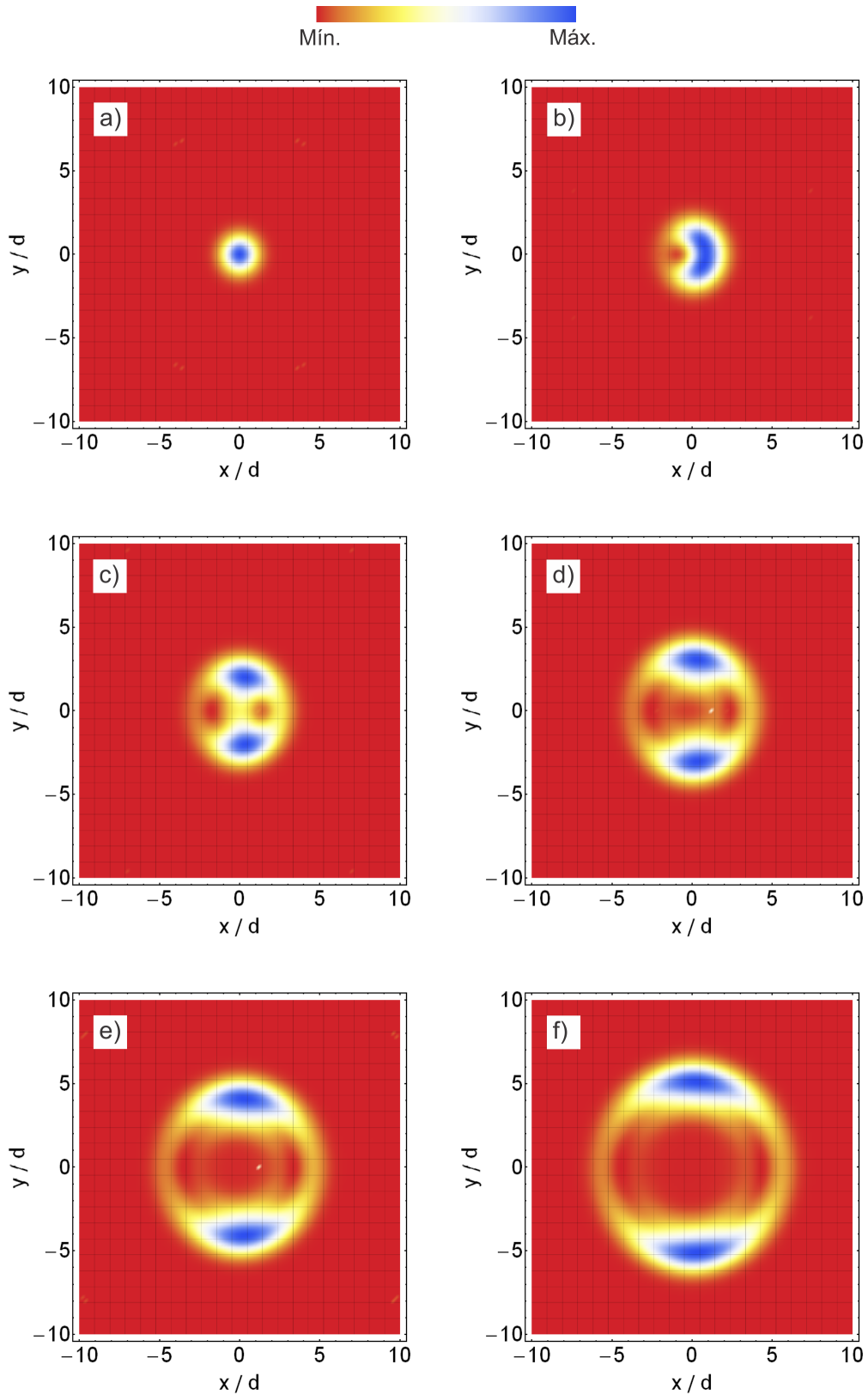


Figura 5.1: Densidade de probabilidade eletrônica, $\rho(\vec{r}, t) = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$, para monocamada de grafeno com $C_1 = 1$ e $C_2 = 0$ para $a = k_0 d = 1.2$ onde de (a) a (f) temos $t = 0, t = 1, t = 2, t = 3, t = 4, t = 5$, respectivamente (t possui unidades de d/v_f , onde v_f é a velocidade de Fermi).

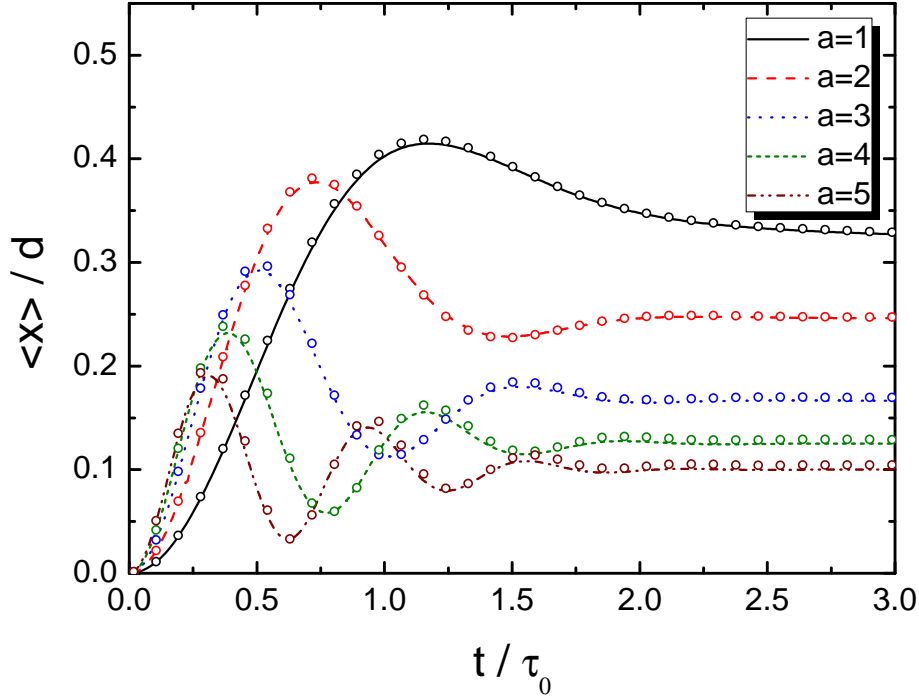


Figura 5.2: Média da coordenada $\langle x(t) \rangle / d$ versus tempo ($\tau_0 = d/v_f$) para um pacote de onda que se propaga em uma monocamada de grafeno com $C_1 = 1$ e $C_2 = 0$ para diversos valores do parâmetro a , onde $a = k_0 d$. As linhas (símbolos) representam os valores obtidos a partir do modelo analítico (*tight-binding*).

oscilar somente ao longo da direção x (*zitterbewegung*). Pode-se observar também que ao passar do tempo a largura das do pacote de onda aumenta devido ao efeito da dispersão.

Devido ao fato de não ocorrer oscilação ao longo do eixo- y , como dito no parágrafo anterior, só temos interesse em analisar o ZBW ao longo da direção x , uma vez que, a partir da Tabela 4.1, já sabíamos que $\langle y \rangle = 0$. A Fig. 5.2 ilustra o gráfico do $\langle \tilde{x}(t) \rangle = \langle x(t) \rangle / d$ versus o tempo (t/τ_0) para a expressão analítica (linhas) dado pela Eq. (4.119), bem como uma comparação com o modelo *tight-binding* (símbolos) para diversos valores do parâmetro $a = k_0 d$. No modelo de Dirac, a relação de dispersão será sempre linear, de forma que podemos escolher valores do parâmetro a sem se preocupar com o produto $k_0 d$, isto ficará mais claro no parágrafo a seguir, quando iremos falar um pouco sobre o resultado numérico. A partir da Fig. 5.2, podemos ver também que $\langle x(t) \rangle$ converge para um determinado valor demonstrando que o movimento trêmulo não é permanente, mas sim um movimento de regime transiente, como descrito nas Ref's [14, 17]. Podemos observar ainda na Fig. 5.2 que quanto maior o valor de a , mais oscilações irão ocorrer, de forma que a velocidade ($v_x = d \langle x(t) \rangle / dt$) irá oscilar com período mais curto e menor amplitude.

No caso do modelo TB, temos que prestar bastante atenção na escolha do valor do

produto $k_0 d$. Na verdade, precisamos escolher um k_0 bem próximo do ponto K do cone

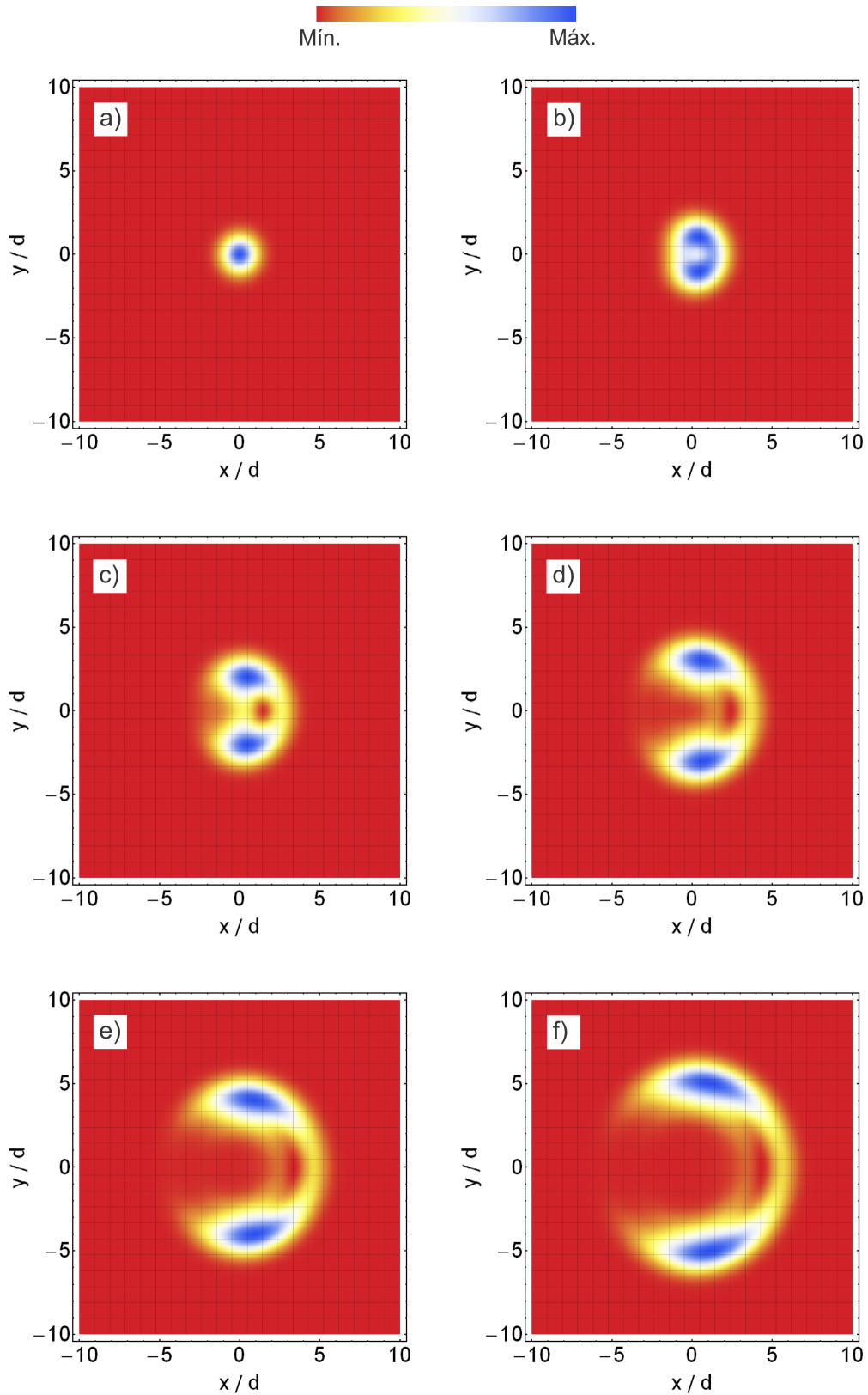


Figura 5.3: Densidade de probabilidade eletrônica, $\rho(\vec{r}, t) = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$, para monocamada de grafeno com $C_1 = 1$ e $C_2 = 1$ para $a = k_0 d = 1.2$ onde de (a) a (f) temos $t = 0, t = 1, t = 2, t = 3, t = 4, t = 5$, respectivamente (t possui unidades de d/v_f , onde v_f é a velocidade de Fermi).

de Dirac, uma vez que a relação de dispersão para o modelo TB deixa de ser linear para valores mais altos, diferenciando-se do modelo analítico utilizado, bem como escolher valores grandes para o parâmetro d . Dentro destas condições, a Fig. 5.2 ilustra o valor esperado $\langle x(t) \rangle$, representado por símbolos, para $k_0 d$ variando de 1 a 5, onde obtivemos esses valores fazendo $k_0 = 0.01 \text{ \AA}^{-1}$, $k_0 = 0.02 \text{ \AA}^{-1}$, $k_0 = 0.03 \text{ \AA}^{-1}$, $k_0 = 0.04 \text{ \AA}^{-1}$, $k_0 = 0.05 \text{ \AA}^{-1}$ e sempre utilizando $d = 100 \text{ \AA}$ para o pacote de onda Gaussiano inicial.

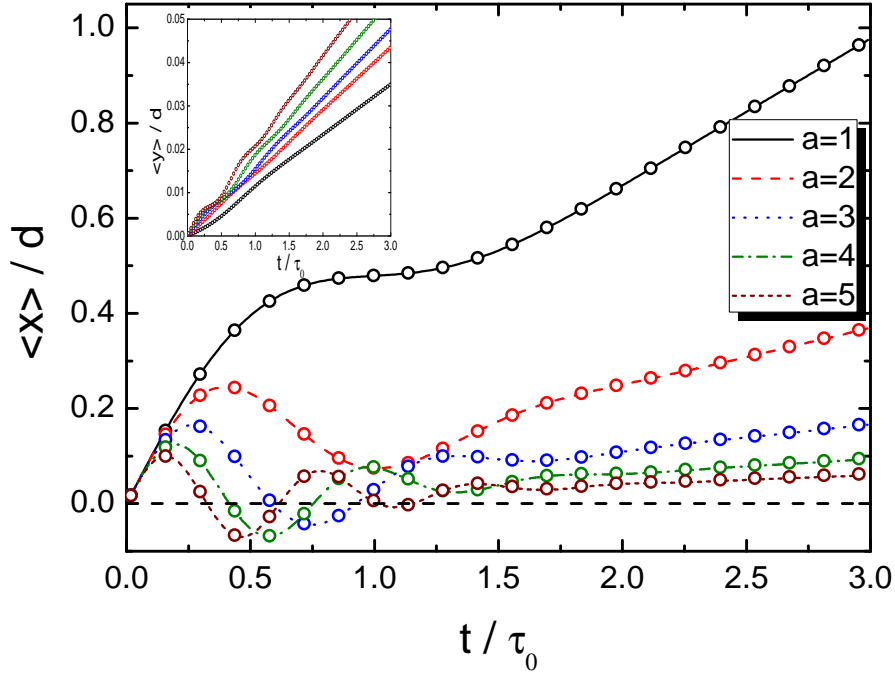


Figura 5.4: Média da coordenada $\langle x(t) \rangle / d$ versus tempo ($\tau_0 = d/u$) para um pacote de onda que se propaga em uma monocamada com $C_1 = 1$ e $C_2 = 1$ para diversos valores do parâmetro a , onde $a = k_0 d$. As linhas (símbolos) representam os valores obtidos a partir do modelo analítico (*tight-binding*). A inserção mostra a média da coordenada $\langle y(t) \rangle / d$ obtida a partir do modelo TB.

5.1.2 Média de $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ e densidade de probabilidade para $C_1 = 1$ e $C_2 = 1$

Agora, temos $\langle \sigma_x \rangle \neq 0$, $\langle \sigma_y \rangle = \langle \sigma_z \rangle = 0$, ou seja, o pseudo-spin está no plano xy e orientado ao longo do eixo- x . A Fig. 5.3 ilustra a densidade de probabilidade evoluindo no tempo (em unidades de d/u) para esta configuração utilizando os mesmos parâmetros da sub-seção 5.1.1, porém com $C_1 = 1$ e $C_2 = 1$. Podemos perceber que a medida que o tempo vai passando ($t > 0$), o pacote de onda se divide em duas partes que se movem ao longo do eixo- y em direções opostas, Fig's. 5.3(b)-(f). Como no caso anterior, o pacote de onda se divide de forma simétrica em relação ao eixo- y , ou seja, $\rho(x, y, t) = \rho(x, -y, t)$ e

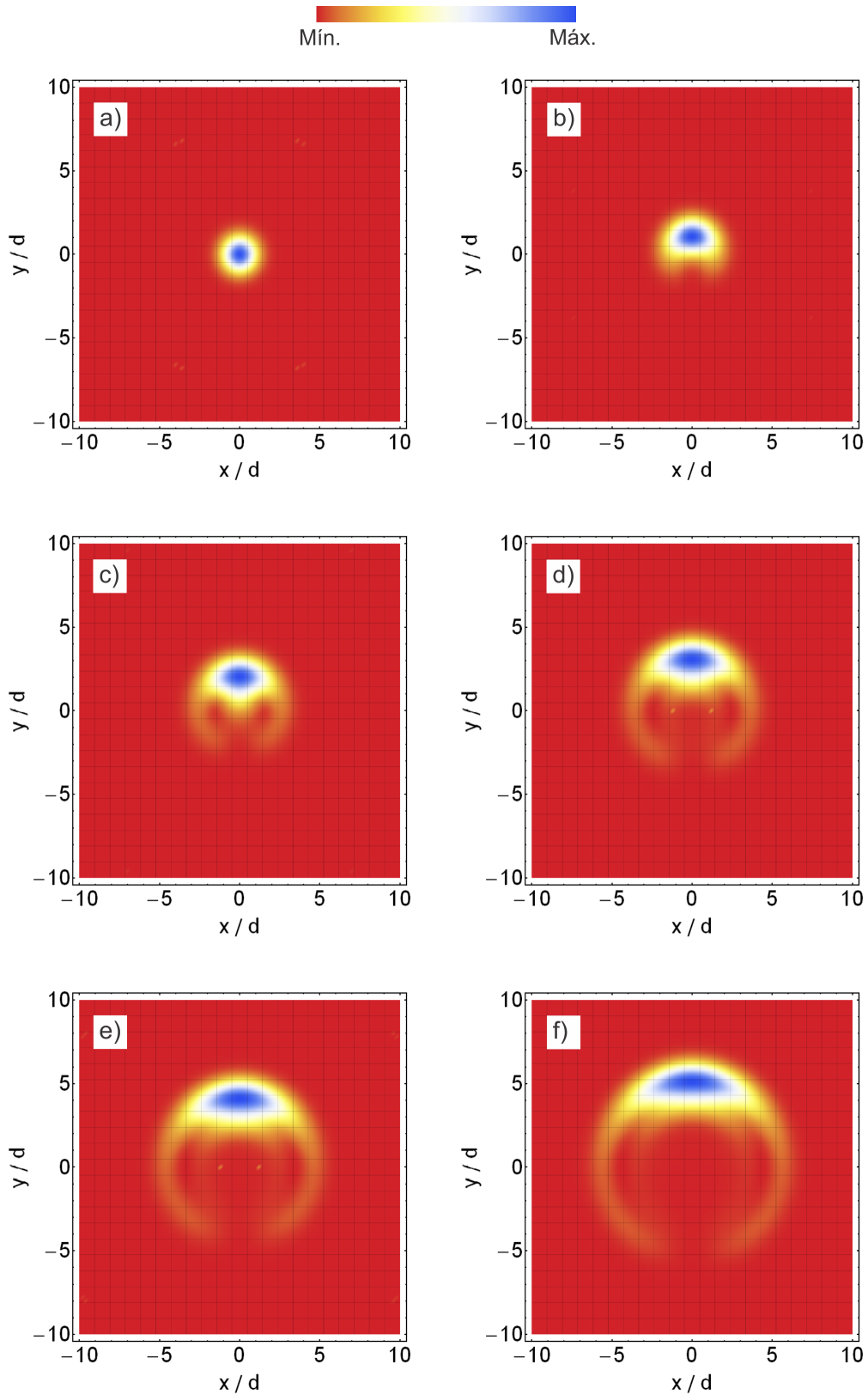


Figura 5.5: Densidade de probabilidade eletrônica, $\rho(\vec{r}, t) = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$, para monocamada de grafeno com $C_1 = 1$ e $C_2 = i$ para $a = k_0 d = 1.2$ onde de (a) a (f) temos $t = 0, t = 1, t = 2, t = 3, t = 4, t = 5$, respectivamente (t possui unidades de d/v_f , onde v_f é a velocidade de Fermi).

não possui simetria em relação ao eixo- x ($\rho(x, y, t) \neq \rho(-x, y, t)$), o que significa que o centro do pacote irá oscilar somente ao longo da direção x (*zitterbewegung*). Pode-se observar também que ao passar do tempo a largura das do pacote de onda aumenta devido ao efeito da dispersão.

A Fig. 5.4 ilustra os resultados analíticos obtidos a partir da Eq. (4.120) para o modelo analítico (TB) representado pelas linhas (símbolos). A partir deles, teremos que: (i) quando maior o valor de a , menor será a amplitude do ZBW e o período das oscilações; (ii) o ZBW é um movimento transiente, mostrando que o movimento trêmulo não é permanente.

Para o modelo TB, os mesmos cuidados descrito na sub-seção 5.1.1 precisam ser tomados. Podemos observar também a partir da inserção da Fig. 5.4 que $\langle y(t) \rangle$ é próxima de zero para este método.

5.1.3 Média de $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ e densidade de probabilidade para $C_1 = 1$ e $C_2 = i$

Neste último caso para monocamada, o pseudo-spin está no plano xy e orientado ao longo do eixo- y , ou seja, $\langle \sigma_y \rangle \neq 0$, $\langle \sigma_x \rangle = \langle \sigma_z \rangle = 0$. A Fig. 5.5 ilustra a densidade de probabilidade para diversos valores do tempo (em unidades de d/u) para os mesmos parâmetros das sub-seções 5.1.1 e 5.1.2, porém com $C_1 = 1$ e $C_2 = i$. Diferentemente dos dois casos anteriores, a medida que o tempo tempo vai passando ($t > 0$), o pacote de onda não se divide em duas partes, mas se propaga com um formato de arco. Como o pseudo-spin e o momento k_0 estão na mesma direção, o pacote de onda se propaga neste mesmo sentido sem se separar. Também, diferentemente dos dois casos anteriores, o pacote de onda agora se propaga ao longo do eixo- x como ilustra as Fig's. 5.1(b)-(f). Pode-se observar também que ao passar do tempo a largura das do pacote de onda aumenta devido ao efeito da dispersão.

A Fig. 5.6 ilustra os resultados obtidos analiticamente a partir da Eq. (4.121) para o modelo analítico (TB) representado pelas linhas (símbolos). Para este caso, o *zitterbewegung* para $\langle y(t) \rangle$ é bastante sutil e praticamente só ocorre quando $a = 0$. Apesar de existir também um pequeno movimento trêmulo, $\langle x(t) \rangle$ é muito pequeno. Mais uma vez, o que foi descrito nas sub-seções 5.1.1 e 5.1.2 foi utilizado para gerar os resultados numéricos.

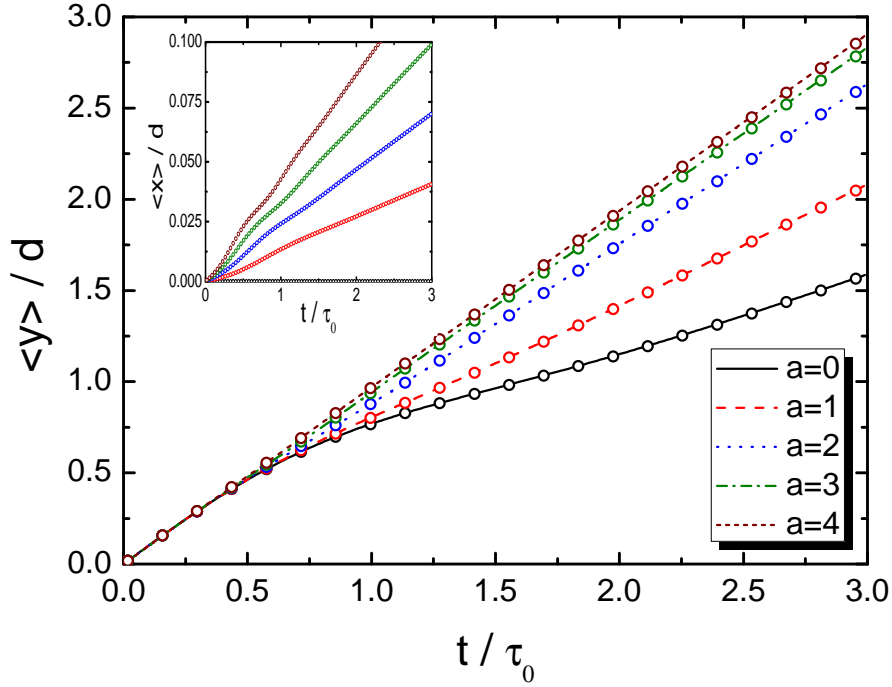


Figura 5.6: Média da coordenada $\langle x(t) \rangle / d$ versus tempo ($\tau_0 = d/v_f$) para um pacote de onda que se propaga em uma monocamada com $C_1 = 1$ e $C_1 = i$ para diversos valores do parâmetro a , onde $a = k_0 d$. As linhas (símbolos) representam os valores obtidos a partir do modelo analítico (*tight-binding*). A inserção mostra a média da coordenada $\langle x(t) \rangle / d$ obtida a partir do modelo TB.

5.2 Propagação de pacote de onda em bicamada de grafeno

Neste seção, iremos expor os resultados obtidos analiticamente para bicamada de grafeno. Estes resultados consistem na densidade de probabilidade $\rho(\vec{r}, t) = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$ obtido a partir das Eq's. (4.32), (4.33), (4.123) e (4.124) e do valor média da posição $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$, dado pelas Eq's. (6.69), (4.126) e (4.82).

5.2.1 Densidade de probabilidade e média de $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ e para $C_1 = 1$ e $C_2 = 0$

A Fig. 5.7 mostra a densidade de probabilidade obtida a partir das funções de onda das sub-redes A e B da bicamada de grafeno para uma função de onda inicial com pseudo-spin polarizado na direção perpendicular ao plano, ou seja, $\langle \sigma_z \rangle = 1$ e $\langle \sigma_x \rangle = \langle \sigma_y \rangle = 0$. Foram utilizados os parâmetros $d = 2$ nm e $k_0 = 0.6$ nm⁻¹, os mesmos da seção 5.1, para diversos valores do tempo (em unidades de d/v_f). Neste caso, as funções de onda se

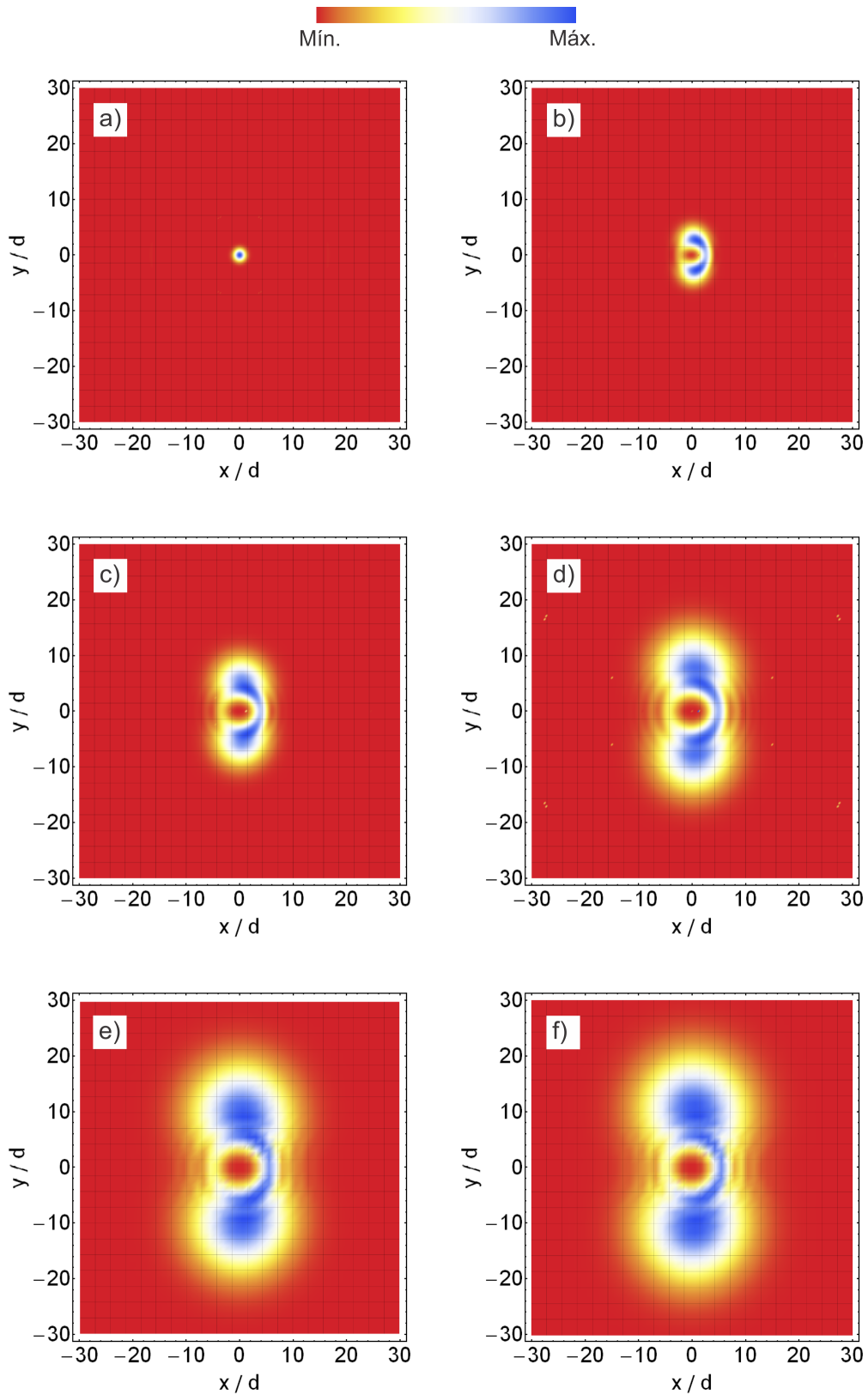


Figura 5.7: Densidade de probabilidade eletrônica, $\rho(\vec{r}, t) = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$, para bicamada de grafeno com $C_1 = 1$ e $C_2 = 0$ para $a = k_0 d = 1.2$ onde de (a) a (f) temos $t = 0$, $t = 1$, $t = 2$, $t = 3$, $t = 4$, $t = 5$, respectivamente (t possui unidades de d/v_f , onde v_f é a velocidade de Fermi).

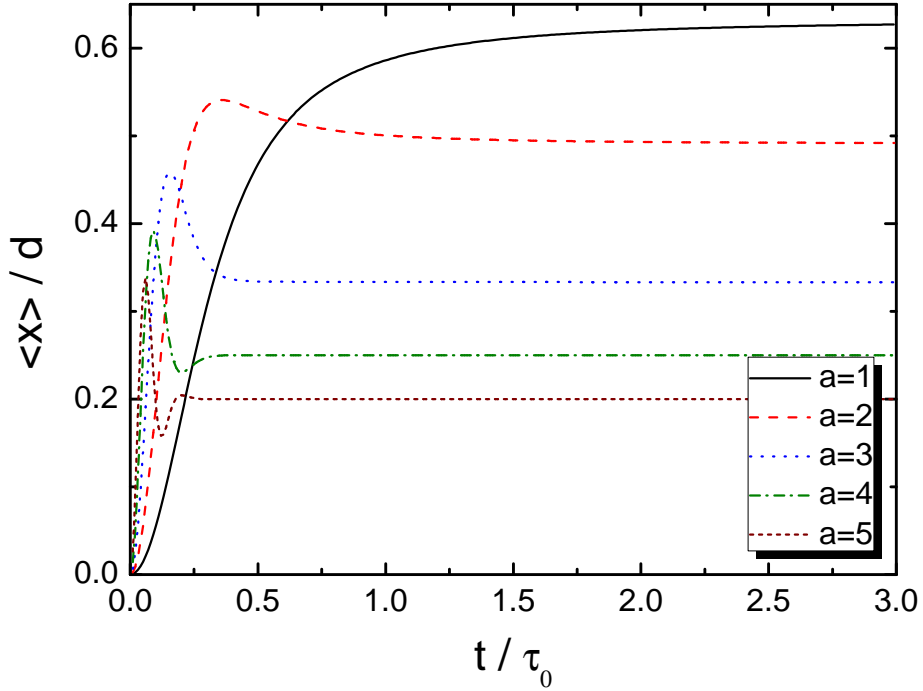


Figura 5.8: Média da coordenada $\langle x(t) \rangle / d$ versus tempo ($\tau_0 = d/v_f$) para um pacote de onda que se propaga em uma bicamada com $C_1 = 1$ e $C_2 = 0$ para diversos valores do parâmetro a , onde $a = k_0 d$.

espalham mais rapidamente do que quando se tem apenas uma camada de grafeno, como pode ser visto nas Fig's. 5.5(b)-(c).

A partir da Eq. (6.69), foi possível plotar o gráfico do valor médio da coordenada x para diversos valores do parâmetro a . Para valores maiores de a , mais oscilações irão surgir, porém com amplitudes também maiores.

5.2.2 Densidade de probabilidade e média de $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ e para $C_1 = 1$ e $C_2 = 1$

A Fig. 5.9 mostra a densidade de probabilidade para uma função de onda inicial com pseudo-spin polarizado no plano- xy e ao longo do eixo- x , ou seja, $\langle \sigma_x \rangle = 1$ e $\langle \sigma_y \rangle = \langle \sigma_z \rangle = 0$. Foram utilizados os mesmos parâmetros anteriores. As Fig's. 5.9(b)-(c) mostram como o pacote de onda evolui no tempo ($t > 0$).

Utilizando a Eq. (4.126), foi possível plotar o gráfico do módulo do valor médio da coordenada y para diversos valores do parâmetro a . Uma pequena oscilação próximo ao valor do tempo 0.25 ocorre para o valor $a = 1$.

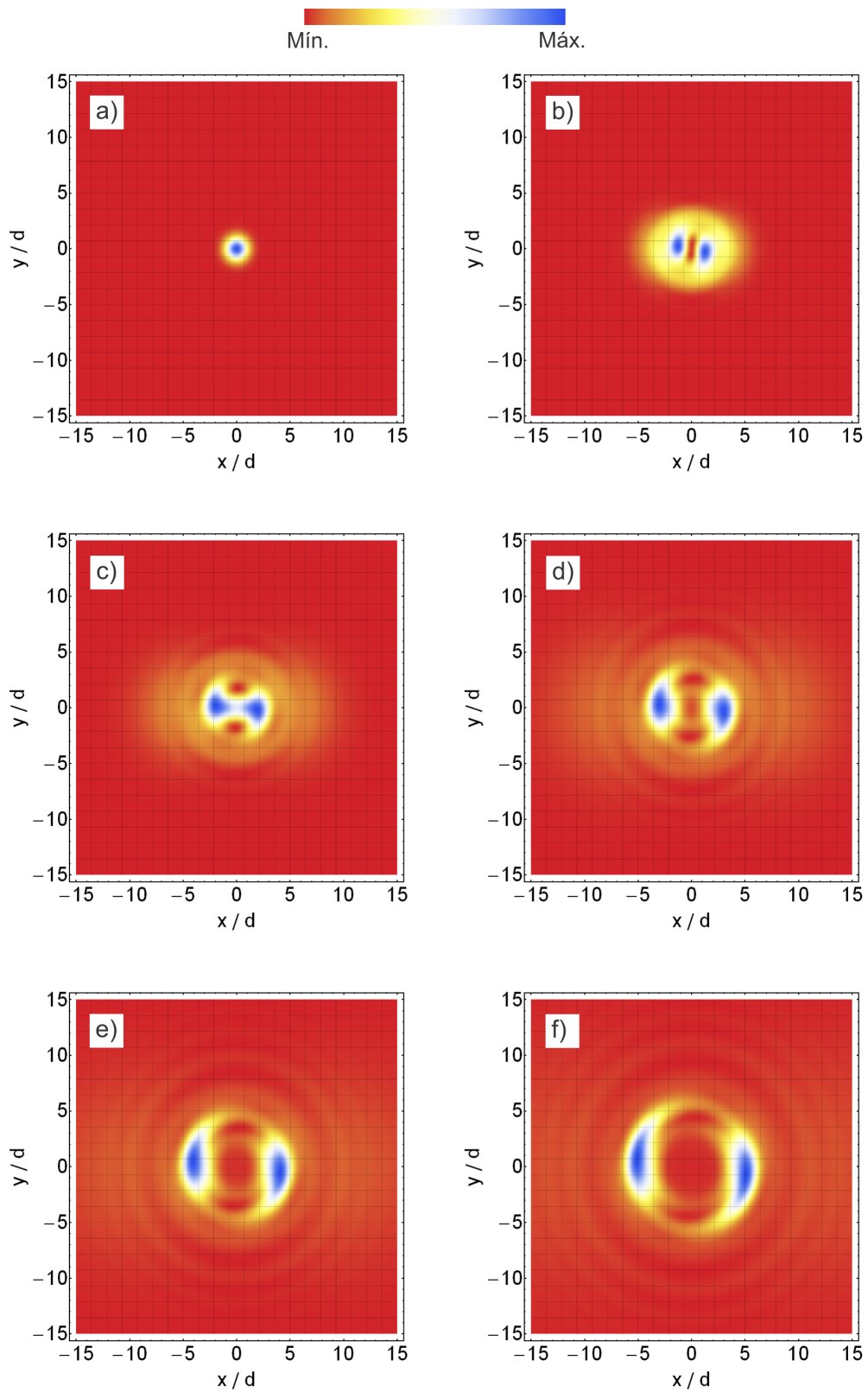


Figura 5.9: Densidade de probabilidade eletrônica, $\rho(\vec{r}, t) = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$, para bicamada de grafeno com $C_1 = 1$ e $C_2 = 1$ para $a = k_0d = 1.2$ onde de (a) a (f) temos $t = 0$, $t = 1$, $t = 2$, $t = 3$, $t = 4$, $t = 5$, respectivamente (t possui unidades de d/v_f , onde v_f é a velocidade de Fermi).

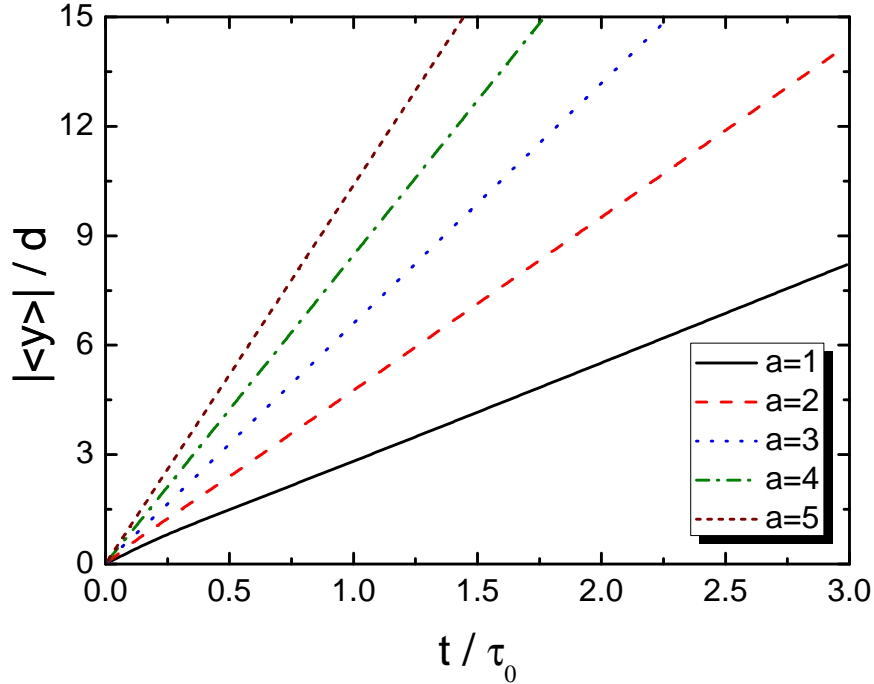


Figura 5.10: Módulo da média da coordenada $\langle x(t) \rangle / d$ versus tempo ($\tau_0 = d/v_f$) para um pacote de onda que se propaga em uma bicamada com $C_1 = 1$ e $C_2 = 1$ para diversos valores do parâmetro a , onde $a = k_0 d$.

5.2.3 Densidade de probabilidade e média de $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ e para $C_1 = 1$ e $C_2 = i$

Por fim, a Fig. 5.11 representa a densidade de probabilidade para uma função de onda inicial com pseudo-spin polarizado na direção perpendicular ao plano- xy , ou seja, $\langle \sigma_y \rangle = 1$ e $\langle \sigma_x \rangle = \langle \sigma_z \rangle = 0$, com parâmetros $d = 2$ nm e $k_0 = 0.6$ nm $^{-1}$ para diversos valores do tempo (em unidades de d/v_f). A partir da Eq. (4.128), foi possível plotar o gráfico do valor médio da coordenada x para diversos valores do parâmetro a . Como podemos ver, para $a = 1$ e $a = 2$, as oscilações são bastante amortecidas, convergindo para o valor $\langle x(t) \rangle = 0$ logo em seguida. A medida que o valor do parâmetro a vai aumentando, temos períodos mais curtos e menores amplitude de oscilação.

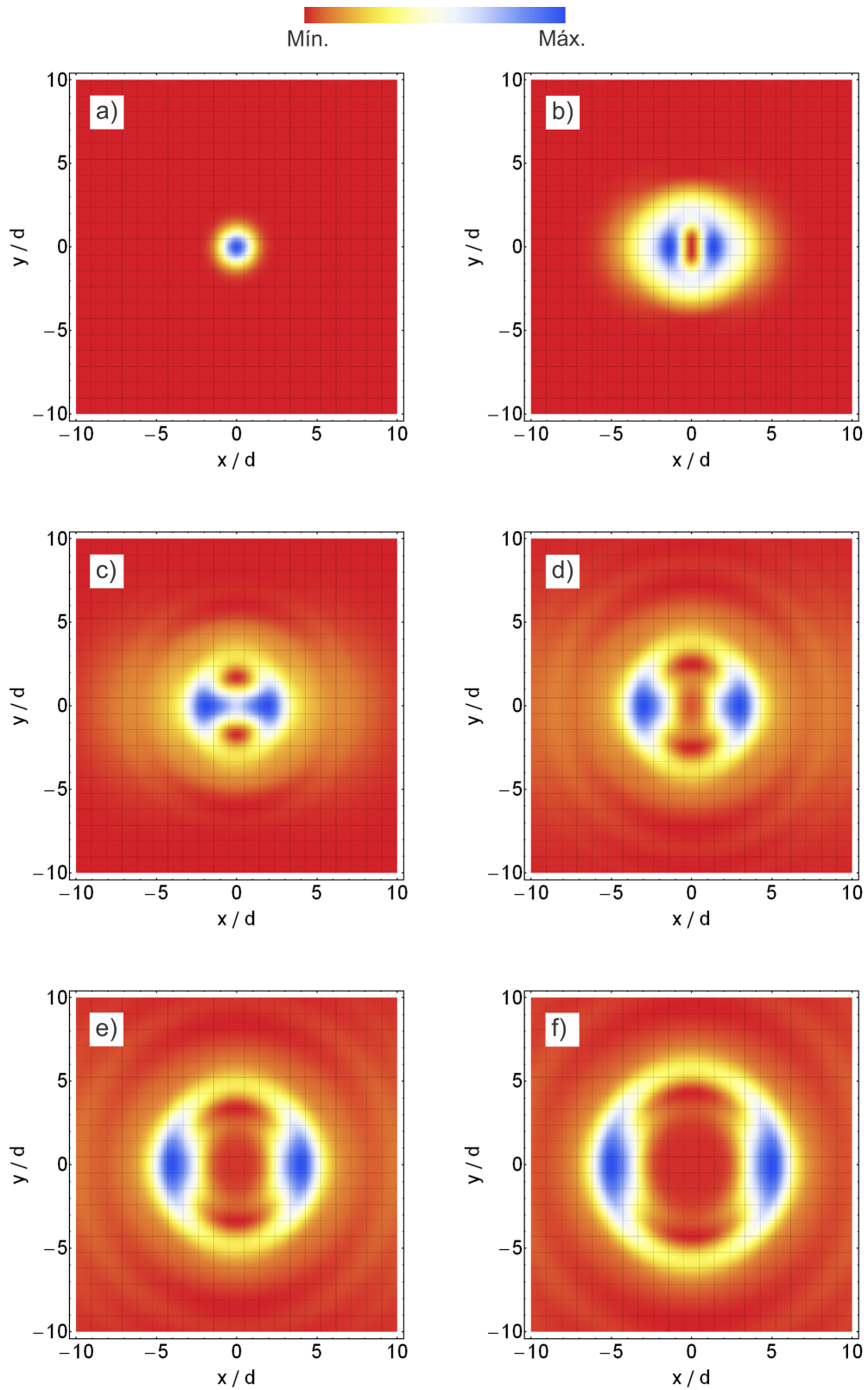


Figura 5.11: Densidade de probabilidade eletrônica, $\rho(\vec{r}, t) = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$, para bicamada de grafeno com $C_1 = 1$ e $C_2 = i$ para $a = k_0 d = 1.2$ onde de (a) a (f) temos $t = 0$, $t = 1$, $t = 2$, $t = 3$, $t = 4$, $t = 5$, respectivamente (t possui unidades de d/u , onde u é a velocidade de Fermi).

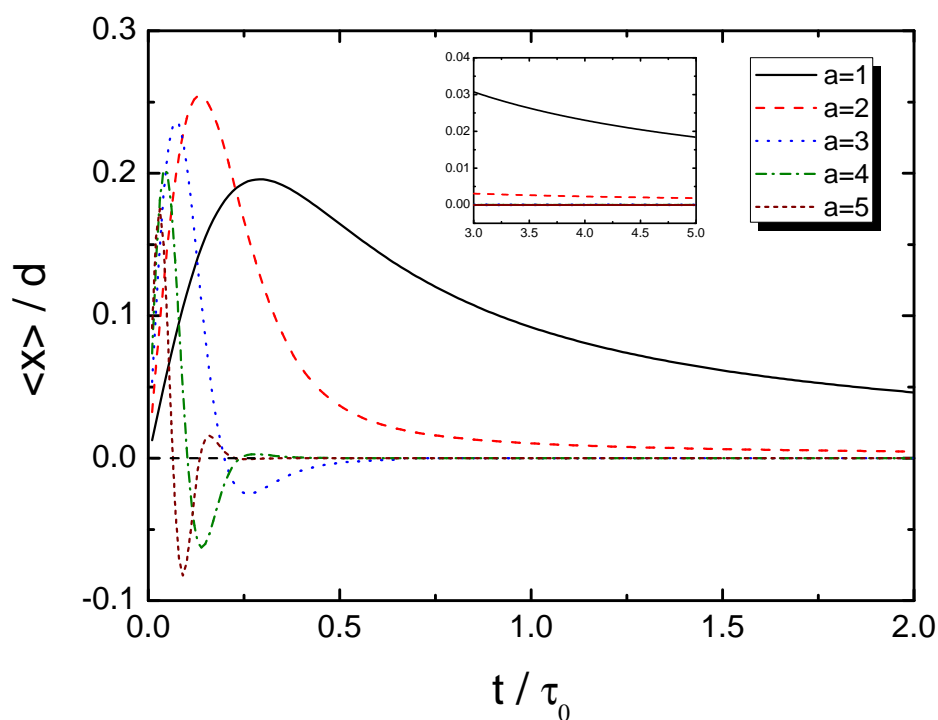


Figura 5.12: Média da coordenada $\langle x(t) \rangle / d$ versus tempo ($\tau_0 = d/v_f$) para um pacote de onda que se propaga em uma bicamada com $C_1 = 1$ e $C_2 = i$ para diversos valores do parâmetro a , onde $a = k_0 d$. O painel enfatiza a convergência dos valores

Conclusões e perspectivas

Neste trabalho, foram apresentados os resultados de uma série de investigações que fizemos sobre dinâmica quântica de partículas carregadas representadas por um pacote de onda gaussiano 2D em monocamada e bicamada de grafeno para as seguintes configurações iniciais do pseudo-spinor: (i) perpendicular ao plano- xy ; (ii) no plano- xy e orientado ao longo do eixo- x ; (iii) no plano- xy e orientado ao longo do eixo- y . Primeiramente, encontramos analiticamente as expressões correspondentes das funções de onda das sub-redes A e B para a monocamada (sub-seção 4.2.2) e bicamada (sub-seção 4.2.3) de grafeno a partir da equação de Dirac. Em seguida, utilizamos a representação de Heisenberg para prever em quais das situações (i), (ii) e (iii) o valor médio das coordenadas x e y , ou seja, $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ seriam nulos ou não, conforme ilustrado na Tabela 4.1. Depois, a partir das funções de onda, encontramos analiticamente as expressões correspondentes a $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$. Por fim, foi utilizado o método *split-operator* com o hamiltoniano TB para obter $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$ a fim de comparação com os resultados analíticos para a monocamada de grafeno.

Abordando o problema analiticamente, conseguimos prever qual coordenada do centro do pacote de onda possuía movimento trêmulo (ZBW), tanto para monocamada quanto bicamada de grafeno utilizando a representação de Heisenberg para as configurações iniciais do pseudo-spinor citado no parágrafo anterior. Utilizando a equação de Dirac, obtivemos analiticamente expressões para o valor médio de x e y , de forma que foi possível aferir quais delas eram nulas ou não. Estes últimos resultados, mostraram-se em total acordo com o que tinha sido previsto utilizando-se a representação de Heisenberg.

Para a monocamada de grafeno, observamos a presença do fenômeno *zitterbewegung* (ou simplesmente movimento trêmulo) da função de onda para as configurações (i), (ii) e (iii) citadas no primeiro parágrafo. Foi possível verificar uma boa concordância entre os resultados analíticos, obtidos a partir da equação de Dirac, e os resultados utilizando o modelo TB, como ilustra a Fig. 5.2. Foi possível observar também que o ZBW não é um movimento permanente, possuindo caráter transitório.

Os mesmos resultados citados no parágrafo anterior, foram observado para bicamada de grafeno, exceto as suas comparações com o modelo TB.

Algumas perspectivas futuras são citadas abaixo:

- Verificar os limites quando $a = dk_0 \gg 1$ a fim de verificar como o ZBW das coordenadas do centro do pacote de onda se comportam nesta situação.
- Determinar as expressões das velocidades, a partir das equações de $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$, a fim de verificar a dependência das mesmas com a largura d do pacote de onda, o momento inicial \vec{p}_0 , bem como os módulos das componentes $\psi_1(\vec{r}, 0)$ e $\psi_2(\vec{r}, 0)$ e da diferença de fase. Seria interessante também, verificar o comportamento das velocidades depois de passado um t consideravelmente grande.
- Desenvolver um código numérico utilizando o método *split-operator* para o Hamiltoniano TB e um código para o Hamiltoniano do tipo Dirac para bicamada de grafeno, a fim de comparar com os resultados analíticos da bicamada de grafeno obtidos nesta dissertação.

Apêndice A

Cálculo do $\langle x \rangle$ e $\langle y \rangle$

A.1- Cálculo da $\langle x \rangle$ para $C_1 = 1$ e $C_2 = 0$

A partir das Eq's (4.32) e (4.33), teremos

$$\psi_1(\vec{r}, t) = \frac{C_1}{\sqrt{|C_1|^2 + |C_2|^2}} \int G_{11}(\vec{r}, \vec{r}', t) f(\vec{r}') d\vec{r}' + \frac{C_2}{\sqrt{|C_1|^2 + |C_2|^2}} \int G_{12}(\vec{r}, \vec{r}', t) f(\vec{r}') d\vec{r}', \quad (6.1)$$

$$\psi_2(\vec{r}, t) = \frac{C_1}{\sqrt{|C_1|^2 + |C_2|^2}} \int G_{21}(\vec{r}, \vec{r}', t) f(\vec{r}') d\vec{r}' + \frac{C_2}{\sqrt{|C_1|^2 + |C_2|^2}} \int G_{22}(\vec{r}, \vec{r}', t) f(\vec{r}') d\vec{r}', \quad (6.2)$$

onde G_{11} , G_{12} , G_{21} e G_{22} são dadas pelas Eq's (4.20) e (4.29).

Considerando $C_1=1$ e $C_2 = 0$, teremos:

$$\psi_1(\vec{r}, t) = \int G_{11}(\vec{r}, \vec{r}', t) f(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (6.3)$$

e

$$\psi_2(\vec{r}, t) = \int G_{21}(\vec{r}, \vec{r}', t) f(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (6.4)$$

A partir das Eq's (4.58) e (4.63), teremos que:

$$\psi_1(\vec{r}, t) = \frac{d}{2\hbar^2\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \cdot \int \exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p} \quad (6.5)$$

e

$$\psi_2(\vec{r}, t) = \frac{-id}{2\hbar^2\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \int \left(\frac{p_x + ip_y}{p}\right)^n \cdot \exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p}. \quad (6.6)$$

Queremos obter o valor esperado de $\vec{r}(t)$, ou seja, $\langle \vec{r}(t) \rangle$ usando a representação do momento. Desta forma, teremos que determinar

$$\langle \vec{r}(t) \rangle = \sum_{j=1}^2 \int \bar{\psi}_j^\dagger(\vec{p}, t) [i\hbar \vec{\nabla}_p] \bar{\psi}_j(\vec{p}, t) d\vec{p}, \quad (6.7)$$

onde

$$\bar{\psi}_j(\vec{p}, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \exp\left[-i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right] \psi_j(\vec{r}, t) d\vec{r} \quad (6.8)$$

é a transformada de Fourier de $\psi_j(\vec{r}, t)$. Logo

$$\bar{\psi}_1(\vec{p}, t) = \frac{d}{2\hbar^2\sqrt{\pi^3}} \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right) \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \cdot \int \exp\left[-i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right] d\vec{r} \cdot \int \exp\left(i\frac{\vec{p}' \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{p'^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y' k_0 d^2}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{p'^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p}' \quad (6.9)$$

$$\bar{\psi}_1(\vec{p}, t) = \frac{d}{4\hbar^3\pi\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \cdot \left\{ \int \exp\left[-i\frac{(\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{r}}{\hbar}\right] d\vec{r} \right\} \cdot \int \exp\left(-\frac{p'^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y' k_0 d^2}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{p'^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p}', \quad (6.10)$$

lembrando que o termo entre chaves é exatamente uma delta de Dirac igual a $(2\pi\hbar)^2 \delta(\vec{p} - \vec{p}')$, então teremos:

$$\bar{\psi}_1(\vec{p}, t) = \frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right). \quad (6.11)$$

Agora que já obtivemos $\bar{\psi}_1(\vec{p}, t)$, vamos determinar $\bar{\psi}_2(\vec{p}, t)$. A partir da Eq. (6.6), teremos:

$$\bar{\psi}_2(\vec{p}, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \left[\frac{-id}{2\hbar^2\sqrt{\pi^3}} \cdot \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \right] \int \exp\left[-i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right] d\vec{r} \cdot \int \left(\frac{p'_x + ip'_y}{p'}\right)^n \cdot \exp\left(i\frac{\vec{p}' \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{p'^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y' k_0 d^2}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p'^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p}', \quad (6.12)$$

$$\bar{\psi}_2(\vec{p}, t) = \frac{-id}{4\hbar^3\pi\sqrt{\pi^3}} \cdot \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \left\{ \int \exp\left[-i\frac{(\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{r}}{\hbar}\right] d\vec{r} \right\} \cdot \int \left(\frac{p'_x + ip'_y}{p'}\right)^n \cdot \exp\left(-\frac{p'^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y' k_0 d^2}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p'^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p}', \quad (6.13)$$

novamente, o termo entre chaves é uma delta de Dirac igual a $(2\pi\hbar)^2 \delta(\vec{p} - \vec{p}')$, assim,

$$\bar{\psi}_2(\vec{p}, t) = \frac{-id}{\hbar\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \left(\frac{p_x + ip_y}{p}\right)^n \cdot \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right). \quad (6.14)$$

Em coordenadas cartesianas, o operador momento é dado por

$$\vec{\nabla}_p = \hat{x} \frac{\partial}{\partial p_x} + \hat{y} \frac{\partial}{\partial p_y}. \quad (6.15)$$

Primeiramente, vamos calcular $\partial\bar{\psi}_1/p_x$, assim:

$$\frac{\partial\bar{\psi}_1}{\partial p_x} = \frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \frac{\partial}{\partial p_x} \left[\exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right], \quad (6.16)$$

como $p^n = (p_x^2 + p_y^2)^{n/2}$, teremos

$$\begin{aligned} \frac{\partial\bar{\psi}_1}{\partial p_x} &= \frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \\ &\cdot \left[-\frac{2p_x d^2}{2\hbar^2} \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) - \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \frac{t}{\gamma\hbar} \frac{n}{2} (p_x^2 + p_y^2)^{\frac{n}{2}-1} \cdot (2p_x) \right], \end{aligned} \quad (6.17)$$

que pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} \frac{\partial\bar{\psi}_1}{\partial p_x} &= \frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \\ &\cdot \left[-\frac{p_x d^2}{\hbar^2} \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) - \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \frac{nt}{\gamma\hbar} p_x p^{n-2} \right]. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Utilizando as variáveis adimensionais das Eq's (4.65), (4.66), (4.72) e (4.73), podemos reescrever a Eq.(6.18) como

$$\begin{aligned} \frac{\partial\bar{\psi}_1}{\partial p_x} &= \frac{d^2}{\hbar^2\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{q}{2} + aq\text{sen}\theta\right) \\ &\cdot \left[-q\cos\theta\cos(q^n t') - nq^{n-1}t'\cos\theta\text{sen}(q^n t') \right]. \end{aligned} \quad (6.19)$$

De forma análoga, teremos

$$\frac{\partial\bar{\psi}_1}{\partial p_y} = \frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \frac{\partial}{\partial p_y} \left[\exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right], \quad (6.20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial\bar{\psi}_1}{\partial p_y} &= \frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \\ &\cdot \left[\left(-\frac{2p_y d^2}{2\hbar^2} + \frac{k_0 d^2}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) - \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \frac{t}{\gamma\hbar} \frac{n}{2} (p_x^2 + p_y^2)^{\frac{n}{2}-1} \cdot (2p_y) \right], \end{aligned} \quad (6.21)$$

$$\frac{\partial \bar{\psi}_1}{\partial p_y} = \frac{d}{\hbar \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \cdot \left[\left(-\frac{p_y d^2}{\hbar^2} + \frac{k_0 d^2}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma \hbar}\right) - \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma \hbar}\right) \frac{nt}{\gamma \hbar} p_y p^{n-2} \right], \quad (6.22)$$

introduzindo as variáveis adimensionais, teremos:

$$\frac{\partial \bar{\psi}_1}{\partial p_y} = \frac{d}{\hbar \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{q^2}{2} + aq \text{sen} \theta\right) \cdot \left[\left(-\frac{dq \text{sen} \theta}{\hbar} + \frac{ad}{\hbar}\right) \cos(q^n t') - nq^{n-1} t' \text{sen} \theta \text{sen}(q^n t') \right], \quad (6.23)$$

$$\frac{\partial \bar{\psi}_1}{\partial p_y} = \frac{d^2}{\hbar^2 \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{q^2}{2} + aq \text{sen} \theta\right) \cdot [(-q \text{sen} \theta + a) \cos(q^n t') - nq^{n-1} t' \text{sen} \theta \text{sen}(q^n t')]. \quad (6.24)$$

Como

$$\bar{\psi}_1^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_1 = \left[\bar{\psi}_1^\dagger \left(\frac{\partial \bar{\psi}_1}{\partial p_x} \right) \hat{x} + \bar{\psi}_1^\dagger \left(\frac{\partial \bar{\psi}_1}{\partial p_y} \right) \hat{y} \right], \quad (6.25)$$

logo

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_1^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_1 &= \left\{ \left[\frac{d}{\hbar \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{q^2}{2} + aq \text{sen} \theta\right) \cos(q^n t') \right] \right\} \\ &\cdot \left\{ \frac{d^2}{\hbar^2 \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{q^2}{2} + aq \text{sen} \theta\right) \cdot [-q \cos \theta \cos(q^n t') - nq^{n-1} t' \cos \theta \text{sen}(q^n t')] \right\} \hat{x} \\ &+ \left\{ \left[\frac{d}{\hbar \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{q^2}{2} + aq \text{sen} \theta\right) \cos(q^n t') \right] \right\} \\ &\cdot \left\{ \frac{d^2}{\hbar^2 \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{q^2}{2} + aq \text{sen} \theta\right) \right. \\ &\quad \cdot [(-q \text{sen} \theta + a) \cos(q^n t') - nq^{n-1} t' \text{sen} \theta \text{sen}(q^n t')] \left. \right\} \hat{y} \quad (6.26) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_1^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_1 &= \frac{d^3}{\hbar^3 \pi} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq \text{sen} \theta) \\ &\cdot \left\{ [-q \cos \theta \cos^2(q^n t') - nq^{n-1} t' \cos \theta \text{sen}(q^n t') \cos(q^n t')] \hat{x} \right. \\ &\quad \left. + [(-q \text{sen} \theta + a) \cos^2(q^n t') - nq^{n-1} t' \text{sen} \theta \text{sen}(q^n t') \cos(q^n t')] \hat{y} \right\}, \quad (6.27) \end{aligned}$$

como $\text{sen}(a) \cos(a) = \text{sen}(2a)/2$, então

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_1^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_1 &= \frac{d^3}{\hbar^3 \pi} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq \text{sen} \theta) \\ &\cdot \left\{ [-q \cos \theta \cos^2(q^n t') - \frac{n}{2} q^{n-1} t' \cos \theta \text{sen}(2q^n t')] \hat{x} \right. \\ &\quad \left. + [(-q \text{sen} \theta + a) \cos^2(q^n t') - \frac{n}{2} q^{n-1} t' \text{sen} \theta \text{sen}(2q^n t')] \hat{y} \right\}. \quad (6.28) \end{aligned}$$

Agora, vamos fazer o mesmo procedimento para $\bar{\psi}_2$,

$$\frac{\partial \bar{\psi}_2}{\partial p_x} = \frac{-id}{\hbar\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \frac{\partial}{\partial p_x} \left\{ \left(\frac{p_x + ip_y}{p}\right)^n \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y ad}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right\}, \quad (6.29)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\psi}_2}{\partial p_x} = & \frac{-id}{\hbar\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y ad}{\hbar}\right) \left\{ n \left[\frac{p_x + ip_y}{p}\right]^{n-1} \right. \\ & \cdot \frac{\partial}{\partial p_x} \left[p_x (p_x^2 + p_y^2)^{-1/2} + ip_y (p_x^2 + p_y^2)^{-1/2} \right] \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \\ & \left. - \frac{p_x d^2}{\hbar^2} \left(\frac{p_x + ip_y}{p}\right)^n \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) + \left(\frac{p_x + ip_y}{p}\right)^n \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \frac{nt}{\gamma\hbar} p_x p^{n-2} \right\}, \quad (6.30) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\psi}_2}{\partial p_x} = & \frac{-id}{\hbar\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y ad}{\hbar}\right) \\ & \cdot \left\{ n \left[\frac{p_x + ip_y}{p}\right]^{n-1} \left[\frac{1}{p} - \frac{p_x (p_x + ip_y)}{p^3} \right] \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right. \\ & \left. - \frac{p_x d^2}{\hbar^2} \left(\frac{p_x + ip_y}{p}\right)^n \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) + \left(\frac{p_x + ip_y}{p}\right)^n \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \frac{nt}{\gamma\hbar} p_x p^{n-2} \right\}, \quad (6.31) \end{aligned}$$

como $e^{i\theta} = (p_x + ip_y)/p$, teremos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\psi}_2}{\partial p_x} = & \frac{-id}{\hbar\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y ad}{\hbar}\right) \\ & \cdot \left\{ n e^{i(n-1)\theta} \left[\frac{1}{p} - \frac{p \cos\theta}{p^2} e^{i\theta} \right] \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right. \\ & \left. - \frac{p \cos\theta d^2}{\hbar^2} e^{in\theta} \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) + e^{in\theta} \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \frac{nt}{\gamma\hbar} p \cos\theta p^{n-2} \right\}, \quad (6.32) \end{aligned}$$

fazendo a substituição para deixar as variáveis adimensionais,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\psi}_2}{\partial p_x} = & \frac{-id^2}{\hbar^2\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{q^2}{2} + aq \text{sen}\theta\right) \cdot \left\{ n e^{i(n-1)\theta} \left[\frac{1}{q} - \frac{\cos\theta}{q} e^{i\theta} \right] \right. \\ & \left. \cdot \text{sen}(q^n t') - q \cos\theta e^{in\theta} \text{sen}(q^n t') + n q^{n-1} t' \cos\theta e^{in\theta} \cos(q^n t') \right\}, \quad (6.33) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\psi}_2}{\partial p_x} = & \frac{-id^2}{\hbar^2\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{q^2}{2} + aq \text{sen}\theta\right) \\ & \cdot \left\{ e^{in\theta} \text{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q \cos\theta \right] + n t' q^{n-1} \cos\theta e^{in\theta} \cos(q^n t') \right\}. \quad (6.34) \end{aligned}$$

Agora, vamos fazer o mesmo procedimento para $\partial\bar{\psi}_2/\partial p_y$, assim

$$\frac{\partial\bar{\psi}_2}{\partial p_y} = \frac{-id}{\hbar\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \frac{\partial}{\partial p_y} \left\{ \left(\frac{p_x + ip_y}{p}\right)^n \cdot \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y ad}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right\} \quad (6.35)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial\bar{\psi}_2}{\partial p_y} = & \frac{-id}{\hbar\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y ad}{\hbar}\right) \\ & \cdot \left\{ n \left(\frac{p_x + ip_y}{p}\right)^{n-1} \frac{\partial}{\partial p_y} \left[(p_x + ip_y) (p_x + ip_y)^{-1/2} \right] \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right. \\ & + \left(\frac{p_x + ip_y}{p}\right)^n \left(-\frac{p_y d^2}{\hbar^2} + \frac{ad}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \\ & \left. + \left(\frac{p_x + ip_y}{p}\right)^n \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \frac{\partial}{\partial p_y} \left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right\}, \quad (6.36) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial\bar{\psi}_2}{\partial p_y} = & \frac{-id}{\hbar\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y ad}{\hbar}\right) \\ & \cdot \left\{ n \left(\frac{p_x + ip_y}{p}\right)^{n-1} \left[\frac{i}{p} - \frac{p_y (p_x + ip_y)}{p^3} \right] \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right. \\ & + \left(-\frac{p_y d^2}{\hbar^2} + \frac{ad}{\hbar}\right) \left(\frac{p_x + ip_y}{p}\right)^n \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \\ & \left. + \frac{np_y p^{n-2} t}{\gamma\hbar} \left(\frac{p_x + ip_y}{p}\right)^n \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right\}, \quad (6.37) \end{aligned}$$

substituindo $e^{i\theta} = (p_x + ip_y)/p$ e fazendo as mudanças de variáveis, teremos

$$\begin{aligned} \frac{\partial\bar{\psi}_2}{\partial p_y} = & \frac{-id^2}{\hbar^2\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{q^2}{2} + qas\text{en}\theta\right) \\ & \cdot \left\{ ne^{i(n-1)\theta} \left[\frac{i}{q} - \frac{\text{sen}\theta e^{i\theta}}{q} \right] \text{sen}(q^n t') \right. \\ & + (-q\text{sen}\theta + a) e^{in\theta} \text{sen}(q^n t') \\ & \left. + nq^{n-1} t' \text{sen}\theta e^{in\theta} \cos(q^n t') \right\}, \quad (6.38) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial\bar{\psi}_2}{\partial p_y} = & \frac{-id^2}{\hbar^2\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{q^2}{2} + qas\text{en}\theta\right) \\ & \cdot \left\{ e^{in\theta} \text{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) - q\text{sen}\theta + a \right] \right. \\ & \left. + nq^{n-1} t' \text{sen}\theta e^{in\theta} \cos(q^n t') \right\}. \quad (6.39) \end{aligned}$$

Como

$$\bar{\psi}_2^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_2 = \left[\bar{\psi}_2^\dagger \left(\frac{\partial\bar{\psi}_2}{\partial p_x} \right) \hat{x} + \bar{\psi}_2^\dagger \left(\frac{\partial\bar{\psi}_2}{\partial p_y} \right) \hat{y} \right], \quad (6.40)$$

teremos

$$\begin{aligned}
\bar{\psi}_2^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_2 &= \left\{ \frac{id}{\hbar\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) e^{-in\theta} \cdot \exp\left(-\frac{q^2}{2} + aq\text{sen}\theta\right) \text{sen}(q^n t') \right\} \\
&\left\{ \frac{-id^2}{\hbar^2\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{q^2}{2} + aq\text{sen}\theta\right) e^{in\theta} \text{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q\cos\theta \right] \right. \\
&\quad \left. + nt' q^{n-1} \cos\theta e^{in\theta} \cos(q^n t') \right\} \hat{x} \\
&+ \left\{ \frac{id}{\hbar\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) e^{-in\theta} \cdot \exp\left(-\frac{q^2}{2} + aq\text{sen}\theta\right) \text{sen}(q^n t') \right\} \\
&\cdot \left\{ \frac{-id^2}{\hbar^2\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{q^2}{2} + aq\text{sen}\theta\right) e^{in\theta} \text{sen}(q^n t') \right. \\
&\quad \left. \cdot \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) - q\text{sen}\theta + a \right] + nt' q^{n-1} \text{sen}\theta e^{in\theta} \cos(q^n t') \right\} \hat{y}, \quad (6.41)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{\psi}_2^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_2 &= \frac{d^3}{\hbar^3\pi} \cdot \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq\text{sen}\theta) \\
&\cdot \left\{ \left[\text{sen}^2(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q\cos\theta \right] + \frac{n}{2} t' q^{n-1} \cos\theta \text{sen}(2q^n t') \right] \hat{x} \right. \\
&\quad \left. \cdot \left[\text{sen}^2(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) - q\text{sen}\theta + a \right] + \frac{n}{2} t' q^{n-1} \text{sen}\theta \text{sen}(2q^n t') \right] \hat{y} \right\}. \quad (6.42)
\end{aligned}$$

Somando as Eq's (6.28) e (6.42), teremos

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^2 \bar{\psi}_j^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_j &= \frac{d^3}{\hbar^3\pi} \cdot \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq\text{sen}\theta) \\
&\cdot \left\{ \left[-q\cos\theta \cos^2(q^n t') - \frac{n}{2} q^{n-1} t' \cos\theta \text{sen}(2q^n t') \right] \hat{x} \right. \\
&\quad + \left[\text{sen}^2(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q\cos\theta \right] + \frac{n}{2} t' q^{n-1} \cos\theta \text{sen}(2q^n t') \right] \hat{x} \\
&\quad + \left[(-q\text{sen}\theta + a) \cos^2(q^n t') - \frac{n}{2} q^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(2q^n t') \right] \hat{y} \\
&\quad \left. + \left[\text{sen}^2(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) - q\text{sen}\theta + a \right] + \frac{n}{2} t' q^{n-1} \text{sen}\theta \text{sen}(2q^n t') \right] \hat{y} \right\}, \quad (6.43)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^2 \bar{\psi}_j^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_j &= \frac{d^3}{\hbar^3\pi} \cdot \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq\text{sen}\theta) \\
&\cdot \left\{ \left[-q\cos\theta [\cos^2(q^n t') + \text{sen}^2(q^n t')] + n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) \text{sen}^2(q^n t') \right] \hat{x} \right. \\
&\quad \left. + \left[(-q\text{sen}\theta + a) [\cos^2(q^n t') + \text{sen}^2(q^n t')] + n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) \text{sen}^2(q^n t') \right] \hat{y} \right\}, \quad (6.44)
\end{aligned}$$

$$\sum_{j=1}^2 \bar{\psi}_j^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_j = \frac{d^3}{\hbar^3 \pi} \cdot \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq \operatorname{sen} \theta) \cdot \left\{ \left[-q \cos \theta + n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos \theta}{q} \right) \operatorname{sen}^2(q^n t') \right] \hat{x} + \left[(-q \operatorname{sen} \theta + a) + n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\operatorname{sen} \theta}{q} \right) \operatorname{sen}^2(q^n t') \right] \hat{y} \right\}. \quad (6.45)$$

Substituindo a Eq.(6.45) na Eq.(6.7) e utilizando a Eq.(4.83)¹, teremos:

$$\langle x(t) \rangle = \left(i\hbar \frac{\hbar^2}{d^2} \right) \left(\frac{d^3 e^{-a^2}}{\hbar^3 \pi} \right) \int_0^\infty \int_{-\pi}^\pi \left\{ \exp(-q^2 + 2aq \operatorname{sen} \theta) \left[-q^2 \cos \theta + n (e^{-i\theta} - \cos \theta) \operatorname{sen}^2(q^n t') \right] \right\} dq d\theta \quad (6.46)$$

como $e^{i\theta} - \cos \theta = -i \operatorname{sen} \theta$, então

$$\langle x(t) \rangle = \left(\frac{i d e^{-a^2}}{\pi} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} dq \left\{ \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq \operatorname{sen} \theta) [-i \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen}^2(q^n t') - q^2 \cos \theta] d\theta \right\}. \quad (6.47)$$

Agora, vamos resolver a integral na variável θ ,

$$-i \operatorname{sen}^2(q^n t') \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq \operatorname{sen} \theta) \operatorname{sen} \theta d\theta - q^2 \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq \operatorname{sen} \theta) \cos \theta d\theta, \quad (6.48)$$

como $\operatorname{sen} \theta = (e^{i\theta} - e^{-i\theta})/2i$ e $\cos \theta = (e^{i\theta} + e^{-i\theta})/2$, então

$$- \frac{n}{2} \operatorname{sen}^2(q^n t') \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq \operatorname{sen} \theta + i\theta) d\theta + \frac{n}{2} \operatorname{sen}^2(q^n t') \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq \operatorname{sen} \theta - i\theta) d\theta - \frac{q^2}{2} \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq \operatorname{sen} \theta + i\theta) d\theta - \frac{q^2}{2} \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq \operatorname{sen} \theta - i\theta) d\theta. \quad (6.49)$$

$$- \frac{n}{2} \operatorname{sen}^2(q^n t') [2\pi i I_1(2aq)] + \frac{n}{2} \operatorname{sen}^2(q^n t') [-2\pi i I_1(2aq)] - \frac{q^2}{2} [2\pi i I_1(2aq)] - \frac{q^2}{2} [-2\pi i I_1(2aq)]. \quad (6.50)$$

$$- n\pi \operatorname{sen}^2(q^n t') I_1(2aq) - n\pi \operatorname{sen}^2(q^n t') I_1(2aq) - \pi i q^2 I_1(2aq) + \pi i q^2 I_1(2aq), \quad (6.51)$$

$$- 2n\pi \operatorname{sen}^2(q^n t') I_1(2aq). \quad (6.52)$$

Substituindo a Eq.(6.52) na Eq.(6.47), teremos:

$$\langle x(t) \rangle = \left(\frac{i d e^{-a^2}}{\pi} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} [-2n\pi \operatorname{sen}^2(q^n t') I_1(2aq)] dq, \quad (6.53)$$

¹A Eq.(4.83) corresponde a: $\int_{-\infty}^\infty d\vec{p} \rightarrow \int_0^\infty p dp \int_{-\pi}^\pi d\theta = (\hbar^2/d^2) \int_0^\infty q dq \int_{-\pi}^\pi d\theta$

$$\langle x(t) \rangle = \left(2nde^{-a^2} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} \sin^2(q^n t') I_1(2aq) dq. \quad (6.54)$$

Como $\sin^2(q^n t') = [1 - \cos(2q^n t')] / 2$, então

$$\langle x(t) \rangle = \left(2nde^{-a^2} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} \left(\frac{1 - \cos(2q^n t')}{2} \right) I_1(2aq) dq, \quad (6.55)$$

$$\langle x(t) \rangle = \left(nde^{-a^2} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} I_1(2aq) dq - \left(nde^{-a^2} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} \cos(2q^n t') I_1(2aq) dq. \quad (6.56)$$

Sabendo que

$$\int_0^\infty e^{-\alpha x^2} I_\nu(\beta x) dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\alpha}} \exp\left(\frac{\beta^2}{8\alpha}\right) I_{\nu/2}\left(\frac{\beta^2}{8\alpha}\right), \quad (6.57)$$

teremos

$$\int_0^\infty e^{-q^2} I_1(2aq) dq = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \exp\left(\frac{a^2}{2}\right) I_{1/2}\left(\frac{a^2}{2}\right). \quad (6.58)$$

Substituindo a Eq.(6.58) na Eq.(6.56), iremos obter

$$\langle x(t) \rangle = \frac{nd\sqrt{\pi}}{2} e^{-a^2/2} I_{1/2}\left(\frac{a^2}{2}\right) - \left(nde^{-a^2} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} \cos(2q^n t') I_1(2aq) dq. \quad (6.59)$$

Podemos simplificar a Eq.(6.59), sabendo que a função de Bessel modificada de primeira ordem pode ser escrita como [131]

$$I_\nu(x) = \frac{1}{(\sqrt{\pi}) \Gamma(n + 1/2)} \left(\frac{x}{2}\right)^\nu \int_{-1}^1 e^{-xt} (1 - t^2)^{\nu-1/2} dt. \quad (6.60)$$

Fazendo $\nu = 1/2$ na Eq.(6.60), teremos:

$$I_{1/2}(x) = \frac{1}{(\sqrt{\pi}) \Gamma(1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{1/2} \int_{-1}^1 e^{-xt} dt, \quad (6.61)$$

$$I_{1/2}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{x}{2}\right)^{1/2} \left[-\frac{e^{-xt}}{x} \right]_{-1}^1, \quad (6.62)$$

$$I_{1/2}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{x}{2}\right)^{1/2} \left(\frac{e^x - e^{-x}}{x} \right), \quad (6.63)$$

fazendo $x = a^2/2$,

$$I_{1/2}\left(\frac{a^2}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{a^2}{4}\right)^{1/2} \left(\frac{2}{a^2}\right) \left(e^{a^2/2} - e^{-a^2/2}\right), \quad (6.64)$$

$$I_{1/2}\left(\frac{a^2}{2}\right) = \left(\frac{e^{a^2/2} - e^{-a^2/2}}{a\sqrt{\pi}} \right), \quad (6.65)$$

Organizando o primeiro termo da Eq.(6.60), teremos

$$\frac{nd\sqrt{\pi}}{2} e^{-a^2/2} I_{1/2}\left(\frac{a^2}{2}\right) = \left(\frac{nd\sqrt{\pi}}{2} e^{-a^2/2} \right) \left(\frac{e^{a^2/2} - e^{-a^2/2}}{a\sqrt{\pi}} \right), \quad (6.66)$$

$$\frac{nd\sqrt{\pi}}{2}e^{-a^2/2}I_{1/2}\left(\frac{a^2}{2}\right) = \frac{1 - e^{-a^2}}{2a}nd. \quad (6.67)$$

Finalmente, substituindo a Eq.(6.67) na Eq. (6.59), teremos

$$\langle x(t) \rangle = nd\frac{1 - e^{-a^2}}{2a} - nde^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} \cos(2q^n t') I_1(2aq) dq. \quad (6.68)$$

Podemos ainda definir $\langle \tilde{x}(t) \rangle = \langle x(t) \rangle / d$, logo

$$\langle \tilde{x}(t) \rangle = n\frac{1 - e^{-a^2}}{2a} - ne^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} \cos(2q^n t') I_1(2aq) dq. \quad (6.69)$$

onde n corresponde ao número de camadas de grafeno.

A.2 - Cálculo da $\langle x \rangle$ para $C_1 = 1$ e $C_2 = 1$

Para $C_1 = 1$ e $C_2 = 1$, as Eq's (6.1) e (6.2) serão dadas por

$$\psi_1(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\int G_{11}(\vec{r}, \vec{r}', t) f(\vec{r}') d\vec{r}' + \int G_{12}(\vec{r}, \vec{r}', t) f(\vec{r}') d\vec{r}' \right] \quad (6.70)$$

e

$$\psi_2(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\int G_{21}(\vec{r}, \vec{r}', t) f(\vec{r}') d\vec{r}' + \int G_{22}(\vec{r}, \vec{r}', t) f(\vec{r}') d\vec{r}' \right]. \quad (6.71)$$

A integral da Eq.(6.70) que contém o termo $G_{11}(\vec{r}, \vec{r}', t)$ é dada pela Eq.(6.6) e a integral da Eq.(6.71) que contém o termo $G_{12}(\vec{r}, \vec{r}', t)$ é dada pela Eq.(6.6). Como $G_{11}(\vec{r}, \vec{r}', t) = G_{22}(\vec{r}, \vec{r}', t)$ e $G_{21}(\vec{r}, \vec{r}', t) = G_{12}^*(\vec{r}, \vec{r}', t)$, teremos que

$$\begin{aligned} \psi_1(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{d}{2\hbar^2\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \cdot \int \exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \right. \\ \cdot \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p} - \frac{id}{2\hbar^2\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \int \left(\frac{p_x - ip_y}{p}\right)^n \\ \left. \cdot \exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p} \right\} \quad (6.72) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \psi_2(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{-id}{2\hbar^2\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \int \left(\frac{p_x + ip_y}{p}\right)^n \right. \\ \cdot \exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p} + \frac{d}{2\hbar^2\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \\ \left. \cdot \int \exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \cdot \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p} \right\}. \quad (6.73) \end{aligned}$$

Mais uma vez, queremos determinar $\langle \vec{r}(t) \rangle$ usando a representação do momento

$$\langle \vec{r}(t) \rangle = \sum_{j=1}^2 \int \overline{\psi_j}^\dagger(\vec{p}, t) \left[i\hbar \vec{\nabla}_p \right] \overline{\psi_j}(\vec{p}, t) d\vec{p}, \quad (6.74)$$

onde

$$\bar{\psi}_j(\vec{p}, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \exp\left[-i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right] \psi_j(\vec{r}, t) d\vec{r} \quad (6.75)$$

é a transformada de Fourier de $\psi_j(\vec{r}, t)$. Logo

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_1(\vec{p}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{2\pi\hbar} \left\{ \frac{d}{2\hbar^2\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \cdot \int \exp\left[-i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right] d\vec{r} \right. \\ \cdot \int \exp\left(i\frac{\vec{p}' \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{p'^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p'_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \cdot \cos\left(\frac{p'^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p}' \\ \left. - \frac{id}{2\hbar^2\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \int \exp\left[-i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right] d\vec{r} \int \left(\frac{p'_x - ip'_y}{p'}\right)^n \right. \\ \left. \cdot \exp\left(i\frac{\vec{p}' \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{p'^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p'_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p'^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p}' \right\}, \quad (6.76) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_1(\vec{p}, t) = \frac{d}{4\hbar^3\pi\sqrt{2\pi^3}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \left\{ \int \exp\left(i\frac{\vec{p}' \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{p'^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p'_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \right. \\ \cdot \cos\left(\frac{p'^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p}' \cdot \int \exp\left[-i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right] d\vec{r} - i \int \left(\frac{p'_x - ip'_y}{p'}\right)^n \\ \left. \cdot \exp\left(i\frac{\vec{p}' \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{p'^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p'_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p'^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p}' \cdot \int \exp\left[-i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right] d\vec{r} \right\}, \quad (6.77) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_1(\vec{p}, t) = \frac{d}{4\hbar^3\pi\sqrt{2\pi^3}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \left\{ \int \exp\left(-\frac{p'^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p'_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \right. \\ \cdot \cos\left(\frac{p'^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p}' \cdot \int \exp\left[-i\frac{(\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{r}}{\hbar}\right] d\vec{r} - i \int \left(\frac{p'_x - ip'_y}{p'}\right)^n \\ \left. \cdot \exp\left(-\frac{p'^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p'_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p'^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p}' \cdot \int \exp\left[-i\frac{(\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{r}}{\hbar}\right] d\vec{r} \right\} \quad (6.78) \end{aligned}$$

novamente, o termo entre chaves é uma delta de Dirac igual a $(2\pi\hbar)^2 \delta(\vec{p} - \vec{p}')$ e fazendo as substituições de variáveis, teremos assim,

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_1(\vec{p}, t) = \frac{d}{\hbar\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \left\{ \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right. \\ \left. - i \left(\frac{p_x - ip_y}{p}\right)^n \cdot \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right\}. \quad (6.79) \end{aligned}$$

Em coordenadas cartesianas, o operador momento é dado por

$$\vec{\nabla}_p = \hat{x} \frac{\partial}{\partial p_x} + \hat{y} \frac{\partial}{\partial p_y}. \quad (6.80)$$

Logo,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\psi}_1}{\partial p_x} = \frac{d}{\hbar\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \left\{ \frac{\partial}{\partial p_x} \left[\exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right] \right. \\ \left. - i \frac{\partial}{\partial p_x} \left[\left(\frac{p_x - ip_y}{p}\right)^n \cdot \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right] \right\}. \quad (6.81) \end{aligned}$$

A primeira derivada da Eq.(6.81) é igual a Eq.(6.19) e a segunda é igual a Eq.(6.34). Fazendo as mudanças de variáveis utilizadas anteriormente, teremos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\psi}_1}{\partial p_x} = & \frac{d^2}{\hbar^2 \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{q}{2} + aq \operatorname{sen}\theta\right) \left\{ [-q \cos\theta \cos(q^n t') - nq^{n-1} t' \cos\theta \operatorname{sen}(q^n t')] \right. \\ & \left. - i \left[e^{-in\theta} \operatorname{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q \cos\theta \right] + nt' q^{n-1} \cos\theta e^{-in\theta} \cos(q^n t') \right] \right\}. \end{aligned} \quad (6.82)$$

Por outro lado

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\psi}_1}{\partial p_y} = & \frac{d}{\hbar \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \left\{ \frac{\partial}{\partial p_y} \left[\exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma \hbar}\right) \right] \right. \\ & \left. - i \frac{\partial}{\partial p_y} \left[\left(\frac{p_x - ip_y}{p} \right)^n \cdot \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma \hbar}\right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (6.83)$$

Podemos utilizar as Eq's. (6.24) e (6.39) e as substituições de variáveis para reescrever a Eq.(248) como

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\psi}_1}{\partial p_y} = & \frac{d^2}{\hbar^2 \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{q^2}{2} + qa \operatorname{sen}\theta\right) \left\{ [(-q \operatorname{sen}\theta + a) \cos(q^n t') \right. \\ & \left. - nq^{n-1} t' \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}(q^n t')] - i \left[e^{-in\theta} \operatorname{sen}(q^n t') \left[n \left(-\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\operatorname{sen}\theta}{q} \right) - q \operatorname{sen}\theta + a \right] \right. \right. \\ & \left. \left. + nq^{n-1} t' \operatorname{sen}\theta e^{-in\theta} \cos(q^n t') \right] \right\}. \end{aligned} \quad (6.84)$$

Agora que já temos as derivadas de $\bar{\psi}_1$ em relação a p_x e p_y , podemos obter

$$\bar{\psi}_1^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_1 = \left[\bar{\psi}_1^\dagger \left(\frac{\partial \bar{\psi}_1}{\partial p_x} \right) \hat{x} + \bar{\psi}_1^\dagger \left(\frac{\partial \bar{\psi}_1}{\partial p_y} \right) \hat{y} \right], \quad (6.85)$$

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_1^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_1|_{\hat{x}} = & \left\{ \left[\frac{d}{\hbar \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{q^2}{2} + aq \operatorname{sen}\theta\right) \cos(q^n t') \right] \right. \\ & \left. + \left[\frac{id}{\hbar \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) e^{in\theta} \cdot \exp\left(-\frac{q^2}{2} + aq \operatorname{sen}\theta\right) \operatorname{sen}(q^n t') \right] \right\} \\ & \cdot \frac{d^2}{\hbar^2 \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{q}{2} + aq \operatorname{sen}\theta\right) \left\{ [-q \cos\theta \cos(q^n t') - nq^{n-1} t' \cos\theta \operatorname{sen}(q^n t')] \right. \\ & \left. - i \left[e^{-in\theta} \operatorname{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q \cos\theta \right] + nt' q^{n-1} \cos\theta e^{-in\theta} \cos(q^n t') \right] \right\}, \end{aligned} \quad (6.86)$$

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_1^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_1|_{\hat{x}} = & \frac{d^3}{2\pi \hbar^3} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq \operatorname{sen}\theta) \left\{ [\cos(q^n t')] + [ie^{in\theta} \cdot \operatorname{sen}(q^n t')] \right\} \\ & \cdot \left\{ -q \cos\theta \cos(q^n t') - nq^{n-1} t' \cos\theta \operatorname{sen}(q^n t') \right. \\ & \left. - ie^{-in\theta} \operatorname{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q \cos\theta \right] - int' q^{n-1} \cos\theta e^{-in\theta} \cos(q^n t') \right\}. \end{aligned} \quad (6.87)$$

Multiplicando apenas o termo $M_1 = [\cos(q^n t')] [q \cos \theta \cos(q^n t')]$, teremos

$$M_1 = q \cos \theta \cos^2(q^n t'). \quad (6.88)$$

Multiplicando apenas o termo $M_2 = [\cos(q^n t')] [n q^{n-1} t' \cos \theta \sin(q^n t')]$, teremos

$$M_2 = n q^{n-1} t' \cos \theta \sin(q^n t') \cos(q^n t'), \quad (6.89)$$

como $\sin(a) \cos(a) = \sin(2a)/2$, então

$$M_2 = \left[\frac{1}{2} n q^{n-1} t' \cos \theta \sin(2q^n t') \right]. \quad (6.90)$$

Multiplicando apenas o termo $M_3 = [\cos(q^n t')] \left\{ i e^{-in\theta} \sin(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos \theta}{q} \right) - q \cos \theta \right] \right\}$, teremos

$$M_3 = i e^{-in\theta} \sin(q^n t') \cos(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos \theta}{q} \right) - q \cos \theta \right], \quad (6.91)$$

$$M_3 = \frac{i}{2} e^{-in\theta} \sin(2q^n t') \left[n \left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos \theta}{q} \right) - q \cos \theta \right]. \quad (6.92)$$

Multiplicando apenas o termo $M_4 = [\cos(q^n t')] [n t' q^{n-1} \cos \theta e^{-in\theta} \cos(q^n t')]$, teremos

$$M_4 = \cos(q^n t') [i n t' q^{n-1} \cos \theta e^{-in\theta} \cos(q^n t')], \quad (6.93)$$

$$M_4 = i n t' q^{n-1} \cos \theta e^{-in\theta} \cos^2(q^n t'). \quad (6.94)$$

Multiplicando apenas o termo $M_5 = [[i e^{in\theta} \cdot \sin(q^n t')]] [q \cos \theta \cos(q^n t')]$, teremos

$$M_5 = q i e^{in\theta} \cos \theta \sin(q^n t') \cos(q^n t'), \quad (6.95)$$

$$M_5 = \frac{i}{2} q e^{in\theta} \cos \theta \sin(2q^n t'). \quad (6.96)$$

Multiplicando apenas o termo $M_6 = [i e^{in\theta} \cdot \sin(q^n t')] [n q^{n-1} t' \cos \theta \sin(q^n t')]$, teremos

$$M_6 = [i n q^{n-1} e^{in\theta} t' \cos \theta \sin^2(q^n t')]. \quad (6.97)$$

Multiplicando apenas o termo $M_7 = [i e^{in\theta} \cdot \sin(q^n t')] \left\{ i e^{-in\theta} \sin(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos \theta}{q} \right) - q \cos \theta \right] \right\}$, teremos

$$M_7 = \left\{ -\sin^2(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos \theta}{q} \right) - q \cos \theta \right] \right\}. \quad (6.98)$$

Multiplicando apenas o termo $M_8 = [i e^{in\theta} \cdot \sin(q^n t')] [i n t' q^{n-1} \cos \theta e^{i-n\theta} \cos(q^n t')]$, teremos

$$M_8 = [-n t' q^{n-1} \cos \theta \sin(q^n t') \cos(q^n t')], \quad (6.99)$$

$$M_8 = \left[-\frac{1}{2} n t' q^{n-1} \cos \theta \sin(2q^n t') \right]. \quad (6.100)$$

Logo, $\bar{\psi}_1^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_1|_{\hat{x}}$ será dada por

$$\bar{\psi}_1^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_1|_{\hat{x}} = \frac{d^3}{2\pi\hbar^3} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq\text{sen}\theta) \cdot [-M_1 - M_2 - M_3 - M_4 - M_5 - M_6 - M_7 - M_8]. \quad (6.101)$$

Agora, vamos calcular $\bar{\psi}_2$:

$$\bar{\psi}_2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \exp\left[-i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right] \psi_2(\vec{r}, t) d\vec{r}, \quad (6.102)$$

$$\bar{\psi}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{2\pi\hbar} \left\{ \frac{-id}{2\hbar^2\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \int \left(\frac{p_x + ip_y}{p}\right)^n \exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p} \cdot \int \exp\left[-i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right] d\vec{r} + \frac{d}{2\hbar^2\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \cdot \int \exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \cdot \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p} \right\}, \quad (6.103)$$

$$\bar{\psi}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{2\pi\hbar} \left\{ \frac{-id}{2\hbar^2\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \int \left(\frac{p_x + ip_y}{p}\right)^n \exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p} \cdot \int \exp\left[-i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right] d\vec{r} + \frac{d}{2\hbar^2\sqrt{\pi^3}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \cdot \int \exp\left(i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \cdot \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p} \right\}, \quad (6.104)$$

$$\bar{\psi}_2 = \frac{d}{4\hbar^3\pi\sqrt{2\pi^3}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \left\{ -i \int \exp\left[-i\frac{(\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{r}}{\hbar}\right] d\vec{r} \right\} \int \left(\frac{p'_x + ip'_y}{p'}\right)^n \cdot \exp\left(-\frac{p'^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p'_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p'^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p}' + \left\{ \int \exp\left[-i\frac{(\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{r}}{\hbar}\right] d\vec{r} \right\} \cdot \int \exp\left(-\frac{p'^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p'_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{p'^n t}{\gamma\hbar}\right) d\vec{p}', \quad (6.105)$$

novamente, o termo entre chaves é uma delta de Dirac igual a $(2\pi\hbar)^2 \delta(\vec{p} - \vec{p}')$, assim,

$$\bar{\psi}_2 = \frac{d}{\hbar\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \left\{ \left[-i \left(\frac{p_x + ip_y}{p}\right)^n \cdot \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right] + \left[\exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right] \right\}. \quad (6.106)$$

Derivando a Eq.(6.60) em relação a p_x e fazendo as substituições de variáveis, podemos obter:

$$\frac{\partial \bar{\psi}_2}{\partial p_x} = \frac{d^2}{\hbar^2\sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{q^2}{2} + aq\text{sen}\theta\right) \left\{ -ie^{in\theta} \text{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q}\right) - q\cos\theta \right] - int' q^{n-1} \cos\theta e^{in\theta} \cos(q^n t') - q\cos\theta \cos(q^n t') - nq^{n-1} t' \cos\theta \text{sen}(q^n t') \right\}. \quad (6.107)$$

Como queremos somente o valor médio de x , então vamos calcular apenas a componente \hat{x} da equação abaixo,

$$\bar{\psi}_2^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_2 = \left[\bar{\psi}_2^\dagger \left(\frac{\partial \bar{\psi}_2}{\partial p_x} \right) \hat{x} + \bar{\psi}_2^\dagger \left(\frac{\partial \bar{\psi}_2}{\partial p_y} \right) \hat{y} \right]. \quad (6.108)$$

Logo:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_2^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_2 |_{\hat{x}} = & \left\{ \frac{d}{\hbar \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \left\{ \left[i e^{-i\theta} \cdot \exp\left(-\frac{q^2}{2} + aq \sin\theta\right) \sin(q^n t') \right] \right\} \right. \\ & + \left. \left[\exp\left(-\frac{q^2}{2} + aq \sin\theta\right) \cos(q^n t') \right] \right\} \cdot \frac{d^2}{\hbar^2 \sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \\ & \cdot \exp\left(-\frac{q^2}{2} + aq \sin\theta\right) \cdot \left\{ -i e^{i\theta} \sin(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q \cos\theta \right] \right. \\ & \left. - int' q^{n-1} \cos\theta e^{i\theta} \cos(q^n t') - q \cos\theta \cos(q^n t') - nq^{n-1} t' \cos\theta \sin(q^n t') \right\}, \quad (6.109) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_2^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_2 |_{\hat{x}} = & \frac{d^3}{2\pi \hbar^3} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq \sin\theta) \{ \cos(q^n t') + i e^{-i\theta} \cdot \sin(q^n t') \} \\ & \{ -q \cos\theta \cos(q^n t') - nq^{n-1} t' \cos\theta \sin(q^n t') \\ & - i e^{i\theta} \sin(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q \cos\theta \right] - int' q^{n-1} \cos\theta e^{i\theta} \cos(q^n t') \}. \quad (6.110) \end{aligned}$$

Multiplicando apenas o termo $M'_1 = [\cos(q^n t')] \{q \cos\theta \cos(q^n t')\}$, teremos

$$M'_1 = q \cos\theta \cos^2(q^n t'). \quad (6.111)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_2 = [\cos(q^n t')] \{nq^{n-1} t' \cos\theta \sin(q^n t')\}$, teremos

$$M'_2 = nq^{n-1} t' \cos\theta \sin(q^n t') \cos(q^n t'), \quad (6.112)$$

$$M'_2 = \frac{n}{2} q^{n-1} t' \cos\theta \sin(2q^n t'). \quad (6.113)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_3 = [\cos(q^n t')] \left\{ i e^{i\theta} \sin(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q \cos\theta \right] \right\}$, teremos

$$M'_3 = \left\{ i e^{i\theta} \sin(q^n t') \cos(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q \cos\theta \right] \right\}, \quad (6.114)$$

$$M'_3 = \left\{ \frac{i}{2} e^{i\theta} \sin(2q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q \cos\theta \right] \right\}. \quad (6.115)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_4 = [\cos(q^n t')] \{int' q^{n-1} \cos\theta e^{i\theta} \cos(q^n t')\}$, teremos

$$M'_4 = int' q^{n-1} \cos\theta e^{i\theta} \cos^2(q^n t'). \quad (6.116)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_5 = [i e^{-i\theta} \cdot \sin(q^n t')] \{q \cos\theta \cos(q^n t')\}$, teremos

$$M'_5 = i e^{-i\theta} q \cos\theta \cos(q^n t') \sin(q^n t'), \quad (6.117)$$

$$M'_5 = \left\{ \frac{i}{2} e^{-in\theta} q \cos\theta \operatorname{sen}(2q^n t') \right\}. \quad (6.118)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_6 = [ie^{-in\theta} \cdot \operatorname{sen}(q^n t')] \{nq^{n-1}t' \cos\theta \operatorname{sen}(q^n t')\}$, teremos

$$M'_6 = ie^{-in\theta} nq^{n-1}t' \cos\theta \operatorname{sen}^2(q^n t'). \quad (6.119)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_7 = [ie^{-in\theta} \cdot \operatorname{sen}(q^n t')] \left\{ ie^{in\theta} \operatorname{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q \cos\theta \right] \right\}$, teremos

$$M'_7 = [ie^{-in\theta} \cdot \operatorname{sen}(q^n t')] \left\{ ie^{in\theta} \operatorname{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q \cos\theta \right] \right\} \quad (6.120)$$

$$M'_7 = \left\{ -\operatorname{sen}^2(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q \cos\theta \right] \right\}. \quad (6.121)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_8 = [ie^{-in\theta} \cdot \operatorname{sen}(q^n t')] \{int'q^{n-1} \cos\theta e^{in\theta} \cos(q^n t')\}$, teremos

$$M'_8 = \{ -nt'q^{n-1} \cos\theta \operatorname{sen}(q^n t') \cos(q^n t') \}, \quad (6.122)$$

como $\operatorname{sen}(a) \cos(a) = \operatorname{sen}(2a)/2$, então

$$M'_8 = \left\{ -\frac{n}{2} t' q^{n-1} \cos\theta \operatorname{sen}(2q^n t') \right\}. \quad (6.123)$$

Logo, a Eq.(269) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \overline{\psi}_2^\dagger \vec{\nabla}_p \overline{\psi}_2 |_{\hat{x}} &= \frac{d^3}{2\pi \hbar^3} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq \operatorname{sen}\theta) \\ &\cdot [-M'_1 - M'_2 - M'_3 - M'_4 - M'_5 - M'_6 - M'_7 - M'_8]. \end{aligned} \quad (6.124)$$

Somando as Eq's (6.101) e (6.124), teremos

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^2 \overline{\psi}_j^\dagger \vec{\nabla}_p \overline{\psi}_j |_{\hat{x}} &= \frac{d^3}{2\pi \hbar^3} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq \operatorname{sen}\theta) \left\{ -q \cos\theta \cos^2(q^n t') \right. \\ &- \frac{n}{2} q^{n-1} t' \cos\theta \operatorname{sen}(2q^n t') - \frac{i}{2} e^{-in\theta} \operatorname{sen}(2q^n t') \left[n \left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q \cos\theta \right] \\ &- int'q^{n-1} \cos\theta \cos^2(q^n t') e^{-in\theta} - \frac{i}{2} q e^{in\theta} \cos\theta \operatorname{sen}(2q^n t') \\ &- inq^{n-1} e^{in\theta} t' \cos\theta \operatorname{sen}^2(q^n t') + \operatorname{sen}^2(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q \cos\theta \right] \\ &+ \frac{n}{2} t' q^{n-1} \cos\theta \operatorname{sen}(2q^n t') - q \cos\theta \cos^2(q^n t') \\ &- \frac{n}{2} q^{n-1} t' \cos\theta \operatorname{sen}(2q^n t') - \frac{i}{2} e^{in\theta} \operatorname{sen}(2q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q \cos\theta \right] \\ &- int'q^{n-1} \cos\theta e^{in\theta} \cos^2(q^n t') - \frac{i}{2} e^{-in\theta} q \cos\theta \operatorname{sen}(2q^n t') \\ &- ie^{-in\theta} nq^{n-1} t' \cos\theta \operatorname{sen}^2(q^n t') + \operatorname{sen}^2(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q \cos\theta \right] \\ &\left. + \frac{n}{2} t' q^{n-1} \cos\theta \operatorname{sen}(2q^n t') \right\} \end{aligned} \quad (6.125)$$

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^2 \bar{\psi}_j^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_j |_{\hat{x}} &= \frac{d^3}{2\pi\hbar^3} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq\text{sen}\theta) \\
&\quad \cdot \left\{ -2q\cos\theta\cos^2(q^n t') - 2q\cos\theta\text{sen}^2(q^n t') \right. \\
&\quad \left. - \frac{n}{2} q^{n-1} t' \cos\theta \text{sen}(2q^n t') + \frac{n}{2} t' q^{n-1} \cos\theta \text{sen}(2q^n t') \right. \\
-\frac{i}{2} e^{i\theta} \text{sen}(2q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q\cos\theta \right] &- \frac{i}{2} e^{-i\theta} \text{sen}(2q^n t') \left[n \left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) - q\cos\theta \right] \\
&- int' q^{n-1} e^{-i\theta} \cos\theta \cos^2(q^n t') - int' q^{n-1} e^{-i\theta} \cos\theta \text{sen}^2(q^n t') \\
&- \frac{i}{2} q e^{i\theta} \cos\theta \text{sen}(2q^n t') - \frac{i}{2} e^{-i\theta} q \cos\theta \text{sen}(2q^n t') \\
&- int' q^{n-1} \cos\theta e^{i\theta} \cos^2(q^n t') - int' q^{n-1} e^{i\theta} \cos\theta \text{sen}^2(q^n t') \\
&+ \text{sen}^2(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) \right] + \text{sen}^2(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) \right] \\
&\quad \left. - \frac{n}{2} q^{n-1} t' \cos\theta \text{sen}(2q^n t') + \frac{n}{2} t' q^{n-1} \cos\theta \text{sen}(2q^n t') \right\} \quad (6.126)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^2 \bar{\psi}_j^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_j |_{\hat{x}} &= \frac{d^3}{2\pi\hbar^3} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq\text{sen}\theta) \cdot \left\{ -2q\cos\theta \right. \\
&- \frac{n}{2} i e^{i\theta} \text{sen}(2q^n t') \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) + \frac{i}{2} q e^{i\theta} \cos\theta \text{sen}(2q^n t') \\
&- \frac{i}{2} n e^{-i\theta} \text{sen}(2q^n t') \left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) + \frac{i}{2} q e^{-i\theta} \cos\theta \text{sen}(2q^n t') \\
&\quad - int' q^{n-1} \cos\theta e^{-i\theta} - int' q^{n-1} \cos\theta e^{i\theta} \\
&\quad \left. - \frac{i}{2} q e^{i\theta} \cos\theta \text{sen}(2q^n t') - \frac{i}{2} e^{-i\theta} q \cos\theta \text{sen}(2q^n t') \right. \\
&\quad \left. + \text{sen}^2(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) \right] + \text{sen}^2(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q} \right) \right] \right\}, \quad (6.127)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^2 \bar{\psi}_j^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_j |_{\hat{x}} &= \frac{d^3}{2\pi\hbar^3} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq\text{sen}\theta) \cdot \left\{ -2q\cos\theta \right. \\
&- \frac{n}{2q} i e^{i\theta} \text{sen}(2q^n t') (e^{-i\theta} - \cos\theta) - \frac{i}{2q} n e^{-i\theta} \text{sen}(2q^n t') (e^{i\theta} - \cos\theta) \\
&\quad - int' q^{n-1} \cos\theta (e^{-i\theta} + e^{i\theta}) \\
&\quad \left. + \frac{n}{q} \text{sen}^2(q^n t') (e^{i\theta} - \cos\theta) + \frac{n}{q} \text{sen}^2(q^n t') (e^{-i\theta} - \cos\theta) \right\}, \quad (6.128)
\end{aligned}$$

como $e^{\pm i\theta} - \cos\theta = \pm i\text{sen}\theta$, então

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^2 \bar{\psi}_j^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_j|_{\hat{x}} &= \frac{d^3}{2\pi\hbar^3} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq\text{sen}\theta) \cdot \{-2q\cos\theta \\ &\quad - \frac{n}{2q} i e^{i n\theta} \text{sen}(2q^n t') (-i\text{sen}\theta) - \frac{i}{2q} n e^{-i n\theta} \text{sen}(2q^n t') (i\text{sen}\theta) \\ &\quad - 2int' q^{n-1} \cos\theta \cos(n\theta) \\ &\quad + \frac{n}{q} \text{sen}^2(q^n t') (i\text{sen}\theta) + \frac{n}{q} \text{sen}^2(q^n t') (-i\text{sen}\theta)\}, \quad (6.129) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^2 \bar{\psi}_j^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_j|_{\hat{x}} &= \frac{d^3}{2\pi\hbar^3} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq\text{sen}\theta) \cdot \{-2q\cos\theta \\ &\quad + \frac{i}{2q} n e^{i n\theta} \text{sen}(2q^n t') (i\text{sen}\theta) - \frac{i}{2q} n e^{-i n\theta} \text{sen}(2q^n t') (i\text{sen}\theta) \\ &\quad - 2int' q^{n-1} \cos\theta \cos(n\theta) \\ &\quad + \frac{n}{q} \text{sen}^2(q^n t') (i\text{sen}\theta) - \frac{n}{q} \text{sen}^2(q^n t') (i\text{sen}\theta)\}, \quad (6.130) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^2 \bar{\psi}_j^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_j|_{\hat{x}} &= \frac{d^3}{2\pi\hbar^3} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq\text{sen}\theta) \cdot \{-2q\cos\theta \\ &\quad - \frac{1}{2q} n \text{sen}\theta \text{sen}(2q^n t') (e^{i n\theta} - e^{-i n\theta}) - 2int' q^{n-1} \cos\theta \cos(n\theta)\}, \quad (6.131) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^2 \bar{\psi}_j^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_j|_{\hat{x}} &= \frac{d^3}{2\pi\hbar^3} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq\text{sen}\theta) \cdot \{-2q\cos\theta \\ &\quad - \frac{i}{q} n \text{sen}\theta \text{sen}(n\theta) \text{sen}(2q^n t') - 2int' q^{n-1} \cos\theta \cos(n\theta)\}, \quad (6.132) \end{aligned}$$

Desta forma, teremos que

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= \left(i\hbar \frac{\hbar^2}{d^2} \right) \left(\frac{d^3 e^{-a^2}}{2\hbar^3 \pi} \right) \int_0^\infty \int_{-\pi}^\pi \{ \exp(-q^2 + 2aq\text{sen}\theta) \\ &\quad [-2q^2 \cos\theta - in\text{sen}(2q^n t') \text{sen}\theta \text{sen}(n\theta) - 2int' q^n \cos\theta \cos(n\theta)] \} dq d\theta, \quad (6.133) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= \left(\frac{i d e^{-a^2}}{2\pi} \right) \left\{ \int_0^\infty e^{-q^2} dq \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq\text{sen}\theta) \right. \\ &\quad \left. [-2q^2 \cos\theta - in\text{sen}(2q^n t') \text{sen}\theta \text{sen}(n\theta) - 2int' q^n \cos\theta \cos(n\theta)] d\theta \right\}. \quad (6.134) \end{aligned}$$

Agora, vamos resolver a integral na variável θ ,

$$\left[-2q^2 \int_{-\pi}^{\pi} \exp(2aq\text{sen}\theta) \cos\theta - i\text{sen}(2q^n t') \int_{-\pi}^{\pi} \exp(2aq\text{sen}\theta) \text{sen}\theta \text{sen}(n\theta) - 2it'q^n \int_{-\pi}^{\pi} \exp(2aq\text{sen}\theta) \cos\theta \cos(n\theta) \right] d\theta. \quad (6.135)$$

Fazendo $n = 1$ na Eq.(6.135) e consultando uma tabela de integrais, teremos

$$-2q^2 \cdot (0) - i\text{sen}(2qt') \{2\pi I_2(2aq) + \pi_0 F_1[2, a^2 q^2]\} - 2\pi it' q_0 F_1[2, a^2 q^2], \quad (6.136)$$

$$-2\pi i\text{sen}(2qt') I_2(2aq) - \frac{1}{2} i\pi \text{sen}(2qt')_0 F_1[2, a^2 q^2] - 2\pi it' q_0 F_1[2, a^2 q^2], \quad (6.137)$$

onde ${}_0F_1[b, z]$ é a função hipergeométrica confluyente regularizada.

Substituindo a Eq.(6.137) na Eq.(6.134), teremos:

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= \left(\frac{ide^{-a^2}}{2\pi} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} [-2\pi i\text{sen}(2qt') I_2(2aq)] dq \\ &\quad + \left(\frac{ide^{-a^2}}{2\pi} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} [-i\pi \text{sen}(2qt')_0 F_1[2, a^2 q^2]] dq \\ &\quad + \left(\frac{ide^{-a^2}}{2\pi} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} [-2\pi it' q_0 F_1[2, a^2 q^2]] dq, \end{aligned} \quad (6.138)$$

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= de^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} [\text{sen}(2qt') I_2(2aq)] dq \\ &\quad + \frac{1}{2} de^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} [\text{sen}(2qt')_0 F_1[2, a^2 q^2]] dq \\ &\quad + dt' e^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} [q_0 F_1[2, a^2 q^2]] dq, \end{aligned} \quad (6.139)$$

Podemos utilizar as relações entre a função hipergeométrica confluyente regularizada, função de Bessel e função de Bessel modificada disponível na Ref.[131]:

$$J_\alpha(x) = \frac{(x/2)^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)_0} F_1\left[\alpha+1, -\frac{1}{4}x^2\right] \quad (6.140)$$

e

$$J_n(ix) = i^n I_n(x). \quad (6.141)$$

Considerando $\alpha = 1$ e $x = 2iaq$ na Eq.(6.140) uma vez que queremos relacionar ${}_0F_1[2, a^2 q^2]$ com $J_n(ix)$. Assim,

$$J_1(2iaq) = \frac{iaq}{\Gamma(2)_0} F_1[2, a^2 q^2], \quad (6.142)$$

$${}_0F_1[2, a^2 q^2] = \frac{1}{iaq} J_1(2iaq). \quad (6.143)$$

Utilizando a Eq.(6.141), podemos obter

$$J_1(2iaq) = i \cdot I_1(2aq), \quad (6.144)$$

substituindo na Eq.(6.143), teremos:

$${}_0F_1[2, a^2q^2] = \frac{1}{iaq} [i \cdot I_1(2aq)], \quad (6.145)$$

$${}_0F_1[2, a^2q^2] = \frac{I_1(2aq)}{aq}. \quad (6.146)$$

Vamos agora substituir a Eq.(6.146) na última integral da Eq.(6.139),

$$\frac{1}{a} dt' e^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} q \left[\frac{I_1(2aq)}{aq} \right] dq, \quad (6.147)$$

$$\frac{1}{a} dt' e^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} I_1(2aq) dq, \quad (6.148)$$

$$\frac{1}{a} dt' e^{-a^2} \left[\frac{e^{a^2} - 1}{2a} \right], \quad (6.149)$$

$$d \left(\frac{1 - e^{-a^2}}{2a^2} \right) t'. \quad (6.150)$$

Logo, a Eq.(6.138) será

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle = d \left(\frac{1 - e^{-a^2}}{2a^2} \right) t' + de^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} [\text{sen}(2qt') I_2(2aq)] dq \\ + \frac{1}{2a} de^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} \left[\text{sen}(2qt') \frac{I_1(2aq)}{q} \right] dq \end{aligned} \quad (6.151)$$

Podemos ainda definir $\langle \tilde{x}(t) \rangle = \langle x(t) \rangle / d$, assim

$$\begin{aligned} \langle \tilde{x}(t) \rangle = \left(\frac{1 - e^{-a^2}}{2a^2} \right) t' + e^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} [\text{sen}(2qt') I_2(2aq)] dq \\ + \frac{1}{2a} e^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} \left[\text{sen}(2qt') \frac{I_1(2aq)}{q} \right] dq \end{aligned} \quad (6.152)$$

A partir da relação

$$\frac{d}{dx} I_n(x) = \frac{n}{x} I_n(x) + I_{n+1}(x), \quad (6.153)$$

e considerando $x = 2aq \rightarrow dx = 2aq(dq)$, teremos

$$\frac{1}{2a} \frac{d}{dq} I_1(2aq) = \frac{1}{2aq} I_1(2aq) + I_2(2aq), \quad (6.154)$$

$$\frac{d}{dq} I_1(2aq) = \frac{1}{q} I_1(2aq) + 2a I_2(2aq), \quad (6.155)$$

Logo, podemos reescrever a Eq.(6.152) como

$$\langle \tilde{x}(t) \rangle = \left(\frac{1 - e^{-a^2}}{2a^2} \right) t' + \frac{e^{-a^2}}{2a} \int_0^\infty e^{-q^2} \text{sen}(2qt') \left[\frac{d}{dq} I_1(2aq) \right] dq. \quad (6.156)$$

Agora, fazendo $n = 2$ na Eq.(6.135) e resolvendo as integrais, teremos

$$-2q^2 \cdot (0) - 2i \text{sen}(2q^2 t') \cdot (0) - 2\pi i t' q^2 \cdot (0). \quad (6.157)$$

Logo,

$$\langle x(t) \rangle = 0, \quad (6.158)$$

consequentemente

$$\langle \tilde{x}(t) \rangle = 0. \quad (6.159)$$

Agora, vamos calcular $\langle y(t) \rangle$ para, em seguida, encontrar o seu valor para $n = 2$ (bicamada), uma vez que, utilizando a representação de Heisenberg, concluímos que a mesma será diferente de zero.

Primeiramente, termos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\psi}_1}{\partial p_y} = & \frac{d^2}{\hbar^2 \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{q^2}{2} + q \text{sen}\theta\right) \left\{ [(-q \text{sen}\theta + a) \cos(q^n t') \right. \\ & \left. - nq^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(q^n t')] - i \left[e^{-in\theta} \text{sen}(q^n t') \left[n \left(-\frac{ie^{i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q \text{sen}\theta + a) \right] \right. \right. \\ & \left. \left. + nq^{n-1} t' e^{-in\theta} \text{sen}\theta \cos(q^n t') \right] \right\} \quad (6.160) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\psi}_2(\vec{p}, t)}{\partial p_y} = & \frac{d^2 e^{-a^2/2}}{\hbar^2 \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{q^2}{2} + aq \text{sen}\theta\right] \left\{ -ie^{in\theta} \text{sen}(q^n t') \right. \\ & \cdot \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q \text{sen}\theta + a) \right] - inq^{n-1} t' e^{in\theta} \text{sen}\theta \cos(q^n t') \\ & \left. + (-q \text{sen}\theta + a) \cos(q^n t') - nq^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(q^n t') \right\}. \quad (6.161) \end{aligned}$$

Logo

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_1^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_1 |_{\hat{y}} = & \frac{d^3 e^{-a^2}}{2\pi \hbar^3} \exp[-q^2 + 2aq \text{sen}\theta] \left\{ [\cos(q^n t') + ie^{in\theta} \text{sen}(q^n t')] \right\} \\ & \cdot \left\{ (-q \text{sen}\theta + a) \cos(q^n t') - nq^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(q^n t') \right. \\ & \left. - ie^{-in\theta} \text{sen}(q^n t') \left[n \left(-\frac{ie^{i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q \text{sen}\theta + a) \right] - inq^{n-1} t' e^{-in\theta} \text{sen}\theta \cos(q^n t') \right\}. \quad (6.162) \end{aligned}$$

Multiplicando apenas o termo $M_1 = [\cos(q^n t')] [(-q \text{sen}\theta + a) \cos(q^n t')]$, teremos

$$M_1 = (-q \text{sen}\theta + a) \cos^2(q^n t'). \quad (6.163)$$

Multiplicando apenas o termo $M_2 = [\cos(q^n t')] [nq^{n-1} t' \text{sen} \theta \text{sen}(q^n t')]$, teremos

$$M_2 = nq^{n-1} t' \text{sen} \theta \text{sen}(q^n t') \cos(q^n t'), \quad (6.164)$$

como $\text{sen}(a) \cos(a) = \text{sen}(2a)/2$, então

$$M_2 = \left[\frac{1}{2} nq^{n-1} t' \text{sen} \theta \text{sen}(2q^n t') \right]. \quad (6.165)$$

Multiplicando apenas o termo $M_3 = [\cos(q^n t')] \left\{ ie^{-in\theta} \text{sen}(q^n t') \left[n \left(-\frac{ie^{i\theta}}{q} - \frac{\text{sen} \theta}{q} \right) + (-q \text{sen} \theta + a) \right] \right\}$, teremos

$$M_3 = ie^{-in\theta} \text{sen}(q^n t') \cos(q^n t') \left[n \left(-\frac{ie^{i\theta}}{q} - \frac{\text{sen} \theta}{q} \right) + (-q \text{sen} \theta + a) \right], \quad (6.166)$$

$$M_3 = \frac{i}{2} e^{-in\theta} \text{sen}(2q^n t') \left[n \left(-\frac{ie^{i\theta}}{q} - \frac{\text{sen} \theta}{q} \right) + (-q \text{sen} \theta + a) \right]. \quad (6.167)$$

Multiplicando apenas o termo $M_4 = [\cos(q^n t')] [inq^{n-1} t' e^{-in\theta} \text{sen} \theta \cos(q^n t')]$, teremos

$$M_4 = \cos(q^n t') [inq^{n-1} t' e^{-in\theta} \text{sen} \theta \cos(q^n t')], \quad (6.168)$$

$$M_4 = inq^{n-1} t' e^{-in\theta} \text{sen} \theta \cos^2(q^n t'). \quad (6.169)$$

Multiplicando apenas o termo $M_5 = [ie^{in\theta} \cdot \text{sen}(q^n t')] [(-q \text{sen} \theta + a) \cos(q^n t')]$, teremos

$$M_5 = ie^{in\theta} (-q \text{sen} \theta + a) \text{sen}(q^n t') \cos(q^n t'), \quad (6.170)$$

$$M_5 = \frac{i}{2} (-q \text{sen} \theta + a) e^{in\theta} \text{sen}(2q^n t'). \quad (6.171)$$

Multiplicando apenas o termo $M_6 = [ie^{in\theta} \cdot \text{sen}(q^n t')] [nq^{n-1} t' \text{sen} \theta \text{sen}(q^n t')]$, teremos

$$M_6 = [inq^{n-1} e^{in\theta} t' \text{sen} \theta \text{sen}^2(q^n t')]. \quad (6.172)$$

Multiplicando apenas o termo $M_7 = [ie^{in\theta} \cdot \text{sen}(q^n t')] \left\{ ie^{-in\theta} \text{sen}(q^n t') \left[n \left(-\frac{ie^{i\theta}}{q} - \frac{\text{sen} \theta}{q} \right) + (-q \text{sen} \theta + a) \right] \right\}$, teremos

$$M_7 = \left\{ -\text{sen}^2(q^n t') \left[n \left(-\frac{ie^{i\theta}}{q} - \frac{\text{sen} \theta}{q} \right) + (-q \text{sen} \theta + a) \right] \right\}. \quad (6.173)$$

Multiplicando apenas o termo $M_8 = [ie^{in\theta} \cdot \text{sen}(q^n t')] [inq^{n-1} t' e^{-in\theta} \text{sen} \theta \cos(q^n t')]$, teremos

$$M_8 = [-nt' q^{n-1} \text{sen} \theta \text{sen}(q^n t') \cos(q^n t')], \quad (6.174)$$

$$M_8 = \left[-\frac{1}{2} nt' q^{n-1} \text{sen} \theta \text{sen}(2q^n t') \right]. \quad (6.175)$$

Logo, $\bar{\psi}_1^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_1|_{\hat{y}}$ será dada por

$$\bar{\psi}_1^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_1|_{\hat{x}} = \frac{d^3}{2\pi\hbar^3} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq\text{sen}\theta) \cdot [M_1 - M_2 - M_3 - M_4 + M_5 - M_6 - M_7 - M_8]. \quad (6.176)$$

Por outro lado, teremos

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_2^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_2|_{\hat{x}} = & \frac{d^3}{2\pi\hbar^3} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq\text{sen}\theta) \{ \cos(q^n t') + ie^{-in\theta} \cdot \text{sen}(q^n t') \} \\ & \{ (-q\text{sen}\theta + a) \cos(q^n t') - nq^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(q^n t') \\ & - ie^{in\theta} \text{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q\text{sen}\theta + a) \right] - inq^{n-1} t' \text{sen}\theta e^{in\theta} \cos(q^n t') \}. \end{aligned} \quad (6.177)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_1 = [\cos(q^n t')] \{(-q\text{sen}\theta + a) \cos(q^n t')\}$, teremos

$$M'_1 = (-q\text{sen}\theta + a) \cos^2(q^n t'). \quad (6.178)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_2 = [\cos(q^n t')] \{nq^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(q^n t')\}$, teremos

$$M'_2 = nq^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(q^n t') \cos(q^n t'), \quad (6.179)$$

$$M'_2 = \frac{1}{2} nq^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(2q^n t'). \quad (6.180)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_3 = [\cos(q^n t')] \{ie^{in\theta} \text{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q\text{sen}\theta + a) \right]\}$, teremos

$$M'_3 = \left\{ ie^{in\theta} \text{sen}(q^n t') \cos(q^n t') \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q\text{sen}\theta + a) \right] \right\}, \quad (6.181)$$

$$M'_3 = \left\{ \frac{1}{2} ie^{in\theta} \text{sen}(2q^n t') \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q\text{sen}\theta + a) \right] \right\}. \quad (6.182)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_4 = [\cos(q^n t')] [inq^{n-1} t' \text{sen}\theta e^{in\theta} \cos(q^n t')]$, teremos

$$M'_4 = int' q^{n-1} \text{sen}\theta e^{in\theta} \cos^2(q^n t'). \quad (6.183)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_5 = [ie^{-in\theta} \cdot \text{sen}(q^n t')] [(-q\text{sen}\theta + a) \cos(q^n t')]$, teremos

$$M'_5 = ie^{-in\theta} (-q\text{sen}\theta + a) \cos(q^n t') \text{sen}(q^n t'), \quad (6.184)$$

$$M'_5 = \frac{i}{2} e^{-in\theta} (-q\text{sen}\theta + a) \text{sen}(2q^n t'). \quad (6.185)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_6 = [ie^{-in\theta} \cdot \text{sen}(q^n t')] \{nq^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(q^n t')\}$, teremos

$$M'_6 = inq^{n-1} t' e^{-in\theta} \text{sen}\theta \text{sen}^2(q^n t'). \quad (6.186)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_7 = [ie^{-in\theta} \cdot \text{sen}(q^n t')] \left\{ ie^{in\theta} \text{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q \text{sen}\theta + a) \right] \right\}$, teremos

$$M'_7 = [ie^{-in\theta} \cdot \text{sen}(q^n t')] \left[ie^{in\theta} \text{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q \text{sen}\theta + a) \right] \right] \quad (6.187)$$

$$M'_7 = -\text{sen}^2(q^n t') \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q \text{sen}\theta + a) \right]. \quad (6.188)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_8 = [ie^{-in\theta} \cdot \text{sen}(q^n t')] \{int' q^{n-1} e^{in\theta} \text{sen}\theta \cos(q^n t')\}$, teremos

$$M'_8 = -nq^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(q^n t') \cos(q^n t'), \quad (6.189)$$

como $\text{sen}(a) \cos(a) = \text{sen}(2a)/2$, então

$$M'_8 = -\frac{1}{2} nt' q^{n-1} \text{sen}\theta \text{sen}(2q^n t'). \quad (6.190)$$

Logo, a Eq.(343) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \overline{\psi}_2^\dagger \vec{\nabla}_p \overline{\psi}_2|_{\hat{x}} &= \frac{d^3}{2\pi \hbar^3} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq \text{sen}\theta) \\ &\cdot [M'_1 - M'_2 - M'_3 - M'_4 + M'_5 - M'_6 - M'_7 - M'_8]. \quad (6.191) \end{aligned}$$

Somando as Eq's (6.176) e (6.191), teremos

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^2 \overline{\psi}_j^\dagger \vec{\nabla}_p \overline{\psi}_j|_{\hat{x}} &= \frac{d^3 e^{-a^2}}{2\pi \hbar^3} \exp[-q^2 + 2aq \text{sen}\theta] \left\{ (-q \text{sen}\theta + a) \cos^2(q^n t') \right. \\ &- \frac{1}{2} nq^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(2q^n t') - \frac{i}{2} e^{-in\theta} \text{sen}(2q^n t') \left[n \left(-\frac{ie^{i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q \text{sen}\theta + a) \right] \\ &- inq^{n-1} t' e^{-in\theta} \text{sen}\theta \cos^2(q^n t') + \frac{i}{2} (-q \text{sen}\theta + a) e^{in\theta} \text{sen}(2q^n t') - inq^{n-1} e^{in\theta} t' \text{sen}\theta \text{sen}^2(q^n t') \\ &+ \frac{1}{2} nt' q^{n-1} \text{sen}\theta \text{sen}(2q^n t') + \text{sen}^2(q^n t') \left[n \left(-\frac{ie^{i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q \text{sen}\theta + a) \right] \\ &- \frac{1}{2} nq^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(2q^n t') + (-q \text{sen}\theta + a) \cos^2(q^n t') \\ &- int' q^{n-1} \text{sen}\theta e^{in\theta} \cos^2(q^n t') - \frac{1}{2} ie^{in\theta} \text{sen}(2q^n t') \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q \text{sen}\theta + a) \right] \\ &- inq^{n-1} t' e^{-in\theta} \text{sen}\theta \text{sen}^2(q^n t') + \frac{i}{2} e^{-in\theta} (-q \text{sen}\theta + a) \text{sen}(2q^n t') \\ &\left. + \frac{1}{2} nt' q^{n-1} \text{sen}\theta \text{sen}(2q^n t') + \text{sen}^2(q^n t') \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q \text{sen}\theta + a) \right] \right\}, \quad (6.192) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^2 \bar{\psi}_j^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_j |_{\hat{x}} &= \frac{d^3 e^{-a^2}}{2\pi \hbar^3} \exp[-q^2 + 2aq \operatorname{sen} \theta] \\
&\left\{ 2(-q \operatorname{sen} \theta + a) \cos^2(q^n t') + 2(-q \operatorname{sen} \theta + a) \operatorname{sen}^2(q^n t') \right. \\
&\quad - \frac{n}{2} q^{n-1} t' \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen}(2q^n t') + \frac{n}{2} t' q^{n-1} \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen}(2q^n t') \\
&\quad + \frac{i}{2} (-q \operatorname{sen} \theta + a) e^{in\theta} \operatorname{sen}(2q^n t') - \frac{i}{2} e^{in\theta} \operatorname{sen}(2q^n t') (-q \operatorname{sen} \theta + a) \\
&\quad - \frac{i}{2} e^{-in\theta} \operatorname{sen}(2q^n t') (-q \operatorname{sen} \theta + a) + \frac{i}{2} e^{-in\theta} (-q \operatorname{sen} \theta + a) \operatorname{sen}(2q^n t') \\
&\quad - \frac{i}{2} e^{-in\theta} \operatorname{sen}(2q^n t') \left[n \left(-\frac{ie^{i\theta}}{q} - \frac{\operatorname{sen} \theta}{q} \right) \right] - \frac{1}{2} i e^{in\theta} \operatorname{sen}(2q^n t') \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\operatorname{sen} \theta}{q} \right) \right] \\
&\quad - inq^{n-1} t' e^{-in\theta} \operatorname{sen} \theta \cos^2(q^n t') - inq^{n-1} t' e^{-in\theta} \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen}^2(q^n t') \\
&\quad - inq^{n-1} e^{in\theta} t' \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen}^2(q^n t') - int' q^{n-1} \operatorname{sen} \theta e^{in\theta} \cos^2(q^n t') \\
&\quad + \operatorname{sen}^2(q^n t') \left[n \left(-\frac{ie^{i\theta}}{q} - \frac{\operatorname{sen} \theta}{q} \right) \right] + \operatorname{sen}^2(q^n t') \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\operatorname{sen} \theta}{q} \right) \right] \\
&\quad \left. - \frac{n}{2} q^{n-1} t' \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen}(2q^n t') + \frac{1}{2} nt' q^{n-1} \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen}(2q^n t') \right\} \quad (6.193)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^2 \bar{\psi}_j^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_j |_{\hat{x}} &= \frac{d^3 e^{-a^2}}{2\pi \hbar^3} \exp[-q^2 + 2aq \operatorname{sen} \theta] \left\{ 2(-q \operatorname{sen} \theta + a) \right. \\
&\quad \left. - 2int' q^{n-1} \operatorname{sen} \theta \cos(n\theta) + \frac{ni}{q} \cos \theta \operatorname{sen}(n\theta) \operatorname{sen}(2q^n t') \right\}. \quad (6.194)
\end{aligned}$$

Desta forma, teremos que

$$\begin{aligned}
\langle y(t) \rangle &= \left(i\hbar \frac{\hbar^2}{d^2} \right) \left(\frac{d^3 e^{-a^2}}{2\hbar^3 \pi} \right) \int_0^\infty \int_{-\pi}^\pi \left\{ \exp(-q^2 + 2aq \operatorname{sen} \theta) [2(-q^2 \operatorname{sen} \theta + aq) \right. \\
&\quad \left. + n \operatorname{sen}(2q^n t') \cos(\theta) \operatorname{sen}(n\theta) - 2int' q^n \operatorname{sen} \theta \cos(n\theta)] \right\} dq d\theta, \quad (6.195)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle y(t) \rangle &= \left(\frac{ide^{-a^2}}{2\pi} \right) \left\{ \int_0^\infty e^{-q^2} dq \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq \operatorname{sen} \theta) [2(-q^2 \operatorname{sen} \theta + aq) \right. \\
&\quad \left. + n \operatorname{sen}(2q^n t') \cos(\theta) \operatorname{sen}(n\theta) - 2int' q^n \operatorname{sen} \theta \cos(n\theta)] d\theta \right\}. \quad (6.196)
\end{aligned}$$

Agora, vamos resolver a integral apenas para a variável θ ,

$$\begin{aligned}
&\left[2 \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq \operatorname{sen} \theta) (-q^2 \operatorname{sen} \theta + aq) + n \operatorname{sen}(2q^n t') \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq \operatorname{sen} \theta) \cos \theta \operatorname{sen}(n\theta) \right. \\
&\quad \left. - 2int' q^n \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq \operatorname{sen} \theta) \operatorname{sen} \theta \cos(n\theta) \right] d\theta, \quad (6.197)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\left[-2q^2 \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq \operatorname{sen} \theta) \operatorname{sen} \theta + 2aq \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq \operatorname{sen} \theta) + n \operatorname{sen}(2q^n t') \right. \\
&\quad \left. \cdot \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq \operatorname{sen} \theta) \cos \theta \operatorname{sen}(n\theta) - 2int' q^n \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq \operatorname{sen} \theta) \operatorname{sen} \theta \cos(n\theta) \right] d\theta, \quad (6.198)
\end{aligned}$$

Fazendo $n = 2$, teremos

$$-4\pi q^2 I_1(2aq) + 4\pi aq I_0(2aq) + 2i \operatorname{sen}(2q^2 t') \cdot \left\{ aq\pi {}_0\tilde{F}_1[3, a^2 q^2] \right\} \\ - 4it' q^2 \left\{ -2\pi I_1(2aq) + \frac{2\pi I_2(2aq)}{aq} \right\}, \quad (6.199)$$

$$-4\pi q^2 I_1(2aq) + 4\pi aq I_0(2aq) + 2\pi iaq \operatorname{sen}(2q^2 t') \cdot {}_0\tilde{F}_1[3, a^2 q^2] \\ + 8\pi it' q^2 I_1(2aq) - \frac{8\pi it' q I_2(2aq)}{a}, \quad (6.200)$$

onde ${}_0\tilde{F}_1[3, a^2 q^2]$ é a função hipergeométrica confluyente.

$$\langle y(t) \rangle = \left(\frac{ide^{-a^2}}{2\pi} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} [4\pi aq I_0(2aq)] dq \\ + \left(\frac{ide^{-a^2}}{2\pi} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} [-4\pi q^2 I_1(2aq)] dq \\ + \left(\frac{ide^{-a^2}}{2\pi} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} [2\pi aq \operatorname{sen}(2q^2 t') \cdot {}_0\tilde{F}_1[3, a^2 q^2]] dq \\ + \left(\frac{ide^{-a^2}}{2\pi} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} [8\pi it' q^2 I_1(2aq)] dq \\ + \left(\frac{ide^{-a^2}}{2\pi} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} \left[-\frac{8\pi it' q I_2(2aq)}{a} \right] dq, \quad (6.201)$$

$$\langle y(t) \rangle = (2aide^{-a^2}) \left[\frac{e^{a^2}}{2} \right] + (-2ide^{-a^2}) \left[\frac{ae^{a^2}}{2} \right] \\ + (ade^{-a^2}) \int_0^\infty e^{-q^2} [q \operatorname{sen}(2q^2 t') \cdot {}_0\tilde{F}_1[3, a^2 q^2]] dq \\ - (4de^{-a^2}) t' \int_0^\infty e^{-q^2} [q^2 I_1(2aq)] dq - \left(\frac{4de^{-a^2}}{a} \right) t' \int_0^\infty e^{-q^2} [q I_2(2aq)] dq, \quad (6.202)$$

$$\langle \tilde{y}(t) \rangle = -ade^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} [q \operatorname{sen}(2q^2 t') \cdot {}_0\tilde{F}_1[3, a^2 q^2]] dq \\ - 4de^{-a^2} t' \int_0^\infty e^{-q^2} [q^2 I_1(2aq)] dq \\ - d \frac{4e^{-a^2}}{a} t' \int_0^\infty e^{-q^2} [q I_2(2aq)] dq. \quad (6.203)$$

Podemos ainda definir $\langle \tilde{y}(t) \rangle = \langle y(t) \rangle / d$, logo:

$$\langle \tilde{y}(t) \rangle = -ae^{-a^2} \int_0^\infty e^{-q^2} [q \operatorname{sen}(2q^2 t') \cdot {}_0\tilde{F}_1[3, a^2 q^2]] dq \\ - 4e^{-a^2} t' \int_0^\infty e^{-q^2} [q^2 I_1(2aq)] dq - \frac{4e^{-a^2}}{a} t' \int_0^\infty e^{-q^2} [q I_2(2aq)] dq. \quad (6.204)$$

A.3 - Cálculo da $\langle x \rangle$ para $C_1 = 1$ e $C_2 = i$

Para $C_1 = 1$ e $C_2 = i$, as Eq's (6.1) e (6.2) serão dadas por

$$\psi_1(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\int G_{11}(\vec{r}, \vec{r}', t) f(\vec{r}') d\vec{r}' + i \int G_{12}(\vec{r}, \vec{r}', t) f(\vec{r}') d\vec{r}' \right] \quad (6.205)$$

e

$$\psi_2(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\int G_{21}(\vec{r}, \vec{r}', t) f(\vec{r}') d\vec{r}' + i \int G_{22}(\vec{r}, \vec{r}', t) f(\vec{r}') d\vec{r}' \right]. \quad (6.206)$$

Podemos obter $\bar{\psi}_1(\vec{p}, t)$ e $\bar{\psi}_2(\vec{p}, t)$ a partir das Eq's (6.79) e (6.106), respectivamente, assim:

$$\bar{\psi}_1(\vec{p}, t) = \frac{de^{-a^2/2}}{\hbar\sqrt{2\pi}} \left\{ \exp \left[-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y a d}{\hbar} \right] \cos \left(\frac{p^n t}{\gamma t} \right) + \left(\frac{p_x - ip_y}{p} \right)^n \exp \left[-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y a d}{\hbar} \right] \text{sen} \left(\frac{p^n t}{\gamma t} \right) \right\} \quad (6.207)$$

e

$$\bar{\psi}_2(\vec{p}, t) = \frac{de^{-a^2/2}}{\hbar\sqrt{2\pi}} \left\{ -i \left(\frac{p_x + ip_y}{p} \right)^n \cdot \exp \left[-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y a d}{\hbar} \right] \text{sen} \left(\frac{p^n t}{\gamma t} \right) + i \left[\exp \left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar} \right) \cos \left(\frac{p^n t}{\gamma \hbar} \right) \right] \right\}. \quad (6.208)$$

Como a polarização do pseudospin agora é ao longo do eixo- y , precisaremos calcular somente a média do operador posição $\langle y(t) \rangle$. Para isso, precisaremos primeiro calcular a derivada de $\bar{\psi}_1(\vec{p}, t)$ e $\bar{\psi}_2(\vec{p}, t)$ em relação a p_y , que nos dará:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\psi}_1(\vec{p}, t)}{\partial p_y} &= \frac{d^2 e^{-a^2/2}}{\hbar^2 \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{q^2}{2} + a q \text{sen} \theta \right] \left\{ e^{-in\theta} \text{sen}(q^n t') \right. \\ &\quad \cdot \left[n \left(-\frac{ie^{i\theta}}{q} - \frac{\text{sen} \theta}{q} \right) + (-q \text{sen} \theta + a) \right] + n q^{n-1} t' e^{-in\theta} \text{sen} \theta \cos(q^n t') \\ &\quad \left. + (-q \text{sen} \theta + a) \cos(q^n t') - n q^{n-1} t' \text{sen} \theta \text{sen}(q^n t') \right\} \quad (6.209) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\psi}_2(\vec{p}, t)}{\partial p_y} &= \frac{d^2 e^{-a^2/2}}{\hbar^2 \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{q^2}{2} + a q \text{sen} \theta \right] \left\{ -ie^{in\theta} \text{sen}(q^n t') \right. \\ &\quad \cdot \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen} \theta}{q} \right) + (-q \text{sen} \theta + a) \right] - i n q^{n-1} t' e^{in\theta} \text{sen} \theta \cos(q^n t') \\ &\quad \left. + i(-q \text{sen} \theta + a) \cos(q^n t') - i n q^{n-1} t' \text{sen} \theta \text{sen}(q^n t') \right\} \quad (6.210) \end{aligned}$$

Agora, precisamos determinar $\bar{\psi}_1^\dagger(\vec{p}, t)$ ($\partial \bar{\psi}_1(\vec{p}, t) / \partial p_y$) e $\bar{\psi}_2^\dagger(\vec{p}, t)$ ($\partial \bar{\psi}_2(\vec{p}, t) / \partial p_y$). Como

$$\bar{\psi}_1^\dagger(\vec{p}, t) = \frac{de^{-a^2/2}}{\hbar\sqrt{2\pi}} \left\{ \exp \left[-\frac{q^2}{2} + a q \text{sen} \theta \right] \cos(q^n t') + \left(\frac{p_x + ip_y}{p} \right)^n \exp \left[-\frac{q^2}{2} + a q \text{sen} \theta \right] \text{sen}(q^n t') \right\}, \quad (6.211)$$

teremos:

$$\begin{aligned} \overline{\psi}_1^\dagger \vec{\nabla}_p \overline{\psi}_1|_{\hat{x}} &= \frac{d^3 e^{-a^2}}{2\pi \hbar^3} \exp[-q^2 + 2aq\text{sen}\theta] \left\{ [\cos(q^n t') + e^{in\theta} \text{sen}(q^n t')] \right. \\ &\quad \cdot \{(-q\text{sen}\theta + a) \cos(q^n t') - nq^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(q^n t') \\ &\quad \left. + e^{-in\theta} \text{sen}(q^n t') \left[n \left(-\frac{ie^{i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) = (-q\text{sen}\theta + a) \right] + nq^{n-1} t' e^{-in\theta} \text{sen}\theta \cos(q^n t') \right\}. \end{aligned} \quad (6.212)$$

Multiplicando apenas o termo $M_1 = [\cos(q^n t')] [(-q\text{sen}\theta + a) \cos(q^n t')]$, teremos

$$M_1 = (-q\text{sen}\theta + a) \cos^2(q^n t'). \quad (6.213)$$

Multiplicando apenas o termo $M_2 = [\cos(q^n t')] [nq^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(q^n t')]$, teremos

$$M_2 = nq^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(q^n t') \cos(q^n t'), \quad (6.214)$$

como $\text{sen}(a) \cos(a) = \text{sen}(2a)/2$, então

$$M_2 = \frac{n}{2} q^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(2q^n t'). \quad (6.215)$$

Multiplicando apenas o termo $M_3 = [\cos(q^n t')] \left\{ e^{-in\theta} \text{sen}(q^n t') \left[n \left(-\frac{ie^{i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q\text{sen}\theta + a) \right] \right\}$, teremos

$$M_3 = e^{-in\theta} \text{sen}(q^n t') \cos(q^n t') \left[n \left(-\frac{ie^{i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q\text{sen}\theta + a) \right], \quad (6.216)$$

$$M_3 = \frac{1}{2} e^{-in\theta} \text{sen}(2q^n t') \left[n \left(-\frac{ie^{i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q\text{sen}\theta + a) \right]. \quad (6.217)$$

Multiplicando apenas o termo $M_4 = [\cos(q^n t')] [nq^{n-1} t' e^{-in\theta} \text{sen}\theta \cos(q^n t')]$, teremos

$$M_4 = nq^{n-1} t' e^{-in\theta} \text{sen}\theta \cos^2(q^n t'). \quad (6.218)$$

Multiplicando apenas o termo $M_5 = [e^{in\theta} \text{sen}(q^n t')] [(-q\text{sen}\theta + a) \cos(q^n t')]$, teremos

$$M_5 = \frac{1}{2} (-q\text{sen}\theta + a) e^{in\theta} \text{sen}(2q^n t'). \quad (6.219)$$

Multiplicando apenas o termo $M_6 = [e^{in\theta} \text{sen}(q^n t')] [nq^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(q^n t')]$, teremos

$$M_6 = nq^{n-1} e^{in\theta} t' \text{sen}\theta \text{sen}^2(q^n t'). \quad (6.220)$$

Multiplicando apenas o termo $M_7 = [e^{in\theta} \text{sen}(q^n t')] \left\{ e^{-in\theta} \text{sen}(q^n t') \left[n \left(-\frac{ie^{i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q\text{sen}\theta + a) \right] \right\}$, teremos

$$M_7 = \left\{ \text{sen}^2(q^n t') \left[n \left(-\frac{ie^{i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q\text{sen}\theta + a) \right] \right\}. \quad (6.221)$$

Multiplicando apenas o termo $M_8 = [e^{in\theta}\text{sen}(q^n t')] [nq^{n-1}t'e^{-in\theta}\text{sen}\theta\cos(q^n t')]$, teremos

$$M_8 = nq^{n-1}t'\text{sen}\theta\text{sen}(q^n t')\cos(q^n t'), \quad (6.222)$$

$$M_8 = \frac{n}{2}q^{n-1}t'\text{sen}\theta\text{sen}(2q^n t'). \quad (6.223)$$

Logo, $\bar{\psi}_1^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_1|_{\hat{x}}$ será dada por

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_1^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_1|_{\hat{x}} &= \frac{d^3}{2\pi\hbar^3} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq\text{sen}\theta) \\ &\cdot [M_1 - M_2 + M_3 + M_4 + M_5 - M_6 + M_7 + M_8]. \end{aligned} \quad (6.224)$$

Agora vamos determinar

$$\bar{\psi}_2^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_2 = \left[\bar{\psi}_2^\dagger \left(\frac{\partial \bar{\psi}_2}{\partial p_x} \right) \hat{x} + \bar{\psi}_2^\dagger \left(\frac{\partial \bar{\psi}_2}{\partial p_y} \right) \hat{y} \right]. \quad (6.225)$$

Assim:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_2^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_2|_{\hat{y}} &= \frac{d^3 e^{-a^2}}{2\pi\hbar^3} \exp(-q^2 + 2aq\text{sen}\theta) \left\{ [-i\cos(q^n t') + ie^{-in\theta} \cdot \text{sen}(q^n t')] \right\} \\ &\cdot \left\{ i(-q\text{sen}\theta + a)\cos(q^n t') - inq^{n-1}t'\text{sen}\theta\text{sen}(q^n t') \right. \\ &\left. - ie^{in\theta}\text{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q\text{sen}\theta + a) \right] - int'q^{n-1}e^{in\theta}\text{sen}\theta\cos(q^n t') \right\}. \end{aligned} \quad (6.226)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_1 = [-i\cos(q^n t')] [i(-q\text{sen}\theta + a)\cos(q^n t')]$, teremos

$$M'_1 = (-q\text{sen}\theta + a)\cos^2(q^n t'). \quad (6.227)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_2 = [-i\cos(q^n t')] [inq^{n-1}t'\text{sen}\theta\text{sen}(q^n t')]$, teremos

$$M'_2 = nq^{n-1}t'\text{sen}\theta\text{sen}(q^n t')\cos(q^n t'), \quad (6.228)$$

$$M'_2 = \frac{n}{2}q^{n-1}t'\text{sen}\theta\text{sen}(2q^n t'). \quad (6.229)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_3 = [-i\cos(q^n t')] \left\{ ie^{in\theta}\text{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q\text{sen}\theta + a) \right] \right\}$, teremos

$$M'_3 = \left\{ e^{in\theta}\text{sen}(q^n t')\cos(q^n t') \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q\cos\theta + a) \right] \right\}, \quad (6.230)$$

$$M'_3 = \frac{1}{2}e^{in\theta}\text{sen}(2q^n t') \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q\cos\theta + a) \right]. \quad (6.231)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_4 = [-i\cos(q^n t')] [int'q^{n-1}e^{in\theta}\text{sen}\theta\cos(q^n t')]$, teremos

$$M'_4 = nt'q^{n-1}\text{sen}\theta e^{in\theta}\cos^2(q^n t'). \quad (6.232)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_5 = [ie^{-in\theta} \cdot \text{sen}(q^n t')] [i(-q\text{sen}\theta + a) \cos(q^n t')]$, teremos

$$M'_5 = -e^{-in\theta} (-q\text{sen}\theta + a) \cos(q^n t') \text{sen}(q^n t'), \quad (6.233)$$

$$M'_5 = -\frac{1}{2} e^{-in\theta} (-q\text{sen}\theta + a) \text{sen}(2q^n t'). \quad (6.234)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_6 = [ie^{-in\theta} \cdot \text{sen}(q^n t')] \{inq^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(q^n t')\}$, teremos

$$M'_6 = -nq^{n-1} t' e^{-in\theta} \text{sen}\theta \text{sen}^2(q^n t'). \quad (6.235)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_7 = [ie^{-in\theta} \cdot \text{sen}(q^n t')] \left\{ ie^{in\theta} \text{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q\text{sen}\theta + a) \right] \right\}$, teremos

$$M'_7 = [ie^{-in\theta} \cdot \text{sen}(q^n t')] \left[ie^{in\theta} \text{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q\text{sen}\theta + a) \right] \right] \quad (6.236)$$

$$M'_7 = -\text{sen}^2(q^n t') \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q\text{sen}\theta + a) \right]. \quad (6.237)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_8 = [ie^{-in\theta} \cdot \text{sen}(q^n t')] \{int' q^{n-1} e^{in\theta} \text{sen}\theta \cos(q^n t')\}$, teremos

$$M'_8 = -nq^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(q^n t') \cos(q^n t'), \quad (6.238)$$

como $\text{sen}(a) \cos(a) = \text{sen}(2a)/2$, então

$$M'_8 = -\frac{n}{2} t' q^{n-1} \text{sen}\theta \text{sen}(2q^n t'). \quad (6.239)$$

Logo, a Eq.(343) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_2^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_2|_{\hat{x}} &= \frac{d^3}{2\pi\hbar^3} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq\text{sen}\theta) \\ &\cdot [M'_1 - M'_2 - M'_3 - M'_4 + M'_5 - M'_6 - M'_7 - M'_8]. \quad (6.240) \end{aligned}$$

Somando as Eq's (6.224) e (6.240), teremos

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^2 \bar{\psi}_j^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_j|_{\hat{x}} &= \frac{d^3 e^{-a^2}}{2\pi\hbar^3} \exp[-q^2 + 2aq\text{sen}\theta] \{ (-q\text{sen}\theta + a) \cos^2(q^n t') \\ &- \frac{n}{2} q^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(2q^n t') + \frac{1}{2} e^{-in\theta} \text{sen}(2q^n t') \left[n \left(-\frac{ie^{i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q\text{sen}\theta + a) \right] \\ &+ nq^{n-1} t' e^{-in\theta} \text{sen}\theta \cos^2(q^n t') + \frac{1}{2} (-q\text{sen}\theta + a) e^{in\theta} \text{sen}(2q^n t') - nq^{n-1} e^{in\theta} t' \text{sen}\theta \text{sen}^2(q^n t') \\ &+ \frac{n}{2} q^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(2q^n t') + \text{sen}^2(q^n t') \left[n \left(-\frac{ie^{i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q\text{sen}\theta + a) \right] \\ &- \frac{n}{2} q^{n-1} t' \text{sen}\theta \text{sen}(2q^n t') + (-q\text{sen}\theta + a) \cos^2(q^n t') \\ &- nt' q^{n-1} \text{sen}\theta e^{in\theta} \cos^2(q^n t') - \frac{1}{2} e^{in\theta} \text{sen}(2q^n t') \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q\cos\theta + a) \right] \\ &+ nq^{n-1} t' e^{-in\theta} \text{sen}\theta \text{sen}^2(q^n t') - \frac{1}{2} e^{-in\theta} (-q\text{sen}\theta + a) \text{sen}(2q^n t') \\ &+ \frac{n}{2} t' q^{n-1} \text{sen}\theta \text{sen}(2q^n t') + \text{sen}^2(q^n t') \left[n \left(\frac{ie^{-i\theta}}{q} - \frac{\text{sen}\theta}{q} \right) + (-q\text{sen}\theta + a) \right] \}, \quad (6.241) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^2 \bar{\psi}_j^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_j |_{\hat{x}} &= \frac{d^3 e^{-a^2}}{2\pi \hbar^3} \exp[-q^2 + 2aq \text{sen} \theta] \\
&\left\{ 2(-q \text{sen} \theta + a) \cos^2(q^n t') + 2(-q \text{sen} \theta + a) \text{sen}^2(q^n t') \right. \\
&\quad - \frac{n}{2} q^{n-1} t' \text{sen} \theta \text{sen}(2q^n t') + \frac{n}{2} q^{n-1} t' \text{sen} \theta \text{sen}(2q^n t') \\
&\quad + \frac{1}{2} (-q \text{sen} \theta + a) e^{i n \theta} \text{sen}(2q^n t') - \frac{1}{2} (-q \text{sen} \theta + a) e^{i n \theta} \text{sen}(2q^n t') \\
&\quad + \frac{1}{2} (-q \text{sen} \theta + a) e^{-i n \theta} \text{sen}(2q^n t') - \frac{1}{2} e^{-i n \theta} (-q \text{sen} \theta + a) \text{sen}(2q^n t') \\
&\quad + \frac{1}{2} e^{-i n \theta} \text{sen}(2q^n t') \left[n \left(-\frac{i e^{i \theta}}{q} - \frac{\text{sen} \theta}{q} \right) \right] - \frac{1}{2} e^{i n \theta} \text{sen}(2q^n t') \left[n \left(\frac{i e^{-i \theta}}{q} - \frac{\text{sen} \theta}{q} \right) \right] \\
&\quad + n q^{n-1} t' e^{-i n \theta} \text{sen} \theta \cos^2(q^n t') + n t' q^{n-1} e^{-i n \theta} \text{sen} \theta \text{sen}^2(q^n t') \\
&\quad - n t' q^{n-1} \text{sen} \theta e^{i n \theta} \cos^2(q^n t') - n q^{n-1} e^{i n \theta} t' \text{sen} \theta \text{sen}^2(q^n t') \\
&\quad + \text{sen}^2(q^n t') \left[n \left(-\frac{i e^{i \theta}}{q} - \frac{\text{sen} \theta}{q} \right) \right] + \text{sen}^2(q^n t') \left[n \left(\frac{i e^{-i \theta}}{q} - \frac{\text{sen} \theta}{q} \right) \right] \\
&\quad \left. - \frac{n}{2} q^{n-1} t' \text{sen} \theta \text{sen}(2q^n t') + \frac{n}{2} t' q^{n-1} \text{sen} \theta \text{sen}(2q^n t') \right\}, \quad (6.242)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^2 \bar{\psi}_j^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_j |_{\hat{x}} &= \frac{d^3 e^{-a^2}}{2\pi \hbar^3} \exp[-q^2 + 2aq \text{sen} \theta] \left\{ 2(-q \text{sen} \theta + a) \right. \\
&\quad \left. - \frac{n i}{q} \cos \theta \text{sen}(2q^n t') \cos(n \theta) + n q^{n-1} t' e^{-i n \theta} \text{sen} \theta - n t' q^{n-1} \text{sen} \theta e^{i n \theta} \right\}, \quad (6.243)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^2 \bar{\psi}_j^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_j |_{\hat{x}} &= \frac{d^3 e^{-a^2}}{2\pi \hbar^3} \exp[-q^2 + 2aq \text{sen} \theta] \left\{ 2(-q \text{sen} \theta + a) \right. \\
&\quad \left. - \frac{n i}{q} \cos \theta \text{sen}(2q^n t') \cos(n \theta) - 2 i n t' q^{n-1} \text{sen} \theta \text{sen}(n \theta) \right\}, \quad (6.244)
\end{aligned}$$

Desta forma, teremos que

$$\begin{aligned}
\langle y(t) \rangle &= \left(i \hbar \frac{\hbar^2}{d^2} \right) \left(\frac{d^3 e^{-a^2}}{2 \hbar^3 \pi} \right) \int_0^\infty \int_{-\pi}^\pi \left\{ \exp(-q^2 + 2aq \text{sen} \theta) [2(-q^2 \text{sen} \theta + aq) \right. \\
&\quad \left. - n i \text{sen}(2q^n t') \cos \theta \cos(n \theta) - 2 i n t' q^n \text{sen} \theta \text{sen}(n \theta)] \right\} dq d\theta, \quad (6.245)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle y(t) \rangle &= \left(\frac{i d e^{-a^2}}{2\pi} \right) \left\{ \int_0^\infty e^{-q^2} dq \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq \text{sen} \theta) [2(-q^2 \text{sen} \theta + aq) \right. \\
&\quad \left. - n i \text{sen}(2q^n t') \cos \theta \cos(n \theta) - 2 i n t' q^n \text{sen} \theta \text{sen}(n \theta)] d\theta \right\}. \quad (6.246)
\end{aligned}$$

Agora, vamos resolver a integral apenas para a variável θ ,

$$\begin{aligned}
\left[2 \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq \text{sen} \theta) (-q^2 \text{sen} \theta + aq) - n i \text{sen}(2q^n t') \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq \text{sen} \theta) \cos \theta \cos(n \theta) \right. \\
\left. - 2 i n t' q^n \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq \text{sen} \theta) \text{sen} \theta \text{sen}(n \theta) \right] d\theta, \quad (6.247)
\end{aligned}$$

$$\left[-2q^2 \int_{-\pi}^{\pi} \exp(2aq \operatorname{sen} \theta) \operatorname{sen} \theta + 2aq \int_{-\pi}^{\pi} \exp(2aq \operatorname{sen} \theta) - n \operatorname{isen}(2q^n t') \cdot \int_{-\pi}^{\pi} \exp(2aq \operatorname{sen} \theta) \cos \theta \cos(n\theta) - 2int' q^n \int_{-\pi}^{\pi} \exp(2aq \operatorname{sen} \theta) \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen}(n\theta) \right] d\theta, \quad (6.248)$$

Fazendo $n = 1$ na Eq.(6.248) teremos

$$-4\pi q^2 I_1(2aq) + 4\pi aq I_0(2aq) - \operatorname{isen}(2qt') \cdot \{ \pi_0 F_1 [2, a^2 q^2] \} - 2it' q \{ 2\pi I_2(2aq) + \pi_0 F_1 [2, a^2 q^2] \}, \quad (6.249)$$

$$-4\pi q^2 I_1(2aq) + 4\pi aq I_0(2aq) - \operatorname{isen}(2qt') \cdot [\pi_0 F_1 [2, a^2 q^2]] - 4\pi it' q I_2(2aq) - 2it' q \pi_0 F_1 [2, a^2 q^2], \quad (6.250)$$

mas ${}_0F_1 [2, a^2 q^2] = I_1(2aq) / aq$, logo

$$4\pi aq I_0(2aq) - 4\pi q^2 I_1(2aq) - 2it' \pi \frac{I_1(2aq)}{a} - 4\pi it' q I_2(2aq) - \operatorname{isen}(2qt') \cdot \left[\pi \frac{I_1(2aq)}{aq} \right]. \quad (6.251)$$

Substituindo a Eq.(6.251) na Eq.(6.246), teremos:

$$\begin{aligned} \langle y(t) \rangle &= \left(\frac{ide^{-a^2}}{2\pi} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} [4\pi aq I_0(2aq)] dq + \left(\frac{ide^{-a^2}}{2\pi} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} [-4\pi q^2 I_1(2aq)] dq \\ &+ \left(\frac{ide^{-a^2}}{2\pi} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} \left[-2it' \pi \frac{I_1(2aq)}{a} \right] dq + \left(\frac{ide^{-a^2}}{2\pi} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} [-4\pi it' q I_2(2aq)] dq \\ &+ \left(\frac{de^{-a^2}}{2a} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} \left[\operatorname{sen}(2qt') \frac{I_1(2aq)}{q} \right] dq, \quad (6.252) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle y(t) \rangle &= \left(2aide^{-a^2} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} [q I_0(2aq)] dq + \left(-2ide^{-a^2} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} [q^2 I_1(2aq)] dq \\ &+ \left(\frac{t'de^{-a^2}}{a} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} [I_1(2aq)] dq + \left(2t'de^{-a^2} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} [q I_2(2aq)] dq \\ &+ \left(\frac{de^{-a^2}}{2a} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} \left[\operatorname{sen}(2qt') \frac{I_1(2aq)}{q} \right] dq, \quad (6.253) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle y(t) \rangle &= \left(2aide^{-a^2} \right) \left[\frac{e^{a^2}}{2} \right] + \left(-2ide^{-a^2} \right) \left[\frac{ae^{a^2}}{2} \right] \\ &+ \left(\frac{t'de^{-a^2}}{a} \right) \left[\frac{e^{a^2} - 1}{2a} \right] + \left(2t'de^{-a^2} \right) \left[\frac{e^{a^2} - 1}{2a} \right], \\ &+ \left(\frac{de^{-a^2}}{2a} \right) \int_0^\infty e^{-q^2} \left[\operatorname{sen}(2qt') \frac{I_1(2aq)}{q} \right] dq, \quad (6.254) \end{aligned}$$

finalmente teremos

$$\langle y(t) \rangle = d \left(1 - \frac{1}{2a^2} + \frac{e^{-a^2}}{2a^2} \right) t' + \frac{de^{-a^2}}{2a} \int_0^\infty e^{-q^2} \text{sen}(2qt') \frac{I_1(2aq)}{q} dq. \quad (6.255)$$

Podemos ainda definir $\langle \tilde{y}(t) \rangle = \langle y(t) \rangle / d$, logo:

$$\langle \tilde{y}(t) \rangle = \left(1 - \frac{1}{2a^2} + \frac{e^{-a^2}}{2a^2} \right) t' + \frac{e^{-a^2}}{2a} \int_0^\infty e^{-q^2} \text{sen}(2qt') \frac{I_1(2aq)}{q} dq. \quad (6.256)$$

Fazendo $n = 2$ na Eq.(6.248), também concluímos que

$$\langle y(t) \rangle = 0. \quad (6.257)$$

Agora vamos calcular $\langle x(t) \rangle$ para $n = 1$.

Utilizando as Eq's (6.79) e (6.106), teremos:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_1(\vec{p}, t) = \frac{d}{\hbar\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \left\{ \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right. \\ \left. + \left(\frac{p_x - ip_y}{p}\right)^n \cdot \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right\} \quad (6.258) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_2 = \frac{d}{\hbar\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \left\{ \left[-i \left(\frac{p_x + ip_y}{p}\right)^n \cdot \exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \text{sen}\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right] \right. \\ \left. + i \left[\exp\left(-\frac{p^2 d^2}{2\hbar^2} + \frac{p_y k_0 d^2}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{p^n t}{\gamma\hbar}\right) \right] \right\}. \quad (6.259) \end{aligned}$$

As derivadas em relação a p_x das Eq's (6.258) e (6.259) serão dadas por

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\psi}_1}{\partial p_x} = \frac{d^2}{\hbar^2 \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{q}{2} + aq \text{sen}\theta\right) \left\{ \left[-q \cos\theta \cos(q^n t') - nq^{n-1} t' \cos\theta \text{sen}(q^n t') \right] \right. \\ \left. + \left[e^{-in\theta} \text{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q}\right) - q \cos\theta \right] + nt' q^{n-1} \cos\theta e^{-in\theta} \cos(q^n t') \right] \right\}. \quad (6.260) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\psi}_2}{\partial p_x} = \frac{d^2}{\hbar^2 \sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{a^2}{2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{q^2}{2} + aq \text{sen}\theta\right) \left\{ -ie^{in\theta} \text{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q}\right) \right. \right. \\ \left. \left. - q \cos\theta \right] - int' q^{n-1} \cos\theta e^{in\theta} \cos(q^n t') - iq \cos\theta \cos(q^n t') - inq^{n-1} t' \cos\theta \text{sen}(q^n t') \right\}. \quad (6.261) \end{aligned}$$

Agora, vamos calcular $\bar{\psi}_1^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_1|_{\hat{x}}$:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_1^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_1|_{\hat{x}} = \frac{d^3}{2\pi \hbar^3} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq \text{sen}\theta) \left\{ \left[\cos(q^n t') \right] + \left[e^{in\theta} \cdot \text{sen}(q^n t') \right] \right\} \\ \cdot \left\{ -q \cos\theta \cos(q^n t') - nq^{n-1} t' \cos\theta \text{sen}(q^n t') \right. \\ \left. + e^{-in\theta} \text{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q}\right) - q \cos\theta \right] + nt' q^{n-1} \cos\theta e^{-in\theta} \cos(q^n t') \right\}. \quad (6.262) \end{aligned}$$

Multiplicando apenas o termo $M_1 = [\cos(q^n t')] [q \cos \theta \cos(q^n t')]$, teremos

$$M_1 = q \cos \theta \cos^2(q^n t'). \quad (6.263)$$

Multiplicando apenas o termo $M_2 = [\cos(q^n t')] [n q^{n-1} t' \cos \theta \sin(q^n t')]$, teremos

$$M_2 = n q^{n-1} t' \cos \theta \sin(q^n t') \cos(q^n t'), \quad (6.264)$$

como $\sin(a) \cos(a) = \sin(2a) / 2$, então

$$M_2 = \frac{n}{2} q^{n-1} t' \cos \theta \sin(2q^n t'). \quad (6.265)$$

Multiplicando apenas o termo $M_3 = [\cos(q^n t')] \left\{ e^{-in\theta} \sin(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos \theta}{q} \right) - q \cos \theta \right] - q \sin \theta \right\}$, teremos

$$M_3 = e^{-in\theta} \sin(q^n t') \cos(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos \theta}{q} \right) - q \cos \theta \right], \quad (6.266)$$

$$M_3 = \frac{1}{2} e^{-in\theta} \sin(2q^n t') \left[n \left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos \theta}{q} \right) - q \cos \theta \right]. \quad (6.267)$$

Multiplicando apenas o termo $M_4 = [\cos(q^n t')] [n t' q^{n-1} \cos \theta e^{-in\theta} \cos(q^n t')]$, teremos

$$M_4 = n q^{n-1} t' e^{-in\theta} \cos \theta \cos^2(q^n t'). \quad (6.268)$$

Multiplicando apenas o termo $M_5 = [e^{in\theta} \sin(q^n t')] [q \cos \theta \cos(q^n t')]$, teremos

$$M_5 = \frac{1}{2} q \cos \theta e^{in\theta} \sin(2q^n t'). \quad (6.269)$$

Multiplicando apenas o termo $M_6 = [e^{in\theta} \sin(q^n t')] [n q^{n-1} t' \cos \theta \sin(q^n t')]$, teremos

$$M_6 = n q^{n-1} e^{in\theta} t' \cos \theta \sin^2(q^n t'). \quad (6.270)$$

Multiplicando apenas o termo $M_7 = [e^{in\theta} \sin(q^n t')] \left\{ e^{-in\theta} \sin(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos \theta}{q} \right) - q \cos \theta \right] - q \cos \theta \right\}$, teremos

$$M_7 = \left\{ \sin^2(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos \theta}{q} \right) - q \cos \theta \right] \right\}. \quad (6.271)$$

Multiplicando apenas o termo $M_8 = [e^{in\theta} \sin(q^n t')] [n t' q^{n-1} \cos \theta e^{-in\theta} \cos(q^n t')]$, teremos

$$M_8 = n q^{n-1} t' \cos \theta \sin(q^n t') \cos(q^n t'), \quad (6.272)$$

$$M_8 = \frac{n}{2} q^{n-1} t' \cos \theta \sin(2q^n t'). \quad (6.273)$$

Logo, $\bar{\psi}_1^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_1|_{\hat{x}}$ será dada por

$$\bar{\psi}_1^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_1|_{\hat{x}} = \frac{d^3}{2\pi \hbar^3} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq \sin \theta) \cdot [-M_1 - M_2 + M_3 + M_4 - M_5 - M_6 + M_7 + M_8]. \quad (6.274)$$

Por outro lado, teremos $\bar{\psi}_2^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_2|_{\hat{x}}$:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_2^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_2|_{\hat{y}} = \frac{d^3 e^{-a^2}}{2\pi \hbar^3} \exp(-q^2 + 2aq \operatorname{sen} \theta) \{ & [-i \cos(q^n t') + i e^{-i\theta} \cdot \operatorname{sen}(q^n t')] \} \\ & \cdot \{ -iq \cos \theta \cos(q^n t') - inq^{n-1} t' \cos \theta \operatorname{sen}(q^n t') \\ & - i e^{i\theta} \operatorname{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos \theta}{q} \right) - q \cos \theta \right] - int' q^{n-1} e^{i\theta} \cos \theta \cos(q^n t') \}. \end{aligned} \quad (6.275)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_1 = [-i \cos(q^n t')] [iq \cos \theta \cos(q^n t')]$, teremos

$$M'_1 = q \cos \theta \cos^2(q^n t'). \quad (6.276)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_2 = [-i \cos(q^n t')] [inq^{n-1} t' \cos \theta \operatorname{sen}(q^n t')]$, teremos

$$M'_2 = nq^{n-1} t' \cos \theta \operatorname{sen}(q^n t') \cos(q^n t'), \quad (6.277)$$

$$M'_2 = \frac{n}{2} q^{n-1} t' \cos \theta \operatorname{sen}(2q^n t'). \quad (6.278)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_3 = [-i \cos(q^n t')] \{ i e^{i\theta} \operatorname{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos \theta}{q} \right) - q \cos \theta \right] \}$, teremos

$$M'_3 = \left\{ e^{i\theta} \operatorname{sen}(q^n t') \cos(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos \theta}{q} \right) - q \cos \theta \right] \right\}, \quad (6.279)$$

$$M'_3 = \frac{1}{2} e^{i\theta} \operatorname{sen}(2q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos \theta}{q} \right) - q \cos \theta \right]. \quad (6.280)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_4 = [-i \cos(q^n t')] [int' q^{n-1} e^{i\theta} \cos \theta \cos(q^n t')]$, teremos

$$M'_4 = nt' q^{n-1} \cos \theta e^{i\theta} \cos^2(q^n t'). \quad (6.281)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_5 = [i e^{-i\theta} \cdot \operatorname{sen}(q^n t')] [iq \cos \theta \cos(q^n t')]$, teremos

$$M'_5 = -e^{-i\theta} q \cos \theta \cos(q^n t') \operatorname{sen}(q^n t'), \quad (6.282)$$

$$M'_5 = -\frac{1}{2} e^{-i\theta} q \cos \theta \operatorname{sen}(2q^n t'). \quad (6.283)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_6 = [i e^{-i\theta} \cdot \operatorname{sen}(q^n t')] [inq^{n-1} t' \cos \theta \operatorname{sen}(q^n t')]$, teremos

$$M'_6 = -nq^{n-1} t' e^{-i\theta} \cos \theta \operatorname{sen}^2(q^n t'). \quad (6.284)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_7 = [i e^{-i\theta} \cdot \operatorname{sen}(q^n t')] \{ i e^{i\theta} \operatorname{sen}(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos \theta}{q} \right) - q \cos \theta \right] \}$, teremos

$$M'_7 = -\operatorname{sen}^2(q^n t') \left[n \left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos \theta}{q} \right) - q \cos \theta \right]. \quad (6.285)$$

Multiplicando apenas o termo $M'_8 = [i e^{-i\theta} \cdot \operatorname{sen}(q^n t')] [int' q^{n-1} e^{i\theta} \cos \theta \cos(q^n t')]$, teremos

$$M'_8 = -nq^{n-1} t' \cos \theta \operatorname{sen}(q^n t') \cos(q^n t'), \quad (6.286)$$

como $\text{sen}(a) \cos(a) = \text{sen}(2a)/2$, então

$$M'_8 = -\frac{n}{2}t'q^{n-1}\cos\theta\text{sen}(2q^n t'). \quad (6.287)$$

Logo, a Eq.(343) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_2^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_2|_{\hat{x}} &= \frac{d^3}{2\pi\hbar^3} \exp(-a^2) \exp(-q^2 + 2aq\text{sen}\theta) \\ &\cdot [-M'_1 - M'_2 - M'_3 - M'_4 - M'_5 - M'_6 - M'_7 - M'_8]. \end{aligned} \quad (6.288)$$

Somando as Eq's (6.274) e (6.288), teremos

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^2 \bar{\psi}_j^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_j|_{\hat{x}} &= \frac{d^3 e^{-a^2}}{2\pi\hbar^3} \exp[-q^2 + 2aq\text{sen}\theta] \left\{ -q\cos\theta\cos^2(q^n t') \right. \\ &\quad - \frac{n}{2}q^{n-1}t'\cos\theta\text{sen}(2q^n t') + \frac{1}{2}e^{-in\theta}\text{sen}(2q^n t') \left[n\left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q}\right) - q\cos\theta \right] \\ &\quad + nq^{n-1}t'e^{-in\theta}\cos\theta\cos^2(q^n t') - \frac{1}{2}q\cos\theta e^{in\theta}\text{sen}(2q^n t') - nq^{n-1}e^{in\theta}t'\cos\theta\text{sen}^2(q^n t') \\ &\quad + \frac{n}{2}q^{n-1}t'\cos\theta\text{sen}(2q^n t') + \text{sen}^2(q^n t') \left[n\left(\frac{e^{i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q}\right) - q\cos\theta \right] \\ &\quad - \frac{n}{2}q^{n-1}t'\cos\theta\text{sen}(2q^n t') - q\cos\theta\cos^2(q^n t') \\ &\quad - nt'q^{n-1}\cos\theta e^{in\theta}\cos^2(q^n t') - \frac{1}{2}e^{in\theta}\text{sen}(2q^n t') \left[n\left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q}\right) - q\cos\theta \right] \\ &\quad + nq^{n-1}t'e^{-in\theta}\cos\theta\text{sen}^2(q^n t') + \frac{1}{2}e^{-in\theta}q\cos\theta\text{sen}(2q^n t') \\ &\quad \left. + \frac{n}{2}t'q^{n-1}\cos\theta\text{sen}(2q^n t') + \text{sen}^2(q^n t') \left[n\left(\frac{e^{-i\theta}}{q} - \frac{\cos\theta}{q}\right) - q\cos\theta \right] \right\}. \end{aligned} \quad (6.289)$$

Organizando todos os termos acima, podemos concluir que

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^2 \bar{\psi}_j^\dagger \vec{\nabla}_p \bar{\psi}_j|_{\hat{x}} &= \frac{d^3 e^{-a^2}}{2\pi\hbar^3} \exp[-q^2 + 2aq\text{sen}\theta] \left\{ -2q\cos\theta \right. \\ &\quad \left. + \frac{ni}{q}\text{sen}\theta\cos(n\theta)\text{sen}(2q^n t') - 2int'q^{n-1}\cos\theta\text{sen}(n\theta) \right\}. \end{aligned} \quad (6.290)$$

Desta forma, teremos

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= \left(i\hbar \frac{\hbar^2}{d^2} \right) \left(\frac{d^3 e^{-a^2}}{2\hbar^3\pi} \right) \int_0^\infty \int_{-\pi}^\pi \left\{ \exp(-q^2 + 2aq\text{sen}\theta) [-2q^2\cos\theta \right. \\ &\quad \left. + n\text{isen}\theta\cos(n\theta)\text{sen}(2q^n t') - 2int'q^n\cos\theta\text{sen}(n\theta)] dqd\theta \right\}, \end{aligned} \quad (6.291)$$

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= \left(\frac{ide^{-a^2}}{2\pi} \right) \left\{ \int_0^\infty e^{-q^2} dq \int_{-\pi}^\pi \exp(2aq\text{sen}\theta) [-2q^2\cos\theta \right. \\ &\quad \left. + n\text{isen}\theta\cos(n\theta)\text{sen}(2q^n t') - 2int'q^n\cos\theta\text{sen}(n\theta)] d\theta \right\}. \end{aligned} \quad (6.292)$$

Agora, vamos resolver a integral apenas para a variável θ ,

$$\left[-2q^2 \int_{-\pi}^{\pi} \exp(2aq\text{sen}\theta) \cos\theta + n\text{isen}(2q^n t') \int_{-\pi}^{\pi} \exp(2aq\text{sen}\theta) \text{sen}\theta \cos(n\theta) - 2int' q^n \int_{-\pi}^{\pi} \exp(2aq\text{sen}\theta) \cos\theta \text{sen}(n\theta) \right] d\theta, \quad (6.293)$$

Fazendo $n = 2$ na Eq.(6.293) e utilizando a tabela de integrais da Ref.[130], teremos

$$-2q^2 \cdot (0) + 2\text{isen}(2q^2 t') \left[-2\pi I_1(2aq) + \frac{2\pi I_2(2aq)}{aq} \right] - 2int' q^2 \cdot (0) \quad (6.294)$$

$$-4\pi\text{isen}(2q^2 t') I_1(2aq) + \frac{4\pi\text{isen}(2q^2 t') I_2(2aq)}{aq}. \quad (6.295)$$

Substituindo a Eq.(6.295) na Eq.(6.292), teremos:

$$\langle x(t) \rangle = \left(\frac{ide^{-a^2}}{2\pi} \right) \int_0^{\infty} e^{-q^2} [-4\pi\text{isen}(2q^2 t') I_1(2aq)] dq + \left(\frac{ide^{-a^2}}{2\pi} \right) \int_0^{\infty} e^{-q^2} \left[\frac{4\pi\text{isen}(2q^2 t') I_2(2aq)}{aq} \right] dq, \quad (6.296)$$

$$\langle y(t) \rangle = 2de^{-a^2} \int_0^{\infty} e^{-q^2} [\text{sen}(2q^2 t') I_1(2aq)] dq - \frac{2de^{-a^2}}{a} \int_0^{\infty} e^{-q^2} \left[\frac{\text{sen}(2q^2 t') I_2(2aq)}{q} \right] dq. \quad (6.297)$$

Podemos ainda definir $\langle \tilde{x}(t) \rangle = \langle x(t) \rangle / d$, logo:

$$\langle \tilde{x}(t) \rangle = 2e^{-a^2} \int_0^{\infty} e^{-q^2} [\text{sen}(2q^2 t') I_1(2aq)] dq - \frac{2e^{-a^2}}{a} \int_0^{\infty} e^{-q^2} \left[\frac{\text{sen}(2q^2 t') I_2(2aq)}{q} \right] dq. \quad (6.298)$$

Referências Bibliográficas

- [1] Feynman, R.P. *There's plenty of room at the bottom*. *Resonance*, v. 16, n. 9, p. 890–905, 2011.
- [2] Kroto, H.W.; Heath, J.R.; et al. *C₆₀: buckminsterfullerene*. *Nature*, v. 318, n. 6042, p. 162, 1985.
- [3] Iijima, S. *Helical microtubules of graphitic carbon*. *Nature*, v. 354, p. 56, 1991.
- [4] Peierls, R. *Quelques propriétés typiques des corps solides*. *Annales de l'I.H.P.*, v.5, n. 3, p. 177–222, 1935.
- [5] Landau, L. D.; *Theory of phase transformations*. *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion*, v.11, p.26, 1937.
- [6] Berry, M. V; Geim, A.K. *Of flying frogs and levitrons*. *European Journal of Physics*, v. 18, n. 4, p. 307, 1997.
- [7] Novoselov, K.S.; Geim, A.K.; et al. *Electric field effect in atomically thin carbon films*. *Science*, v. 306, n. 5696, p. 666–669, 2004. xv, 23, 34, 37, 38, 41
- [8] Wallace, P. R. *The Band Theory of Graphite*. *Physical Review*, v. 71, p.622, 1947.
- [9] Ferrari, A.C.; Bonaccorso, F.; et al. *Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems*. *Nanoscale*, v. 7, n. 11, p. 4598–4810, 2014.
- [10] Ribeiro-Soares, J.; Dresselhaus, M.S. *News and Views: Perspectives on Graphene and Other 2D Materials Research and Technology Investments*. *Brazilian Journal of Physics*, v. 44, n. 2, p. 278–282, 2014.

- [11] Schliemann, J.; Loss, Daniel; Westervelt, R. Zitterbewegung of Electronic Wave Packets in III-V Zinc-Blende Semiconductor Quantum Wells. *Physical Review Letters*, v.94, n.20, p.206801, 2005.
- [12] Schliemann, J. Cyclotron motion and magnetic focusing in semiconductor quantum wells with spin-orbit coupling. *Physical Review B*, v.77, n.12, p.125303, 2008.
- [13] Sasabe, S. Spin-Magnetic Moment of Dirac Electron, and Role of Zitterbewegung. *Journal of Modern Physics*, v.5, n.07, p.534.90004-2, 2014.
- [14] Zawadzki, W.; Rusin, T. M. Zitterbewegung (trembling motion) of electrons in narrow-gap semiconductors. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v.20, n.45, p.454208, 2008
- [15] Lurie, D.; Cremer, S. Zitterbewegung of quasiparticles in superconductors. *Physica*, v.50, n.2., p.224, 1970.
- [16] Vaishnav, J. Y., and Charles W. Clark. Observing Zitterbewegung with ultracold atoms. *Phys. Review Letters*, v.100, n.15, p.153002, 2008.
- [17] Demikhovskii, V. Ya, G. M. Maksimova, and E. V. Frolova. Wave packet dynamics in a two-dimensional electron gas with spin orbit coupling: Splitting and zitterbewegung. *Physical Review B*, v.78, n.11, p.115401, 2008.
- [18] E. Schrödinger, Über die kräftefreie Bewegung in der relativistischen Quantenmechanik. *Berliner Ber.*, p.418, 1930.
- [19] Zawadzki, Wlodek, and Tomasz M. Rusin. Zitterbewegung (trembling motion) of electrons in semiconductors: a review. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v.23, n.14, p.143201, 2011.
- [20] Schrödinger, E. An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *Phys. Review*, v.28, p.1049, 1926.
- [21] Dirac, P.A.M. The quantum theory of the electron. *Proc.of the Royal Soc. Lond. A*, v.117, p.610, 1928.
- [22] Maksimova, G. M.; Demikhovskii, V. Ya; Frolova, E. V. Wave packet dynamics in a monolayer graphene. *Phys. Rev. B*, v. 78, n. 23, p. 235321, 2008.
- [23] Chaves. A.; Covaci, L.; Rakhimov, Kh. Yu.; Farias, G. A.; Peeters, F. M. Wave-packet dynamics and valley filter in strained graphene. *Physical Review B* 82.20 (2010): 205430. *Physical Review B*, v.77, n.12, p.125303, 2008.
- [24] Costa, D. R. Transportes e confinamento em monocamada e bicamada de nanoestruturas de grafeno com diferentes bordas, interfaces e potenciais. Tese de Doutorado. Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2014.

- [25] John C. Kotz, Paul M. Treichel, J.R.T. *Chemistry & chemical reactivity*. 8 ed. Belmont: Cengage Learning, 2012.
- [26] Hugh O. P. *Handbook of carbon, graphite, diamond and fullerenes: properties, processing and applications*. New Jersey: Noyes Publications, 1993.
- [27] McMurry, J. *Organic chemistry*. 8 ed. Belmont: Cengage Learning, 2016.
- [28] Bruice, P. Y. *Organic chemistry*. 7 ed. Santa Barbara: Pearson Education., 2013.
- [29] Feltre, R. *Química orgânica*. 6 ed. São Paulo: Moderna, 2004.
- [30] Wu, Z.-S.; Zhou, G.; et al. *Graphene/metal oxide composite electrode materials for energy storage*. *Nano Energy*, v. 1, n. 1, p. 107–131, 2012.
- [31] Wyckoff, R.W.G. *Crystal structures*. New York: Interscience, 1960.
- [32] Fuller, R. B. *Inventions - The Patented Works of R. Buckminster Fuller*. New York: St. Martin's Press, 1983.
- [33] Dai, L.; Mau, A.W.H. *Controlled synthesis and modification of carbon nanotubes and C60: Carbon nanostructures for advanced polymeric composite materials*. *Advanced Materials*, v. 13, n. 12-13, p. 899–913, 2001.
- [34] Herbst, M. H.; Macêdo, M. I. F.; Rocco, A. M. *Tecnologia dos nanotubos de carbono: tendências e perspectivas de uma área multidisciplinar*. *Química Nova*, v. 27, p. 986, 2004.
- [35] Gamaly, E.G.; Rode, a. V.; et al. *Ultrafast ablation with high-pulse-rate lasers. Part I: Theoretical considerations*. *Journal of Applied Physics*, v. 85, n. 8, p. 4213–4221, 1999.
- [36] Rode, a. V.; Luther-Davies, B.; et al. *Ultrafast ablation with high-pulse-rate lasers. Part II: Experiments on laser deposition of amorphous carbon films*. *Journal of Applied Physics*, v. 85, n. 8, p. 4222–4230, 1999.
- [37] Rode, A. V.; Hyde, S.T.; et al. *Structural analysis of a carbon foam formed by high pulse-rate laser ablation*. *Applied Physics A: Materials Science and Processing*, v. 69, n. 7, 1999.
- [38] K. S. Novoselov. *Nobel Lecture: Graphene: Materials in the Flatland*. *Reviews of Modern Physics*, V. 83, p.837, 2011.
- [39] Bassalo, J. M. F. *O Prêmio Nobel de Física de 2010*. *Caderno Brasileiro de Ensino de Física*, v. 28, n. 1, p. 205, 2011.

- [40] Geim, a K.; Dubonos, S. V.; et al. *Microfabricated adhesive mimicking gecko foot-hair*. *Nature materials*, v. 2, n. 7, p. 461–463, 2003.
- [41] Brownson, D. A. C.; Banks, C. E. *The Handbook of Graphene Electrochemistry*. 1 ed. Manchester: Springer, 2014.
- [42] Laboratório de material didático multimídia - LMDM. *Ciência dos materiais multimídia*. Disponível em: <http://www.cienciadosmateriais.org/index.php?acao=exibir&cap=17&top=178>. Acessado em 1 de abril de 2016.
- [43] Raccichini, R.; Varzi, A.; et al. *The role of graphene for electrochemical energy storage*. *Nature materials*, v. 14, n. 3, p. 271–9, 2015.
- [44] Zhong, Y.L., Tian, Z., Simon, G.P., & Li, D. (2015). *Scalable production of graphene via wet chemistry: Progress and challenges*. *Materials Today*, v. 18, n. 2, p. 73–78, 2015.
- [45] Schultz, R.A.; Jensen, M.C.; et al. *Single crystal cleavage of brittle materials*. *International Journal of Fracture*, v. 65, n. 4, p. 291–312, 1994.
- [46] Romero, R.; Robert, M.; et al. *Evidence by transmission electron microscopy of weathering microsystems in soils developed from crystalline rocks*. *Clay minerals*, v. 27, n. 1, p. 21–33, 1992.
- [47] Lu, X.; Yu, M.; et al. *Tailoring graphite with the goal of achieving single sheets*. *Nanotechnology*, v. 10, n. 3, p. 269, 1999.
- [48] Maragó, O.M.; Bonaccorso, F.; et al. *Brownian motion of graphene*. *ACS Nano*, v. 4, n. 12, p. 7515–7523, 2010.
- [49] Lotya, M.; Hernandez, Y.; et al. *Liquid Phase Production of Graphene by Exfoliation of Graphite in Surfactant/Water Solutions*. *Journal of the American Chemical Society*, v. 131, n. 10, p. 3611–3620, 2009.
- [50] Hasan, T.; Torrisi, F.; et al. *Solution-phase exfoliation of graphite for ultrafast photonics*. *Physica status solidi (b)*, v. 247, n. 11-12, p. 2953–2957, 2010.
- [51] Hassoun, J.; Bonaccorso, F.; et al. *An Advanced Lithium-Ion Battery Based on a Graphene Anode and a Lithium Iron Phosphate Cathode*. *Nano Letters*, v. 14, n. 8, p. 4901–4906, 2014.
- [52] Khan, U.; O'Neill, A.; et al. *High-Concentration Solvent Exfoliation of Graphene*. *Small*, v. 6, n. 7, p. 864–871, 2010.
- [53] Torrisi, F.; Hasan, T.; et al. *Inkjet-Printed Graphene Electronics*. *ACS Nano*, v. 6, n. 4, p. 2992–3006, 2012.

- [54] Wei, D.; Grande, L.; et al. *Graphene from electrochemical exfoliation and its direct applications in enhanced energy storage devices*. *Chem. Commun.*, v. 48, n. 9, p. 1239–1241, 2012.
- [55] Paton, K.R.; Varrla, E.; et al. *Scalable production of large quantities of defect-free few-layer graphene by shear exfoliation in liquids*. *Nat Mater*, v. 13, n. 6, p. 624–630, 2014.
- [56] Tour, J.M. *Layered materials: Scaling up exfoliation*. *Nat Mater*, v. 13, n. 6, p. 545–546, 2014.
- [57] Yu, Q.; Lian, J.; et al. *Graphene segregated on Ni surfaces and transferred to insulators*. *Applied Physics Letters*, v. 93, n. 11, 2008.
- [58] Mattevi, C.; Kim, H.; et al. *A review of chemical vapour deposition of graphene on copper*. *J. Mater. Chem.*, v. 21, n. 10, p. 3324–3334, 2011.
- [59] Strupinski, W.; Grodecki, K.; et al. *Graphene Epitaxy by Chemical Vapor Deposition on SiC*. *Nano Letters*, v. 11, n. 4, p. 1786–1791, 2011.
- [60] Weimer, A.W. *Carbide, nitride, and boride materials synthesis and processing*. London; Chapman & Hall, 1997.
- [61] Sutter, P.W.; Flege, J.-I.; et al. *Epitaxial graphene on ruthenium*. *Nat Mater*, v. 7, n. 5, p. 406–411, 2008.
- [62] Ohta, T.; Bartelt, N.C.; et al. *Role of carbon surface diffusion on the growth of epitaxial graphene on SiC*. *Physical Review B*, v. 81, n. 12, p. 121411, 2010.
- [63] Moreau, E.; Godey, S.; et al. *Graphene growth by molecular beam epitaxy on the carbon-face of SiC*. *Applied Physics Letters*, v. 97, n. 24, 2010.
- [64] Hannon, J.B.; Copel, M.; et al. *Direct Measurement of the Growth Mode of Graphene on SiC(0001) and SiC(0001) $\bar{1}$* . *Physical Review Letters*, v. 107, n. 16, p. 166101, 2011.
- [65] Emtsev, K. V.; Bostwick, A.; et al. *Towards wafer-size graphene layers by atmospheric pressure graphitization of silicon carbide*. *Nat Mater*, v. 8, n. 3, p. 203–207, 2009.
- [66] Ruan, M.; Hu, Y.; et al. *Epitaxial graphene on silicon carbide: Introduction to structured graphene*. *MRS Bulletin*, v. 37, n. 12, p. 1138–1147, 2012.
- [67] Colombo, L.; Wallace, R.M.; et al. *Graphene growth and device integration*. *Proceedings of the IEEE*, v. 101, n. 7, p. 1536–1556, 2013.

- [68] Novoselov, K.S.; Geim, A.K.; et al. *Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene*. *Nature*, v. 438, n. 7065, p. 197–200, 2005.
- [69] Bassalo, J. M. F. *O Prêmio Nobel de Física de 2010*. *Cad. Bras. Ens. Fís.*, v.28, n.1., p.205-213, 2011..
- [70] Zhang, Y.; Tan, Y.-W.; et al. *Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene*. *Nature*, v. 438, n. 7065, p. 201–204, 2005.
- [71] Young, A.F.; Kim, P. *Quantum interference and Klein tunnelling in graphene heterojunctions*. *Nat Phys*, v. 5, n. 3, p. 222–226, 2009.
- [72] Lee, C.; Wei, X.; et al. *Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene*. *Science*, v. 321, n. 5887, p. 385–388, 2008.
- [73] Nair, R.R.; Blake, P.; et al. *Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene*. *Science*, v. 320, n. 5881, p. 1308, 2008.
- [74] Bonaccorso, F.; Sun, Z.; et al. *Graphene photonics and optoelectronics*. *Nat Photon*, v. 4, n. 9, p. 611–622, 2010.
- [75] Schwierz, F. *Graphene transistors*. *Nat Nano*, v. 5, n. 7, p. 487–496, 2010.
- [76] Liao, L.; Lin, Y.-C.; et al. *High-speed graphene transistors with a self-aligned nanowire gate*. *Nature*, v. 467, n. 7313, p. 305–308, 2010.
- [77] Cheng, R.; Bai, J.; et al. *High-frequency self-aligned graphene transistors with transferred gate stacks*. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 109, n. 29, p. 11588–11592, 2012.
- [78] Dharmendar, R.; Register, L.F.; et al. *Graphene field-effect transistors*. *Journal of Physics D: Applied Physics*, v. 44, n. 31, p. 313001, 2011.
- [79] Liu, G.; Ahsan, S.; et al. *Graphene-based non-Boolean logic circuits*. *Journal of Applied Physics*, v. 114, n. 15, 2013.
- [80] Petrone, N.; Meric, I.; et al. *Graphene Field-Effect Transistors with Gigahertz-Frequency Power Gain on Flexible Substrates*. *Nano Letters*, v. 13, n. 1, p. 121–125, 2013.
- [81] Meric, I.; Dean, C.R.; et al. *Graphene Field-Effect Transistors Based on Boron-Nitride Dielectrics*. *Proceedings of the IEEE*, v. 101, n. 7, p. 1609–1619, 2013.
- [82] Liu, Y.; Dong, X.; et al. *Biological and chemical sensors based on graphene materials*. *Chem. Soc. Rev.*, v. 41, n. 6, p. 2283–2307, 2012.

- [83] Chen, P.; Mitsui, T.; et al. *Atomic Layer Deposition to Fine-Tune the Surface Properties and Diameters of Fabricated Nanopores*. *Nano Letters*, v. 4, n. 7, p. 1333–1337, 2004.
- [84] Lu, Y.; Goldsmith, B.R.; et al. *DNA-decorated graphene chemical sensors*. *Applied Physics Letters*, v. 97, n. 8, 2010.
- [85] Merchant, C.A.; Healy, K.; et al. *DNA Translocation through Graphene Nanopores*. *Nano Letters*, v. 10, n. 8, p. 2915–2921, 2010.
- [86] Derrington, I.M.; Butler, T.Z.; et al. *Nanopore DNA sequencing with MspA*. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 107, n. 37, p. 16060–16065, 2010.
- [87] Schedin, F.; Geim, A.K.; et al. *Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene*. *Nat Mater*, v. 6, n. 9, p. 652–655, 2007.
- [88] Dan, Y.; Lu, Y.; et al. *Intrinsic Response of Graphene Vapor Sensors*. *Nano Letters*, v. 9, n. 4, p. 1472–1475, 2009.
- [89] Pumera, M. *Graphene in biosensing*. *Materials Today*, v. 14, n. 7–8, p. 308–315, 2011.
- [90] Hess, L.H.; Jansen, M.; et al. *Graphene Transistor Arrays for Recording Action Potentials from Electrogenic Cells*. *Advanced Materials*, v. 23, n. 43, p. 5045–5049, 2011.
- [91] Nelson, T.; Zhang, B.; et al. *Detection of Nucleic Acids with Graphene Nanopores: Ab Initio Characterization of a Novel Sequencing Device*. *Nano Letters*, v. 10, n. 9, p. 3237–3242, 2010.
- [92] Zhang, B.Y.; Liu, T.; et al. *Broadband high photoresponse from pure monolayer graphene photodetector*. *Nat Commun*, v. 4, p. 1811, 2013.
- [93] Johnson, R R.; Sem título. Altura: 632 pixels. Largura: 599. 497 Kb. Formato JPEG. Disponível em: <http://www.physics.upenn.edu/~robertjo/gallery/graphene-nanopore-big.jpg>. Acesso em: 25 de abril de 2016.
- [94] Johnson, R R.; Sem título. Altura: 734 pixels. Largura: 716. 529 Kb. Formato JPEG. Disponível em: <http://www.physics.upenn.edu/~robertjo/gallery/graphene-device.jpg>. Acesso em: 25 de abril de 2016.
- [95] Bae, S.; Kim, S.J.; et al. *Towards industrial applications of graphene electrodes*. *Physica Scripta*, v. 2012, n. T146, p. 14024, 2012.
- [96] Polat, E.O.; Balcı, O.; et al. *Graphene based flexible electrochromic devices*. *Scientific Reports*, v. 4, p. 6484, 2014.

- [97] Ahn, J.-H.; Hong, B.H. *Graphene for displays that bend*. *Nat Nano*, v. 9, n. 10, p. 737–738, 2014.
- [98] Ren, W.; Cheng, H.-M. *The global growth of graphene*. *Nat Nano*, v. 9, n. 10, p. 726–730, 2014.
- [99] Liu, J.; Xue, Y.; et al. *Graphene-based materials for energy applications*. *MRS Bulletin*, v. 37, n. 12, p. 1265–1272, 2012.
- [100] Hsieh, Y.-P.; Hong, B.-J.; et al. *Ultrathin graphene-based solar cells*. *RSC Adv.*, v. 5, n. 121, p. 99627–99631, 2015.
- [101] Singh, E.; Nalwa, H.S. *Stability of graphene-based heterojunction solar cells*. *RSC Adv.*, v. 5, n. 90, p. 73575–73600, 2015.
- [102] Sung, H.; Ahn, N.; et al. *Transparent Conductive Oxide-Free Graphene-Based Perovskite Solar Cells with over 17% Efficiency*. *Advanced Energy Materials*, v. 6, n. 3, 2016.
- [103] Tielrooij, K.J.; Song, J.C.W.; et al. *Photoexcitation cascade and multiple hot-carrier generation in graphene*. *Nat Phys*, v. 9, n. 4, p. 248–252, 2013.
- [104] Chang, L.; *Sem título*. Altura: 810 pixels. Largura: 1215. 89.1 Kb. Formato JPEG. Disponível em: <http://s3.amazonaws.com/digitaltrends-uploads-prod/2016/02/Moth-eye-solar-panels.jpg>. Acesso em: 8 de maio de 2016.
- [105] Bahamon, D.A.; Pereira, A.L.C.; et al. *Inner and outer edge states in graphene rings: A numerical investigation*. *Phys. Rev. B*, v. 79, n. 12, p. 125414, 2009.
- [106] Raza, H. *Graphene nanoelectronics: metrology, synthesis, properties and applications*. Iowa City: Springer, 2012.
- [107] Castro Neto, A. H.; Guinea, F.; et al. *The electronic properties of graphene*. *Rev. Mod. Phys.*, v. 81, n. 1, p. 109–162, 2009.
- [108] Zarenia, M. *Conned states in monolayer and bilayer graphene nanostructures*. Tese de doutorado. Universiteit Antwerpen, Belgium, 2013.
- [109] Boukhvalov, D.W.; Katsnelson, M.I.; et al. *Hydrogen on graphene: Electronic structure, total energy, structural distortions and magnetism from first-principles calculations*. *Phys. Rev. B*, v. 77, n. 3, p. 35427, 2008.
- [110] Bostwick, A.; Ohta, T.; et al. *Quasiparticle dynamics in graphene*. *Nat Phys*, v. 3, n. 1, p. 36–40, 2007.

- [111] Sena, S. H. R de. *Propriedades eletrônicas de tricamada de grafeno e nanofitas de carbono tensionadas*. Tese de Doutorado. Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2012.
- [112] Geim, A.K.; Grigorieva, I. V. *Van der Waals heterostructures*. *Nature*, v. 499, n. 7459, p. 419–425, 2013.
- [113] Novoselov, K.S. *Nobel Lecture: Graphene: Materials in the Flatland*. *Rev. Mod. Phys.*, v. 83, n. 3, p. 837–849, 2011.
- [114] Partoens, B.; Peeters, F.M. *From graphene to graphite: Electronic structure around the K point*. *Phys. Rev. B*, v. 74, n. 7, p. 75404, 2006.
- [115] Katsnelson, M. I. *Graphene: carbon in two dimensions*. Cambridge: University Press, 2012.
- [116] Rakhmanov, A.L.; Rozhkov, A. V; et al. *Instabilities of the AA-Stacked Graphene Bilayer*. *Phys. Rev. Lett.*, v. 109, n. 20, p. 206801, 2012.
- [117] Koshino, M.; McCann, E. *Parity and valley degeneracy in multilayer graphene*. *Phys. Rev. B*, v. 81, n. 11, p. 115315, 2010.
- [118] McCann, E.; Fal'ko, V.I. *Landau-Level Degeneracy and Quantum Hall Effect in a Graphite Bilayer*. *Phys. Rev. Lett.*, v. 96, n. 8, p. 86805, 2006.
- [119] McCann, E.; Koshino, M. *The electronic properties of bilayer graphene*. *Reports on Progress in Physics*, v. 76, n. 5, p. 56503, 2013.
- [120] Misu, A.; Mendez, E.E.; et al. *Near Infrared Reflectivity of Graphite under Hydrostatic Pressure. I. Experiment*. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 47, n. 1, p. 199–207, 1979.
- [121] Nilsson, J.; Castro Neto, A.H.; et al. *Electron-electron interactions and the phase diagram of a graphene bilayer*. *Phys. Rev. B*, v. 73, n. 21, p. 214418, 2006. 56
- [122] Pereira Jr., J. M.; Vasilopoulos, P.; et al. *Tunable Quantum Dots in Bilayer Graphene*. *Nano Letters*, v. 7, n. 4, p. 946–949, 2007. 56
- [123] Snyman, I.; Beenakker, C.W.J. *Ballistic transmission through a graphene bilayer*. *Phys. Rev. B*, v. 75, n. 4, p. 45322, 2007.
- [124] Tabert, C.J.; Nicol, E.J. *Dynamical conductivity of AA-stacked bilayer graphene*. *Phys. Rev. B*, v. 86, n. 7, p. 75439, 2012.
- [125] Sensarma, R.; Hwang, E.H.; et al. *Dynamic screening and low-energy collective modes in bilayer graphene*. *Phys. Rev. B*, v. 82, n. 19, 2010.

-
- [126] Bostwick, A.; Ohta, T.; et al. *Symmetry breaking in few layer graphene films*. *New Journal of Physics*, v. 9, n. 10, p. 385, 2007.
- [127] Duppen, B. Van; Peeters, F.M. *Klein paradox for a pn junction in multilayer graphene*. *Eur. Letters*, v. 102, n. 2, p. 27001, 2013.
- [128] Nakamura, M.; Hirasawa, L. *Electric transport and magnetic properties in multilayer graphene*. *Phys. Rev. B*, v. 77, n. 4, p. 45429, 2008.
- [129] Kumar, S. B.; Guo, J. *Chiral tunneling in trilayer graphene*. *Applied Physics Letters*, v. 100, n. 16, 2012.
- [130] Gradshteyn, I. S.; Ryzhik, I. M. *Table of Integrals, Series, and Products*. 7 ed. San Diego: Elsevier, 2007.
- [131] Bell, W. W. *Special functions for scientists and engineers*. 1 ed. London: DoverBooks, 204
- [132] Sakurai, J. J.; Napolitano, J. *Modern quantum mechanics*. 2 ed. Addison-Wesley, 2011.
- [133] Chaves, A.. *Dinâmica de pacotes de onda em semicondutores e grafeno e de vórtices em supercondutores*. Tese de Doutorado. Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2010.

Índice Remissivo

- AFM, 22, 38
Alótropo, 26, 27, 30, 32–34
ARPES, 51
Bicamada de grafeno, 26, 43, 47, 53, 54, 56, 57, 60, 62, 75, 90–97
Carbono, 22, 23, 26–34, 39, 40, 47, 48, 53, 80
CVD, 39
Densidade de probabilidade, 61, 89, 90, 92, 94
Diamante, 23, 30, 32, 41
Dirac, 24, 26, 40, 41, 48, 50–52, 56, 66, 81, 84, 87
Efeito hall quântico, 41
Elétrons, 24, 26–30, 40, 41, 48, 49, 51, 52, 54–56, 63, 76, 77, 80
Empilhamento Bernal, 26, 53, 54, 56, 61
Esfoliação, 39
FLG, 37
Fulereo, 22, 23, 33
Função de Bessel, 69, 72, 115
Função de Bessel modificada, 105, 115
Função hipergeométrica confluyente regularizada, 115
Grafeno, 22–24, 26, 27, 34–48, 51–58, 60–62, 74, 75, 80, 82, 83, 86, 88, 90–93, 95–97
Grafite, 23, 24, 30, 32–35, 37–40, 54
Hamiltoniano, 24, 26, 49–52, 54–56, 58, 60–63, 74–78, 81, 96
Hibridização, 22, 26
Hopping, 48, 49, 54, 55, 58, 63, 77, 80
MLG, 37
Monocamada de grafeno, 23, 26, 35, 37, 42, 43, 45, 47, 52, 53, 55, 56, 58, 61, 62, 74, 80, 82–84, 86–90, 97
Movimento trêmulo, 24, 61, 75, 84, 89, 97
Nanotecnologia, 22
NFM, 22
Pacote de onda, 24, 26, 61, 62, 66, 80, 82, 84, 87, 89, 90, 92, 94, 96, 97
Pseudo-spin, 26, 61, 62, 66, 75, 80, 82, 87, 89, 90, 92, 94
Rede de Bravais, 47
Schrödinger, 24, 41, 50, 63, 76
Split-operator, 78, 96, 97
SPM, 22
STM, 22
Tight-binding, 26, 47, 48, 54–56, 84
Velocidade de Fermi, 41, 58, 62, 63, 95

ZBW, 24, 26, 62, 84, 89, 96, 97

Zitterbewegung, 24, 61, 84, 89, 97

Zona de Brillouin, 47, 48, 51, 56