



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

**JOÃO PEDRO GOMES DO NASCIMENTO**

**MONOCAMADA DE FOSFORENO NA PRESENÇA DE UM CAMPO MAGNÉTICO  
DEPENDENTE DO TEMPO**

**FORTALEZA**

**2019**

JOÃO PEDRO GOMES DO NASCIMENTO

MONOCAMADA DE FOSFORENO NA PRESENÇA DE UM CAMPO MAGNÉTICO  
DEPENDENTE DO TEMPO

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.

Orientador: Prof. Dr. Ilde Guedes da Silva.

FORTALEZA  
2019

JOÃO PEDRO GOMES DO NASCIMENTO

MONOCAMADA DE FOSFORENO NA PRESENÇA DE UM CAMPO MAGNÉTICO  
DEPENDENTE DO TEMPO

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 31/01/2019.

BANCA EXAMINADORA

---

Prof. Dr. Ilde Guedes da Silva (Orientador)  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. Andrey Chaves  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. Marcony Silva Cunha  
Universidade Estadual do Ceará (UECE)

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal do Ceará  
Biblioteca do Curso de Física

---

A000p Gomes do Nascimento, João Pedro .  
Monocamada de fosforeno na presença de um campo magnético dependente do tempo / João Pedro  
Gomes do Nascimento. – Fortaleza, 2019.  
53.:il.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Departamento de  
Física, Fortaleza, 2019.

Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientação: Prof. Dr. Ilde Guedes da Silva.

1. Fosforeno. 2. Materiais bidimensionais. 3. Sistemas dependentes do tempo. 4. Método de Lewis  
e Riesenfeld. 5. Níveis de Landau. I. Título.

CDD:000.0

---

Aos Meus Pais

e

à Minha Irmã.

## AGRADECIMENTOS

Primeiramente, quero agradecer aos meus pais, Gilson Oliveira do Nascimento e Maria Zildene Gomes do Nascimento, e à minha irmã, Daiana Maria Gomes do Nascimento, por todo o amor, apoio e dedicação recebidos ao longo de minha jornada. A eles devo o que tenho e tudo que sou.

Agradeço aos meus familiares, em especial ao meu avô Nilo Bezerra do Nascimento, à minha tia Maria do Socorro Gomes de Matos e ao meu primo Francisco Jose Gomes de Matos por estarem presentes em todos os momentos.

Agradeço à minha tia Ana Lucia Oliveira do Nascimento, que infelizmente nos deixou, mas que com certeza está feliz por mim onde quer que ela esteja.

Agradeço imensamente ao professor Ilde Guedes da Silva. Agradeço por toda a sua orientação desde o terceiro semestre de graduação, por toda a sua paciência e apoio ao longo desses anos.

Agradeço aos amigos de longa data, dentre eles Joana Ribeiro e Olga Queiroz, minha família de coração.

Agradeço à professora Hilma por não ter desistido de mim no início de meus estudos.

Agradeço à todos os funcionários do Seara da Ciência.

Agradeço também à Vanderley Aguiar de Lima Júnior pelo apoio e atenção.

Agradeço aos professores Carlos William de Araujo Paschoal e Ricardo Renan Landim de Carvalho por estarem sempre dispostos a ajudar e discutir ideias.

Agradeço à todos os funcionários e amigos do Departamento de Física da UFC.

Agradeço ao CNPQ pelo apoio financeiro.

Acima de tudo, agradeço a Deus.

## RESUMO

Neste trabalho estudamos elétrons e buracos em uma monocamada de fosforeno na presença de um campo magnético dependente do tempo  $\mathbf{B}(t)$  de baixa intensidade. Considerando  $\mathbf{B}(t) = (0, 0, B(t))$  e escolhendo o calibre simétrico,  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = -(1/2)\mathbf{r} \times \mathbf{B}(t)$ , utilizamos o método de Lewis e Riesenfeld para chegarmos às funções de onda de elétrons e buracos. A partir das soluções, calculamos as incertezas, informações de Fisher, o valor esperado da energia mecânica e as probabilidades de transição. Aplicamos os resultados aos campos  $\mathbf{B}(t) = B_0\mathbf{k}$  e  $\mathbf{B}(t) = (B_0^2 + B_1^2 \cos^2(\mu t))^{1/2}\mathbf{k}$ . As incertezas para o estado fundamental mostram um fenômeno de compressão dependente da intensidade do campo magnético oscilatório. Para este sistema, também verificamos que as informações de Fisher fornecem medidas de incerteza mais precisas que os desvios padrão. No caso do campo magnético de intensidade constante, as energias variam linearmente com os números quânticos  $n$  e  $m$  e com  $B_0$ . Como esperado, nenhuma transição entre estados ocorre pois os estados que descrevem a partícula são estacionários. No caso oscilatório, observamos que a energia oscila com o tempo, aumentando linearmente com os níveis de Landau  $n$  e  $m$  e não linearmente com o campo magnético. As transições  $(k, l) \rightarrow (n, m)$  ocorrem somente para  $l = m$ . Investigamos também as transições de probabilidade  $(0, 0) \rightarrow (n, 0)$  e  $(1, l) \rightarrow (2, l)$ .

**Palavras-chave:** Fosforeno. Materiais bidimensionais. Sistemas dependentes do tempo. Método de Lewis e Riesenfeld. Níveis de Landau.

## ABSTRACT

In this work we study electrons and holes in monolayer phosphorene under a low-intensity time-dependent magnetic field  $\mathbf{B}(t)$ . By considering  $\mathbf{B}(t) = (0, 0, B(t))$  and choosing the symmetric gauge,  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = -(1/2)\mathbf{r} \times \mathbf{B}(t)$ , we use the Lewis and Riesenfeld method to obtain the wave functions for electrons and holes. From those solutions, we calculate the uncertainties, the Fisher information, the quantum-mechanical energy expectation value and the transition probabilities. We apply the results to the fields  $\mathbf{B}(t) = B_0\mathbf{k}$  and  $\mathbf{B}(t) = (B_0^2 + B_1^2 \cos^2(\mu t))^{1/2}\mathbf{k}$ . The uncertainties for the ground state show squeezing phenomenon depending on the intensity of the oscillatory magnetic field. In this system, we also verify that the Fisher information provides more accurate uncertainty measures than the standard deviations. In the constant magnetic field intensity case, the energy varies linearly with the quantum numbers  $n$  and  $m$  and  $B_0$ . As expected, no transitions takes place because the states describing the particle are stationary. In the oscillatory case, we observe that the energy oscillates in time, increasing linearly with the Landau levels  $n$  and  $m$  and nonlinearly with the magnetic field. The  $(k, l) \rightarrow (n, m)$  transitions take place only for  $l = m$ . We also investigate the  $(0, 0) \rightarrow (n, 0)$  and  $(1, l) \rightarrow (2, l)$  probability transitions.

**Keywords:** Phosphorene. Two-dimensional materials. Time-dependent systems. Lewis and Riesenfeld method. Landau levels.

## LISTA DE FIGURAS

- Figura 1 – Comportamento dos níveis de Landau  $E_n = E_n^j - E_j$ , onde  $j = c, v$ , em relação ao (a) número quântico  $n$  para alguns valores de  $B_0$ , e em relação à (b) intensidade do campo magnético  $B_0$  para os dez primeiros estados. Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = k_x = e = 1$ . Reproduzido de [17]. . . . . 17
- Figura 2 – Densidades de probabilidade para elétrons ( $|\psi_n^c|^2$ ) nos estados (a)  $n = 0$  e (b)  $n = 1$  com  $B_0 = 0.3$  (linha sólida) e  $B_0 = 0.7$  (linha pontilhada). Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = k_x = e = 1$ . Reproduzido de [17]. . . . . 18
- Figura 3 – Densidades de probabilidade para elétrons ( $|\psi_{n,m}^c|^2$ ) nos estados (a)  $n = m = 0$  e (b)  $n = m = 1$ . Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = k_x = e = 1$  e  $B_0 = 0.3$ . Reproduzido de [17]. . . . . 19
- Figura 4 – Dependência temporal de (a)  $\Delta x(t)$  (linha sólida) e  $\Delta y(t)$  (linha tracejada), e (b)  $\Delta p_x(t)$  (linha sólida) e  $\Delta p_y(t)$  (linha tracejada), para elétrons de condução no estado fundamental. Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = \mu = e = B_0 = B_1 = 1$ . A linha pontilhada representa  $\Delta x, y(t) = \Delta p_{x, y}(t) = 0.707$ . . . . . 32
- Figura 5 – Intensidade do campo magnético oscilatório  $B(t)$ . Neste gráfico consideramos  $\mu = B_0 = B_1 = 1$ . . . . . 33
- Figura 6 – Comportamento das incertezas (a)  $\Delta x(B_0)$  (linha sólida) e  $\Delta y(B_0)$  (linha tracejada), e (b)  $\Delta p_x(B_0)$  (linha sólida) e  $\Delta p_y(B_0)$  (linha tracejada), para elétrons de condução no estado fundamental. Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = \mu = e = 1$ ,  $B_1 = 0.5$  e  $t = 0.5\pi$ . A linha pontilhada representa  $\Delta x, y(B_0) = \Delta p_{x, y}(B_0) = 0.707$ . . . . . 33
- Figura 7 – Dependência temporal de (a)  $F_x(t)$  (linha sólida) e  $F_y(t)$  (linha tracejada), e (b)  $F_{p_x}(t)$  (linha sólida) e  $F_{p_y}(t)$  (linha tracejada) para elétrons de condução no estado fundamental. Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = \mu = e = B_0 = B_1 = 1$ . 34
- Figura 8 – Energia  $E_{n,m} = E_{n,m}^j - E_j$ , onde  $j = c, v$ , para alguns valores de  $n$  e  $m$ . Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = e = B_0 = 1$ . . . . . 36
- Figura 9 – Dependência temporal de (a)  $E_{n,0}^c(t)$  para  $n = 0$  (linha sólida),  $n = 1$  (linha tracejada) e  $n = 2$  (linha pontilhada), e (b)  $B(t)$ . As energias  $E_{n,0}^c(t)$  estão deslocadas de  $-E_c$ . Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = \mu = e = 1$  e  $B_0 = B_1 = 0.5$ . . . . . 36

Figura 10 – Dependência de  $E_{0,0}^c(B_0)$  em relação à  $B_0$  para  $t = 0$  (linha sólida),  $t = \pi/4$  (linha tracejada) e  $t = \pi/2$  (linha pontilhada). As energias estão deslocadas de  $-E_c$ . Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = \mu = e = 1$  e  $B_1 = 0.5$ . . . . . 37

Figura 11 – Dependência temporal de (a)  $P_{(0,0) \rightarrow (n,0)}^c(t)$ , para as transições  $n = 0$  (linha sólida),  $n = 1$  (linha tracejada) e  $n = 2$  (linha pontilhada), e (b)  $P_{(1,l) \rightarrow (2,l)}^c(t)$ , para as transições  $l = 0$  (linha sólida) e  $l = \pm 1$  (linha pontilhada). Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = \mu = e = 1$  e  $B_0 = B_1 = 0.5$ . . . . . 39

Figura 12 – Dependência temporal de  $\Delta E_n(t)$  para  $n = 1$  (linha sólida) e  $n = 2$  (linha tracejada). Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = \mu = e = 1$  e  $B_0 = B_1 = 0.5$ . . . 39

## SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO . . . . .	11
2	MONOCAMADA DE FOSFORENO NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO INDEPENDENTE DO TEMPO . . . . .	16
3	MONOCAMADA DE FOSFORENO NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO DEPENDENTE DO TEMPO . . . . .	20
3.1	Considerações iniciais . . . . .	20
3.2	Teoria quântica de invariantes dependentes do tempo . . . . .	20
3.3	Fosforeno na presença de campo magnético dependente do tempo . . . . .	26
3.3.1	<i>Funções de onda</i> . . . . .	26
3.3.2	<i>Incertezas e Informação de Fisher</i> . . . . .	31
3.3.3	<i>Valor esperado da energia mecânica</i> . . . . .	35
3.3.4	<i>Probabilidades de transição</i> . . . . .	37
4	CONCLUSÃO . . . . .	40
	APÊNDICE A – FUNÇÕES DE FASE . . . . .	41
	APÊNDICE B – FUNÇÕES DE ONDA NO ESPAÇO DO MOMENTO . . . . .	43
	APÊNDICE C – VALORES ESPERADOS . . . . .	45
	APÊNDICE D – SOLUÇÕES DA EQUAÇÃO DE MILNE-PINNEY GENERALIZADA . . . . .	48
	APÊNDICE E – PROBABILIDADES DE TRANSIÇÃO . . . . .	49
	REFERÊNCIAS . . . . .	51
	ANEXO A – ARTIGOS PUBLICADOS DURANTE O PERÍODO DE MESTRADO . . . . .	54

## 1 INTRODUÇÃO

O estudo das propriedades de monocamadas e de várias camadas de materiais bidimensionais tem atraído grande atenção desde a produção do grafeno em 2004 [1] devido às suas possíveis aplicações em nanoeletrônica. Ao longo dos últimos anos, diversas outras monocamadas de cristais foram desenvolvidas, tais como siliceno [2, 3], germaneno [4], estaneno [5] e os dicalcogenetos de metais de transição [6, 7]. Recentemente, o fosforeno, uma monocamada de fósforo negro [8, 9], tem sido extensivamente estudado.

O fosforeno foi obtido pela primeira vez em 2014 através do método de esfoliação mecânica [10]. Nesta técnica, camadas de cristais de fósforo negro são obtidas por meio de fitas adesivas. Em seguida, a amostra presente na fita é transferida para um substrato de dióxido de silício,  $SiO_2$ , pressionando-se a fita contra o substrato. Essa é a mesma técnica que foi utilizada por Novoselov et. al. na produção do grafeno em 2004 [1], e que só é possível graças às forças de van der Waals que dominam as interações entre as camadas no *bulk* desses materiais.

O Fósforo Negro é um semicondutor com *gap* direto de  $0.3\text{ eV}$  em seu estado de *bulk* [11-13]. O valor desse *gap* aumenta à medida que a espessura do filme de Fósforo Negro diminui, alcançando  $2\text{ eV}$  para a monocamada de fosforeno. Esse comportamento é devido ao efeito do confinamento quântico. Por causa de sua estrutura, o fosforeno exibe propriedades ópticas, elétricas, mecânicas e de transporte dependentes da direção desejáveis para a fabricação de baterias [14, 13], transistores [12, 13, 15] e sensores [16]. Sob o ponto de vista teórico, vários outros estudos investigam o comportamento de monocamadas de fosforeno na presença de campos elétricos e magnéticos.

Em 2015, Zhou et. al. [17] investigaram os níveis de Landau e as propriedades de magneto-transporte de uma monocamada de fosforeno, quando na presença de um campo magnético  $\mathbf{B}$  estático de baixa intensidade. Considerando  $\mathbf{B} = B_0\mathbf{k}$  e o calibre de Landau  $\mathbf{A} = -B_0\mathbf{y}$ , os autores mostraram que as energias das bandas de condução e valência variam linearmente com o índice do nível de Landau  $n$  e com a intensidade do campo magnético  $B_0$ . As divisões das bandas de condução e valência e as respectivas funções de onda são diferentes devido à anisotropia do material. Eles também obtiveram as funções de onda para o caso do calibre simétrico,  $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -(1/2)\mathbf{r} \times \mathbf{B}$ , em termos dos polinômios de Laguerre.

Também em 2015, Zhou et. al. [18] estudaram os níveis de Landau e a condutividade magneto-óptica de filmes finos de Fósforo Negro na presença de campo magnético estático. No modelo estudado, os autores utilizaram a técnica de Hamiltoniana efetiva  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  e a teoria de resposta linear. Eles também estudaram os efeitos dos acomplamentos de inter-bandas e intra-bandas usando cálculos numéricos e a teoria de perturbação independente do tempo.

Sousa et. al. [19], em 2017, investigaram o efeito de campos elétricos e magnéticos nos níveis de energia de elétrons de condução confinados em anéis quânticos feitos de fosforeno. Os autores observaram que as características do efeito Stark dependem da direção em que o campo elétrico é aplicado. Eles também mostraram que as oscilações de Aharonov-Bohm na energia não podem ser observadas em anéis confinantes circulares, mas sim, em anéis elípticos apropriados. Todos esses resultados são consequência direta da anisotropia da massa efetiva do fosforeno.

Apesar dos extensos estudos sob os pontos de vista eletrônico, óptico e termodinâmico, existem poucos trabalhos explorando medidas de incerteza e informação em materiais. Mas, o que é informação? Em 1948, Claude Shannon estabeleceu esse conceito [20] e definiu-o como tudo aquilo que reduz a incerteza. Essa incerteza é definida para cada conjunto de elementos que se tenha, constituindo uma medida da variabilidade nesse conjunto, por exemplo, a variabilidade dos pesos das pessoas de uma cidade. A entropia de Shannon para um conjunto de elementos discretos  $X = \{x_i\}$ , onde cada elemento está associado a uma densidade de probabilidade  $\{P(x_i)\}$ , é dada por

$$S_X = - \sum_{i=1}^n P(x_i) \ln P(x_i). \quad (1.1)$$

Se temos certeza do resultado de um dado experimento, ou seja, se o conjunto  $X$  for constituído de um único elemento  $x_1$ , então  $P(x_1) = 1$ ,  $P(x_i) = 0$  para  $i \neq 1$  e a entropia de Shannon será nula. Dessa maneira, a entropia de Shannon está relacionada com o grau de incerteza e quantifica, portanto, a informação. Quanto menor for  $S_x$ , menor é o grau de incerteza e maior será a informação que se tem.

Outra ferramenta poderosa utilizada no mesmo âmbito que a entropia de Shannon é a informação de Fisher. R. A. Fisher a estabeleceu em 1925 [21] como uma maneira de medir a quantidade de informação que um observável  $X$  carrega em relação a um dado parâmetro  $\theta$  para o qual a densidade de probabilidade de  $X$  varia, ou seja, para o qual a densidade de probabilidade seja uma função explícita de  $X$  e  $\theta$ ,  $P(X, \theta)$ .

A entropia de Shannon e a informação de Fisher têm sido utilizadas na busca por novas relações de incerteza em mecânica quântica. Mas qual a diferença entre as medidas de incerteza padrão (desvios padrão) e aquelas provenientes da teoria da informação? A resposta está nos conceitos de medidas global e local [22] que apresentaremos a seguir. Seja  $x$  uma variável aleatória e contínua, cuja densidade de probabilidade é  $\rho(x)$ . No contexto da mecânica quântica, a variável  $x$  pode referir-se aos autovalores do operador posição. Nesse caso,  $\rho(x) dx$  representa a probabilidade de encontrarmos a partícula entre as posições  $x$  e  $x + dx$ . Assim, a

entropia de Shannon referente ao observável  $x$  é escrita como

$$S_x = - \int \rho(x) \ln[\rho(x)] dx. \quad (1.2)$$

Por outro lado, a informação de Fisher para a posição da partícula é dada por

$$F_x = \int \frac{1}{\rho(x)} \left[ \frac{d}{dx} \rho(x) \right]^2 dx. \quad (1.3)$$

Como vemos, a informação de Fisher  $F_x$  depende da derivada da densidade de probabilidade, enquanto que o desvio padrão  $\Delta x$  e a entropia de Shannon  $S_x$ , não. Conseqüentemente, a informação  $F_x$  é mais sensível ao comportamento pontual de  $\rho(x)$  do que  $\Delta x$  e  $S_x$ . Por isso, dizemos que  $F_x$  é uma medida local, ao passo que  $\Delta x$  e  $S_x$  são medidas globais. Em outras palavras,  $F_x$  **tem a capacidade** de nos fornecer medidas de incerteza mais acuradas que  $\Delta x$  e  $S_x$ .

Em uma série de artigos [23-25], Nascimento e seus colaboradores estudaram medidas de incerteza e de informação em sistemas dependentes e independentes do tempo. Em 2016, Aguiar, Nascimento e Guedes [23] obtiveram as funções de onda,  $\psi_{n,m,k}(\mathbf{r}, t)$ , para uma partícula carregada, sem spin, e presa em uma armadilha de Penning dependente do tempo. Para determinar  $\psi_{n,m,k}(\mathbf{r}, t)$ , os autores utilizaram o método de Lewis e Riesenfeld [26] e duas transformações unitárias. Para  $\psi_{0,0,0}(\mathbf{r}, t)$ , eles calcularam os desvios padrão para a posição e momento. A partir dos desvios padrão, os autores descreveram condições para a ocorrência do fenômeno de compressão. A compressão em átomos tem encontrado aplicações em teleporte quântico, criptografia e codificação [28-31]. Em seguida, eles mostraram como os desvios padrão para a posição ( $\Delta \mathbf{r}$ ) e momento ( $\Delta \mathbf{p}$ ) estão relacionadas as respectivas entropias de Shannon ( $S_{\mathbf{r},\mathbf{p}}$ ) e informações de Fisher ( $F_{\mathbf{r},\mathbf{p}}$ ).

Em 2017, Nascimento, Aguiar e Guedes [24] analisaram os efeitos da não comutatividade do espaço e do momento sobre as informações de Fisher e entropias de Shannon de um oscilador harmônico imerso em um campo elétrico dependente do tempo em duas e três dimensões. Utilizando uma transformação canônica e o método de Lewis e Riesenfeld [26], eles calcularam as funções de onda do sistema. Em seguida, obtiveram as informações e entropias para o estado fundamental do sistema. Eles observaram que a definição de informação de Fisher em espaços não-comutativos tem que ser modificada para que as inequações de Cramer-Rao [27] sejam satisfeitas.

Em 2018, Nascimento et al. [25] estudaram as energias ( $E_n$ ), os desvios padrão ( $\Delta x$ ,  $\Delta p$ ), as informações de Fisher ( $F_{x,p}$ ) e as entropias de Shannon ( $S_{x,p}$ ) de um oscilador harmônico na presença de um campo elétrico estático ( $\mathcal{E}$ ) em um espaço com métrica  $g_{xx}^{-1} = 1 + \gamma x$ . Para essa métrica, o oscilador harmônico simples pôde ser mapeado no potencial de Morse. No caso de um oscilador harmônico em um espaço euclidiano, as energias possuem um deslocamento

devido ao campo. Contudo, ao considerar um espaço com métrica  $g_{xx}^{-1}$ , eles observaram dois termos adicionais nas energias: um que depende somente do fator de métrica  $\gamma$ , e outro que depende do produto da métrica com o campo elétrico,  $\gamma\epsilon$ . Eles também analisaram o comportamento das incertezas, informações e entropias em relação aos parâmetros  $\gamma$  e  $\epsilon$ . Através das informações de Fisher, eles obtiveram os comprimentos de Fisher,  $\delta x, p$ , e observaram que essas quantidades fornecem medidas de incerteza mais acuradas que  $\Delta x, p$ , ou seja,  $\delta x, p < \Delta x, p$ .

Ao longo dos últimos anos, novos tipos de medidas entrópicas e de informação foram desenvolvidas e aplicadas em outros contextos. Em 2014, Sanūdo e López-Ruiz [32] calcularam a complexidade estatística e a informação de Fisher-Shannon para elétrons lançados contra uma barreira de potencial em monocamada de grafeno. Eles observaram que essas medidas estatísticas assumem seus valores mínimos quando a transmissão através da barreira é total. Em 2015, os mesmos autores estudaram o mesmo problema em bicamada de grafeno [33]. Diferentemente do caso anterior, eles observaram que a complexidade estatística e a informação de Fisher-Shannon assumem seus valores mínimos quando a transmissão é aproximadamente nula. Estes resultados evidenciam que as medidas entrópicas podem ser úteis para discernir certas diferenças físicas em sistemas quânticos similares.

Em 2014, Garcia et. al. [34] estudaram o fenômeno de *quantum revival* em pacotes de onda em grafeno via produto de Fisher-Shannon. Eles observaram que os *revivals* e *fractional revivals* do pacote de onda correspondem a mínimos relativos no produto entrópico, sinalizando a retomada do comportamento quasi-clássico do pacote de onda.

Em 2015, Calixto e Romera [35] propuseram um novo método para indentificar transições de isolantes topológicos para isolantes de banda em siliceno, na presença de campos elétricos e magnéticos, através da entropia de Rényi-Wehrl dos estados quânticos no espaço de fase. Outros trabalhos relacionando conceitos de informação entrópica e transições de fase quânticas podem ser encontradas nas Refs. [36-39].

Neste trabalho estudamos elétrons e buracos em uma monocamada de fosforeno na presença de um campo magnético dependente do tempo  $\mathbf{B}(t)$  e de baixa intensidade. Para este fim, utilizamos a hamiltoniana presente na Ref. [17], estabelecida por Zhou et. al.. Em particular, consideramos os campos magnéticos  $\mathbf{B}(t) = B_0\mathbf{k}$  e  $\mathbf{B}(t) = (B_0^2 + B_1^2 \cos^2(\mu t))^{1/2}\mathbf{k}$ , que podem ser reproduzidos em laboratório. Este trabalho encontra-se assim dividido: no Capítulo 2, revemos alguns dos resultados obtidos na Ref. [17]. No Capítulo 3, fazemos uma breve introdução às principais idéias e resultados da chamada Teoria de invariantes dependentes do tempo. Em seguida, utilizamos o método de Lewis e Riesenfeld para chegarmos às funções de onda para elétrons em uma monocamada de fosforeno, quando submetidos à campos magnéticos dependentes do tempo e de baixa intensidade. De posse das funções de onda, determinamos as incertezas, as informações de Fisher, os valores esperados da energia

mecânica e as probabilidades de transição. Neste ponto, vale a pena ressaltar que não existem estudos de medidas de incerteza e informação para elétrons em fosforeno na literatura científica. No Capítulo 4, apresentamos alguns comentários finais.

## 2 MONOCAMADA DE FOSFORENO NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO INDEPENDENTE DO TEMPO

A equação de Schrödinger independente do tempo para um sistema quântico é escrita como

$$H\Psi = E\Psi, \quad (2.1)$$

onde  $H$  é a hamiltoniana que descreve a dinâmica do sistema e  $\Psi$  são as suas autofunções. Se o sistema em questão é constituído por elétrons/buracos em uma monocamada de fosforeno na presença de um campo magnético de baixa intensidade,  $H$  é **aproximada** por [17]

$$H = \begin{pmatrix} E_c + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{m_{cx}} \pi_x^2 + \frac{1}{m_{cy}} \pi_y^2 \right) & 0 \\ 0 & E_v - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{m_{vx}} \pi_x^2 + \frac{1}{m_{vy}} \pi_y^2 \right) \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

onde  $\boldsymbol{\pi} = (\pi_x, \pi_y) = (p_x - eA_x, p_y - eA_y)$  é o momento generalizado,  $e$  é a carga elementar,  $\mathbf{A} = (A_x, A_y)$  é o potencial vetor magnético,  $m_{cx}, m_{cy}, m_{vx}$  e  $m_{vy}$  são massas efetivas relacionadas à massa do elétron livre  $m_e$  ( $m_{cx} = 0.167 m_e, m_{cy} = 0.848 m_e, m_{vx} = 0.184 m_e, m_{vy} = 1.142 m_e$ ) e  $E_c = 0.34 eV$  ( $E_v = -1.18 eV$ ) é o valor mínimo (máximo) da banda de condução (valência). Nesse caso,  $\Psi = [\psi^c \ \psi^v]^T$ , com  $\psi^c$  ( $\psi^v$ ) correspondendo à funções de onda associadas à amplitudes de probabilidade de elétrons de condução (valência). O subscrito  $T$  acima significa transposta de [...].

Consideremos um campo magnético estático aplicado na direção  $z$ ,  $\mathbf{B} = (0, 0, B_0)$ . Escolhendo o calibre de Landau  $\mathbf{A} = (-yB_0, 0, 0)$ , podemos mostrar que a equação matricial (2.1) equivale às equações diferenciais desacopladas

$$\frac{1}{2} \left[ \frac{1}{m_{cx}} (p_x + eyB_0)^2 + \frac{1}{m_{cy}} p_y^2 \right] \psi^c(\mathbf{r}) = (E - E_c) \psi^c(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

$$\frac{1}{2} \left[ \frac{1}{m_{vx}} (p_x + eyB_0)^2 + \frac{1}{m_{vy}} p_y^2 \right] \psi^v(\mathbf{r}) = -(E - E_v) \psi^v(\mathbf{r}). \quad (2.4)$$

Foqemos na Eq. (2.3). Supondo uma solução do tipo

$$\psi^c(\mathbf{r}) = e^{ik_x x} F^c(y), \quad (2.5)$$

podemos expressá-la na forma

$$\left[ \frac{p_y^2}{2m_{cy}} + \frac{m_{cy}}{2} \left( \frac{eB_0}{\sqrt{m_{cx}m_{cy}}} \right)^2 \left( y + \frac{\hbar k_x}{eB_0} \right)^2 \right] F^c(y) = (E - E_c) F^c(y), \quad (2.6)$$

que é a equação de autovalores de um oscilador harmônico deslocado de  $-\hbar k_x/eB_0$  e de frequência

angular clássica  $\omega = (eB_0/\sqrt{m_{cx}m_{cy}})^{1/2}$ , cujas soluções são bastante conhecidas.

Observe que a Eq. (2.3) se reduz à Eq. (2.4) sob a mudança  $m_{cx} \rightarrow m_{vx}$ ,  $m_{cy} \rightarrow m_{vy}$ ,  $E - E_c \rightarrow -(E - E_v)$ . Portanto, para a escolha do calibre de Landau  $\mathbf{A} = (-yB_0, 0, 0)$ , as funções de onda e suas respectivas energias são, respectivamente

$$\Psi_n^c(\mathbf{r}) = [\psi_n^c(\mathbf{r}) \ 0]^T, \quad (2.7)$$

$$E_n^c = E_c + \frac{\hbar e B_0}{\sqrt{m_{cx}m_{cy}}} \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad (2.8)$$

e

$$\Psi_n^v(\mathbf{r}) = [0 \ \psi_n^v(\mathbf{r})]^T, \quad (2.9)$$

$$E_n^v = E_v - \frac{\hbar e B_0}{\sqrt{m_{vx}m_{vy}}} \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad (2.10)$$

onde

$$\begin{aligned} \psi_n^j(\mathbf{r}) = & e^{ik_x x} \left( \frac{eB_0}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{m_{jy}}{m_{jx}}} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp \left[ -\frac{eB_0}{2\hbar} \sqrt{\frac{m_{jy}}{m_{jx}}} \left( y + \frac{\hbar k_x}{eB_0} \right)^2 \right] \\ & \times H_n \left[ \sqrt{\frac{eB_0}{\hbar}} \sqrt{\frac{m_{jy}}{m_{jx}}} \left( y + \frac{\hbar k_x}{eB_0} \right) \right], \end{aligned} \quad (2.11)$$

com  $j = c$  para elétrons de condução,  $j = v$  para elétrons de valência, e onde  $H_n(z)$  são os polinômios de Hermite. Nas Figs. 1(a)-(b) mostramos o comportamento linear dos níveis de Landau  $E_n = E_n^j - E_j$  em relação a  $n$  e  $B_0$ . As densidades de probabilidade de um elétron ( $|\psi_n^c|^2$ ) para alguns valores de  $n$  e  $B_0$  são mostradas nas Figs. 2(a)-(b).

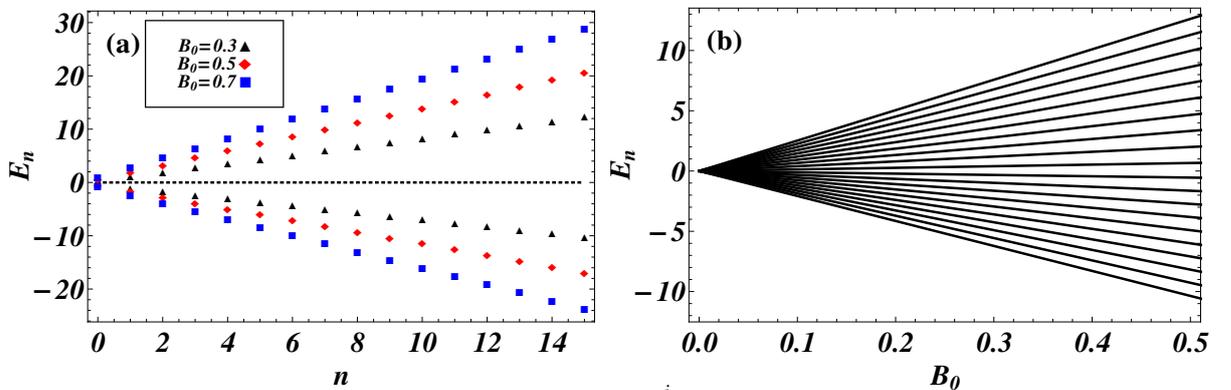


Figura 1: Comportamento dos níveis de Landau  $E_n = E_n^j - E_j$ , onde  $j = c, v$ , em relação ao (a) número quântico  $n$  para alguns valores de  $B_0$ , e em relação à (b) intensidade do campo magnético  $B_0$  para os dez primeiros estados. Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = k_x = e = 1$ . Reproduzido de [17].

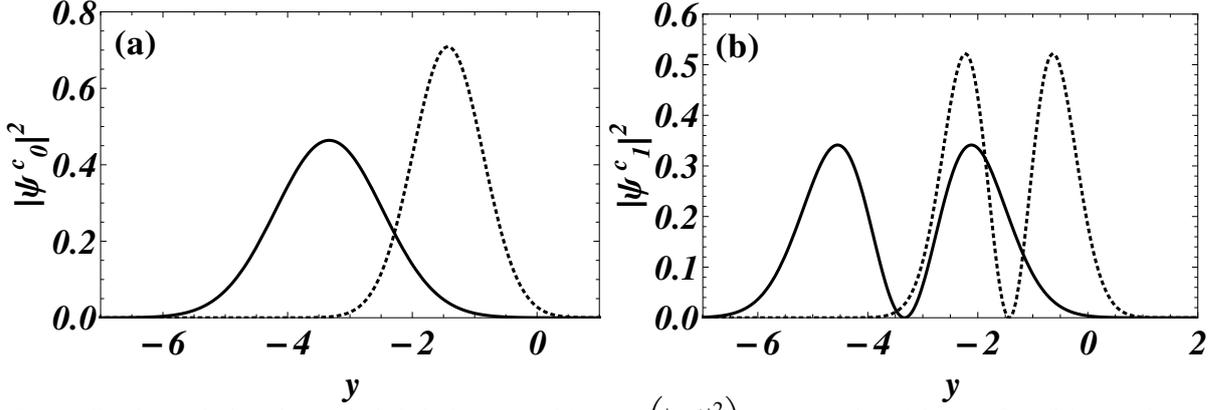


Figura 2: Densidades de probabilidade para elétrons ( $|\psi_n^c|^2$ ) nos estados (a)  $n = 0$  e (b)  $n = 1$  com  $B_0 = 0.3$  (linha sólida) e  $B_0 = 0.7$  (linha pontilhada). Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = k_x = e = 1$ . Reproduzido de [17].

Agora, consideremos o calibre de Landau  $\mathbf{A} = (0, B_0 x, 0)$ . Utilizando um raciocínio análogo ao que foi realizado anteriormente, podemos mostrar que as funções de onda e as respectivas energias são, respectivamente, dadas pelas Eqs. (2.6)-(2.9), com

$$\begin{aligned} \psi_n^j(\mathbf{r}) = & e^{ik_y y} \left( \frac{eB_0}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{m_{jx}}{m_{jy}}} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp \left[ -\frac{eB_0}{2\hbar} \sqrt{\frac{m_{jx}}{m_{jy}}} \left( x + \frac{\hbar k_y}{eB_0} \right)^2 \right] \\ & \times H_n \left[ \sqrt{\frac{eB_0}{\hbar}} \sqrt{\frac{m_{jx}}{m_{jy}}} \left( x + \frac{\hbar k_y}{eB_0} \right) \right], \end{aligned} \quad (2.12)$$

onde  $j = c, v$ .

Zhou et al. também apresentaram as funções de onda no caso da escolha do calibre simétrico,  $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -(1/2)\mathbf{r} \times \mathbf{B}$ , a saber

$$\Psi_{n,m}^c(\mathbf{r}) = [\psi_{n,m}^c(\mathbf{r}) \ 0]^T, \quad \Psi_{n,m}^v(\mathbf{r}) = [0 \ \psi_{n,m}^v(\mathbf{r})]^T, \quad (2.13)$$

onde

$$\begin{aligned} \psi_{n,m}^j(\mathbf{r}) = & \left[ \frac{\Gamma(n+1)}{\pi \Gamma(n+|m|+1)} \right]^{1/2} \left( \frac{eB_0}{2\hbar} \right)^{(|m|+1)/2} e^{im\theta_j} \left( \sqrt{\frac{m_{jx}}{m_{jy}}} x^2 + \sqrt{\frac{m_{jy}}{m_{jx}}} y^2 \right)^{|m|/2} \\ & \times \exp \left[ -\frac{eB_0}{4\hbar} \left( \sqrt{\frac{m_{jx}}{m_{jy}}} x^2 + \sqrt{\frac{m_{jy}}{m_{jx}}} y^2 \right) \right] L_n^{|m|} \left[ \frac{eB_0}{2\hbar} \left( \sqrt{\frac{m_{jx}}{m_{jy}}} x^2 + \sqrt{\frac{m_{jy}}{m_{jx}}} y^2 \right) \right], \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\theta_j = \arctan \left[ \sqrt{\frac{m_{jy} y}{m_{jx} x}} \right], \quad (2.15)$$

com  $n \in \mathbb{N}$ ,  $m \in \mathbb{Z}$ ,  $j = c$  para elétrons de condução,  $j = v$  para elétrons de valência, e onde  $L_n^m(z)$  são os polinômios associados de Laguerre. Na Fig. 3 mostramos as densidades de probabilidade

de um elétron ( $|\psi_{n,m}^c|^2$ ) para alguns valores de  $n$ ,  $m$  e  $B_0$ .

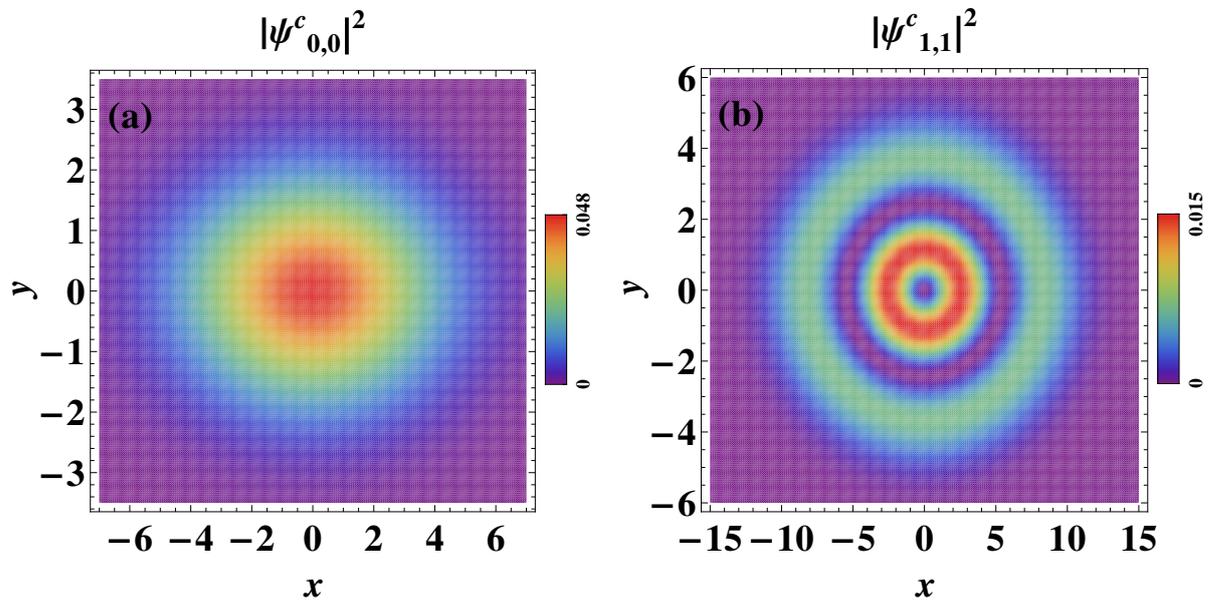


Figura 3: Densidades de probabilidade para elétrons ( $|\psi_{n,m}^c|^2$ ) nos estados (a)  $n = m = 0$  e (b)  $n = m = 1$ . Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = k_x = e = 1$  e  $B_0 = 0.3$ . Reproduzido de [17].

### 3 MONOCAMADA DE FOSFORENO NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO DEPENDENTE DO TEMPO

#### 3.1 Considerações iniciais

Começaremos este Capítulo com uma breve introdução às principais idéias e resultados da chamada Teoria de invariantes dependentes do tempo, formulada por Lewis e Riesenfeld em 1969 [26]. Em seguida, utilizaremos o método de Lewis e Riesenfeld para chegarmos às funções de onda para elétrons em uma monocamada de fosforeno, quando submetidos à campos magnéticos dependentes do tempo e de baixa intensidade. De posse das funções de onda, determinaremos as incertezas, as informações de Fisher, os valores esperados da energia mecânica e as probabilidades de transição.

#### 3.2 Teoria quântica de invariantes dependentes do tempo

Consideremos um sistema quântico descrito pela hamiltoniana  $H(t)$ , cuja dependência temporal é explícita. A equação de Schrödinger dependente do tempo para este sistema é dada por

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = H(t)\psi(t). \quad (3.1)$$

Agora, suponhamos a existência de um operador hermitiano que seja explicitamente dependente do tempo e invariante, ou seja,

$$I = I^\dagger, \quad (3.2)$$

$$\frac{dI}{dt} = \frac{\partial I}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[I, H] = 0. \quad (3.3)$$

Aplicando a Eq. (3.3) no estado  $\psi(t)$ , obtemos

$$\frac{\partial I}{\partial t} \psi(t) + \frac{1}{i\hbar} I H \psi(t) - \frac{1}{i\hbar} H I \psi(t) = 0. \quad (3.4)$$

Combinando as Eqs. (3.1) e (3.4), temos que

$$i\hbar \frac{\partial [I\psi(t)]}{\partial t} = H(t)[I\psi(t)]. \quad (3.5)$$

Assim, a ação do operador invariante  $I(t)$  sobre o estado  $\psi(t)$  produz uma nova solução da equação de Schrödinger,  $I\psi(t)$ . Este resultado independe da forma funcional de  $I(t)$ . Entretanto, a partir de agora, iremos considerar somente operadores invariantes que não contenham derivadas temporais. Esta restrição é tomada para facilitar a escolha das fases dos autoestados de  $I(t)$ . Como veremos posteriormente, estes autoestados multiplicados por um fator de fase,

dependente do tempo e arbitrário, serão soluções da equação de Schrödinger dependente do tempo.

Agora, admitiremos que o invariante  $I(t)$  é um operador de um conjunto completo de observáveis que comutam. Isto implica na existência de um conjunto completo de autoestados ortonormais  $|\lambda, k; t\rangle$  de  $I(t)$ , ou seja,

$$I(t)|\lambda, k; t\rangle = \lambda|\lambda, k; t\rangle, \quad (3.6)$$

$$\langle\lambda', k'; t|\lambda, k; t\rangle = \delta_{\lambda', \lambda} \delta_{k', k}, \quad (3.7)$$

onde  $\lambda$  são os autovalores de  $I(t)$  e  $k$  representa os números quânticos necessários para especificar os autoestados  $|\lambda, k; t\rangle$ .

Observe que os autovalores  $\lambda$  de invariante são reais,

$$\lambda = \lambda^*, \quad (3.8)$$

pois  $I(t)$  é hermitiano. A seguir, iremos demonstrar que  $\lambda$  são independentes do tempo. Aplicando a Eq. (3.3) sobre o autoestado  $|\lambda, k; t\rangle$ , obtemos

$$i\hbar \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle + IH|\lambda, k; t\rangle - HI|\lambda, k; t\rangle = 0, \quad (3.9)$$

que pode ser reescrita utilizando a Eq. (3.6) como

$$i\hbar \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle + IH|\lambda, k; t\rangle - \lambda H|\lambda, k; t\rangle = 0. \quad (3.10)$$

Tomando o produto escalar da Eq. (3.10) com o bra  $\langle\lambda', k'; t|$ , temos

$$i\hbar \langle\lambda', k'; t| \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle + \langle\lambda', k'; t| IH|\lambda, k; t\rangle - \lambda \langle\lambda', k'; t| H|\lambda, k; t\rangle = 0, \quad (3.11)$$

que pode ser reescrita utilizando-se as Eqs. (3.6) e (3.8) da forma

$$i\hbar \langle\lambda', k'; t| \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle + (\lambda' - \lambda) \langle\lambda', k'; t| H|\lambda, k; t\rangle = 0. \quad (3.12)$$

Veja que para  $\lambda = \lambda'$ , a Eq. (3.12) reduz-se à

$$i\hbar \langle\lambda', k'; t| \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle = 0, \quad (3.13)$$

para quaisquer  $k$  e  $k'$ .

Por outro lado, derivando a Eq. (3.6) em relação ao tempo, temos que

$$\frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle + I \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle = \frac{\partial \lambda}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle + \lambda \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle. \quad (3.14)$$

Tomando agora o produto escalar da Eq. (3.14) com o bra  $\langle \lambda, k; t |$ , chegamos a

$$\langle \lambda, k; t | \frac{\partial I}{\partial t} | \lambda, k; t \rangle + \langle \lambda, k; t | I \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, k; t \rangle = \langle \lambda, k; t | \frac{\partial \lambda}{\partial t} | \lambda, k; t \rangle + \lambda \langle \lambda, k; t | \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, k; t \rangle. \quad (3.15)$$

Combinando as Eqs. (3.6)-(3.8) e (3.15), obtemos

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = \langle \lambda, k; t | \frac{\partial I}{\partial t} | \lambda, k; t \rangle, \quad (3.16)$$

Por fim, comparando as Eqs. (3.13) e (3.16), vemos que

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = 0. \quad (3.17)$$

A seguir, investigaremos de que maneira os autoestados do operador invariante  $I(t)$  estão relacionados às soluções da equação de Schrödinger. Sabendo que os autovalores do invariante  $I(t)$  são independentes do tempo, Eq. (3.17), podemos reescrever a Eq. (3.14) na forma

$$(\lambda - I) \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, k; t \rangle = \frac{\partial I}{\partial t} | \lambda, k; t \rangle. \quad (3.18)$$

Tomando agora o produto escalar da Eq. (3.18) com  $\langle \lambda', k'; t |$ , chegamos a

$$\begin{aligned} \langle \lambda', k'; t | \frac{\partial I}{\partial t} | \lambda, k; t \rangle &= \lambda \langle \lambda', k'; t | \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, k; t \rangle - \langle \lambda', k'; t | I \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, k; t \rangle, \\ &= (\lambda - \lambda') \langle \lambda', k'; t | \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, k; t \rangle. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Comparando as Eqs. (3.12) e (3.19), vemos que

$$i\hbar(\lambda - \lambda') \langle \lambda', k'; t | \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, k; t \rangle = (\lambda - \lambda') \langle \lambda', k'; t | H | \lambda, k; t \rangle, \quad (3.20)$$

que para  $\lambda \neq \lambda'$ , reduz-se à

$$i\hbar \langle \lambda', k'; t | \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, k; t \rangle = \langle \lambda', k'; t | H | \lambda, k; t \rangle. \quad (3.21)$$

Enfatizamos que a Eq. (3.21) não é válida para  $\lambda = \lambda'$ . Se essa equação fosse válida tanto para  $\lambda \neq \lambda'$  quanto para  $\lambda = \lambda'$ , poderíamos afirmar que o estado  $|\lambda, k; t\rangle$  satisfaria a equação de Schrödinger. Contudo, não nos esqueçamos de que ainda não fixamos a fase do estado  $|\lambda, k; t\rangle$ , de modo que estamos livres para multiplicar o estado  $|\lambda, k; t\rangle$  por um fator de fase dependente do tempo. Desta maneira, podemos definir um novo conjunto de autoestados de  $I(t)$ , que evoluem no tempo de acordo com a equação de Schrödinger e que estão relacionados aos antigos estados  $|\lambda, k; t\rangle$  através da transformação de calibre

$$|\lambda, k; t\rangle_\alpha = e^{i\alpha_{\lambda k}(t)} |\lambda, k; t\rangle, \quad (3.22)$$

onde  $\alpha_{\lambda k}(t)$  são funções reais dependentes do tempo.

Observe que os novos estados  $|\lambda, k; t\rangle_\alpha$  serão autoestados ortonormais de  $I(t)$  desde que o invariante não contenha derivadas temporais, o que supomos inicialmente. Assim, podemos escrever a equação de autovalores para  $I(t)$  em termos dos novos autoestados da seguinte maneira

$$I(t)|\lambda, k; t\rangle_\alpha = \lambda|\lambda, k; t\rangle_\alpha. \quad (3.23)$$

Diante dessas observações, veja que as Eqs. (3.8)-(3.20) continuam válidas em termos dos novos autoestados, bastando tomar  $|\lambda, k; t\rangle \rightarrow |\lambda, k; t\rangle_\alpha$ . Consequentemente,

$$i\hbar\langle\lambda', k'; t|_\alpha \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle_\alpha = \langle\lambda', k'; t|_\alpha H |\lambda, k; t\rangle_\alpha. \quad (3.24)$$

para  $\lambda \neq \lambda'$ . Se ajustarmos as fases  $\alpha_{\lambda k}(t)$  de modo que a Eq. (3.24) seja também satisfeita para  $\lambda = \lambda'$ , garantiremos que os novos autoestados serão soluções da equação de Schrödinger. Mas de que maneira determinaremos tais fases? Fazendo o caminho inverso. Como mostraremos a seguir, podemos determinar  $\alpha_{\lambda k}(t)$  impondo a validade da Eq. (3.24) para  $\lambda = \lambda'$ .

A equação de Schrödinger dependente do tempo para os novos estados é dada por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle_\alpha = H(t)|\lambda, k; t\rangle_\alpha. \quad (3.25)$$

Tomando o produto escalar da Eq. (3.25) com o bra  $\langle\lambda, k'; t|_\alpha$ , e utilizando as Eqs. (3.7) e (3.22), chegamos a

$$\hbar\delta_{k',k} \frac{d\alpha_{\lambda k}}{dt} = \langle\lambda, k'; t|_\alpha i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H|\lambda, k; t\rangle_\alpha. \quad (3.26)$$

Para que a Eq. (3.26) seja satisfeita, devemos escolher os estados  $|\lambda, k; t\rangle$  de tal forma que o lado direito dessa equação seja nulo para  $k' \neq k$ . Essa diagonalização é sempre possível já que o operador  $i\hbar\partial_t - H$  é hermitiano. Assim, as fases devem ser soluções da equação diferencial

$$\hbar \frac{d\alpha_{\lambda k}}{dt} = \langle\lambda, k; t|_\alpha i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H|\lambda, k; t\rangle_\alpha, \quad (3.27)$$

uma vez que os autoestados  $|\lambda, k; t\rangle_\alpha$  satisfazem a equação de Schrödinger.

Por fim, como cada autoestado  $|\lambda, k; t\rangle_\alpha$  satisfaz a equação de Schrödinger, podemos escrever a solução geral  $|t\rangle$  como a combinação linear das soluções, ou seja,

$$|t\rangle = \sum_{\lambda k} C_{\lambda k} e^{i\alpha_{\lambda k}(t)} |\lambda, k; t\rangle_\alpha, \quad (3.28)$$

onde  $C_{\lambda k}$  são coeficientes independentes do tempo.

A teoria de invariantes pode ser utilizada no estudo de osciladores harmônicos com

massa ( $m$ ) e frequência angular ( $\omega$ ) dependentes do tempo, cuja hamiltoniana é dada por

$$H(t) = \frac{p^2}{2m(t)} + \frac{m(t)\omega^2(t)}{2}q^2, \quad (3.29)$$

onde  $q$  e  $p$  são as variáveis canonicamente conjugadas que satisfazem  $[q, p] = i\hbar$ . Osciladores harmônicos com massa dependente do tempo têm sido utilizados no estudo de dissipação em sistemas quânticos [40-52].

Em 1969, Lewis e Riesenfeld [26] deduziram um operador invariante para sistemas com massa constante e frequência angular  $\omega = \omega(t)$ . Em seguida, determinaram as soluções quânticas para este sistema através da relação entre os autoestados de  $I(t)$  e as soluções da equação de Schrödinger. Em 1997, Pedrosa [53] construiu um operador invariante para a hamiltoniana (3.29) seguindo o mesmo procedimento de Lewis e Riesenfeld. Posteriormente, Pedrosa, Serra e Guedes [54] obtiveram a função de onda exata para osciladores harmônicos com massa e frequência angular dependentes do tempo na presença e na ausência de perturbação singular. Para chegar às soluções quânticas, os autores utilizaram o invariante construído anteriormente por Pedrosa na Ref. [53]. A seguir, deduziremos um operador invariante para a hamiltoniana (3.29).

O invariante construído por Lewis e Riesenfeld [26] tem a forma

$$I(t) = \frac{1}{2} [\alpha(t)q^2 + \beta(t)p^2 + \zeta(t) \{q, p\}], \quad (3.30)$$

onde  $\alpha(t)$ ,  $\beta(t)$  e  $\zeta(t)$  são funções reais dependentes do tempo, e  $\{q, p\}$  é o anticomutador de  $q$  e  $p$ . Derivando a Eq. (3.30) em relação ao tempo, chegamos a

$$\frac{dI}{dt} = \frac{1}{2} [\dot{\alpha}q^2 + \dot{\beta}p^2 + \dot{\zeta} \{q, p\} + 2(q\dot{q}\alpha + p\dot{p}\beta) + \zeta(\dot{q}p + p\dot{q} + \dot{p}q + q\dot{p})]. \quad (3.31)$$

Combinando as Eqs. (3.3), (3.31) e as equações de Heisenberg para um sistema descrito pela hamiltoniana (3.29), a saber,

$$\dot{q} = \frac{p}{m(t)}, \quad (3.32)$$

$$\dot{p} = -m(t)\omega^2(t)q^2, \quad (3.33)$$

obtemos as seguintes relações

$$\dot{\alpha}(t) - 2m(t)\omega^2(t)\zeta(t) = 0, \quad (3.34)$$

$$\dot{\beta}(t) + \frac{2\zeta(t)}{m(t)} = 0, \quad (3.35)$$

$$\frac{\alpha(t)}{m(t)} - \beta(t)m(t)\omega^2(t) + \dot{\zeta}(t) = 0. \quad (3.36)$$

Podemos reduzir as três últimas equações a uma única equação diferencial, chamada de equação auxiliar do invariante do sistema. Substituindo

$$\beta(t) = \sigma^2(t), \quad (3.37)$$

na Eq. (3.35), temos

$$\zeta(t) = -m(t)\sigma(t)\dot{\sigma}(t). \quad (3.38)$$

Com o auxílio das Eqs. (3.37) e (3.38), podemos reescrever a Eq. (3.36) na forma

$$\alpha = m^2\omega^2\sigma^2 + \dot{m}m\sigma\dot{\sigma} + m^2\dot{\sigma}^2 + m^2\sigma\ddot{\sigma}. \quad (3.39)$$

Substituindo as Eqs. (3.38) e (3.39) na Eq. (3.34), encontramos

$$\begin{aligned} 3m\dot{m}\dot{\sigma}^2 + 2\dot{\sigma}\ddot{\sigma}m^2 + 3m\dot{m}\sigma\ddot{\sigma} + m^2\dot{\sigma}\ddot{\sigma} + m^2\dot{\sigma}\ddot{\sigma} + 2m\dot{m}\sigma^2\omega^2 \\ + 2m^2\sigma^2\omega\dot{\omega} + 4m^2\omega^2\sigma\dot{\sigma} + \dot{m}^2\sigma\dot{\sigma} + m\dot{m}\sigma\dot{\sigma} = 0. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Dividindo a Eq. (3.40) por  $m^2$  e colocando  $\sigma$  em evidência, obtemos

$$\sigma \left( 3\dot{\sigma}\frac{\dot{m}}{m} + 4\dot{\sigma}\omega^2 + \ddot{\sigma} + 2\sigma\omega^2\frac{\dot{m}}{m} + 2\sigma\omega\dot{\omega} + \dot{\sigma}\frac{\dot{m}^2}{m^2} + \dot{\sigma}\frac{\dot{m}}{m} \right) + 3 \left( \dot{\sigma}^2\frac{\dot{m}}{m} + \dot{\sigma}\ddot{\sigma} \right) = 0, \quad (3.41)$$

que pode ser reescrita em

$$\sigma \left( \dot{\sigma}\frac{\dot{m}}{m} + \dot{\sigma}\omega^2 + \ddot{\sigma} + 2\sigma\omega\dot{\omega} - \dot{\sigma}\frac{\dot{m}^2}{m^2} + \dot{\sigma}\frac{\dot{m}}{m} \right) + \left( 3\dot{\sigma} + 2\sigma\frac{\dot{m}}{m} \right) \left( \dot{\sigma} + \dot{\sigma}\frac{\dot{m}}{m} + \omega^2\sigma \right) = 0. \quad (3.42)$$

Note que

$$\dot{\sigma}\frac{\dot{m}}{m} + \dot{\sigma}\omega^2 + \ddot{\sigma} + 2\sigma\omega\dot{\omega} - \dot{\sigma}\frac{\dot{m}^2}{m^2} + \dot{\sigma}\frac{\dot{m}}{m} = \frac{d}{dt} \left( \dot{\sigma} + \frac{\dot{m}}{m}\dot{\sigma} + \omega^2\sigma \right). \quad (3.43)$$

Multiplicando a Eq. (3.42) por  $m^2\sigma^2$  e utilizando a Eq. (3.43), temos

$$m^2\sigma^3 \frac{d}{dt} \left( \dot{\sigma} + \frac{\dot{m}}{m}\dot{\sigma} + \omega^2\sigma \right) + (3\dot{\sigma}\sigma^2m^2 + 2m\dot{m}\sigma^3) \left( \dot{\sigma} + \frac{\dot{m}}{m}\dot{\sigma} + \omega^2\sigma \right) = 0. \quad (3.44)$$

Sabendo que

$$\frac{d}{dt} (m^2\sigma^3) = 3\dot{\sigma}\sigma^2m^2 + 2m\dot{m}\sigma^3, \quad (3.45)$$

podemos expressar a Eq. (3.44) como

$$\frac{d}{dt} \left[ m^2 \sigma^3 \left( \ddot{\sigma} + \frac{\dot{m}}{m} \dot{\sigma} + \omega^2 \sigma \right) \right] = 0. \quad (3.46)$$

Integrando a Eq. (3.46), chegamos a

$$\ddot{\sigma} + \frac{\dot{m}}{m} \dot{\sigma} + \omega^2 \sigma = \frac{C^2}{m^2 \sigma^3}, \quad (3.47)$$

onde  $C^2$  é uma constante de integração arbitrária.

Utilizando as Eqs. (3.37)-(3.39) e (3.47), podemos reescrever o invariante (3.30) como sendo

$$I(t) = \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{Cq}{\sigma} \right)^2 + (\sigma p - m\dot{\sigma}q)^2 \right], \quad (3.48)$$

onde  $\sigma(t)$  satisfaz a equação auxiliar (3.47). Finalmente, inserindo a mudança de escala  $\sigma(t) = C^{1/2} \rho(t)$  nas Eqs. (3.47) e (3.48), e tomando  $C = 1$ , obtemos

$$I(t) = \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{q}{\rho} \right)^2 + (\rho p - m\dot{\rho}q)^2 \right], \quad (3.49)$$

como invariante para um sistema descrito pela hamiltoniana (3.29), e

$$\ddot{\rho} + \frac{\dot{m}}{m} \dot{\rho} + \omega^2 \rho = \frac{1}{m^2 \rho^3}, \quad (3.50)$$

como nova equação auxiliar. A Eq. (3.50) é a conhecida equação de Milne-Pinney [55, 56] generalizada. Qualquer solução real dessa equação pode ser utilizada para a construção do operador invariante (3.49).

### 3.3 Fosforeno na presença de campo magnético dependente do tempo

#### 3.3.1 Funções de onda

A equação de Schrödinger dependente do tempo para um sistema quântico é escrita como

$$i\hbar \partial_t \Psi = H(t) \Psi, \quad (3.51)$$

onde  $H$  é a hamiltoniana que descreve a dinâmica do sistema e  $\Psi$  são as suas autofunções. Novamente, se o sistema em questão é constituído por elétrons/buracos em uma monocamada de fosforeno na presença de um campo magnético de baixa intensidade,  $H$  será dada pela Eq. (2.2). Nesse caso,  $\Psi = [\psi^c \ \psi^v]^T$ , com  $\psi^c$  ( $\psi^v$ ) correspondendo às funções de onda associadas às amplitudes de probabilidade de elétrons de condução (valência). O subscripto  $T$  acima significa transposta de [...].

Das Eqs. (2.2) e (3.51), obtemos as seguintes equações diferenciais desacopladas

$$i\hbar\partial_t\psi^c(x,y,t) - E_c\psi^c(x,y,t) = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{m_{cx}}\pi_x^2 + \frac{1}{m_{cy}}\pi_y^2\right)\psi^c(x,y,t), \quad (3.52)$$

$$i\hbar\partial_t\psi^v(x,y,t) - E_v\psi^v(x,y,t) = -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{m_{vx}}\pi_x^2 + \frac{1}{m_{vy}}\pi_y^2\right)\psi^v(x,y,t). \quad (3.53)$$

Considerando  $\mathbf{B}(t) = (0,0,B(t))$ , escolhendo  $\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = -(1/2)\mathbf{r} \times \mathbf{B}(t)$  e redefinindo as coordenadas cartesianas como  $x = (m_{cy}/m_{cx})^{1/4}X$ ,  $y = (m_{cx}/m_{cy})^{1/4}Y$ , a Eq. (3.52) torna-se

$$(i\hbar\partial_t - E_c)\psi^c(X,Y,t) = \left[\frac{1}{2M_c}(P_X^2 + P_Y^2) - \frac{\omega_c(t)}{2}\bar{L}_z + \frac{M_c\omega_{1c}^2(t)}{2}(X^2 + Y^2)\right]\psi^c(X,Y,t), \quad (3.54)$$

onde  $P_X = -i\hbar\partial/\partial X$ ,  $P_Y = -i\hbar\partial/\partial Y$ ,  $M_c = \sqrt{m_{cx}m_{cy}}$ ,  $\omega_c(t) = eB(t)/M_c$ ,  $\bar{L}_z = XP_Y - YP_X$  e  $\omega_{1c}^2(t) = e^2B^2(t)/4M_c^2$ .

Aplicando a transformação unitária

$$\psi^c(X,Y,t) = U_1\varphi^c(X,Y,t) = \exp\left[i\left(\frac{1}{2\hbar}\bar{L}_z \int \omega_c(t')dt' - \frac{E_c}{\hbar}t\right)\right]\varphi^c(X,Y,t), \quad (3.55)$$

podemos mapear a Eq. (3.54) na de um oscilador harmônico bidimensional com frequência angular dependente do tempo, ou seja,

$$i\hbar\partial_t\varphi^c(X,Y,t) = H'(t)\varphi^c(X,Y,t), \quad (3.56)$$

onde

$$H'(t) = \frac{1}{2M_c}(P_X^2 + P_Y^2) + \frac{M_c\omega_{1c}^2(t)}{2}(X^2 + Y^2). \quad (3.57)$$

O termo  $\exp(i\bar{L}_z \int \omega_c(t')dt'/2\hbar)$  da transformação unitária  $U_1$ , Eq. (3.55), produz rotações apropriadas nos momentos canônicos e nas coordenadas de posição, eliminando o termo  $\bar{L}_z$  da Eq. (3.54). Para uma discussão mais aprofundada, veja a Ref. [57].

O invariante para um sistema descrito pela hamiltoniana (3.57) é dado por

$$I(t) = \frac{1}{2}\left[\left(\frac{X}{\rho_c}\right)^2 + \left(\frac{Y}{\rho_c}\right)^2 + (\rho_c P_X - M_c \dot{\rho}_c X)^2 + (\rho_c P_Y - M_c \dot{\rho}_c Y)^2\right], \quad (3.58)$$

que é uma simples extensão do invariante obtido anteriormente, Eq. (3.49). A função  $\rho_c(t)$  satisfaz a equação de Milne-Pinney generalizada (veja a Eq. (3.50))

$$\ddot{\rho}_c + \omega_{1c}^2(t)\rho_c = \frac{1}{M_c^2\rho_c^3}. \quad (3.59)$$

Somente soluções reais de  $\rho_c(t)$  são aceitáveis para que  $I(t)$  seja hermitiano.

A equação de autovalores para o invariante  $I(t)$  (veja a Eq. (3.23)) é dada por

$$I\phi_{n,m}(X,Y,t) = \lambda_{n,m}\phi(X,Y,t), \quad (3.60)$$

onde  $\lambda_{n,m}$  são os autovalores discretos independentes do tempo e  $\langle \phi_{n,m}, \phi_{n',m'} \rangle = \delta_{n,n'}\delta_{m,m'}$ . As soluções da Eq. (3.56),  $\varphi_{n,m}^c$ , estão relacionadas às autofunções  $\phi_{n,m}$  de  $I$  (veja a Eq. (3.22)) por

$$\varphi_{n,m}^c(X,Y,t) = \exp[i\alpha_{n,m}(t)]\phi_{n,m}(X,Y,t), \quad (3.61)$$

onde as funções de fase  $\alpha_{n,m}(t)$  satisfazem a equação (veja a Eq. (3.27))

$$\hbar \frac{d\alpha_{n,m}(t)}{dt} = \left\langle \phi_{n,m}(X,Y,t) \left| i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H'(t) \right| \phi_{n,m}(X,Y,t) \right\rangle, \quad (3.62)$$

com  $H'(t)$  dado pela Eq. (3.57).

Agora, considere a transformação unitária

$$\phi'_{n,m}(X,Y,t) = U_2 \phi_{n,m}(X,Y,t), \quad (3.63)$$

onde

$$U_2 = \exp \left[ -\frac{iM_c \dot{\rho}_c}{2\hbar \rho_c} (X^2 + Y^2) \right]. \quad (3.64)$$

Sob esta transformação e definindo  $X = \rho_c r \cos \theta$ ,  $Y = \rho_c r \sin \theta$ , a Eq. (3.60) torna-se

$$I'(t) \sigma_{n,m}(r, \theta) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + \frac{r^2}{2} \right] \sigma_{n,m}(r, \theta) = \lambda_{n,m} \sigma_{n,m}(r, \theta), \quad (3.65)$$

onde  $I'(t) = U_2 I(t) U_2^\dagger$ ,  $r^2 = (X^2 + Y^2)/\rho_c^2$ ,  $\theta = \arctan(Y/X)$  e

$$\phi'_{n,m}(X,Y,t) = \frac{1}{\rho_c} \sigma_{n,m}(r, \theta). \quad (3.66)$$

O fator  $1/\rho_c$  na equação acima faz-se necessário para mantermos a normalização do autoestado do invariante,  $\phi_{n,m}$ .

Podemos decompor  $\sigma(r, \theta)$  na forma  $\sigma(r, \theta) = R(r)\Theta(\theta)$ , onde  $\Theta(\theta) = e^{im\theta}$ , com  $m \in \mathbb{Z}$ . Definindo a nova variável  $u = r^2/\hbar$  e escrevendo  $\sigma(u, \theta) = R(r)\Theta(\theta)$  como

$$\sigma(r, \theta) = (\hbar u)^{|m|/2} e^{-u/2} v(u) \Theta(\theta), \quad (3.67)$$

podemos reescrever a Eq. (3.65) na forma

$$u \frac{\partial^2 v(u)}{\partial u^2} + (|m| + 1 - u) \frac{\partial v(u)}{\partial u} + \frac{1}{2} \left( \frac{\lambda_{n,m}}{\hbar} - |m| - 1 \right) v(u) = 0, \quad (3.68)$$

cujas soluções são expressas em termos dos polinômios associados de Laguerre

$$v(u) = L_n^{|m|}(u), \quad (3.69)$$

onde

$$n = \frac{1}{2} \left( \frac{\lambda_{n,m}}{\hbar} - |m| - 1 \right), \quad (3.70)$$

com  $n \in \mathbb{N}$ .

Assim, as autofunções normalizadas de  $I(t)$  são

$$\begin{aligned} \phi_{n,m}(X, Y, t) &= \left[ \frac{\Gamma(n+1)}{\pi \Gamma(n+|m|+1)} \right]^{1/2} \left( \frac{1}{\hbar \rho_c^2} \right)^{\frac{|m|+1}{2}} (X^2 + Y^2)^{|m|/2} e^{im\theta} \\ &\times \exp \left[ -\frac{1}{2\hbar \rho_c} \left( \frac{1}{\rho_c} - iM_c \dot{\rho}_c \right) (X^2 + Y^2) \right] L_n^{|m|} \left( \frac{X^2 + Y^2}{\hbar \rho_c^2} \right), \end{aligned} \quad (3.71)$$

e os autovalores independentes do tempo são escritos como  $\lambda_{n,m} = \hbar(2n + |m| + 1)$ . Podemos também mostrar que as funções de fase são dadas por (veja o Apêndice A)

$$\alpha_{n,m}^c(t) = -(2n + |m| + 1) \int_0^t \frac{dt'}{M_c \rho_c^2(t')}. \quad (3.72)$$

Observando a Eq. (3.55), vemos que o operador  $U_1$  atua apenas na parte angular ( $\theta$ ) de  $\varphi_{n,m}^c(X, Y, t) = \varphi_{n,m}^c(\rho_c r \cos \theta, \rho_c r \sin \theta, t)$ , pois

$$\begin{aligned} U_1 &= \exp \left[ i \left( \frac{1}{2\hbar} \bar{L}_z \int \omega_c(t') dt' - \frac{E_c}{\hbar} t \right) \right] \\ &= \exp \left\{ i \left[ \frac{1}{2\hbar} (XP_Y - YP_X) \int \omega_c(t') dt' - \frac{E_c}{\hbar} t \right] \right\} \\ &= \exp \left[ i \left( \frac{-i}{2} \frac{\partial}{\partial \theta} \int \omega_c(t') dt' - \frac{E_c}{\hbar} t \right) \right] \\ &= \sum_{j=0}^{+\infty} \frac{1}{j!} \left( \frac{1}{2} \int \omega_c(t') dt' \frac{\partial}{\partial \theta} - i \frac{E_c}{\hbar} t \right)^j. \end{aligned} \quad (3.73)$$

Por fim, utilizando as Eqs. (3.55), (3.61), (3.71) e (3.73), e retornando às variáveis originais, obtemos como soluções normalizadas e exatas da Eq. (3.52)

$$\begin{aligned} \psi_{n,m}^c(\mathbf{r}, t) &= \left[ \frac{\Gamma(n+1)}{\pi \Gamma(n+|m|+1)} \right]^{1/2} \left( \frac{1}{\hbar \rho_c^2} \right)^{\frac{|m|+1}{2}} e^{i\alpha_{n,m}^c(t)} \exp \left[ i \left( \frac{m}{2} \int \omega_c(t') dt' - \frac{E_c}{\hbar} t \right) \right] \\ &\times \left( \sqrt{\frac{m_{cx}}{m_{cy}}} x^2 + \sqrt{\frac{m_{cy}}{m_{cx}}} y^2 \right)^{\frac{|m|}{2}} \exp \left[ -\frac{1}{2\hbar \rho_c} \left( \frac{1}{\rho_c} - iM_c \dot{\rho}_c \right) \left( \sqrt{\frac{m_{cx}}{m_{cy}}} x^2 + \sqrt{\frac{m_{cy}}{m_{cx}}} y^2 \right) \right] \\ &\times e^{im\theta} L_n^{|m|} \left[ \frac{1}{\hbar \rho_c^2} \left( \sqrt{\frac{m_{cx}}{m_{cy}}} x^2 + \sqrt{\frac{m_{cy}}{m_{cx}}} y^2 \right) \right], \end{aligned} \quad (3.74)$$

onde

$$\theta_{\mathbf{r}}^c = \arctan \left( \sqrt{\frac{m_{cy} y}{m_{cx} x}} \right), \quad (3.75)$$

com  $n \in \mathbb{N}$  e  $m \in \mathbb{Z}$ .

As soluções da Eq. (3.53) são facilmente obtidas tomando  $m_{cx} \rightarrow -m_{vx}$ ,  $m_{cy} \rightarrow -m_{vy}$  e  $E_c \rightarrow E_v$ , ou seja,

$$\begin{aligned} \Psi_{n,m}^v(\mathbf{r}, t) &= \left[ \frac{\Gamma(n+1)}{\pi \Gamma(n+|m|+1)} \right]^{1/2} \left( \frac{1}{\hbar \rho_v^2} \right)^{\frac{|m|+1}{2}} e^{i\alpha_{n,m}^v(t)} \exp \left[ i \left( \frac{m}{2} \int \omega_v(t') dt' - \frac{E_v}{\hbar} t \right) \right] \\ &\times \left( \sqrt{\frac{m_{vx}}{m_{vy}}} x^2 + \sqrt{\frac{m_{vy}}{m_{vx}}} y^2 \right)^{\frac{|m|}{2}} \exp \left[ -\frac{1}{2\hbar \rho_v} \left( \frac{1}{\rho_v} - iM_v \dot{\rho}_v \right) \left( \sqrt{\frac{m_{vx}}{m_{vy}}} x^2 + \sqrt{\frac{m_{vy}}{m_{vx}}} y^2 \right) \right] \\ &\times e^{im\theta_{\mathbf{r}}^v} L_n^{|m|} \left[ \frac{1}{\hbar \rho_v^2} \left( \sqrt{\frac{m_{vx}}{m_{vy}}} x^2 + \sqrt{\frac{m_{vy}}{m_{vx}}} y^2 \right) \right], \end{aligned} \quad (3.76)$$

onde  $M_v = \sqrt{m_{vx} m_{vy}}$ ,  $\omega_v(t) = eB(t)/M_v$ ,  $\theta_{\mathbf{r}}^v = \arctan \left( \sqrt{\frac{m_{vy} y}{m_{vx} x}} \right)$  e

$$\alpha_{n,m}^v(t) = -(2n + |m| + 1) \int_0^t \frac{dt'}{M_v \rho_v^2(t')}, \quad (3.77)$$

com  $\rho_v$  satisfazendo a equação de Milne-Pinney

$$\ddot{\rho}_v + \omega_{1v}^2(t) \rho_v = \frac{1}{M_v^2 \rho_v^3}, \quad (3.78)$$

onde  $\omega_{1v}^2(t) = e^2 B^2(t)/4M_v^2$ . Para um campo magnético estático, as soluções (3.74) e (3.76) concordam com as soluções obtidas por Zhou et al., Eq. (2.13).

Escrevendo a hamiltoniana da Eq. (3.51) no espaço do momento, podemos obter as funções de onda no espaço do momento. Seguindo um procedimento análogo ao já realizado (veja o Apêndice B), podemos mostrar que as soluções quânticas da Eq. (3.51) no espaço do momento são dadas por

$$\Phi_{n,m}^c(\mathbf{p}, t) = [\chi_{n,m}^c(\mathbf{p}, t) \quad 0]^T, \quad \Phi_{n,m}^v(\mathbf{p}, t) = [0 \quad \chi_{n,m}^v(\mathbf{p}, t)]^T, \quad (3.79)$$

com

$$\begin{aligned}
\chi_{n,m}^j(\mathbf{p}, t) &= \left[ \frac{\Gamma(n+1)}{\pi \Gamma(n+|m|+1)} \right]^{1/2} \left( \frac{1}{\hbar \beta_j^2} \right)^{\frac{|m|+1}{2}} e^{i\alpha_{n,m}^j(t)} \exp \left[ i \left( \frac{m}{2} \int \omega_j(t') dt' - \frac{E_j}{\hbar} t \right) \right] \\
&\times \left( \sqrt{\frac{m_{jy}}{m_{jx}}} p_x^2 + \sqrt{\frac{m_{jx}}{m_{jy}}} p_y^2 \right)^{\frac{|m|}{2}} e^{im\theta_{\mathbf{p}}^j} L_n^{|m|} \left[ \frac{1}{\hbar \beta_j^2} \left( \sqrt{\frac{m_{jy}}{m_{jx}}} p_x^2 + \sqrt{\frac{m_{jx}}{m_{jy}}} p_y^2 \right) \right] \\
&\times \exp \left[ -\frac{1}{2\hbar \beta_j^2} (1 + i\rho_j \dot{\rho}_j M_j) \left( \sqrt{\frac{m_{jy}}{m_{jx}}} p_x^2 + \sqrt{\frac{m_{jx}}{m_{jy}}} p_y^2 \right) \right],
\end{aligned} \tag{3.80}$$

onde  $M_j$ ,  $\omega_j(t)$ ,  $\rho_j(t)$  e  $\omega_{\Gamma_j}^2(t)$  são quantidades já definidas,  $\beta_j^2 = (1 + \rho_j^2 \dot{\rho}_j^2 M_j^2) / \rho_j^2$  e  $\theta_{\mathbf{p}}^j = \arctan \left[ \sqrt{\frac{m_{jx} p_y}{m_{jy} p_x}} \right]$ .

### 3.3.2 Incertezas e Informação de Fisher

Utilizando as funções de onda (3.74), (3.76), e (3.80), chegamos aos seguintes valores esperados (veja o Apêndice C)

$$\langle x^2 \rangle_{n,m}^j = \langle \psi_{n,m}^j | x^2 | \psi_{n,m}^j \rangle = \frac{\hbar}{2} \rho_j^2 \left( \frac{m_{jy}}{m_{jx}} \right)^{1/2} (2n + |m| + 1), \tag{3.81}$$

$$\langle y^2 \rangle_{n,m}^j = \langle \psi_{n,m}^j | y^2 | \psi_{n,m}^j \rangle = \frac{\hbar}{2} \rho_j^2 \left( \frac{m_{jx}}{m_{jy}} \right)^{1/2} (2n + |m| + 1), \tag{3.82}$$

$$\langle p_x^2 \rangle_{n,m}^j = \langle \chi_{n,m}^j | p_x^2 | \chi_{n,m}^j \rangle = \frac{\hbar}{2} \beta_j^2 \left( \frac{m_{jx}}{m_{jy}} \right)^{1/2} (2n + |m| + 1), \tag{3.83}$$

$$\langle p_y^2 \rangle_{n,m}^j = \langle \chi_{n,m}^j | p_y^2 | \chi_{n,m}^j \rangle = \frac{\hbar}{2} \beta_j^2 \left( \frac{m_{jy}}{m_{jx}} \right)^{1/2} (2n + |m| + 1), \tag{3.84}$$

$$\langle x \rangle_{n,m}^j = \langle y \rangle_{n,m}^j = \langle p_x \rangle_{n,m}^j = \langle p_y \rangle_{n,m}^j = 0, \tag{3.85}$$

onde  $j$  é  $c$  para elétrons de condução e  $v$  para elétrons de valência. Como  $m_{jy} > m_{jx}$ , vemos que  $\Delta x > \Delta y$  para qualquer elétron de condução/valência no estado  $(n, m)$ , enquanto que  $\Delta p_y > \Delta p_x$ .

Assim, para um dado  $\mathbf{B}(t)$ , temos de resolver as Eqs. (3.59) e (3.78) para obtermos as incertezas para elétrons e buracos em uma monocamada de fosforeno. Para um campo

magnético oscilante,  $\mathbf{B}(t) = (B_0^2 + B_1^2 \cos^2(\mu t))^{1/2} \mathbf{k}$ , a Eq. (3.58) e sua respectiva solução (veja o Apêndice D) são

$$\ddot{\rho}_c + \frac{e^2}{4M_c^2} (B_0^2 + B_1^2 \cos^2(\mu t)) \rho_c = \frac{1}{M_c^2 \rho_c^3}, \quad (3.86)$$

$$\rho_c(t) = \left( \frac{1}{|W| M_c} \right)^{1/2} \left\{ MC^2 \left[ \frac{e^2 \gamma}{8M_c^2 \mu^2}, -\frac{e^2 B_1^2}{16M_c^2 \mu^2}, \mu t \right] + MS^2 \left[ \frac{e^2 \gamma}{8M_c^2 \mu^2}, -\frac{e^2 B_1^2}{16M_c^2 \mu^2}, \mu t \right] \right\}^{1/2}, \quad (3.87)$$

onde  $\gamma = 2B_0^2 + B_1^2$ ,  $MC$  e  $MS$  são as funções par e ímpar de Mathieu, respectivamente, e  $W$  é o Wronskiano de  $MC$  e  $MS$ .

Nas Figs. 4(a)-(b) mostramos a dependência temporal das incertezas,  $\Delta_{x,y}(t)$  e  $\Delta p_{x,y}(t)$ , para elétrons de condução no estado fundamental. Observamos que  $\Delta_{x,y}(t)$  e  $\Delta p_{x,y}(t)$  oscilam com fases opostas. Os pontos de máximo (mínimo) de  $\Delta_{x,y}(t)$  coincidem com os valores mínimos (máximos) de  $B(t)$ , a intensidade do campo magnético oscilatório (veja a Fig. (5)). Em outras palavras, quanto maior (menor) a intensidade do campo magnético, mais (menos) confinada a partícula está. Nas Figs. 4(a)-(b) vemos também que, para  $B_0 = B_1 = 1$ ,  $\Delta y(t)$  e  $\Delta p_x(t)$  sofrem o fenômeno de compressão, ou seja,  $\Delta y$  e  $\Delta p_x$  são menores que 0.707.

Nas Figs. 6(a)-(b) mostramos o comportamento das incertezas em relação à  $B_0$  no instante  $t = 0.5\pi$ . Observamos que  $\Delta_{x,y}(B_0)$  diminuem com o aumento da intensidade do campo magnético. Por outro lado,  $\Delta p_{x,y}(B_0)$  aumentam com  $B_0$ . No instante  $t = 0.5\pi$ , o fenômeno de compressão ocorre apenas nos momentos para intensidades de campo magnético no intervalo  $0 < B_0 < 0.5$ .

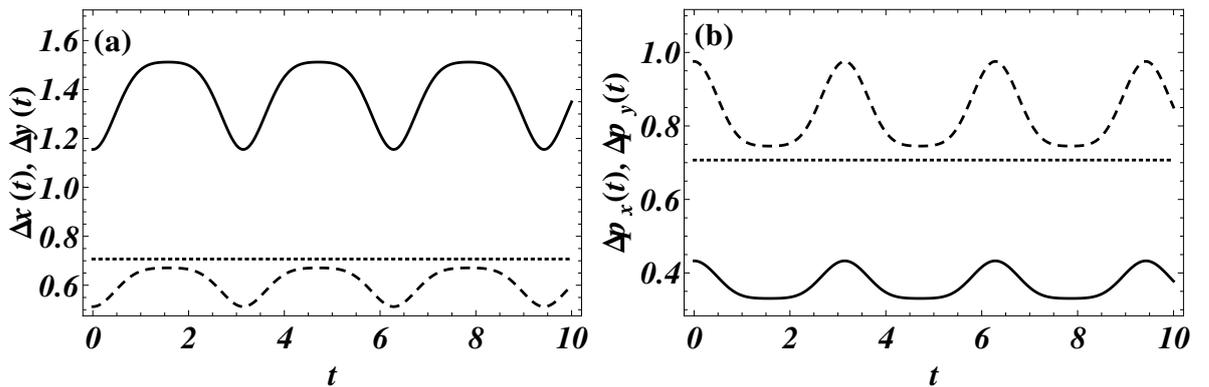


Figura 4: Dependência temporal de (a)  $\Delta x(t)$  (linha sólida) e  $\Delta y(t)$  (linha tracejada), e (b)  $\Delta p_x(t)$  (linha sólida) e  $\Delta p_y(t)$  (linha tracejada), para elétrons de condução no estado fundamental. Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = \mu = e = B_0 = B_1 = 1$ . A linha pontilhada representa  $\Delta_{x,y}(t) = \Delta p_{x,y}(t) = 0.707$ .

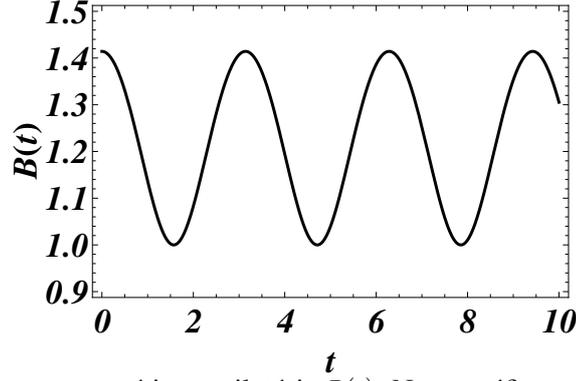


Figura 5: Intensidade do campo magnético oscilatório  $B(t)$ . Neste gráfico consideramos  $\mu = B_0 = B_1 = 1$ .

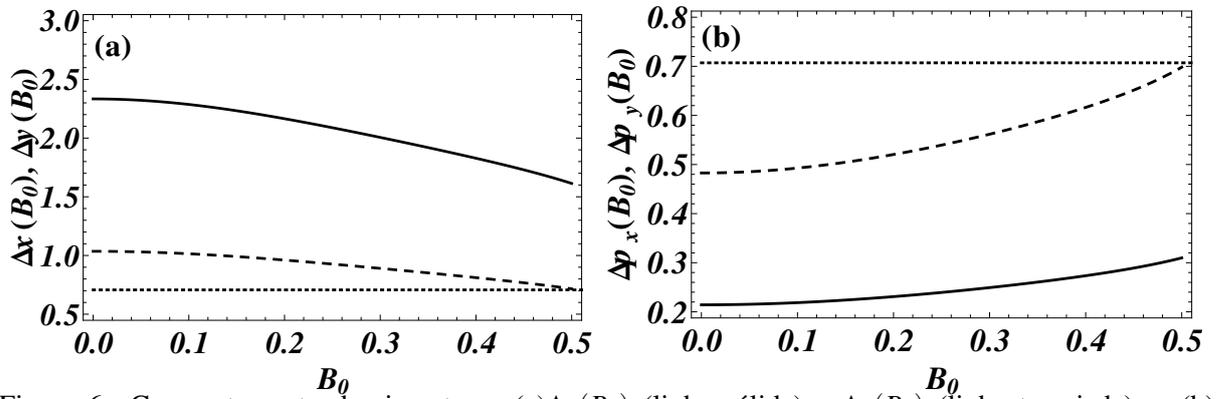


Figura 6: Comportamento das incertezas (a)  $\Delta x(B_0)$  (linha sólida) e  $\Delta y(B_0)$  (linha tracejada), e (b)  $\Delta p_x(B_0)$  (linha sólida) e  $\Delta p_y(B_0)$  (linha tracejada), para elétrons de condução no estado fundamental. Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = \mu = e = 1$ ,  $B_1 = 0.5$  e  $t = 0.5\pi$ . A linha pontilhada representa  $\Delta x, y(B_0) = \Delta p_{x, y}(B_0) = 0.707$ .

Agora, analisemos a informação de Fisher para elétrons em monocamadas de fosforeno na presença de campo magnético. A informação e Fisher para os observáveis  $x$ ,  $y$ ,  $p_x$  e  $p_y$  são dadas por [21]

$$F_w = \int \left[ \frac{1}{\eta(x, y, t)} \left( \frac{\partial \eta(x, y, t)}{\partial w} \right)^2 \right] dx dy, (w = x, y) \quad (3.88)$$

$$F_s = \int \left[ \frac{1}{\vartheta(p_x, p_y, t)} \left( \frac{\partial \vartheta(p_x, p_y, t)}{\partial s} \right)^2 \right] dp_x dp_y, (s = p_x, p_y) \quad (3.89)$$

onde  $\eta(x, y, t) = |\psi_{n, m}^j(x, y, t)|^2$  e  $\vartheta(p_x, p_y, t) = |\chi_{n, m}^j(p_x, p_y, t)|^2$  são as densidades de probabilidade no espaço da posição e do momento, respectivamente.

Substituindo as funções de onda (3.74), (3.76) e (3.80) nas Eqs. (3.88) e (3.89),

obtemos

$$F_x^j(t) = \frac{2}{\hbar\rho_j^2} \left( \frac{m_{jx}}{m_{jy}} \right)^{1/2}, \quad F_y^j(t) = \frac{2}{\hbar\rho_j^2} \left( \frac{m_{jy}}{m_{jx}} \right)^{1/2}, \quad (3.90)$$

$$F_{p_x}^j(t) = \frac{2\rho_j^2}{\hbar(1 + \rho_j^2\dot{\rho}_j^2M_j^2)} \left( \frac{m_{jy}}{m_{jx}} \right)^{1/2}, \quad F_{p_y}^j(t) = \frac{2\rho_j^2}{\hbar(1 + \rho_j^2\dot{\rho}_j^2M_j^2)} \left( \frac{m_{jx}}{m_{jy}} \right)^{1/2}, \quad (3.91)$$

como expressões para as informações de Fisher associadas à elétrons e buracos no estado fundamental.

Nas Figs. 7(a)-(b) mostramos a dependência temporal das informações,  $F_{x,y}(t)$  e  $F_{p_{x,y}}(t)$ , para elétrons de condução no estado fundamental. Assim como as incertezas, as informações  $F_{x,y}(t)$  e  $F_{p_{x,y}}(t)$  oscilam com fases opostas. Comparando as Figs. 4(a) e 7(a), vemos que  $F_{x,y}(t)$  cresce (decresce) nos intervalos de tempo em que  $\Delta x,y(t)$  decresce (cresce). Em outras palavras, quanto menor (maior) a incerteza em relação à posição do elétron, maior (menor) é a informação que temos em relação à sua localização. O mesmo pode ser dito em relação aos comportamentos de  $F_{p_{x,y}}(t)$  e  $\Delta p_{x,y}(t)$  com o tempo.

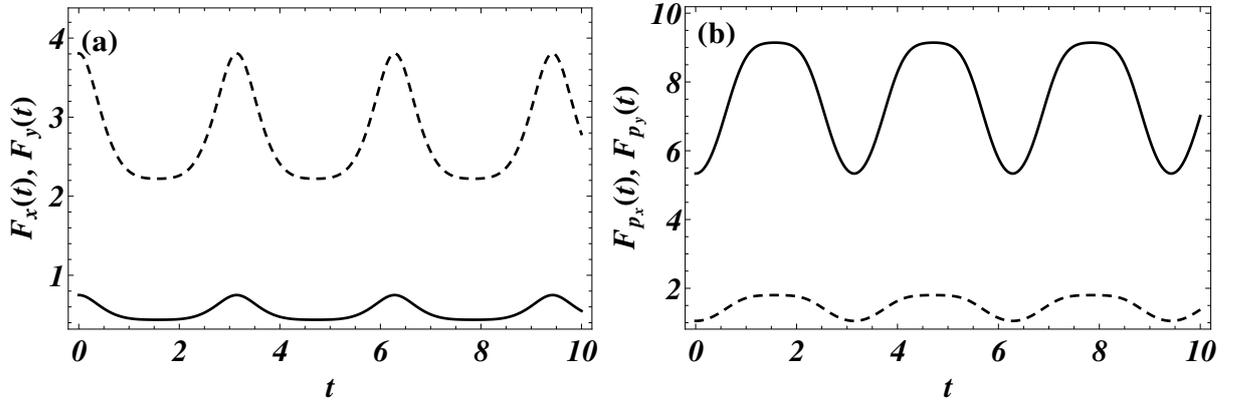


Figura 7: Dependência temporal de (a)  $F_x(t)$  (linha sólida) e  $F_y(t)$  (linha tracejada), e (b)  $F_{p_x}(t)$  (linha sólida) e  $F_{p_y}(t)$  (linha tracejada) para elétrons de condução no estado fundamental. Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = \mu = e = B_0 = B_1 = 1$ .

As informações de Fisher produzem os chamados comprimentos de Fisher, medidas de incerteza poderosas que são definidas no espaço da posição e do momento como [58]

$$\delta \mathbf{r} = \frac{1}{\sqrt{F_{\mathbf{r}}}}, \quad \delta \mathbf{p} = \frac{1}{\sqrt{F_{\mathbf{p}}}}, \quad (3.92)$$

onde  $F_{\mathbf{r}} = F_x + F_y$  e  $F_{\mathbf{p}} = F_{p_x} + F_{p_y}$ . A partir das Eqs. (3.81)-(3.85) e (3.90)-(3.92), vemos que os comprimentos de Fisher, para esse sistema, nos fornecem medidas de incerteza mais precisas que  $\Delta \mathbf{r}, \mathbf{p}$ , i. e.,  $\delta \mathbf{r}, \mathbf{p} < \Delta \mathbf{r}, \mathbf{p}$ .

### 3.3.3 Valor esperado da energia mecânica

Usando coordenadas cartesianas  $\mathbf{x}$  como coordenadas generalizadas, podemos escrever a Lagrangiana de uma partícula de massa  $m$  e carga  $q$  se movendo em um campo eletromagnético como

$$L = \frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2 + q\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{x}} - q\phi. \quad (3.93)$$

Na situação mais geral, tanto o potencial vetor magnético  $\mathbf{A}$  como o potencial escalar elétrico  $\phi$  são funções de  $\mathbf{x}$  e  $t$ . De acordo com Goldstein et al. [59], a hamiltoniana desse sistema é a energia mecânica do sistema desde que a energia "potencial" em um campo eletromagnético seja determinado somente por  $\phi$ . Neste caso, o momento canônico é escrito como  $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{x}} + q\mathbf{A}$  e a Hamiltoniana do sistema é dada por

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2 + q\phi. \quad (3.94)$$

Assim, utilizando as Eqs. (3.81)-(3.85) e o valor esperado (veja o Apêndice C)

$$\left\langle \frac{1}{m_{jy}} x p_y - \frac{1}{m_{jx}} y p_x \right\rangle_{n,m}^j = \frac{\hbar m}{\sqrt{m_{jx} m_{jy}}}, \quad (3.95)$$

obtemos os seguintes valores esperados da energia mecânica para elétrons de condução e valência, respectivamente

$$E_{n,m}^c(t) = E_c + \frac{\hbar}{2(m_{cx} m_{cy})^{1/2}} \left\{ (2n + |m| + 1) \left[ \beta_c^2 + \frac{e^2 B^2(t)}{4} \rho_c^2 \right] - m e B(t) \right\}, \quad (3.96)$$

$$E_{n,m}^v(t) = E_v - \frac{\hbar}{2(m_{vx} m_{vy})^{1/2}} \left\{ (2n + |m| + 1) \left[ \beta_v^2 + \frac{e^2 B^2(t)}{4} \rho_v^2 \right] - m e B(t) \right\}, \quad (3.97)$$

onde  $\beta_j^2 = (1 + \rho_j^2 \dot{\rho}_j^2 M_j^2) / \rho_j^2$ .

Novamente, para um dado  $\mathbf{B}(t)$ , temos de resolver as Eqs. (3.59) e (3.78) para obtermos a energia mecânica média  $E_{n,m}(t)$  para elétrons e buracos em uma monocamada de fosforeno. Primeiro, consideremos o caso estático  $\mathbf{B}(t) = B_0 \mathbf{k}$ . Nesse caso, as soluções das Eqs. (3.59) e (3.78) são

$$\rho_c = \rho_v = (2/eB_0)^{1/2}. \quad (3.98)$$

Assim, das Eqs. (3.96)-(3.98), obtemos o valor médio da energia para elétrons e buracos, respectivamente, como

$$E_{n,m}^c = E_c + \frac{\hbar e B_0}{(m_{cx} m_{cy})^{1/2}} \left( n + \frac{|m| - m + 1}{2} \right), \quad (3.99)$$

$$E_{n,m}^v = E_v - \frac{\hbar e B_0}{(m_{vx} m_{vy})^{1/2}} \left( n + \frac{|m| - m + 1}{2} \right). \quad (3.100)$$

Observe que energias  $E_{n,m}^c$  e  $E_{n,m}^v$  variam linearmente com  $n$ ,  $m$  e  $B_0$ . O número quântico  $m$  pode assumir qualquer valor inteiro para cada  $n$  escolhido. Das Eqs. (3.99)-(3.100) e para um valor fixo de  $n$ , temos duas situações a considerar. Se  $m \geq 0$ , temos infinitos estados degenerados. Já para  $m < 0$ , temos infinitos estados não degenerados. Na Fig. 8 mostramos  $E_{n,m} = E_{n,m}^j - E_j$ , onde  $j = c, v$ , para alguns valores de  $n$ ,  $m$  e  $B_0$ .

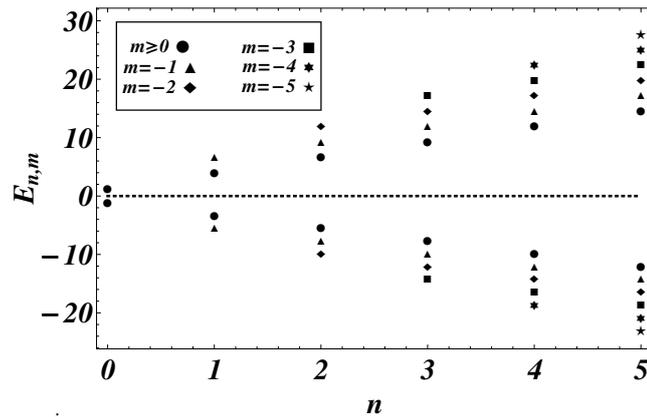


Figura 8: Energia  $E_{n,m} = E_{n,m}^j - E_j$ , onde  $j = c, v$ , para alguns valores de  $n$  e  $m$ . Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = e = B_0 = 1$ .

Agora, consideremos o caso do campo magnético oscilante. Na Fig. 9(a) mostramos  $E_{n,0}^c(t)$  deslocadas de  $-E_c$  para alguns valores de  $n$ . Observamos que  $E_{n,0}^c(t)$  aumentam com  $n$  e oscilam com o mesmo período de oscilação do campo magnético oscilante, a saber,  $T = \pi/\mu$ . Na Fig. 9(b) mostramos a intensidade do campo magnético oscilatório,  $B(t)$ . Comparando as Figs. 9(a) e 9(b), vemos que a oscilação de  $E_{n,0}^c(t)$  reflete o crescimento (decréscimo) da interação magnética quando o campo magnético cresce (decrece).

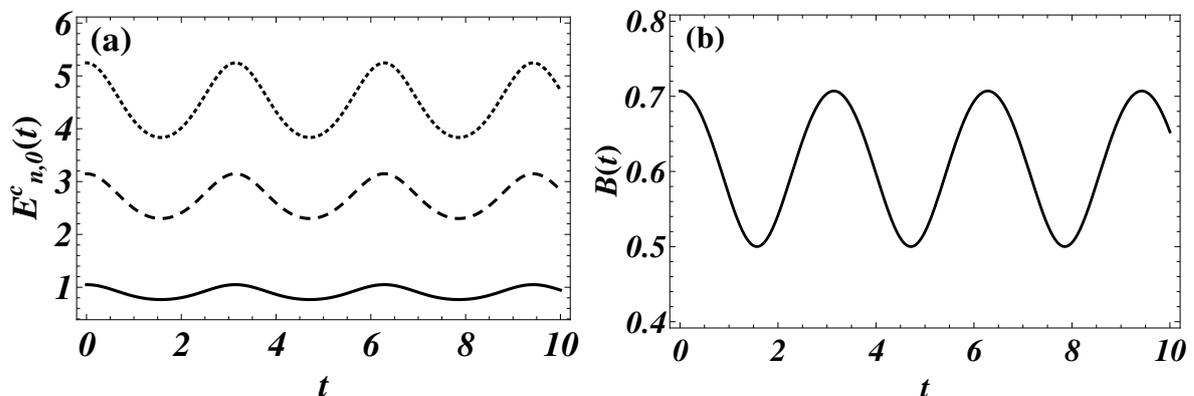


Figura 9: Dependência temporal de (a)  $E_{n,0}^c(t)$  para  $n = 0$  (linha sólida),  $n = 1$  (linha tracejada) e  $n = 2$  (linha pontilhada), e (b)  $B(t)$ . As energias  $E_{n,0}^c(t)$  estão deslocadas de  $-E_c$ . Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = \mu = e = 1$  e  $B_0 = B_1 = 0.5$ .

Na Fig. 10 mostramos  $E_{0,0}^c(B_0)$  deslocado de  $-E_c$  para três valores de tempo  $t$ . Observamos que, diferentemente do caso estático,  $E_{0,0}^c(B_0)$  não varia linearmente com  $B_0$ . A região definida pelas curvas  $E_{0,0}^c(B_0)|_{t=0}$  e  $E_{0,0}^c(B_0)|_{t=\pi/2}$  define todos os possíveis valores de  $E_{0,0}^c(B_0)$ , já que o período de oscilação é  $\pi$ .

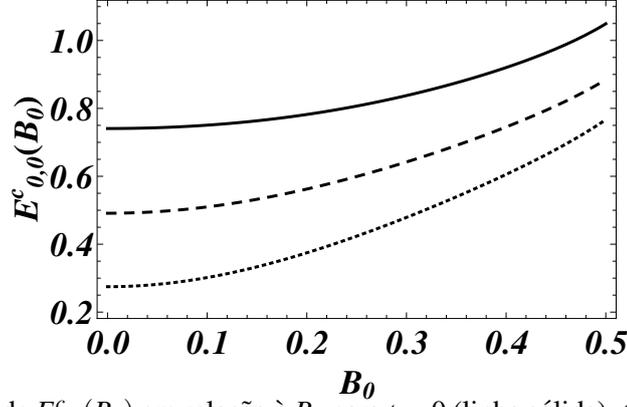


Figura 10: Dependência de  $E_{0,0}^c(B_0)$  em relação à  $B_0$  para  $t = 0$  (linha sólida),  $t = \pi/4$  (linha tracejada) e  $t = \pi/2$  (linha pontilhada). As energias estão deslocadas de  $-E_c$ . Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = \mu = e = 1$  e  $B_1 = 0.5$ .

### 3.3.4 Probabilidades de transição

A probabilidade de transição de um estado inicial  $\psi_{k,l}^j(\mathbf{r}, t_0)$  para um outro estado  $\psi_{n,m}^j(\mathbf{r}, t)$  ( $t \geq t_0$ ) é dada por  $P_{(k,l) \rightarrow (n,m)}^j(t) = |R_{(k,l) \rightarrow (n,m)}^j(t)|^2$ , onde  $R_{(k,l) \rightarrow (n,m)}^j(t)$  é a amplitude de transição  $\langle n, m, t | k, l, t_0 \rangle$ , ou

$$R_{(k,l) \rightarrow (n,m)}^j(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy [\psi_{n,m}^j(\mathbf{r}, t)]^* \psi_{k,l}^j(\mathbf{r}, t_0), \quad (3.101)$$

onde  $j$  é  $c$  para elétrons de condução e  $v$  para elétrons de valência.

A partir das funções de onda (3.74) e (3.76), definindo  $\rho_j(t) = \rho_j$ ,  $\rho_j(t_0) = \rho_{0,j}$ ,  $\dot{\rho}_j(t) = \dot{\rho}_j$ ,  $\dot{\rho}_j(t_0) = \dot{\rho}_{0,j}$ , bem como

$$a_j^2(t) = \frac{1}{\hbar \rho_j^2}, \quad b_j^2(t_0) = \frac{1}{\hbar \rho_{0,j}^2}, \quad (3.102)$$

$$B_j(t) = iM_j (\rho_j \dot{\rho}_j a_j^2(t) - \rho_{0,j} \dot{\rho}_{0,j} b_j^2(t_0)), \quad (3.103)$$

$$\begin{aligned}
A_{k,l,n,m}^j &= \left( \frac{1}{\hbar \rho_{0,j}^2} \right)^{\frac{|l|+1}{2}} \left( \frac{1}{\hbar \rho_j^2} \right)^{\frac{|m|+1}{2}} \left[ \frac{\Gamma(k+1)}{\pi \Gamma(k+|l|+1)} \right]^{1/2} \left[ \frac{\Gamma(n+1)}{\pi \Gamma(n+|m|+1)} \right]^{1/2} \\
&\times e^{-i\alpha_{n,m}^j(t)} e^{i\alpha_{k,l}^j(t_0)} \exp \left[ -i \left( \frac{m}{2} \int_0^t \omega_j(t') dt' - \frac{E_j}{\hbar} t \right) \right] \\
&\times \exp \left[ i \left( \frac{l}{2} \int_0^{t_0} \omega_j(t') dt' - \frac{E_j}{\hbar} t_0 \right) \right],
\end{aligned} \tag{3.104}$$

e usando  $X = r \cos(\theta_{\mathbf{r}}^j)$  e  $Y = r \sin(\theta_{\mathbf{r}}^j)$ , onde  $X = (m_{jy}/m_{jx})^{-1/4}x$  e  $Y = (m_{jx}/m_{jy})^{-1/4}y$ , a Eq. (3.101) torna-se

$$\begin{aligned}
R_{(k,l) \rightarrow (n,m)}^j(t) &= \delta_{l,m} \pi A_{k,l,n,m}^j \\
&\times \int_0^\infty du u^{|l|} L_n^{|l|} [a_j^2(t)u] L_k^{|l|} [b_j^2(t_0)u] \exp \left\{ -\frac{u}{2} [B_j(t) + a_j^2(t) + b_j^2(t_0)] \right\},
\end{aligned} \tag{3.105}$$

onde  $u = r^2$  e  $L_n^{|m|}(z)$  são os polinômios associados de Laguerre.

Considerando as funções geradoras

$$\sum_{i=0}^\infty s^i L_i^{|l|} [a_j^2(t)u] = \frac{1}{(1-s)^{|l|+1}} \exp \left[ -a_j^2(t)u \frac{s}{(1-s)} \right], \quad (|s| < 1) \tag{3.106}$$

e

$$\sum_{\beta=0}^\infty w^\beta L_\beta^{|l|} [b_j^2(t_0)u] = \frac{1}{(1-w)^{|l|+1}} \exp \left[ -b_j^2(t_0)u \frac{w}{(1-w)} \right], \quad (|w| < 1) \tag{3.107}$$

podemos resolver a integral da Eq. (3.105) (veja o Apêndice E) e mostrar que

$$\begin{aligned}
R_{(k,l) \rightarrow (n,m)}^j(t) &= \delta_{l,m} \pi A_{k,l,n,m}^j \\
&\times \sum_{p=0}^k \left\{ \frac{(n+k+|l|-p)!}{p! (k-p)! (n-p)!} (-1)^p 2^{|l|+1} [B_j(t) - a_j^2(t) - b_j^2(t_0)]^p \right. \\
&\times \left. \frac{[B_j(t) - a_j^2(t) + b_j^2(t_0)]^{n-p} [B_j(t) + a_j^2(t) - b_j^2(t_0)]^{k-p}}{[B_j(t) + a_j^2(t) + b_j^2(t_0)]^{n+k+|l|+1-p}} \right\}.
\end{aligned} \tag{3.108}$$

Observe que as transições  $(k, l) \rightarrow (n, m)$  são possíveis somente se  $l = m$ . Para o caso do campo magnético estático, a probabilidade de transição é  $P_{(k,l) \rightarrow (n,m)}^j(t) = \delta_{l,m} \delta_{k,n}$  e nenhuma transição é permitida já que  $\psi_{k,l}^j(\mathbf{r}, t_0)$  e  $\psi_{n,m}^j(\mathbf{r}, t)$  são estados estacionários. Contudo, para  $\mathbf{B}(t) = (B_0^2 + B_1^2 \cos^2(\mu t))^{1/2} \mathbf{k}$ , algumas transições ocorrem como mostrado nas Figs.

11(a)-(b). Da Fig. 11(a) observamos que  $P_{(0,0) \rightarrow (n,0)}^c(t)$  oscila com  $t$  e para  $t = pT = \pi p/\mu$ , com  $p = 0, 1, 2, \dots$ , o sistema irá permanecer no estado inicial  $(0, 0)$ . Este comportamento também reflete a oscilação da interação magnética e pode ser melhor entendido quando analisamos o comportamento de  $\Delta E_n(t) = E_{n,0}^c(t) - E_{0,0}^c(t)$ . A partir da Eq. (3.96), chegamos a

$$\Delta E_n(t) = n \frac{\hbar}{(m_{cx} m_{cy})^{1/2}} \left[ \beta_c^2 + \frac{e^2 B^2(t)}{4} \rho_c^2 \right]. \quad (3.109)$$

Na Fig. 12 mostramos o comportamento de  $\Delta E_n(t)$  para  $n = 1$  e  $n = 2$ . Esperamos que quanto maior (menor) for  $\Delta E_n(t)$ , mais (menos) difícil será de as transições  $(0, 0) \rightarrow (n, 0)$  ocorrerem. Assim, nos instantes de tempo  $t = pT = \pi p/\mu$ , a partícula se encontrará em seu estado inicial  $(0,0)$  pois  $\Delta E_n(t)$  será máximo. Da mesma maneira,  $P_{(0,0) \rightarrow (1,0)}^c(t)$  e  $P_{(0,0) \rightarrow (2,0)}^c(t)$  atingem seus valores máximos nos instantes de tempo  $t$  em que  $\Delta E_n(t)$  é mínimo. Também observamos que a probabilidade para as transições  $(0, 0) \rightarrow (n, 0)$  decresce com  $n$ , o que é explicado pelo fato de  $\Delta E_n(t)$  ser proporcional a  $n$ . Na Fig. 11(b) mostramos  $P_{(1,l) \rightarrow (2,l)}^c(t)$  para alguns valores de  $l$ . Observamos que  $P_{(1,l) \rightarrow (2,l)}^c(t)$  é simétrica em  $l$  e cresce com o aumento de  $|l|$ .

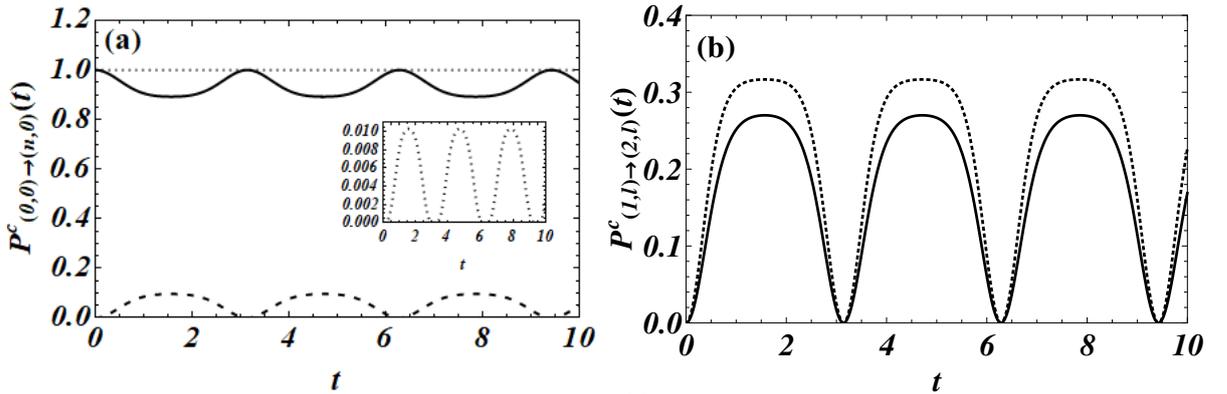


Figura 11: Dependência temporal de (a)  $P_{(0,0) \rightarrow (n,0)}^c(t)$ , para as transições  $n = 0$  (linha sólida),  $n = 1$  (linha tracejada) e  $n = 2$  (linha pontilhada), e (b)  $P_{(1,l) \rightarrow (2,l)}^c(t)$ , para as transições  $l = 0$  (linha sólida) e  $l = \pm 1$  (linha pontilhada). Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = \mu = e = 1$  e  $B_0 = B_1 = 0.5$ .

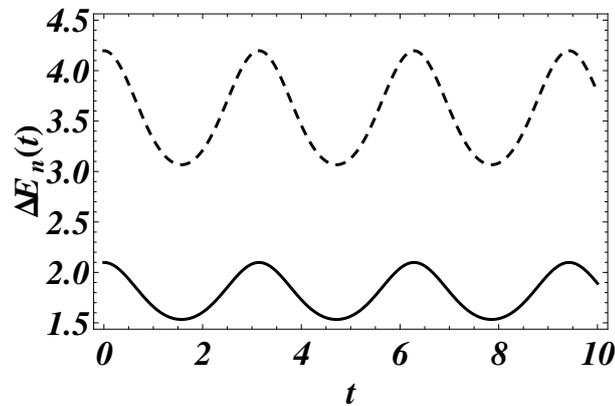


Figura 12: Dependência temporal de  $\Delta E_n(t)$  para  $n = 1$  (linha sólida) e  $n = 2$  (linha tracejada). Neste gráfico consideramos  $\hbar = m_e = \mu = e = 1$  e  $B_0 = B_1 = 0.5$ .

## 4 CONCLUSÃO

Neste trabalho estudamos elétrons e buracos em uma monocamada de fosforeno na presença de um campo magnético dependente do tempo e de baixa intensidade. Considerando  $\mathbf{B} = (0, 0, B(t))$  e escolhendo o calibre simétrico,  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = -(1/2)\mathbf{r} \times \mathbf{B}(t)$ , utilizamos o método de Lewis e Riesenfeld para chegarmos às funções de onda de elétrons e buracos, Eqs. (3.74) e (3.76), respectivamente. O método apoia-se na existência de um operador invariante, hermitiano e sem derivadas temporais, cujas autofunções podem ser relacionadas às soluções da equação de Schrödinger por meio de um fator de fase multiplicativo adequado, Eq. (3.26). Como resultado, obtemos as funções de onda em termos das soluções reais da equação de Milne-Pinney generalizada, Eqs. (3.59) e (3.78). A partir das funções de onda, calculamos as incertezas, informações de Fisher, o valor esperado da energia mecânica quântica e as probabilidades de transição, considerando os campos magnéticos  $\mathbf{B}(t) = B_0\mathbf{k}$  e  $\mathbf{B}(t) = (B_0^2 + B_1^2 \cos^2(\mu t))^{1/2}\mathbf{k}$ .

Mostramos a dependência temporal das incertezas,  $\Delta x, y(t)$  e  $\Delta p_{x, y}(t)$ , e das informações de Fisher,  $F_{x, y}(t)$  e  $F_{p_{x, y}}(t)$ , para elétrons de condução no estado fundamental quando submetidos ao campo magnético oscilatório. Observamos que  $\Delta x, y(t)$  e  $\Delta p_{x, y}(t)$  oscilam com fases opostas. Também observamos que  $F_{x, y}(t)$  cresce (decrece) nos intervalos de tempo em que  $\Delta x, y(t)$  decresce (cresce), o mesmo ocorrendo para  $F_{p_{x, y}}(t)$  e  $\Delta p_{x, y}(t)$ . Através das informações de Fisher, chegamos aos chamados comprimentos de Fisher  $\delta\mathbf{r}, \mathbf{p}$ , Eq. (3.92). No caso do sistema estudado neste trabalho, verificamos que  $\delta\mathbf{r}, \mathbf{p}$  fornecem medidas de incerteza mais precisas que as incertezas padrão  $\Delta\mathbf{r}, \mathbf{p}$ . Analisamos também o comportamento das incertezas em relação à intensidade do campo magnético oscilante  $B_0$ . Observamos que as incertezas na posição diminuem com o aumento de  $B_0$ ; ocorrendo o contrário para a incerteza no momento. Para certos valores de  $B_0$ , observamos o fenômeno de compressão.

Para um campo magnético constante, observamos que o valor esperado da energia mecânica varia linearmente com os níveis de Landau  $n$  e  $m$  e  $B_0$ . Neste caso, as funções de onda são estacionárias e nenhuma transição é permitida. Para um campo magnético oscilante, observamos que o valor esperado da energia mecânica varia linearmente com  $n$  e  $m$  e não linearmente com  $B_0$ . O comportamento não linear observado provém das soluções da equação de Milne-Pinney, dadas em termos das funções de Mathieu. As probabilidades de transição  $(0, 0) \rightarrow (n, 0)$  decrescem com o crescimento de  $n$ , enquanto as para  $(1, l) \rightarrow (2, l)$  crescem com  $|l|$ .

## APÊNDICE A – FUNÇÕES DE FASE

Determinemos a função de fase  $\alpha_{n,m}^c(t)$  a partir da equação

$$\hbar \frac{d\alpha_{n,m}^c(t)}{dt} = \left\langle \phi_{n,m}(X, Y, t) \left| i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H'(t) \right| \phi_{n,m}(X, Y, t) \right\rangle, \quad (\text{A.1})$$

onde

$$H'(t) = \frac{1}{2M_c} (P_X^2 + P_Y^2) + \frac{M_c \omega_{1c}^2(t)}{2} (X^2 + Y^2). \quad (\text{A.2})$$

Utilizando a transformação unitária

$$\phi'_{n,m}(X, Y, t) = U_2 \phi_{n,m}(X, Y, t), \quad (\text{A.3})$$

com

$$U_2 = \exp \left[ -\frac{iM_c \dot{\rho}_c}{2\hbar \rho_c} (X^2 + Y^2) \right], \quad (\text{A.4})$$

chegamos à

$$\begin{aligned} \hbar \frac{d\alpha_{n,m}^c(t)}{dt} = & \left\langle \phi'_{n,m} \left| i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar \frac{\dot{\rho}_c}{\rho_c} X \frac{\partial}{\partial X} + i\hbar \frac{\dot{\rho}_c}{2\rho_c} + i\hbar \frac{\dot{\rho}_c}{\rho_c} Y \frac{\partial}{\partial Y} + i\hbar \frac{\dot{\rho}_c}{2\rho_c} \right| \phi'_{n,m} \right\rangle \\ & + \left\langle \phi'_{n,m} \left| -\frac{1}{M_c \rho_c^2} \left[ -\frac{\hbar^2}{2} \rho_c^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} \right) + \frac{1}{2\rho_c^2} (X^2 + Y^2) \right] \right| \phi'_{n,m} \right\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

O primeiro termo  $\langle \phi'_{n,m} | \dots | \phi'_{n,m} \rangle$  da Eq. (A.5) é nulo. Definindo  $X = \rho_c r \cos \theta$ ,  $Y = \rho_c r \sin \theta$ , a Eq. (A.5) torna-se

$$\hbar \frac{d\alpha_{n,m}^c(t)}{dt} = -\frac{1}{M_c \rho_c^2} \langle \sigma_{n,m}(r, \theta) | I' | \sigma_{n,m}(r, \theta) \rangle, \quad (\text{A.6})$$

onde

$$I' = -\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + \frac{r^2}{2}, \quad (\text{A.7})$$

e

$$\phi'_{n,m}(X, Y, t) = \frac{1}{\rho_c} \sigma_{n,m}(r, \theta). \quad (\text{A.8})$$

Utilizando as Eqs. (3.65) e (3.70), vemos que

$$I' \sigma_{n,m}(r, \theta) = (2n + |m| + 1) \sigma_{n,m}(r, \theta). \quad (\text{A.9})$$

Por fim, substituindo a Eq. (A.9) na Eq. (A.6), e lembrando que o conjunto de

funções  $\sigma_{n,m}(r, \theta)$  é ortonormal, obtemos

$$\alpha_{n,m}^c(t) = -(2n + |m| + 1) \int_0^t \frac{dt'}{M_c \rho_c^2(t')}. \quad (\text{A.10})$$

## APÊNDICE B – FUNÇÕES DE ONDA NO ESPAÇO DO MOMENTO

Escrevendo a Hamiltoniana do sistema

$$H = \begin{pmatrix} E_c + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{m_{cx}} \pi_x^2 + \frac{1}{m_{cy}} \pi_y^2 \right) & 0 \\ 0 & E_v - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{m_{vx}} \pi_x^2 + \frac{1}{m_{vy}} \pi_y^2 \right) \end{pmatrix},$$

na representação do momento, onde  $p_x = p_x$ ,  $p_y = p_y$ ,  $x = i\hbar\partial/\partial x$  e  $y = i\hbar\partial/\partial y$ , podemos obter as funções de onda  $\Psi = [\chi^c \ \chi^v]^T$  de elétrons de condução ( $c$ ) e de valência ( $v$ ) no espaço do momento.

Novamente, da equação de Schrödinger dependente do tempo

$$i\hbar\partial_t\Psi = H\Psi, \quad (\text{B.1})$$

obtemos as seguintes equações diferenciais desacopladas

$$i\hbar\partial_t\chi^c(p_x, p_y, t) - E_c\chi^c(p_x, p_y, t) = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{m_{cx}} \pi_x^2 + \frac{1}{m_{cy}} \pi_y^2 \right) \chi^c(p_x, p_y, t), \quad (\text{B.2})$$

$$i\hbar\partial_t\chi^v(p_x, p_y, t) - E_v\chi^v(p_x, p_y, t) = -\frac{1}{2} \left( \frac{1}{m_{vx}} \pi_x^2 + \frac{1}{m_{vy}} \pi_y^2 \right) \chi^v(p_x, p_y, t). \quad (\text{B.3})$$

Foquemos na Eq. (B.2). Redefinindo os momentos como  $p_x = (m_{cx}/m_{cy})^{1/4} P_X$  e  $p_y = (m_{cy}/m_{cx})^{1/4} P_Y$ , e aplicando a transformação unitária  $\chi^c(X, Y, t) = U_1\varphi^c(X, Y, t)$ , com  $U_1$  dado pela Eq. (3.55), podemos mapear a Eq. (B.2) na equação

$$i\hbar\partial_t\varphi^c(X, Y, t) = \left[ \frac{1}{2M_c}(P_X^2 + P_Y^2) + \frac{M_c\omega_{1c}^2(t)}{2}(X^2 + Y^2) \right] \varphi^c(X, Y, t), \quad (\text{B.4})$$

onde  $X = i\hbar\partial/\partial X$  e  $Y = i\hbar\partial/\partial Y$ .

Como abordado anteriormente, o invariante para a Eq. (B.4) é dado pela Eq. (3.58). As Eqs. (3.59)-(3.62) continuam válidas na representação do momento.

Sob a transformação unitária

$$\phi'_{n,m}(P_X, P_Y, t) = U_3 \phi_{n,m}(P_X, P_Y, t), \quad (\text{B.5})$$

onde

$$U_3 = \exp \left[ \frac{iM_c\rho_c\dot{\rho}_c}{2\hbar\beta_c^2}(P_X^2 + P_Y^2) \right], \quad (\text{B.6})$$

$$\beta_c^2 = \frac{1 + \rho_c^2 \dot{\rho}_c^2 M_c^2}{\rho_c^2}, \quad (\text{B.7})$$

a equação de autovalores do invariante  $I(t)$ ,  $I\phi_{n,m}(P_x, P_y, t) = \lambda_{n,m}\phi_{n,m}(P_x, P_y, t)$ , pode ser reduzida à equação de autovalores do operador  $I'(t)$

$$I'(t) \sigma_{n,m}(P, \theta) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial P^2} + \frac{1}{P} \frac{\partial}{\partial P} + \frac{1}{P^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + \frac{P^2}{2} \right] \sigma_{n,m}(P, \theta) = \lambda_{n,m} \sigma_{n,m}(P, \theta), \quad (\text{B.8})$$

onde  $P_X = \beta_c P \cos \theta$ ,  $P_Y = \beta_c P \sin \theta$ ,  $I'(t) = U_3 I(t) U_3^\dagger$ ,  $P^2 = (P_X^2 + P_Y^2)/\beta_c^2$ ,  $\theta = \arctan(P_Y/P_X)$  e  $\phi'_{n,m}(P_X, P_Y, t) = (1/\beta_c) \sigma_{n,m}(P, \theta)$ .

A partir deste ponto, todo o procedimento é igual àquele realizado na representação da posição. Novamente, observe que a Eq. (B.2) se reduz à Eq. (B.3) tomando  $m_{cx} \rightarrow -m_{vx}$ ,  $m_{cy} \rightarrow -m_{vy}$  e  $E_c \rightarrow E_v$ . Portanto, as funções de onda  $\chi_{n,m}^j$  de elétrons de condução ( $j = c$ ) e de valência ( $j = v$ ) no espaço do momento são

$$\begin{aligned} \chi_{n,m}^j(\mathbf{p}, t) &= \left[ \frac{\Gamma(n+1)}{\pi \Gamma(n+|m|+1)} \right]^{1/2} \left( \frac{1}{\hbar \beta_j^2} \right)^{\frac{|m|+1}{2}} e^{i\alpha_{n,m}^j(t)} \exp \left[ i \left( \frac{m}{2} \int \omega_j(t') dt' - \frac{E_j}{\hbar} t \right) \right] \\ &\times \left( \sqrt{\frac{m_{jy}}{m_{jx}}} p_x^2 + \sqrt{\frac{m_{jx}}{m_{jy}}} p_y^2 \right)^{\frac{|m|}{2}} e^{im\theta_{\mathbf{p}}^j} L_n^{|m|} \left[ \frac{1}{\hbar \beta_j^2} \left( \sqrt{\frac{m_{jy}}{m_{jx}}} p_x^2 + \sqrt{\frac{m_{jx}}{m_{jy}}} p_y^2 \right) \right] \\ &\times \exp \left[ -\frac{1}{2\hbar \beta_j^2} (1 + i\rho_j \dot{\rho}_j M_j) \left( \sqrt{\frac{m_{jy}}{m_{jx}}} p_x^2 + \sqrt{\frac{m_{jx}}{m_{jy}}} p_y^2 \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

onde  $M_j$ ,  $\omega_j(t)$ ,  $\rho_j(t)$ ,  $\alpha_{n,m}^j(t)$  e  $\omega_{1j}^2$  são as mesmas quantidades definidas no Capítulo 3,  $\beta_j^2 = \frac{1 + \rho_j^2 \dot{\rho}_j^2 M_j^2}{\rho_j^2}$  e  $\theta_{\mathbf{p}}^j = \arctan \left( \sqrt{\frac{m_{jx}}{m_{jy}}} \frac{p_y}{p_x} \right)$ .

## APÊNDICE C – VALORES ESPERADOS

Primeiramente, determinemos

$$\langle x^2 \rangle_{n,m}^j = \langle \Psi_{n,m}^j | x^2 | \Psi_{n,m}^j \rangle. \quad (\text{C.1})$$

Substituindo as funções de onda no espaço da posição, Eqs. (3.74) e (3.76), na Eq. (C.1), chegamos à integral

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_{n,m}^j &= \frac{\Gamma(n+1)}{\pi \Gamma(n+|m|+1)} \left( \frac{1}{\hbar \rho_j^2} \right)^{|m|+1} \left( \frac{m_{jy}}{m_{jx}} \right)^{1/2} \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dXdY X^2 (X^2 + Y^2)^{|m|} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar \rho_j^2} (X^2 + Y^2) \right] \left\{ L_n^{|m|} \left[ \frac{1}{\hbar \rho_j^2} (X^2 + Y^2) \right] \right\}^2, \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

onde  $X = (m_{jy}/m_{jx})^{-1/4} x$ ,  $Y = (m_{jx}/m_{jy})^{-1/4} y$ .

Tomando a mudança de variáveis  $X = \rho_j r \cos \theta$  e  $Y = \rho_j r \sin \theta$ , obtemos

$$\langle x^2 \rangle_{n,m}^j = \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+|m|+1)} \rho_j^2 \left( \frac{1}{\hbar} \right)^{|m|+1} \left( \frac{m_{jy}}{m_{jx}} \right)^{1/2} \int_0^{\infty} dr r^{2|m|+3} \exp \left( -\frac{r^2}{\hbar} \right) \left[ L_n^{|m|} \left( \frac{r^2}{\hbar} \right) \right]^2. \quad (\text{C.3})$$

Com a nova mudança de variável  $\zeta = r^2/\hbar$ , podemos reescrever a Eq. (C.3) em

$$\langle x^2 \rangle_{n,m}^j = \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+|m|+1)} \frac{\rho_j^2}{2\hbar} \left( \frac{m_{jy}}{m_{jx}} \right)^{1/2} \int_0^{\infty} d\zeta \zeta^{|m|+1} e^{-\zeta} \left[ L_n^{|m|}(\zeta) \right]^2. \quad (\text{C.4})$$

Finalmente, sabendo que

$$\int_0^{\infty} d\zeta \zeta^{|m|+1} e^{-\zeta} \left[ L_n^{|m|}(\zeta) \right]^2 = \frac{\Gamma(n+|m|+1)}{\Gamma(n+1)} (2n+|m|+1), \quad (\text{C.5})$$

determinamos  $\langle x^2 \rangle_{n,m}^j$  como

$$\langle x^2 \rangle_{n,m}^j = \langle \Psi_{n,m}^j | x^2 | \Psi_{n,m}^j \rangle = \frac{\hbar}{2} \rho_j^2 \left( \frac{m_{jy}}{m_{jx}} \right)^{1/2} (2n+|m|+1). \quad (\text{C.6})$$

Para determinarmos  $\langle y^2 \rangle_{n,m}^j$ , procedemos da mesma maneira.

Utilizando as funções de onda no espaço do momento, Eq. (3.80), podemos deter-

minar

$$\langle p_x^2 \rangle_{n,m}^j = \langle \chi_{n,m}^j | p_x^2 | \chi_{n,m}^j \rangle, \quad (\text{C.7})$$

e

$$\langle p_y^2 \rangle_{n,m}^j = \langle \chi_{n,m}^j | p_y^2 | \chi_{n,m}^j \rangle. \quad (\text{C.8})$$

As integrais a serem obtidas nas Eqs. (C.7) e (C.8) são as mesmas já resolvidas nesse Apêndice.

Para demonstrarmos que

$$\langle x \rangle_{n,m}^j = \langle y \rangle_{n,m}^j = \langle p_x \rangle_{n,m}^j = \langle p_y \rangle_{n,m}^j = 0, \quad (\text{C.9})$$

basta observar que os integrandos são funções ímpares.

Agora, analisemos o valor esperado

$$(I) = \left\langle \frac{1}{m_{jy}} x p_y - \frac{1}{m_{jx}} y p_x \right\rangle_{n,m}^j = \left\langle \psi_{n,m}^j \left| \frac{1}{m_{jy}} x p_y - \frac{1}{m_{jx}} y p_x \right| \psi_{n,m}^j \right\rangle. \quad (\text{C.10})$$

Substituindo as funções de onda no espaço da posição, Eqs. (3.74) e (3.76), na Eq. (C.1), obtemos

$$\begin{aligned} (I) &= \frac{\Gamma(n+1)}{\pi \Gamma(n+|m|+1)} \left( \frac{1}{\hbar \rho_j^2} \right)^{|m|+1} \left( \frac{1}{m_{jx} m_{jy}} \right)^{1/2} \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dX dY (X^2 + Y^2)^{\frac{|m|}{2}} \exp \left[ -\frac{1}{2\hbar \rho_j} \left( \frac{1}{\rho_j} + iM_j \dot{\rho}_j \right) (X^2 + Y^2) \right] e^{-im\theta_j^i} \\ &\times L_n^{|m|} \left[ \frac{1}{\hbar \rho_j^2} (X^2 + Y^2) \right] (X P_Y - Y P_X) (X^2 + Y^2)^{\frac{|m|}{2}} e^{im\theta_j^i} \\ &\times \exp \left[ -\frac{1}{2\hbar \rho_j} \left( \frac{1}{\rho_j} - iM_j \dot{\rho}_j \right) (X^2 + Y^2) \right] L_n^{|m|} \left[ \frac{1}{\hbar \rho_j^2} (X^2 + Y^2) \right], \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

onde  $X = (m_{jy}/m_{jx})^{-1/4} x$ ,  $Y = (m_{jx}/m_{jy})^{-1/4} y$ ,  $P_X = -i\hbar \partial / \partial X$  e  $P_Y = -i\hbar \partial / \partial Y$ .

Tomando a mudança de variáveis  $X = \rho_j r \cos \theta_r^j$  e  $Y = \rho_j r \sin \theta_r^j$ , vemos que  $X P_Y - Y P_X = -i\hbar \partial / \partial \theta_r^j$ , e podemos reescrever a Eq. (C.11) como

$$(I) = \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+|m|+1)} \left( \frac{1}{\hbar} \right)^{|m|} \frac{2m}{(m_{jx} m_{jy})^{1/2}} \int_0^{\infty} dr r^{2|m|+1} \exp \left( -\frac{r^2}{\hbar} \right) \left[ L_n^{|m|} \left( \frac{r^2}{\hbar} \right) \right]^2. \quad (\text{C.12})$$

Com a mudança de variável  $\zeta = r^2/\hbar$ , a Eq. (C.12) torna-se

$$(I) = \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+|m|+1)} \frac{\hbar m}{(m_{jx} m_{jy})^{1/2}} \int_0^{\infty} d\zeta \zeta^{|m|} e^{-\zeta} \left[ L_n^{|m|}(\zeta) \right]^2. \quad (\text{C.13})$$

Finalmente, sabendo que

$$\int_0^\infty d\zeta \zeta^{|m|} e^{-\zeta} \left[ L_n^{|m|}(\zeta) \right]^2 = \frac{\Gamma(n + |m| + 1)}{\Gamma(n + 1)}, \quad (\text{C.14})$$

chegamos a

$$(I) = \frac{\hbar m}{(m_{jx} m_{jy})^{1/2}}. \quad (\text{C.15})$$

## APÊNDICE D – SOLUÇÕES DA EQUAÇÃO DE MILNE-PINNEY GENERALIZADA

Na Seção 3.2, construímos o operador invariante ( $I$ ) associado à hamiltoniana que descreve a evolução temporal de um oscilador com massa ( $m$ ) e frequência ( $\omega$ ) dependentes explicitamente do tempo. Observamos que o operador  $I$  pode ser escrito em termos da função auxiliar  $\rho(t)$ , que satisfaz à chamada equação de Milne-Pinney generalizada

$$\ddot{\rho}(t) + \gamma(t)\dot{\rho}(t) + \omega^2(t)\rho(t) = \frac{1}{m^2(t)\rho^3(t)}, \quad (\text{D.1})$$

onde  $\gamma = \dot{m}/m$ .

Tomando  $\rho(t) = \zeta(t)y(t)$ , podemos reescrever a Eq. (D.1) como

$$\zeta\ddot{y} + (2\dot{\zeta} + \gamma\zeta)\dot{y} + (\ddot{\zeta} + \gamma\dot{\zeta} + \omega^2)y = \frac{1}{m^2\zeta^3y^3}. \quad (\text{D.2})$$

Escolhendo  $\zeta$  de tal forma que

$$2\dot{\zeta} + \gamma\zeta = 0, \quad (\text{D.3})$$

obtemos a equação diferencial não-linear

$$\zeta\ddot{y} + (2\dot{\zeta} + \gamma\zeta)\dot{y} + (\ddot{\zeta} + \gamma\dot{\zeta} + \omega^2)y = \frac{1}{m^2\zeta^3y^3}, \quad (\text{D.4})$$

onde  $\zeta(t)$  é dado por

$$\zeta(t) = \zeta_0 \exp\left(-\frac{1}{2} \int \gamma(t') dt'\right). \quad (\text{D.5})$$

Utilizando o Teorema de Noether, Cariñena e de Lucas [60] demonstraram que as soluções da Eq. (D.4) estão relacionadas às soluções da equação diferencial homogênea

$$\ddot{f} + \left(\omega^2 - \frac{\dot{\gamma}}{2} - \frac{\gamma^2}{4}\right)f = 0. \quad (\text{D.6})$$

Tal relação é dada por [59-61]

$$y = \frac{\sqrt{2}}{|W|} \sqrt{I_1 f_1^2 + I_2 f_2^2 \pm f_1 f_2 \left(4I_1 I_2 - \frac{W^2}{m^2 \zeta^4}\right)^{1/2}}, \quad (\text{D.7})$$

onde  $f_{1,2}$  são duas soluções linearmente independentes da Eq. (D.6),  $W = f_1 \dot{f}_2 - f_2 \dot{f}_1$  é o Wronskiano das soluções  $f_{1,2}$  e  $I_{1,2}$  são constantes positivas tais que  $4I_1 I_2 \geq W^2/m^2 \zeta^4$ .

## APÊNDICE E - PROBABILIDADES DE TRANSIÇÃO

Determinemos o valor da integral

$$(II) = \int_0^\infty du u^{|l|} L_n^{|l|} [a_j^2(t)u] L_k^{|l|} [b_j^2(t_0)u] \exp \left\{ -\frac{u}{2} [B_j(t) + a_j^2(t) + b_j^2(t_0)] \right\}, \quad (E.1)$$

Primeiramente, definamos

$$M_{s,s'} = \int_0^\infty du u^{|l|} S(a_j^2 u, s) S(b_j^2 u, s') \exp \left[ -\frac{u}{2} (B_j + a_j^2 + b_j^2) \right]. \quad (E.2)$$

onde

$$S(z, s) = \sum_{m=0}^{\infty} L_m^{|l|}(z) s^m. \quad (E.3)$$

Como

$$L_m^{|l|}(z) = \frac{1}{m!} \frac{\partial^m}{\partial s^m} \sum_{\alpha=0}^{\infty} L_\alpha^{|l|}(z) s^\alpha \Big|_{s=0}, \quad (E.4)$$

podemos reescrever a integral (II) em termos de  $M_{s,s'}$  da seguinte maneira

$$(II) = \frac{1}{n! k!} \frac{\partial^{k+n}}{\partial s'^k \partial s^n} M_{s,s'} \Big|_{s'=0, s=0}. \quad (E.5)$$

Agora, analisemos  $M_{s,s'}$ . Observe que

$$S(z, s) = \frac{1}{(1-s)^{|l|+1}} \exp \left[ -\frac{zs}{1-s} \right], \quad (|s| < 1). \quad (E.6)$$

Utilizando a Eq. (E.6), a Eq. (E.2) torna-se

$$M_{s,s'} = \frac{\Gamma(|l|+1)}{[(1-s)(1-s')]^{|l|+1}} \left[ \frac{1}{2} (B_j + a_j^2 + b_j^2) + \frac{a_j^2 s}{1-s} + \frac{b_j^2 s'}{1-s'} \right]^{-(|l|+1)}. \quad (E.7)$$

Tomando

$$\lambda = |l| + 1, \quad d = \frac{1}{2a_j^2} (B_j + a_j^2 + b_j^2) + \frac{b_j^2}{a_j^2} \left( \frac{s'}{1-s'} \right), \quad N = \frac{\Gamma(\lambda) (a_j^2)^{-\lambda}}{(1-s')^\lambda}, \quad (E.8)$$

na Eq. (E.7), vemos que

$$\frac{\partial^n}{\partial s^n} M_{s,s'} \Big|_{s=0} = N d^{-\lambda-n} \frac{(\lambda+n-1)! (-1)^n (1-d)^n}{(\lambda-1)!}. \quad (E.9)$$

Definindo

$$\Theta = \left( \frac{b_j^2}{a_j^2} \right)^{-\lambda} \frac{(-1)^n \Gamma(\lambda) (a_j^2)^{-\lambda} (\lambda + n - 1)!}{(\lambda - 1)!}, \quad (\text{E.10})$$

$$c_1 = \frac{a_j^2}{b_j^2} - \frac{1}{2b_j^2} (B_j + a_j^2 + b_j^2), \quad c_2 = \frac{1}{2b_j^2} (B_j + a_j^2 + b_j^2), \quad (\text{E.11})$$

podemos reescrever a Eq. (E.9) na forma

$$\left. \frac{\partial^n}{\partial s^n} M_{s,s'} \right|_{s=0} = \Theta [c_1 - (1 + c_1) s']^n [c_2 + (1 - c_2) s']^{-\lambda - n}. \quad (\text{E.12})$$

Assim, obtemos

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^k}{\partial s'^k} \left( \left. \frac{\partial^n}{\partial s^n} M_{s,s'} \right|_{s=0} \right) \right|_{s'=0} &= \Theta \sum_{p=0}^k \left\{ \frac{k! n! (\lambda + n + k - p - 1)!}{p! (k - p)! (n - p)! (\lambda + n - 1)!} \right. \\ &\quad \left. \times (-1)^k (1 + c_1)^p c_1^{n-p} (1 - c_2)^{k-p} c_2^{-\lambda - n - (k-p)} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{E.13})$$

Por fim, substituindo as Eqs. (E.8), (E.10), (E.11) e (E.13) na Eq. (E.5), chegamos

a

$$\begin{aligned} (II) &= \sum_{p=0}^k \left\{ \frac{(n + k + |l| - p)!}{p! (k - p)! (n - p)!} (-1)^p 2^{|l|+1} [B_j(t) - a_j^2(t) - b_j^2(t)]^p \right. \\ &\quad \left. \times \frac{[B_j(t) - a_j^2(t) + b_j^2(t)]^{n-p} [B_j(t) + a_j^2(t) - b_j^2(t)]^{k-p}}{[B_j(t) + a_j^2(t) + b_j^2(t)]^{n+k+|l|+1-p}} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{E.14})$$

## REFERÊNCIAS

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Gregorieva e A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
- [2] B. Lalmi, H. Oughaddou, H. Enriquez, A. Kara, S. Vizzini, B. Ealet e B. Aufray, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 223109 (2010).
- [3] P. Vogt, P. Capiod, M. Berthe, A. Resta, P. De Padova, T. Bruhn, G. Le Lay, e B. Grandidier, *Appl. Phys. Lett.* **104**, 021602 (2014).
- [4] M. E. Dávila, L. Xian, S. Cahangirov, A. Rubio e G. Le Lay, *New J. Phys.* **16**, 095002 (2014).
- [5] S. Saxena, R. P. Chaudhary e S. Shukla, *Sci. Rep.* **6**, 31073 (2016).
- [6] M. Bosi, *RSC Adv.* **5**, 75500 (2015).
- [7] Y. Shi, H. Lib and L.-J. Li, *Chem. Soc. Rev.* **44**, 2744 (2014).
- [8] P. W. Bridgman, *J. Am. Chem. Soc.* **36**, 1344 (1914).
- [9] R. W. Keyes, *Phys. Rev.* **92**, 580 (1953).
- [10] H. Liu, A. T. Neal, Z. Zhu, Z. Luo, X. Xu, D. Tománek e P. D. Ye, *ACS Nano* **8**, 4033 (2014).
- [11] V. Tran, R. Soklaski, Y. Liang e L. Yang, *Phys. Rev. B* **89**, 235319 (2014).
- [12] L. Li, Y. Yu, G. Jun Ye, Q. Ge, X. Ou, H. Wu, D. Feng, X. Hui Chen e Y. Zhang, *Nat. Nanotechnol.* **9**, 372 (2014).
- [13] L. Kou, C. Chen e S. C. Smith, *J. Phys. Chem. Lett.* **6**, 2794 (2015).
- [14] J. Sun, G. Zheng, H.-W. Lee, N. Liu, H. Wang, H. Yao, W. Yang e Y. Cui, *Nano Lett.* **14**, 4573 (2014).
- [15] Y. Du, H. Liu, Y. Deng e P. D. Ye, *ACS Nano* **8**, 10035 (2014).
- [16] L. Kou, T. Frauenheim e C. Chen, *J. Phys. Chem. Lett.* **5**, 2675 (2014).
- [17] X. Y. Zhou, R. Zhang, J. P. Sun, Y. L. Zou, D. Zhang, W. K. Lou, F. Cheng, G. H. Zhou, F. Zhai e K. Chang, *Sci. Rep.* **5**, 12295 (2015).
- [18] X. Zhou, W.-K. Lou, F. Zhai e K. Chang, *Phys. Rev. B* **92**, 165405 (2015).
- [19] G. O. de Sousa, D. R. da Costa, Andrey Chaves, G. A. Farias e F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **95**, 205414 (2017).
- [20] C. Shannon, W. Weaver, *A Mathematical Theory of Communication* (Urbana, 1949).
- [21] R. A. Fisher, *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **22**, 700 (1925).

- [22] B. R. Frieden e B. H. Soffer, *Phys. Rev. E* **52**, 2274 (1995).
- [23] V. Aguiar, J. P. G. Nascimento e I. Guedes, *Int. J. Mass Spectrom.* **409**, 21 (2016).
- [24] J. P. G. Nascimento, V. Aguiar e I. Guedes, *Physica A* **477**, 65 (2017).
- [25] J. P. G. Nascimento, F. A. P. Ferreira, V. Aguiar, I. Guedes e R. N. Costa Filho, *Physica A* **499**, 250 (2018).
- [26] H. R. Lewis Jr. e W. B. Riesenfeld, *J. Math. Phys.* **10**, 1458 (1969).
- [27] A. Dembo, T. M. Cover e J.A. Thomas, *IEEE Trans. Inform. Theory* **37**, 1501 (1991).
- [28] L. Xiao-Juan e F. Mao-Fa, *Commun. Theor. Phys.* **42**(1), 103 (2004).
- [29] E. T. Jaynes e F. W. Cummings, *Proc. IEEE* **51**(1), 89 (1963).
- [30] A. Furusawa, J. L. Sørensen, S. L. Braunstein, C. A. Fuchs, H. J. Kimble e E. S. Polzik, *Science* **282**(5389), 706 (1998).
- [31] T. C. Ralph, *Phys. Rev. A* **61**(1), 010303 (1999).
- [32] J. Sañudo e R. López-Ruiz, *Phys. Lett. A* **378**, 1005 (2014).
- [33] J. Sañudo e R. López-Ruiz, *Phys. Lett. A* **379**, 1122 (2015).
- [34] T. García, F. de los Santos e E. Romera, *Physica A* **394** 394 (2014).
- [35] M. Calixto e E. Romera, *EPL* **109**, 40003 (2015).
- [36] E. Romera e M. Calixto, *J. Phys.: Condens. Matter* **27**, 175003 (2015).
- [37] E. Romera, J. C. Bolívar, J. B. Roldán e F. de los Santos, *EPL* **115**, 20008 (2016).
- [38] J. C. Bolívar e E. Romera, *Phys. Lett. A* **381**, 1753 (2017).
- [39] J. C. Bolívar, Á. Nagy e E. Romera, *Physica A* **498**, 66 (2018).
- [40] P. Caldirola, *Nuovo Cimento* **18**, 393 (1941).
- [41] E. Kanai, *Progr. Theoret. Phys.* **3**, 440 (1948).
- [42] W. E. Brittin, *Phys. Rev.* **77**, 396 (1950).
- [43] E. H. Kerner, *Can. J. Phys.* **36**, 371 (1958).
- [44] R. W. Hasse, *J. Math. Phys.* **16**, 2005 (1975).
- [45] V. V. Dodonov e V. I. Man'ko, *Nouvo Cimento* **44B**, 265 (1978).
- [46] A. D. Jannussis, G. N. Brodinas e A. Streclas, *Phys. Lett.* **74A**, 6 (1979).
- [47] D. M. Greenberger, *J. Math. Phys.* **20**, 762 (1979).
- [48] I. K. Edwards, *Am. J. Phys.* **47**, 153 (1979).
- [49] H. Dekker, *Phys. Rep.* **80**, 1 (1981).

- [50] H. Gzyl, *Phys. Rev. A* **27**, 2297 (1983).
- [51] A. B. Nassar, *Phys. Lett.* **106A**, 43 (1984); *Lettere al Nuovo Cimento* **41**, 476 (1984).
- [52] C. I. Um, K. H. Yeon e T. F. George, *Phys. Rep.* **362**, 63 (2002).
- [53] I. A. Pedrosa, *Phys. Rev. A* **55**, 3219 (1997).
- [54] I. A. Pedrosa, G. P. Serra e I. Guedes *Phys. Rev. A* **56**, 4300 (1997).
- [55] W. E. Milne, *J. Res. Natl. Bur. Stand.* **43**, 537 (1949).
- [56] E. Pinney, *Proc. of the American Math. Soc.* **1**, 681 (1950).
- [57] S. Menouar, M. Maamache e J. R. Choi, *Ann. Phys.* **325**, 1708 (2010).
- [58] M. J. W. Hall, *Phys. Rev. A* **62**, 012107 (2000).
- [59] H. Goldstein, C. Poole e J. Safko, *Classical Mechanics* (Addison-Wesley, New York, 2002), 3rd ed.
- [60] J. F. Cariñena e J. de Lucas, *Phys. Lett. A* **372**, 5385 (2008).
- [61] J. F. Cariñena e J. de Lucas, *Int. J. Geom. Methods Mod. Phys.* **6**, 683 (2009).
- [62] M. Lutzky, *Phys. Lett. A* **68**, 3 (1978).

**ANEXO A – ARTIGOS PUBLICADOS DURANTE O PERÍODO DE MESTRADO**

Diretamente relacionados à dissertação:

1. **J. P. G. Nascimento**, V. Aguiar e I. Guedes, *Monolayer phosphorene under time-dependent magnetic field*, *Physica B* **531**, 85 (2018).

Indiretamente relacionados à dissertação:

1. **J. P. G. Nascimento**, V. Aguiar e I. Guedes, *Entropy and information of a harmonic oscillator in a time-varying electric field in 2D and 3D noncommutative spaces*, *Physica A* **477**, 65 (2017).
2. **J. P. G. Nascimento**, F. A. P. Ferreira, V. Aguiar, I. Guedes e R. N. Costa Filho, *Information measures of a deformed harmonic oscillator in a static electric field*, *Physica A* **499**, 250 (2018).