

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

HENRIQUE SOBRINHO GHIZONI

CAMINHADAS QUÂNTICAS POR MODELO DE  
ESPALHAMENTO EM REDES HEXAGONAIS E  
TRIANGULARES: UMA INVESTIGAÇÃO NO  
ESPAÇO DE POSIÇÃO E DE MOMENTO

CURITIBA

2023

HENRIQUE SOBRINHO GHIZONI

CAMINHADAS QUÂNTICAS POR MODELO DE ESPALHAMENTO EM  
REDES HEXAGONAIS E TRIANGULARES: UMA INVESTIGAÇÃO  
NO ESPAÇO DE POSIÇÃO E DE MOMENTO

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física, Setor de Ciências Exatas da Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial à obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz

Curitiba  
2023

DADOS INTERNACIONAIS DE CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO (CIP)  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ  
SISTEMA DE BIBLIOTECAS – BIBLIOTECA CIÊNCIA E TECNOLOGIA

Ghizoni, Henrique Sobrinho

Caminhadas quânticas por modelo de espalhamento em redes hexagonais e triangulares: uma investigação no espaço de posição e de momento. / Henrique Sobrinho Ghizoni. – Curitiba, 2023.

1 recurso on-line : PDF.

Tese (Doutorado) - Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências Exatas, Programa de Pós-Graduação em Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz

1. Espelhamento quântico. 2. Teoria quântica. 3. Bandas de energia (Física) 4. Dirac, Pontos de. I. Luz, Marcos Gomes Eleutério da. II. Universidade Federal do Paraná. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

Bibliotecária: Roseny Rivelini Morciani CRB-9/1585

## TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação FÍSICA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da tese de Doutorado de **HENRIQUE SOBRINHO GHIZONI** intitulada: **"Caminhadas Quânticas por Modelo de Espalhamento em Redes Hexagonais e Triangulares: uma Investigação no Espaço de Posição e de Momento"**, sob orientação do Prof. Dr. MARCOS GOMES ELEUTÉRIO DA LUZ, que após terem inquirido o aluno e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa.

A outorga do título de doutor está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

CURITIBA, 31 de Maio de 2023.

Assinatura Eletrônica  
31/05/2023 20:15:31.0  
MARCOS GOMES ELEUTÉRIO DA LUZ  
Presidente da Banca Examinadora

Assinatura Eletrônica  
31/05/2023 17:25:00.0  
CLAUDIONOR GOMES BEZERRA  
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE)

Assinatura Eletrônica  
01/06/2023 10:23:18.0  
MARCOS CESAR DE OLIVEIRA  
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS - UNICAMP)

Assinatura Eletrônica  
01/06/2023 09:00:48.0  
MARLUS KOEHLER  
Avaliador Interno (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

Aos meus pais.  
Aos meus avós.  
Às vítimas da COVID-19.

## AGRADECIMENTOS

A YHVH.

Aos meus pais, João e Alexandra pelo suporte emocional, psicológico e educacional.

À minha companheira Ithorana pelo carinho, apoio e incentivo nos melhores e nos piores momentos até aqui.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz, pelos conselhos e aprendizados de visão acadêmica e professoral. Além disso, agradeço pela paciência e pela compreensão ao longo da trajetória de doutorado.

Ao Prof. Dr. Bruno Felipe Venancio pela coorientação, oportunidades de colaboração e pelo auxílio irrestrito.

Agradeço também a todos os professores do Programa de Pós-Graduação em Física que de alguma forma contribuíram para meu aperfeiçoamento pessoal e intelectual.

Aos meus amigos de longa data pelo incentivo e principalmente por serem ouvintes em momentos necessários.

Aos amigos e colegas que o doutorado me concedeu e que levarei para a vida. Em especial à: Kaike, Aluísio, Menon, João, Mylena, Thalita.

Ao projeto Ciência em Si.

Ao técnico Leandro, responsável pela secretaria do PPGF.

À CAPES.

## RESUMO

Neste trabalho abordamos como implementar Caminhada Quântica por Modelo de Espalhamento (CQME) em dois tipos distintos de rede: hexagonal e na rede triangular infinita. No caso da rede hexagonal, apresentamos tanto o formalismo para CQME's no espaço de posição, no qual abordamos redes infinitas e com condições de contorno, como para CQME's no espaço de momento. No caso da rede triangular infinita, apresentamos apenas o formalismo para CQME's no espaço de posição. Em um primeiro momento, apresentamos os principais conceitos e o formalismo de uma Caminhada Aleatória Clássica (CAC) e de seus análogos quânticos, a Caminhada Quântica por Modelo de Moeda (CQMM) e a CQME, estes com tratamento unidimensional. Em seguida apresentamos o formalismo geral para CQME's em redes hexagonais infinitas, e, propomos uma parametrização AB para as matrizes de espalhamento desta rede. Nós também apresentamos os principais resultados para CQME's com matriz AB, isto é, distribuição de probabilidades e o Deslocamento Quadrático Médio Radial (DQMR), obtido de maneira numérica e, por um modelo apresentado. Dentro deste contexto, apresentamos então o formalismo e o resultados obtidos para CQME's imparciais em nanofitas quadradas, além de propor um modelo que relaciona a distribuição de probabilidades nas bordas das nanofitas com o tamanho da nanofita. Na sequência, apresentamos o formalismo genérico para CQME's no espaço de momento de redes hexagonais, e, em seguida, propomos um método para obter os autovalores do sistema com dependência da parametrização das matrizes espalhamento para os vértices não equivalentes da rede. Dentro deste contexto, apresentamos os resultados para as bandas de energia, velocidade de Fermi e velocidade de grupo, todos obtidos para CQME's no espaço de momento com matrizes AB. Além disso, mostramos que para regiões próximas aos pontos de alta simetria  $K$  e  $K'$  na primeira Zona de Brillouin, os resultados obtidos via CQME convergem com os via *Tight Binding First Nearest Neighbors* (TB-1NN). Ademais, utilizando a equação genérica de autovalores para CQME no espaço de momento e, tomando uma parametrização geradora do  $SU(3)$  para as matrizes de espalhamento, nós apresentamos os resultados obtidos por meio de um método numérico computacional para as bandas  $\pi$  e  $\pi^*$  de três materiais de Dirac 2D: grafeno, germaneno e siliceno. Apresentamos também o formalismo para CQME's na rede triangular infinita e, uma abordagem para analisar a simetria dessa rede utilizando permutação de rótulos entre os estados topologicamente equivalentes. Além disso, apresentamos todas as permutações possíveis e as simetrias presente entre elas. Por fim, nós apresentamos as conclusões associadas aos tópicos de pesquisa deste trabalho.

**Palavras-chave:** Caminhada Quântica por Modelo de Espalhamento; Rede Hexagonal; Bandas de Energia; Materiais de Dirac;

## ABSTRACT

In this thesis we show how to implement Scattering Quantum Walk (SQW) in two types of networks: honeycomb and infinite triangular network. In the case of the hexagonal lattice, we present the SQW formalism in position space with and without boundary conditions, as well as in momentum space. In the case of the triangular lattice, we present the formalism for SQW in position space. First of all, we present the main concepts and the formalism of a Classical Random Walk (CRW) and its quantum analogs, the Coined Quantum Walk (CQW), and the SQW, all of which have a one-dimensional treatment. We then present the formalism for SQW in the infinite honeycomb lattice in position space, and we propose an AB parameterization for the scattering matrices of the system. We also present several key quantities related to SQW using this type of matrix, including probability distributions, radial mean square displacement, and over. We then extend our analysis to SQW with boundary, i.e., the honeycomb square nanoribbons. Within this context, we then present the formalism and the results obtained for unbiased SQW's in square nanoribbons, in addition to proposing a model that relates the probability distribution at the edges of the nanoribbons with the size of the nanoribbon. Next, we present the generic formalism for SQW's in the momentum space of hexagonal lattices, and then propose a method to obtain the eigenvalues of the system with dependence on the parameterization of the scattering matrices for the non-equivalent vertices of the lattice. Within this context, we present results for the energy bands, Fermi velocity and group velocity, all obtained for SQW's in momentum space with AB matrices. Furthermore, we show that for regions close to the high symmetry points K and K' in the first Brillouin Zone, the results obtained via SQW's converge with those via Tight Binding First Nearest Neighbors (TB-1NN). Moreover, using the generic eigenvalues equation for SQW in momentum space and taking a SU(3) generating parameterization for the scattering matrices, we present the results obtained through a numerical computational method for the  $\pi$  and  $\pi^*$  bands of three 2D Dirac materials: graphene, germanene and silicene. We also present the formalism for SQW's on the infinite triangular lattice and, an approach to analyze the symmetry of this lattice using label permutation between the topologically equivalent states. Moreover, we present all possible permutations, and the symmetries present among them. Finally, we present the conclusions associated with the research topics of this thesis.

**Key-words:** Scattering Quantum Walks; Honeycomb Lattice; Energy Bands; Dirac Materials.



## LISTA DE FIGURAS

1.1	Em (a) temos vários carbonos hibridizados $sp - 2$ ligados entre si formando uma folha de grafeno. Já em (b) temos a ilustração entre as ligações envolvidas entre dois átomos não equivalentes (do ponto de vista topológico) desta rede: uma ligação $\sigma$ formada pela sobreposição dos respectivos orbitais hibridizados $sp - 2$ e, uma ligação $\pi$ , paralela entre os átomos e perpendicular em relação à folha de grafeno. Adaptado da Ref.[190]. . . . .	21
1.2	Bandas de energia $\pi$ e $\pi^*$ do grafeno calculadas via método <i>Tight Binding</i> . Em zoom, o cone de Dirac presente em um ponto de alta simetria da rede recíproca. Adaptado da Ref.[203]. . . . .	23
2.1	Exemplo de uma CAC discreta no tempo e nas posições para seis passos, ou instantes de tempo. Em $t = 0$ o homem encontra-se na posição $j = 0$ , origem da nossa coordenada de posições. De acordo com os passos dados, notas-se que a sequência dos resultados obtidos pelo caminhante ao sortear um lado da moeda foram: cara, coroa, coroa, coroa, cara e cara. . . . .	28
2.2	Probabilidade de encontrar o caminhante em uma posição $j$ para três CAC's com diferentes durações: $t = 50$ (linha pontilhada), $t = 100$ (linha trastejada) e $t = 200$ (linha sólida). Escolhemos um intervalo de $\{j, -30, 30\}$ para salientar o perfil das curvas na região próximas ao valor médio, $j = 0$ . . . . .	30
2.3	Ilustração de uma rede infinita unidimensional. Cada vértice da rede está ligado aos seus primeiros vizinhos por arestas de tamanho $a$ . . . . .	32
2.4	Representação de um estado genérico de moeda $ \Psi_C(0)\rangle$ na esfera de Bloch e dos principais estados de moeda utilizados na literatura em $t = 0$ . Os parâmetros $\alpha$ e $\beta$ para cada ponto ilustrado na imagem estão descritos na Tab.2.1. . . . .	34
2.5	Densidade de probabilidade para duas caminhadas quânticas Hadamard com estados iniciais diferentes: a linha preta representa uma CQ de cem passos com estado inicial $ \Psi_0^A\rangle$ , já a linha vermelha representa uma CQ de cem passos com estado inicial $ \Psi_0^B\rangle$ . . . . .	40
2.6	Densidade de probabilidade para uma caminhada quântica Hadamard, com o estado inicial não tendencioso $ \Psi_0^C\rangle$ , em comparação com a distribuição de probabilidade para uma caminhada clássica discreta imparcial ( $p = q = 1/2$ ) e com comprimento de passo constante $l = 1$ ao longo da CAC. Ambas as caminhadas possuem cem passos. . . . .	41
2.7	Comparativo entre o deslocamento quadrático médio, $D_x$ , em função do tempo para uma caminhada quântica Hadamard unidimensional, com estado inicial $ \Psi_0^C\rangle$ , em comparação ao de uma CAC discreta imparcial ( $p = q = 1/2$ ) com comprimento de passo constante $l = 1$ . . . . .	42

2.8	Ilustração de alguns estados de base do sistema para uma CQME unidimensional discreta, vide Eq.(2.35). Perceba que, em uma CQME, os caminhantes quânticos estão definidos nas arestas da rede. . . . .	43
2.9	Na imagem superior, $t = 0$ , temos a representação dos dois estados incidentes no vértice $j$ por duas direções distintas, pelo lado direito, $\sigma = +$ e, pelo lado esquerdo, $\sigma = -$ , com amplitude de probabilidade de $1/\sqrt{2}$ e $i/\sqrt{2}$ , respectivamente (vide Eq.(2.57)). Na imagem inferior, temos a ilustração do sistema para $t = 1$ da CQME Hadamard, vide Eqs.(2.59), (2.61) e (2.64). Note que os colchetes em cinza representam os resultados das multiplicações das amplitudes de espalhamento em $t = 0$ e o respectivo coeficiente de espalhamento. Note também que, para $t = 1$ , a probabilidade de um caminhante estar se dirigindo rumo ao vértice $j$ é nula, $1/2$ para $j + 1$ e $1/2$ para $j - 1$ , vide Eq.(2.55). . . . .	49
3.1	(a) A rede hexagonal ( <i>honeycomb</i> ). Aqui nós assumimos que os vértices com mesma estrutura de ligação que o vértice $(j, k)$ terão ambas as coordenadas pares. (b) A estrutura de referência utilizada para rotular os estados de direção de propagação do caminhante. Os valores possíveis são $\sigma = 1, 2$ e $3$ .	53
3.2	Os módulos ao quadrado dos coeficientes de reflexão e transmissão, para uma dada direção incidente $\sigma$ , da matriz $\hat{\Gamma}_{AB}(\theta, 0)$ , veja Eq.(3.22), em função do parâmetro $\theta$ . Note que, para uma matriz AB, a soma dos módulos ao quadrado dos coeficientes de reflexão e transmissão, para uma dada direção incidente $\sigma$ , é dada por $ r_A(\theta) ^2 + 2 t_B(\theta) ^2$ , vide Eqs.(3.9) e (3.22).	59
3.3	Representação do estado inicial descrito pela Eq.(3.23). Em vermelho temos as coordenadas discretas do vértice associado ao estado inicial $(0, 0)$ , e, de dois de seus primeiros vizinhos, com coordenadas $(-1, -1)$ e $(1, -1)$ .	59
3.4	As distribuições de probabilidades normalizadas para $ \psi_{200}\rangle$ , com $ \psi_0\rangle$ dado pela em Eq.(3.23), para CQME's com matriz espalhamento dado pela Eq.(3.22) com diferentes valores de $\theta$ e para $\gamma = 0$ . Para $\theta = 0$ temos uma CQME com a maior distribuição de probabilidade radial, uma vez que nesta condição temos o maior valor possível associado aos coeficientes de transmissão, vide Eq.(3.21). Por outro lado, à medida que $\theta \rightarrow \pi/2$ temos que distribuição de probabilidades radial tende a zero, e o caminhante tende a ficar localizado no vértice associado ao estado inicial, comportamento que vai de acordo com a Eq.(3.21) e também é mostrado na Fig.3.2. Os padrões de distribuição de probabilidade formados estão diretamente relacionados com a simetria de rede <i>honeycomb</i> , com o estado inicial utilizado na dinâmica e claro com a matriz espalhamento da CQME. . . . .	60
3.5	O deslocamento quadrático médio radial, $D_r$ , veja Eq.(3.16), em função de $n$ , tal que $t = n\tau$ , para CQME's com matriz espalhamento dado pela Eq.(3.22) com diferentes valores de $\theta$ e para $\gamma = 0$ . Para $\theta = 0$ temos uma CQME com o maior valor de $D_r$ , uma vez que nesta condição temos o maior valor possível associado aos coeficientes de transmissão, vide Eq.(3.21). Por outro lado, a medida que $\theta \rightarrow \pi/2$ , isto é, a medida que o coeficiente de reflexão tende ao valor máximo, como mostrado na Fig.3.2 e pela Eq.(3.21), temos que a CQME perde a característica balística do caminhante ao longo da rede e, $D_r$ tende a um comportamento linear. Neste caso, o caminhante quântico terá comportamento equivalente à um caminhante clássico. . . . .	61

3.6	Comportamento de $D_r/a^2$ , veja Eq.(3.16), em função de $\theta$ para diferentes valores de $n$ . Perceba que à medida que $\theta \rightarrow 0$ e $n \gg 1$ é possível observar o comportamento quadrático de $D_r/a^2$ . Por outro lado, a medida que $\theta \rightarrow \pi/2$ fica nítido que $D_r/a^2 \rightarrow 0$ independente do valor de $n$ . . . . .	62
3.7	Comportamento de $D_r/(at)^2$ em função de $\theta$ para diferentes valores de $n$ . É possível notar que à medida que $n \gg 1$ as curvas tendem a um perfil semelhante. . . . .	62
3.8	Comportamento de $D_r/a^2$ versus $n$ , tal que $t = n\tau$ , para diferentes valores de $\theta$ , obtido através da evolução dos estados do sistema (numérico) e, para $D_r = K^2 t^2$ onde $K(\theta)$ é dado pela Eq.(3.24) e truncado em $m = 2$ (modelo). As curvas divergem apenas para quando $\theta \rightarrow \pi/2$ . . . . .	63
3.9	Comportamento de $D_r/a^2$ em relação a $\theta$ para diferentes valores de $n$ , tal que $t = n\tau$ , obtido através da evolução dos estados do sistema (numérico) e, para $D_r = K^2 t^2$ onde $K(\theta)$ é dado pela Eq.(3.24) e truncado em $m = 2$ (modelo). As curvas divergem apenas quando $n \rightarrow 0$ , uma vez que para pequenos valores de $n$ o regime balístico ainda não foi atingido. . . . .	63
3.10	Três exemplos de diferentes tipos de nanofitas: quadrada, retangular armchair e retangular zigzag, respectivamente. A forma da nanofita está diretamente ligada a quantidade de anéis em cada uma das direções $\hat{e}_x$ e $\hat{e}_y$ , representada por $\{n_x \times n_y\}$ . Iremos focar nesta seção no caso em que $n_x = n_y$ , ou seja, nanofitas quadradas. . . . .	64
3.11	Uma nanofita quadrada $\{5 \times 5\}$ . As bordas zigzag (vermelho) e armchair (verde) delimitam a nanofita quadrada. . . . .	66
3.12	Representação do estado inicial descrito pela Eq.(3.44), tal que $O$ é o ponto de origem do plano cartesiano. Em vermelho temos a indicação dos vértices associados ao estado inicial da Eq.(3.44) com suas respectivas coordenadas discretas $(j, k)$ . . . . .	69
3.13	Distribuições de probabilidade normalizadas para uma nanofita quadrada com dimensões $\{21 \times 21\}$ em instantes de tempo múltiplos de $t_{min} = 20$ . Da esquerda para a direita, de cima pra baixo, distribuição de probabilidade para $t = \frac{t_{min}}{2}$ , $t = t_{min}$ , $t = 2t_{min}$ , $t = 3t_{min}$ , $t = 4t_{min}$ e $t = 5t_{min}$ , respectivamente. . . . .	70
3.14	Distribuições de probabilidade normalizadas para uma nanofita quadrada com dimensões $\{41 \times 41\}$ em instantes de tempo múltiplos de $t_{min} = 40$ . Da esquerda pra direita, de cima pra baixo, distribuição de probabilidade para $t = \frac{t_{min}}{2}$ , $t = t_{min}$ , $t = 2t_{min}$ , $t = 3t_{min}$ , $t = 4t_{min}$ e $t = 5t_{min}$ , respectivamente. . . . .	71
3.15	Distribuições de probabilidade normalizadas para uma nanofita quadrada com dimensões $\{61 \times 61\}$ em instantes de tempo múltiplos de $t_{min} = 60$ . Da esquerda pra direita, de cima pra baixo, distribuição de probabilidade para $t = \frac{t_{min}}{2}$ , $t = t_{min}$ , $t = 2t_{min}$ , $t = 3t_{min}$ , $t = 4t_{min}$ e $t = 5t_{min}$ , respectivamente. . . . .	71
3.16	Distribuições de probabilidade normalizadas para uma nanofita quadrada com dimensões $\{81 \times 81\}$ em instantes de tempo múltiplos de $t_{min} = 80$ . Da esquerda pra direita, de cima pra baixo, distribuição de probabilidade para $t = \frac{t_{min}}{2}$ , $t = t_{min}$ , $t = 2t_{min}$ , $t = 3t_{min}$ , $t = 4t_{min}$ e $t = 5t_{min}$ , respectivamente. . . . .	72

3.17	Distribuições de probabilidade normalizadas para uma nanofita quadrada com dimensões $\{101 \times 101\}$ em instantes de tempo múltiplos de $t_{min} = 100$ . Da esquerda pra direita, de cima pra baixo, distribuição de probabilidade para $t = \frac{t_{min}}{2}$ , $t = t_{min}$ , $t = 2t_{min}$ , $t = 3t_{min}$ , $t = 4t_{min}$ e $t = 5t_{min}$ , respectivamente. . . . .	73
3.18	Probabilidade de encontrar a partícula em um dos vértices da borda com $l = 2$ , $p_b$ , em relação a $t$ ( $\tau = 1$ ). O painel mostra $p_b$ para instantes de tempo muito próximos ao valor de $t_{min}$ para cada uma das nanofitas. . . .	73
3.19	Neste gráfico temos a comparação entre $p_{b(max)}$ calculado via CQME's em nanofitas e via modelo proposto, ver Eq.(3.53), com os devidos valores de $Q_b$ e $Q_t$ para cada rede de dimensão $\{n_x \times n_y\}$ . . . . .	75
3.20	Neste gráfico podemos ver como o comportamento do deslocamento quadrático médio radial, $D_r$ , está diretamente associado com o tamanho da nanofita quadrada e, conseqüentemente, com as interações da partícula (caminhante quântico) com os vértices de bordas. As linhas sólidas representam $D_r \times t$ para nanofitas de dimensão $\{n_x \times n_y\}$ , e a linha trastejada para uma rede hexagonal sem condições de contorno (rede infinita). . . . .	75
3.21	Neste gráfico temos o valor normalizado de $D_r$ em relação a $t_{min}$ para nanofitas de diferentes tamanhos. A medida que aumentamos as dimensões da nanofitas, as curvas tendem a convergir para valores cada vez mais próximos. . . . .	76
3.22	Neste gráfico vemos o comportamento oscilatório do deslocamento quadrático médio radial decomposto em $D_x$ e $D_y$ , para um nanofita quadrada $\{81 \times 81\}$ , deixando claro como o caráter oscilatório da DQM radial inicia primeiro na direção $\hat{e}_y$ . É importante notar que, a simetria da rede, dada pela Eq.(3.1), faz com que $D_x$ tenha valores maiores ao longo da caminhada. . . . .	77
3.23	Neste gráfico podemos notar como os valores de probabilidade associadas aos vértices de borda com $l = 2$ de uma nanofita com dimensões $\{81 \times 81\}$ atingem seu valor máximo primeiro nas bordas zigzag do que nas bordas armchair, corroborando com os resultados da Fig.3.22. . . . .	77
4.1	Mapeando os vértices da rede hexagonal (vértices pretos) em uma rede triangular de Bravais (pontos cinzas) pela Eq.(4.1). A área pontilhada é a célula de Wigner-Seitz [191], note que, há dois vértices não equivalente dentro desta. . . . .	80
4.2	A rede recíproca, com pontos gerados pela Eq.(4.3), associada à rede de Bravais mostrada na Fig.4.1, percebe que ela também possui estrutura triangular. A área pontilhada é a primeira Zona de Brillouin tal que $\Gamma$ , $K$ e $M$ são seus pontos de alta simetria. . . . .	81
4.3	Estruturas de bandas, obtidas através da Eq.(4.41) para diferentes matrizes $\Gamma_{AB}(\theta, \pi/2)$ , ao longo da primeira zona de Brillouin e em unidades de $E \pm / \tilde{\epsilon}$ . . . . .	88
4.4	(a) Bandas de energia para diferentes valores de $\theta$ e $\gamma = \pi/2$ ao longo do caminho fechado $\Gamma K M \Gamma$ . (b) Relação de dispersão de energia próxima ao ponto de alta simetria $K$ para diferentes valores de $\theta$ e $\gamma = \pi/2$ . . . . .	89
4.5	Plots de densidade de $ E_{\pm} / \tilde{\epsilon} $ para diferentes valores de $\theta$ e $\gamma = \pi/2$ na primeira zona de Brillouin. Os pontos $\Gamma$ , $M$ , $K$ são os denotados pontos de alta simetria. . . . .	90
4.6	Comportamento de $E_{max}$ em relação ao parâmetro $\theta$ , vide Eq.(4.42). . . . .	91

4.7	Comparação entre as estruturas de banda $\pi$ e $\pi^*$ do grafeno obtidas via: TB-1NN com $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_{TB} = 2.75$ , ver Eq.(4.55); <i>ab initio</i> 1 [195]; <i>ab initio</i> 2 [228]; e via CQME's tomando a Eq.(4.41) para seis valores distintos de $\theta$ e $\gamma = \pi/2$ . As curvas <i>ab initio</i> foram digitalizadas das Refs.[195] e [228]. . . . .	94
4.8	Comparação entre as estruturas de banda $\pi$ e $\pi^*$ do grafeno obtidas via: TB-1NN com $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_{TB} = 3.0$ , vide Eq.(4.55); <i>ab initio</i> 1 [195]; <i>ab initio</i> 2 [228]; e via CQME's tomando a Eq.(4.41) para seis valores distintos de $\theta$ e $\gamma = \pi/2$ . As curvas <i>ab initio</i> foram digitalizadas das Refs.[195] e [228]. . . . .	95
4.9	Comparação entre as estruturas de banda $\pi$ e $\pi^*$ do germaneno obtidas via: TB-1NN com $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_{TB} = 1.05$ , vide Eq.(4.55); <i>ab initio</i> 1 [195]; e via CQME's tomando a Eq.(4.41) para seis valores distintos de $\theta$ e $\gamma = \pi/2$ . As curvas <i>ab initio</i> 1 foram digitalizadas da Ref.[195]. . . . .	97
4.10	Comparação entre as estruturas de banda $\pi$ e $\pi^*$ do siliceno obtidas via: TB-1NN com $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_{TB} = 1.03$ , vide Eq.(4.55); <i>ab initio</i> 1 [195]; e via CQME's tomando a Eq.(4.41) para seis valores distintos de $\theta$ e $\gamma = \pi/2$ . As curvas <i>ab initio</i> 1 foram digitalizadas das Ref.[195]. . . . .	98
4.11	Comparação entre as estruturas de banda $\pi$ e $\pi^*$ para o grafeno obtidas através do algoritmo de busca de matrizes $\hat{\Gamma}^{(\pm)}$ e via <i>ab initio</i> 1 [195]. . . . .	101
4.12	Comparação entre as estruturas de banda $\pi$ e $\pi^*$ para o germaneno obtidas através do algoritmo de busca de matrizes $\hat{\Gamma}^{(\pm)}$ e via <i>ab initio</i> 1 [195]. . . . .	102
4.13	Comparação entre as estruturas de banda $\pi$ e $\pi^*$ para o siliceno obtidas através do algoritmo de busca de matrizes $\hat{\Gamma}^{(\pm)}$ e via <i>ab initio</i> 1 [195]. . . . .	104
5.1	Representação de uma rede triangular. Todos os vértices da rede são representados pelas coordenadas discretas $j$ e $k$ , formando o par ordenado $(j, k)$ . As coordenadas cartesianas dos vértices são dadas pela Eq.(5.1). . . . .	106
5.2	Representação dos estados do caminhante quânticos em direção ao vértice $(j, k)$ (cinza) e em direção aos seus primeiros vizinhos (preto): $(j + 1, k + 1)$ , $(j + 1, k - 1)$ , $(j - 1, k + 1)$ e $(j - 1, k - 1)$ . De maneira genérica, $\Phi_m^{(j,k)}$ representa um estado no qual o caminhante se propaga em direção ao vértice $(j, k)$ pela direção $m$ . . . . .	112
5.3	Representação dos rótulos segundo a Eq.(5.27). Além disso, temos a representação dos eixos de simetria $S_1, S_2, S_3, S_{-4}, S_{+4}, S_6$ , vide Eq.(5.32), referências para as trocas de rótulos se acordo com os elementos de simetria da rede triangular. . . . .	113
5.4	(a) Representação da permutação $p_I$ . Este caso leva a construção de uma CQME na qual os coeficientes de espalhamento dos processos transmissivos, dos quatro estados de direção de propagação $m = \{-1, +1, -3, +3\}$ , estão associados a estados de mesmo rótulo, como por exemplo, $\Gamma_{\alpha\alpha}^{(j,k)} = \Gamma_{+1+1}^{(j,k)}$ . (b) Representação da permutação $p_r$ . Este caso leva a construção de uma CQME na qual os coeficientes de espalhamento dos processos reflexivos, dos quatro estados de direção de propagação citados anteriormente, estão associados a estados de mesmo rótulo, como por exemplo, $\Gamma_{\alpha\alpha}^{(j,k)} = \Gamma_{+1-1}^{(j,k)}$ . . . . .	115
5.5	Representações de permutações em que teremos CQME's na qual tanto os fenômenos de transmissão como de reflexão possuem diferentes associações entre os rótulos, ver Tab.(5.1). (a) Representação da permutação $p_{s_1s_2}$ . (b) Representação da permutação $p_{s_2s_6}$ . . . . .	116

## LISTA DE TABELAS

2.1	Os valores dos parâmetros $\alpha$ e $\beta$ para os estados de moeda mais utilizados na literatura para $t = 0$ . Vale notar que os valores na coluna de $\cos(\alpha/2)$ são as amplitudes de probabilidade associada ao estado de spin <i>up</i> em um estado de moeda. Já os valores na coluna de $e^{i\beta}\sin(\alpha/2)$ são as amplitudes de probabilidade associadas ao estado de spin <i>down</i> em um estado de moeda.	35
3.1	Cinco grandezas que possuem relação direta entre si: o tamanho da rede quadrada $\{n_x \times n_y\}$ , o tempo mínimo para a partícula atingir as condições de contorno espaciais da rede, a probabilidade de encontrar a partícula em um dos vértices com $l = 2$ , $p_b$ , para instante de tempo $t = t_{min}$ , o instante de tempo em que o sistema atinge $p_{b(max)}$ , $t_{p_b(max)}$ e, por fim, o valor de $p_{b(max)}$ . É possível notar que, quanto maior o tamanho da nanofita quadrada, menor será o valor de $p_{b(t_{min})}$ e de $p_{b(max)}$ , como nos mostra a Fig.3.18. Os dados obtidos foram para $\tau = 1$ .	74
4.1	Os valores dos parâmetros $\tilde{\varepsilon}$ e $\tau$ para valores distintos de $\theta$ na Eq.(4.58).	96
4.2	Lista de parâmetros importantes para os três materiais de Dirac 2D abordados nesta seção [195, 198, 236–239]. Os valores de $\varepsilon_{eff}$ e $\tilde{\varepsilon}$ estão em unidades de eV. Já os valores associados aos parâmetros $v_F^{(TB)}$ e $v_F^{(CQME)}$ , vide Eq. (4.47), estão em unidades de $10^5$ m/s. Por fim, os parâmetros associados ao modelo CQME foram obtidos para $\hat{\Gamma}_{AB}(\pi/3, \pi/2)$ .	97
5.1	As vinte e quatro permutações possíveis, os operadores associados e as atribuições dos rótulos para cada caso. Vale notar que, permutações equivalentes associadas ao elemento identidade, ex: $s_2s_2s_1 = es_1 = s_1$ , foram omitidas. Afinal, ver Eq.(5.34), tais permutações podem ser simplificadas e relacionadas diretamente com uma das vinte e quatro permutações apresentadas.	117

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>18</b>
<b>2</b>	<b>As Caminhadas Quânticas</b>	<b>25</b>
2.1	Uma Discussão Básica . . . . .	25
2.2	Caminhadas Aleatórias Clássicas . . . . .	27
2.2.1	Formalismo e Principais Grandezas . . . . .	28
2.3	Caminhadas Quânticas por Modelo de Moeda . . . . .	31
2.3.1	Estrutura Topológica da Rede Unidimensional . . . . .	32
2.3.2	Estados de Base . . . . .	32
2.3.3	Estado Inicial e Evolução Temporal . . . . .	33
2.3.4	Probabilidades e Deslocamento Quadrático Médio . . . . .	39
2.4	Caminhada Quântica por Modelo de Espalhamento . . . . .	41
2.4.1	Estados de Base . . . . .	42
2.4.2	Evolução Temporal e Matriz Espalhamento . . . . .	43
2.4.3	Probabilidades e Deslocamento Quadrático Médio . . . . .	48
2.4.4	Um exemplo de CQME . . . . .	49
<b>3</b>	<b>Caminhadas Quânticas por Modelo de Espalhamento na Rede Hexagonal: Espaço de Posição</b>	<b>52</b>
3.1	Formalismo e Principais Grandezas . . . . .	52
3.1.1	Estrutura Topológica da Rede Hexagonal . . . . .	52
3.1.2	Estados de Base . . . . .	53
3.1.3	Operador Evolução Temporal e Matrizes Espalhamento . . . . .	54
3.1.4	Probabilidades e Deslocamentos Quadráticos Médio . . . . .	56
3.2	CQME's com Matriz de Espalhamento AB . . . . .	57
3.2.1	Matriz AB e seus parâmetros . . . . .	57
3.2.2	Distribuições de Probabilidade e DQM Radial para CQME's com Matriz AB . . . . .	60
3.3	CQME's com Condições de Contorno: Nanofitas Quadradas . . . . .	64
3.3.1	Estrutura Topológica das Nanofitas Quadradas . . . . .	64
3.3.2	Evolução Temporal e Matriz Espalhamento . . . . .	65
3.3.3	Probabilidades e Escala de Tempo . . . . .	67
3.3.4	CQME's Imparciais em Nanofitas Quadradas: Resultados . . . . .	69
<b>4</b>	<b>Caminhadas Quânticas por Modelo de Espalhamento na Rede Hexagonal: Espaço de Momento</b>	<b>79</b>
4.1	Formalismo e Principais Grandezas . . . . .	79
4.1.1	Rede de Bravais e Rede Recíproca . . . . .	79
4.1.2	Condições para CQME's Invariantes sob Translação . . . . .	81
4.1.3	Autovalores e Bandas de Energia: Definições e Formalismo . . . . .	84

4.2	Bandas de Energia e Afins: Um exemplo exato para a Matriz AB . . . . .	87
4.2.1	Bandas de Energia . . . . .	88
4.2.2	Velocidades de Fermi e uma Relação entre CQME's e TB-1NN . . .	91
4.3	CQME's e Materiais de Dirac 2D . . . . .	93
4.3.1	Grafeno . . . . .	94
4.3.2	Germaneno e Siliceno . . . . .	97
4.4	Bandas de Energia: a matriz geradora do $SU(3)$ . . . . .	99
4.4.1	Grafeno . . . . .	101
4.4.2	Germaneno e Siliceno . . . . .	102
<b>5</b>	<b>Caminhadas Quânticas por Modelo de Espalhamento em Redes Tri- angulares</b>	<b>105</b>
5.1	Caminhadas Quânticas por Modelo de Espalhamento em Rede Triangular no Espaço de Posição . . . . .	105
5.1.1	Estrutura Topológica da Rede Triangular e Estados de Base . . . .	105
5.1.2	Operador Evolução Temporal e Matrizes Espalhamento . . . . .	107
5.1.3	Probabilidades e Operadores Cartesianos . . . . .	110
5.2	Rótulos de Direção de Propagação e Elementos de Simetria da Rede Tri- angular . . . . .	111
5.2.1	Permutação entre quatro rótulos topologicamente equivalentes . . .	112
<b>6</b>	<b>Conclusão</b>	<b>118</b>
	<b>Referências</b>	<b>121</b>



## LISTA DE ABREVIATURAS

<b>CAC</b>	Caminhada Aleatória Clássica
<b>CQ</b>	Caminhada Quântica
<b>CQME</b>	Caminhada Quântica por Modelo de Espalhamento
<b>CQMM</b>	Caminhada Quântica por Modelo de Moeda
<b>DQM</b>	Deslocamento Quadrático Médio
<b>DQMR</b>	Deslocamento Quadrático Médio Radial
<b>MQ</b>	Mecânica Quântica
<b>TB-1NN</b>	<i>Tight Binding First Nearest Neighbour</i>
<b>TDF</b>	Transformada Discreta de Fourier

A Caminhada Aleatória Clássica (CAC), proposta inicialmente no começo do século XX por Karl Pearson [1], é uma dinâmica de caráter aleatório com modelagem probabilística [2], estudada e aplicada nas mais diferentes áreas do conhecimento ao longo dos anos [3]. Além de ter uma contribuição direta para o Movimento Browniano [4–8], processos estocásticos e difusivos [9–15], estudo de polímeros [16–21], também possui diversas aplicações fora do escopo da física. Há diversos trabalhos com CAC's aplicadas em modelos de mercado financeiro [22–25], em biologia [3, 26–28], em química [29–32], etc. Na seção 2.1 abordamos o formalismo utilizado para CAC's discretas no tempo e nas posições e, além disso, apresentamos as principais grandezas analisadas neste tipo de dinâmica.

A Caminhada Quântica (CQ) [33, 34], é um análogo quântico [35] da CAC, e pode ser brevemente definida como a dinâmica, de uma ou mais partículas, se propagando por uma rede condicionadas pelos fundamentos e conceitos da Mecânica Quântica (MQ) [36, 37]. Em sua formulação mais conhecida, a de moeda, um dos conceitos mais interessantes das CQ's é o fato da direção de propagação da partícula, ao longo da rede, estar diretamente relacionado com seu grau de liberdade interno: o estado de spin, no caso de um elétron, ou a direção de polarização, no caso de um fóton, por exemplo. Como as CQ's ocorrem dentro do domínio da MQ, há conceitos como superposição de estados e natureza ondulatória, que fornecem comportamentos totalmente diferentes das CAC's: dispersão quadraticamente superior do caminhante quântico em relação ao caminhante clássico, distribuições de probabilidades que podem sofrer processos de interferência ao longo da dinâmica entre outros, apresentados nos capítulos posteriores.

---

Há duas principais classificações para CQ's em relação a seus instantes de tempo: caminhadas quânticas contínuas e caminhadas quânticas discretas. Apesar de seus instantes de tempo serem contínuos e discretos, respectivamente, suas posições são definidas de maneira discreta [34, 38, 39]. Dentro de cada uma dessas classificações há outras ramificações de tipo e modelos de caminhadas quânticas como, por exemplo, Caminhada Quântica por Modelo de Moeda (CQMM) e Caminhada Quântica por Modelo de Espalhamento (CQME). Apesar de possuírem formalismos e motivações fenomenológicas diferentes, são modelos unitariamente equivalentes [40, 41]. Portanto, podem ser formalmente mapeados um no outro em qualquer topologia de rede e para qualquer tipo de moeda quântica ou matriz espalhamento. As CQMM's e as CQME's em uma dimensão são apresentadas de maneira formal no segundo capítulo deste trabalho.

A grande maioria dos pesquisadores da área considera o trabalho de Y. Aharonov, L. Davidovich e N. Zagury [42], publicado em 1993, como sendo o artigo seminal de CQ's. Apesar disso, esse conceito já havia sido abordado por outros autores como: K. R. Parthasarathy que, no ano de 1988, publicou um trabalho propondo caminhadas quânticas, e, inclusive, empregando pela primeira vez o nome *quantum random walk* em um artigo [43]; R. P. Feynman ao propor a discretização do propagador de Dirac [44, 45] e discutir sobre implementações quânticas em computadores [46]; S. Gudder ao propor um tratamento discreto para dinâmicas quânticas [47]; D. A. Meyer em seu estudo sobre autômatos celulares quânticos [48].

Desde seu advento, as CQ's tem sido estudadas e aplicadas nas mais diferentes áreas do conhecimento. Há muitos estudos no contexto de teoria de informação e suas aplicações [49] como, por exemplo, em algoritmos de busca [50–57], em implementação de computação universal [58, 59], em computadores quânticos [60–62], em criptografia [63–66], em protocolos de teletransporte [67–70], e uma vasta literatura no contexto de informação quântica [39, 71–107].

Apesar de grande parte dos trabalhos se concentrarem em informação quântica e afins, temos também trabalhos em biologia [108–110], em ciências sociais [111], em mercado de ações [112] e várias outras áreas do conhecimento [38, 113]. Ao focarmos nas implementações das CQ's em física, podemos citar diversos trabalhos nas mais diferentes linhas, como astrofísica e física de partículas [114–118], em modelos (quânticos) simplificados baseados em processos astronômicos [119, 120], em fundamentos da mecânica quântica [121], em

---

física atômica e molecular [122], em diversas aplicações experimentais [98, 123–129], em redes periódicas e grafos [40, 41, 130–150] e, de maneira mais específica, em redes triangulares e/ou hexagonais [57, 151–154]. Há também aplicações tendo em vista a descrição simplificada de materiais, valendo destacar em materiais bidimensionais, como o grafeno [155–157].

A percepção de que aspectos topológicos podem ter grande influência em conceitos chave de Física da Matéria Condensada aumentou consideravelmente a compreensão de organização e arranjo da matéria [158–161]. Desta forma, propriedades topológicas são capazes de explicar fenômenos como: transição de fase sem quebra de simetria [162, 163], gaps de banda finitos ao longo de caminhos adiabáticos no espaço de parâmetros [164], coeficientes de transporte dependentes de invariantes topológicos [165] e cargas fracionárias [164], para citar alguns exemplos. Todas essas características motivaram o desenvolvimento de diferentes materiais com diferentes finalidades de aplicação [160, 162, 163, 166, 167].

Particularmente, materiais bidimensionais são sistemas em que as propriedades topológicas possuem um papel fundamental [162, 165, 168, 169] e, em particular, tais propriedades (juntamente com os elementos de simetria dos sistemas) são fundamentais na investigação de estruturas planas [170, 171].

Um dos materiais bidimensionais mais conhecidos e estudados da atualidade é o grafeno [172–176]. O grafeno é um cristal bidimensional estável, constituído por uma monocamada de átomos de carbono hibridizados  $sp - 2$  arranjados de maneira regular por estruturas hexagonais, chamadas de *honeycomb* ou favo de mel. Por longos anos, tinha-se a ideia de que o grafeno seria termodinamicamente instável [177], portanto, seria muito improvável conseguir sintetizá-lo em temperatura ambiente [178].

No fim do século XX, alguns pesquisadores já haviam trabalhado na busca de métodos eficazes de síntese de grafeno [179], porém, sem muito sucesso. O resultado destes métodos eram várias camadas de grafeno, em estrutura de *bulk*, bem distante da estrutura monocamada desejada. Anos depois, em 2004, a área sofreu uma verdadeira revolução com a publicação do trabalho de A. Geim e K. Novoselov [180] que desenvolveram e implementaram um método experimental de baixo custo para síntese de grafeno. Apesar de ainda não ser um método que, em um primeiro momento, permitisse sintetizar monocamadas de grafeno, o avanço foi excepcional comparado com outros métodos de síntese.

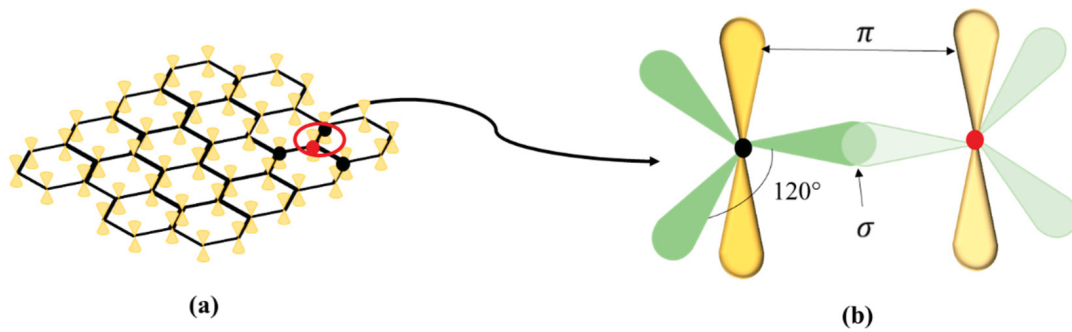


Figura 1.1: Em (a) temos vários carbonos hibridizados  $sp - 2$  ligados entre si formando uma folha de grafeno. Já em (b) temos a ilustração entre as ligações envolvidas entre dois átomos não equivalentes (do ponto de vista topológico) desta rede: uma ligação  $\sigma$  formada pela sobreposição dos respectivos orbitais hibridizados  $sp - 2$  e, uma ligação  $\pi$ , paralela entre os átomos e perpendicular em relação à folha de grafeno. Adaptado da Ref.[190].

O impacto do trabalho foi tão estrondoso que, no ano de 2010, A. Geim e K. Novoselov foram agraciados com o Prêmio Nobel de Física [181].

Como consequência da acurácia na síntese de grafeno, surgiram vários trabalhos explorando as propriedades deste material, e as incríveis propriedades do grafeno começaram de fato a ser estudadas. Ele possui diversas características que são consideradas ímpares para um cristal estável em temperaturas finitas [182–186], como excelente condução térmica e elétrica em temperatura ambiente, presença de Efeito Hall Quântico, alta resistência mecânica, e, além disso, como mostrado recentemente, pode apresentar comportamento supercondutor quando rotacionado sob outra camada de grafeno coincidente em um ângulo de  $1,1^\circ$ , denominado de "ângulo mágico"[187–189].

A rede hexagonal, apesar de ser uma rede periódica (regular), não é uma rede de Bravais [191], uma vez que possui dois vértices não equivalentes em sua célula unitária. Desta forma, se faz necessário mapear a rede hexagonal em duas subredes triangulares distintas: uma com vértices localizados em coordenadas discretas  $(j, k_{par})$ , e outra com vértices localizados em coordenadas discretas  $(j, k_{imp})$ , tal que  $[k_{par}]_2 = 0$  e  $[k_{imp}]_2 = 1$ , onde  $[x]_y$  é o resto da divisão de  $x/y$ . Cada vértice da rede hexagonal possui três primeiros vizinhos e, portanto, possui número de ordenação  $l = 3$ . Se tomarmos uma folha de grafeno como exemplo de rede hexagonal, temos que cada átomo de carbono hibridizado  $sp - 2$  se liga a outros três carbonos hibridizados  $sp - 2$ , por meio de três ligações  $\sigma$  coplanares com diferença de  $120^\circ$  entre si, e uma ligação  $\pi$ , paralela entre os átomos e perpendicular em relação à folha de grafeno [192], como ilustrado na Fig.1.1.

O fato dos elétrons em uma camada de grafeno se comportarem como férmions sem

massa, descritos pelas equações relativísticas de Dirac, em certos pontos de alta simetria da rede recíproca chamou a atenção de diversos pesquisadores. Nos últimos anos, cada vez mais pesquisadores tem notado que o grafeno não é o único material bidimensional com essa característica e, a partir disso, uma nova classe de materiais bidimensionais surgiu: os materiais de Dirac [193]. Estes materiais possuem cones de Dirac, veja Fig.1.2, em pontos da rede recíproca [191], isto é, não há gap entre a banda de valência e a banda de condução destes materiais e, além disso, na região próxima a estes cones há uma relação linear de dispersão de energia.

Dentro do contexto de materiais de Dirac com rede hexagonal planar, além do grafeno, podemos citar alguns materiais pertencentes à mesma família do carbono (na tabela periódica), como o siliceno e o germaneno. Estes materiais, apesar de serem estáveis na forma "arqueada" (*buckled*), possuem uma pequena deformação na direção  $\hat{e}_z$ , também são alvo de investigação em sua forma planar [78, 194–198]. Deste modo, a investigação e comparação de grandezas como bandas de energia e velocidade de Fermi de materiais de Dirac com rede hexagonal, nos possibilita a investigação propriedades topológicas dos mesmos.

Diversos métodos têm sido propostos, inclusive os chamados métodos *ab initio*, para calcular as principais grandezas de Materiais de Dirac (e vários destes com grande custo computacional). Entretanto, diversos trabalhos indicam que certas propriedades deste tipo de material emergem de fatores como a geometria e os elementos de simetria da rede [199–201]. É importante notar que, as ligações químicas são importantes para o estudo destes materiais, entretanto, mostraremos nos Capítulo 4, que elas podem ser incorporadas na descrição da rede hexagonal como um fator efetivo, emergente de interações entre partículas e os vértices da rede.

Uma série de trabalhos [41, 152, 155–157] confirma que é possível utilizar CQ's para explorar materiais representados por redes regulares de diversas formas, entre elas, pela análise das principais grandezas de CQ's no espaço de posição. Nas CQME's no espaço de posição, podemos analisar a evolução dos estados ao longo do tempo, dado um estado inicial do sistema, a estrutura topológica da rede e a(s) matriz(es) espalhamento. Portanto, como estes aspectos que podem ser controlados, temos a liberdade de modelar diversos tipos de materiais. A grande vantagem é que podemos estabelecer características advindas puramente da topologia de cada rede e também as características advindas da

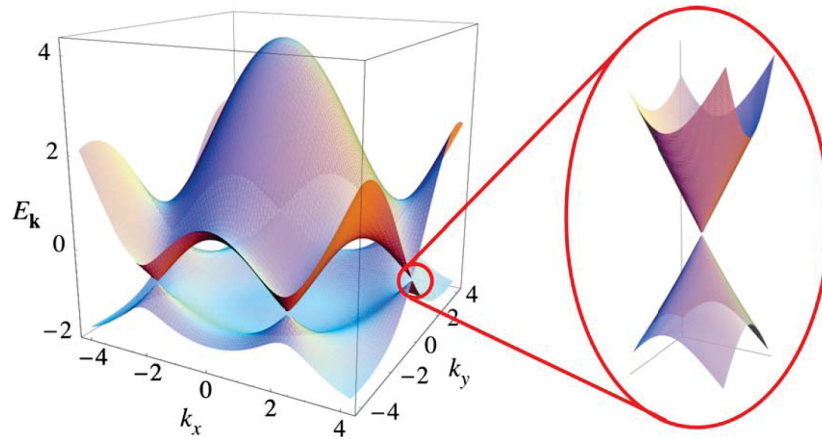


Figura 1.2: Bandas de energia  $\pi$  e  $\pi^*$  do grafeno calculadas via método *Tight Binding*. Em zoom, o cone de Dirac presente em um ponto de alta simetria da rede recíproca. Adaptado da Ref.[203].

escolha da(s) matriz(es) espalhamento e de um dado estado inicial. Alguns dos principais conceitos que podem ser explorados são as densidades de probabilidade, o deslocamento quadrático médio, ambos diretamente relacionados com o comportamento de elétrons em um dado material, possibilitando, por exemplo, investigações sobre localização de Anderson [96].

Um dos motivos que torna os materiais de Dirac com rede hexagonal planar tão interessantes para investigações via CQ's é a dispersão balística dos elétrons nesses materiais [172, 182] e, portanto, podemos considerar o elétron como um caminhante quântico se propagando por uma rede hexagonal infinita [152, 202] ou restrita [155–157], conforme as condições de contorno impostas na nossa dinâmica. Posteriormente abordaremos de maneira formal como implementar CQME's em uma rede hexagonal infinita, que pode ser interpretada como uma folha de grafeno extremamente extensa nas direções  $\hat{e}_x$  e  $\hat{e}_y$ , e, em redes hexagonais limitadas de maneira igual nas direções  $\hat{e}_x$  e  $\hat{e}_y$ , que pode ser interpretadas como uma nanofita quadradas de grafeno. Ao implementar CQME's nestas nanofitas, é possível investigar grandezas como: Deslocamento Quadrático Médio (DQM) radial e nas direções  $\hat{e}_x$  e  $\hat{e}_y$ , distribuição de probabilidade, relação entre distribuição de probabilidade nas bordas em relação às dimensões da nanofita, relação entre distribuição de probabilidade nas bordas em comparação ao tipo de borda (armchair ou zigzag) e outras mais, auxiliando na investigação de caracterização de propriedades conhecidas e desconhecidas desse material.

Por outro lado, o modelo de CQME's no espaço de momento possibilita a investigação

---

de outras grandezas físicas, como estruturas de bandas, por exemplo. Nosso método é extremamente versátil, uma vez que é possível gerar estruturas de bandas parametrizadas conforme a(s) matriz(es) espalhamento da rede, possibilitando uma exploração de conceitos como gaps entre as bandas de condução e de valência, velocidade de Fermi e afins.

Por fim, mas não menos importante, é necessário enfatizar o baixo custo computacional necessário para a implementação de CQME's, tal que muitas vezes computadores pessoais já satisfazem as condições para implementação.

Esta monografia está organizada da seguinte maneira: no Capítulo 2, temos uma discussão primordial sobre as principais diferenças entre sistemas descritos de maneira determinística e os que são descritos de maneira probabilística. Na sequência, temos a apresentação dos formalismos e das principais grandezas estudadas na Caminhada Aleatória Clássica Unidimensional, Caminhada Quântica por Modelo de Moeda Unidimensional e da Caminhada Quântica por Modelo de Espalhamento Unidimensional, todas essas com instantes discretos de tempo. No Capítulo 3, por sua vez, apresentamos dois formalismos para implementação de CQME's em redes hexagonais: um para redes infinitas e outro para nanofitas quadradas. Além disso, mostramos e discutimos os principais resultados obtidos para CQME's no espaço de posição para os dois formalismos apresentados. No Capítulo 4, além de apresentar um formalismo para CQME's no espaço de momento, propomos um método analítico de obtenção de estruturas de bandas e, um método numérico computacional baseado na busca de matrizes que melhor representam as estruturas de banda do grafeno, siliceno e do germaneno. Além disso, fazemos as devidas comparações entre as grandezas físicas obtidas via CQME's, métodos *ab initio* e pelo modelo *Tight Binding First Nearest Neighbour* (TB-1NN). No Capítulo 5, apresentamos um formalismo para implementação de CQME's em redes triangulares infinitas e, os resultados obtidos para diferentes formulações topológicas obtidas a partir da troca de rótulos de estados topologicamente equivalentes. Por fim, no último capítulo desta monografia, fazemos as considerações finais acerca dos resultados obtidos.



## CAPÍTULO 2

# AS CAMINHADAS QUÂNTICAS

Como mencionado no primeiro capítulo, as caminhadas quânticas vêm sendo estudadas e aplicadas nas mais diferentes áreas e contextos. No presente trabalho, temos como principal objetivo investigar se caminhadas quânticas (por modelo de espalhamento) podem ajudar na compreensão e modelagem de materiais bidimensionais que apresentam redes semelhantes às descritas aqui. Entretanto, antes de explorarmos nossas construções específicas para tais sistemas, se faz necessário uma revisão sobre diferentes aspectos de caminhas quânticas, focando na interpretação física, descrição probabilística, formulação básica, etc. Isto é feito no que se segue.

### 2.1 Uma Discussão Básica

Primeiramente, antes de abordarmos os modelos dinâmicos randômicos propostos neste capítulo, o de Caminhada Aleatória Clássica e os de Caminhada Quântica, é necessária uma breve discussão sobre duas visões distintas dentro da Física, a determinística e a probabilística. Aqui não iremos nos ater aos pormenores de cada visão, mas sim nas implicações lógicas de cada uma dela.

Ao longo dos anos, diversos filósofos e cientistas apresentaram sua visão de mundo sobre a natureza e as diversas formas de representação e descrição desta. Como sabemos, o método científico por si só estabelece uma série de critérios lógicos para a devida análise de um objeto de estudo. Entretanto, discussões sobre a ontologia e sobre a epistemologia de um dado objeto de estudo é primordial para traçar os objetivos de uma teoria, por

exemplo. Dentro deste contexto e, dentro das ciências exatas, o conceito de causa sempre foi alvo de investigações e permanece em pauta até hoje. Deve ser natural ao leitor pensar que a mecânica newtoniana pode ser tomada como exemplo para este caso, uma vez que esta estabeleceu os pilares de causa e efeito de grandezas físicas macroscópicas clássicas. Vale notar que a mecânica analítica traçou o formalismo matemático da mecânica newtoniana, permitindo, portanto, uma investigação ainda mais profunda e geral. Dentro deste contexto, tanto D'Alembert como Lagrange discutiram em alguns de seus trabalhos visões sobre a descrição e representação das grandezas físicas [204]. Neste contexto histórico começa a surgir oficialmente a visão determinística ideal, isto é, a concepção na qual tendo as condições iniciais de um dado sistema e, munido de um formalismo que relaciona o comportamento de um conjunto de grandezas físicas ao longo de um certo período, é possível fazer previsões futuras do sistema.

É importante fazermos uma reflexão que a visão/descrição determinística foi rapidamente absorvida para algumas áreas da Física. Porém, em outras esta visão determinística não foi capaz de estabelecer uma relação entre eventos físicos e formalismo proposto e, portanto, outro tipo de visão/descrição precisou ser utilizado. A mecânica quântica é uma destas áreas na qual a descrição determinística falha, assim como a mecânica de muitos corpos, mecânica estatística etc.

Dentro deste contexto, uma área que também não pode ser descrita pela visão determinística é de dinâmica estocástica. Em dinâmica estocástica, o estado de um dado sistema em um certo instante de tempo não pode ser determinado previamente e, seu formalismo conta com variáveis aleatórias para a sua descrição. Um exemplo de dinâmica estocástica é o lançar de dados, por exemplo. No caso de um dado imparcial de seis faces, isto é, equiprovável para todas as faces, não há como determinar qual será o resultado obtido no  $n$ -ésimo sorteio, por exemplo. Desta forma, em dinâmicas estocásticas a descrição adotada é a probabilística. A descrição probabilística, diferente da determinística, propõem uma descrição de cunho aleatório para os eventos. Desta forma, para o evento de lançar um dado imparcial de seis faces, por exemplo, cada face possui uma probabilidade de  $1/6$  de ser sorteada e, para cada sorteio, as probabilidades serão as mesmas e independem dos resultados obtidos em sorteios/evento anteriores. Portanto, neste caso, mesmo que se tenha uma probabilidade associada a um evento, não é possível atribuir uma relação causal entre o jogar de dados e um resultado específico.

Aqui é importante notar que do ponto de vista epistemológico, a descrição probabilística, ao ser incorporada em certas áreas da Física, traz uma visão que distingue principalmente sobre a interpretação da medição de grandezas físicas em um dado sistema. Além disso, esta descrição permite propor objetos de investigação antes negados pela visão determinística. Duas grandes áreas da Física que se desenvolveram a partir da descrição probabilística foram a mecânica estatística e a mecânica quântica. No caso da mecânica quântica, é ainda mais nítido e emblemático, uma vez que após muitas discussões e investigações notou-se que a descrição probabilística era fundamental para os pilares das MQ [204], apesar de anos se passaram até que esta descrição de fato fosse aceita pela academia. Vale notar que, apesar da interpretação probabilística ser destoa da determinística, o que de fato garantiu crédito à primeira foi o fato de corroborar com os experimentos que deram origem a mecânica quântica (assim como os posteriores), isto é, resultados que não podiam ser explicados pelas áreas vigentes da Física até então puderam ser devidamente interpretados.

A seguir, antes de apresentarmos dois formalismos distintos (mas matematicamente unitariamente equivalentes) para caminhadas quânticas, iremos apresentar um tipo de dinâmica estocástica discreta, denominado de Caminhada Aleatória Clássica. O principal objetivo é não só o de habituar o leitor a modelos com variáveis aleatórias e, naturalmente, com a descrição probabilística, que será de entendimento primordial para os próximos capítulos, como também introduzir uma discussão sobre sistemas físicos que apesar de estarem sob o regime da mecânica clássica, possuem uma descrição necessariamente probabilística.

## 2.2 Caminhadas Aleatórias Clássicas

Nesta seção temos como objetivo apresentar o formalismo da Caminhada Aleatória Clássica (CAC) e introduzir sistemas físicos que possuem descrição probabilística, como discutido previamente na seção anterior. Além disso, a discussão presente nesta seção se faz necessária, uma vez que o primeiro modelo de caminhadas quânticas proposto parte de uma analogia quântica ao modelo de Caminhada Aleatória Clássica.

### 2.2.1 Formalismo e Principais Grandezas

A Caminhada Aleatória Clássica (CAC) [2, 205] é amplamente estudada e aplicada há muitas décadas, como já mencionado no primeiro capítulo. A CAC foi discutida pela primeira vez em junho de 1905 por Karl Pearson [1]. Para elucidar o problema proposto por Pearson, pensemos na seguinte situação: um homem se encontra inicialmente parado, em uma posição que chamaremos de origem, e, adota a dinâmica aleatória, tal que se a moeda que está em sua mão for jogada para o alto e o resultado for cara, ele dá um passo para sua direita. Caso o resultado seja coroa, ele dá um passo para sua esquerda. Após o homem dar o passo ditado pelo resultado da moeda, iremos considerar que uma unidade de tempo  $t$  se passou. Na Fig.2.1 temos o exemplo de uma CAC unidimensional discreta no tempo e nas posições para  $t = 6$ , tal que o caminhante no instante de tempo  $t = 0$  encontra-se na posição de origem,  $j = 0$ .

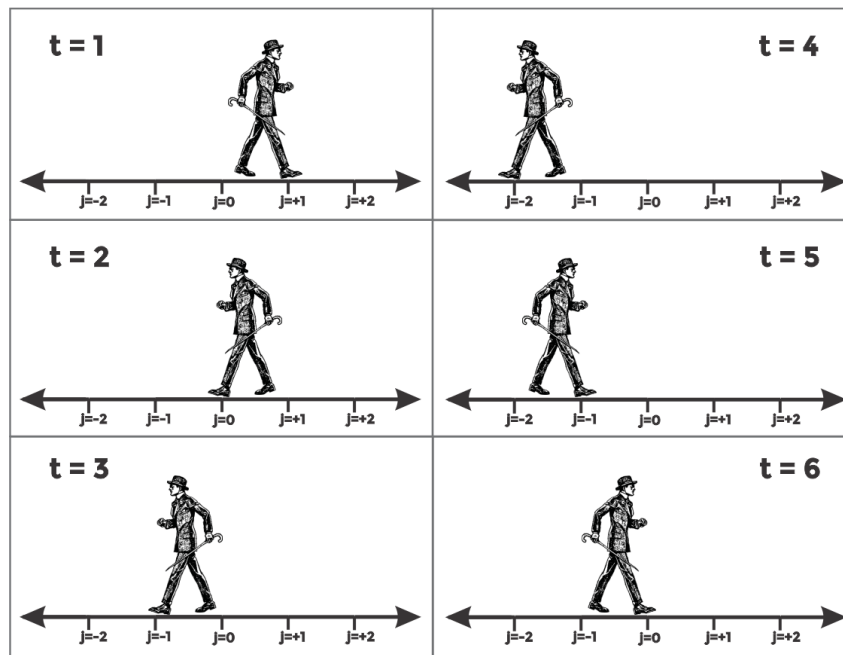


Figura 2.1: Exemplo de uma CAC discreta no tempo e nas posições para seis passos, ou instantes de tempo. Em  $t = 0$  o homem encontra-se na posição  $j = 0$ , origem da nossa coordenada de posições. De acordo com os passos dados, notas-se que a sequência dos resultados obtidos pelo caminhante ao sortear um lado da moeda foram: cara, coroa, coroa, coroa, cara e cara.

Podemos fazer várias perguntas referentes à elucidação do processo: o tamanho dos passos dados pelo caminhante é fixo? E se a moeda utilizada for tendenciosa (viciada)? É possível estipular qual é o local mais provável para o homem estar em uma dinâmica após cem passos dados?

Neste trabalho, nosso foco será em caminhadas quânticas discretas no tempo e nas

posições, desta forma convém impormos as mesmas condições para o análogo clássico. Portanto, consideramos que o caminhante dá passos de comprimento fixo  $l$ , tal que  $l \in \mathbb{Z}$ . Consideramos ainda que o caminhante está inicialmente na origem, ponto representando por  $j = 0$  do nosso sistema de coordenada unidimensional. Neste contexto, para o primeiro instante de tempo  $t$  da dinâmica ilustrada na Fig.2.1, o homem obteve o resultado cara no sorteio da moeda e conseqüentemente se deslocou para a direita, rumo à posição  $j + 1$ . Já no instante  $t = 2$ , ele obteve coroa como resultado do sorteio de moeda, e, portanto, se deslocou para a esquerda, rumo à origem  $j = 0$ . Nos instantes de tempo posteriores notamos que o homem obteve como resultado do sorteio da moeda, respectivamente, os lados: coroa, coroa, coroa, cara, e por fim cara.

Segundo as Refs.[2, 205], podemos definir que probabilidade do caminhante dar um passo para direita será dada por  $p$ , e  $q = 1 - p$  para esquerda, tal que para uma moeda justa (não tendenciosa) teremos que  $p = q = 1/2$ . Vale notar que, uma CAC unidimensional é uma cadeia de Markov discreta [33, 120], ou seja, cada passo da caminhada é probabilisticamente independente dos anteriores.

A probabilidade de encontrar o homem em uma posição  $j$ , após  $t$  instantes de tempo desta dinâmica aleatória, pode ser calculada por uma distribuição binomial [2, 205]:

$$P(j, t) = \frac{t!}{(t+j)/2!(t-j)/2!} p^{(t+j)/2} (1-p)^{(t-j)/2}. \quad (2.1)$$

Um detalhe importante é que podemos inferir o caminho feito pelo homem ao longo da dinâmica, sabendo sua posição final, e cada um dos resultados obtidos (cara ou coroa) em cada instante de tempo  $t$ . Além disso, o número total de posições que um caminhante pode ocupar em uma CAC unidimensional,  $j_{tot}$ , é dependente da quantidade de passos desta caminhada, de forma que  $j_{tot}(t) = 2t + 1$ . Portanto, para uma dinâmica com  $t = 100$ , ao final da caminhada o homem pode estar em qualquer posição discreta entre  $j = -100$  e  $j = +100$ .

Para uma caminhada com muitos passos, tal que  $t \gg 1$ , iremos notar que a distribuição de probabilidade binomial se assemelhará a uma distribuição Gaussiana [2, 205]. De maneira mais rigorosa, temos que a transição entre essas distribuições pode ser obtida através do Teorema Central do Limite [205, 206], ou através dos conceitos de função de densidade de probabilidade [2, 205], tal que a probabilidade  $P(x, t)$  de encontrar o

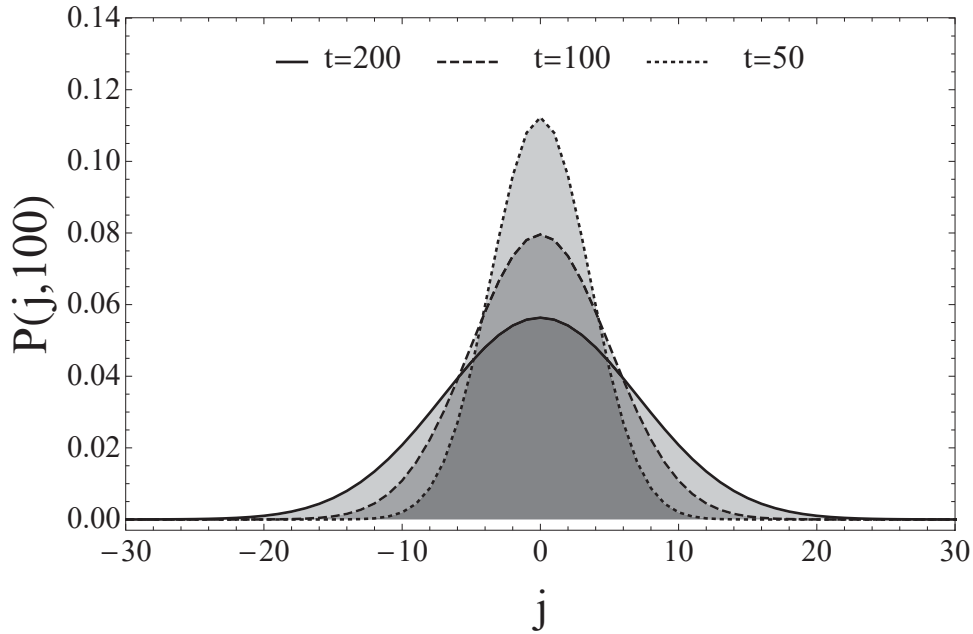


Figura 2.2: Probabilidade de encontrar o caminhante em uma posição  $j$  para três CAC's com diferentes durações:  $t = 50$  (linha pontilhada),  $t = 100$  (linha trastejada) e  $t = 200$  (linha sólida). Escolhemos um intervalo de  $\{j, -30, 30\}$  para salientar o perfil das curvas na região próxima ao valor médio,  $j = 0$ .

caminhante na posição  $x$  no instante de tempo  $t$  com passos de comprimento  $l$  é dada por

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{8\pi t p q l^2}} \exp\left(-\frac{(x - (p - q)tl)^2}{8pqt l^2}\right), \quad (2.2)$$

tal que considerando as devidas integrações [202], chegamos nas principais grandezas a serem analisadas em uma CAC: o valor médio (esperado) da posição do caminhante

$$\langle x \rangle = (p - q)tl, \quad (2.3)$$

a relação de dispersão do caminhante pela rede

$$\langle (\Delta x) \rangle = \sqrt{4tpql^2}, \quad (2.4)$$

e o Deslocamento Quadrático Médio (DQM) dado por

$$D_x = \langle (\Delta x)^2 \rangle = 4tpql^2. \quad (2.5)$$

Como estamos considerando passos discretos de tamanho fixo e unitários, ou seja,  $l = 1$ , e uma moeda justa tal que  $p = q = 1/2$ , a probabilidade de encontrar o caminhante

em uma posição  $x$ , após  $t$  instantes de tempo, pode ser escrita conforme a Eq.(2.2), como:

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp\left(\frac{-x^2}{2t}\right). \quad (2.6)$$

Portanto, a Eq.(2.4), associada à dispersão do caminhante, fica

$$\langle(\Delta x)\rangle = \sqrt{t}, \quad (2.7)$$

e a Eq.(2.5), associada ao DQM, pode ser escrita como

$$D_x = \langle(\Delta x)^2\rangle = t. \quad (2.8)$$

Na Fig.2.2 temos a representação da Eq.(2.6) para três CAC's com:  $t = 50$ ,  $t = 100$  e para  $t = 200$ . É nítido que quanto mais passos tem a caminhada, mas deslocalizada fica a distribuição de probabilidade em torno da origem, o que faz sentido ao analisarmos a Eq.(2.7) e a própria definição de  $\langle(\Delta x)\rangle$  em uma curva gaussiana, ligada diretamente a largura da curva à meia altura [207]. O fato da distribuição de probabilidades em uma CAC (com moeda justa) para  $t \gg 1$  ser dada por uma curva gaussiana, é uma característica do regime clássico. Outra característica desse regime é que o caminhante só pode estar em uma posição a cada passo e, portanto, experimenta apenas um caminho por vez ao longo de uma CAC. Por fim, neste regime não há qualquer tipo de interferência de probabilidades ao longo da caminhada, que como veremos adiante, é um conceito presente nas caminhadas quânticas.

## 2.3 Caminhadas Quânticas por Modelo de Moeda

Nesta seção, iremos explicar os principais conceitos envolvidos na Caminhada Quântica por Modelo de Moeda (CQMM), assim como a apresentação de uma das notações utilizadas neste modelo. Como apresentado no capítulo anterior, este é um dos modelos de implementação mais utilizados na literatura, em especial em informação quântica. Entretanto, para discutir processos de transporte em redes, adotaremos nas seções subsequentes a construção de espalhamento, que para nossos propósitos é mais apropriado.

### 2.3.1 Estrutura Topológica da Rede Unidimensional

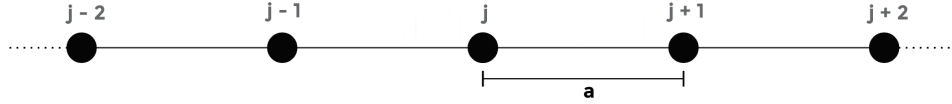


Figura 2.3: Ilustração de uma rede infinita unidimensional. Cada vértice da rede está ligado aos seus primeiros vizinhos por arestas de tamanho  $a$ .

A rede unidimensional discreta, é uma rede infinita formada por vértices que estão ligados aos seus primeiros vizinhos por uma aresta de tamanho  $a$ , como mostrado na Fig.2.3. Cada vértice está associado a uma coordenada discreta  $j$  e está ligado aos vértices vizinhos  $j + 1$  e  $j - 1$ . A coordenada cartesiana,  $x_{(v)}$ , de um vértice  $j$  é dada por

$$x_v = j a, \quad (2.9)$$

tal que  $a$  sempre será o mesmo entre os vértices de uma rede regular unidimensional discreta.

### 2.3.2 Estados de Base

Para uma Caminhada Quântica por Modelo de Moeda discreta e unidimensional, o caminhante quântico pode ser interpretado como um elétron de spin  $1/2$  que se propaga por uma rede unidimensional discreta de acordo com seu estado de spin [120, 208]. De maneira formal, podemos definir que um estado da CQMM discreta pertence ao espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$ , tal que

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_P, \quad (2.10)$$

onde  $\mathcal{H}_C$  é definido como espaço de moeda, e está associado ao grau de liberdade interno do caminhante com base dada por  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ . No caso do caminhante quântico de spin  $1/2$ , os estados que compõem esta base estão associados, respectivamente, aos estados de spin *up* e spin *down* e, são representados como

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$



de tal forma que estamos assumindo a representação mais comum, mas equivalente às outras representações de sistemas de dois níveis, isto é,  $|0\rangle \equiv |+\rangle \equiv |\uparrow\rangle$  e,  $|1\rangle \equiv |-\rangle \equiv |\downarrow\rangle$ . Vale notar que, pelo princípio da superposição [36], se dois estados pertencem a um espaço vetorial, então qualquer combinação linear entre esses estados também pertence a este espaço [36, 37].

O  $\mathcal{H}_P$  é o espaço das posições e, é associado ao grau de liberdade externo (posição do caminhante na rede) e sua base é dada por  $\mathcal{H}_P = \{\dots, |j-1\rangle, |j\rangle, |j+1\rangle, \dots\}$ , tal que  $j \in \mathbb{Z}$ . No contexto de física da matéria condensada [191], cada estado da base de  $\mathcal{H}_P$  está associado à posição de um vértice em uma rede regular unidimensional com parâmetro de rede  $a$ , como definido na subseção anterior.

### 2.3.3 Estado Inicial e Evolução Temporal

Um estado de uma CQMM no instante de tempo  $t$ , tal que  $t = n\tau$ , sendo  $\tau$  um tempo característico e  $n \in \mathbb{N}$ , pode ser descrito por

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} |\Psi_C\rangle \otimes |j\rangle, \quad (2.12)$$

tal que um estado geral de moeda  $|\Psi_C\rangle$  é dado por

$$|\Psi_C\rangle = a(j, t)|0\rangle + b(j, t)|1\rangle, \quad (2.13)$$

onde  $a(j, t)$  é a amplitude de probabilidade associada a um caminhante com estado de spin *up* no instante de tempo  $t$  e,  $b(j, t)$  é a amplitude de probabilidade associada a um caminhante com estado de spin *down* no mesmo instante de tempo.

Para haver conservação de probabilidade ao longo das CQ's, necessariamente temos que

$$\sum_{j=-\infty}^{+\infty} |a(j, t)|^2 + |b(j, t)|^2 = 1. \quad (2.14)$$

Dentro do contexto de informação e computação quântica, podemos definir um estado

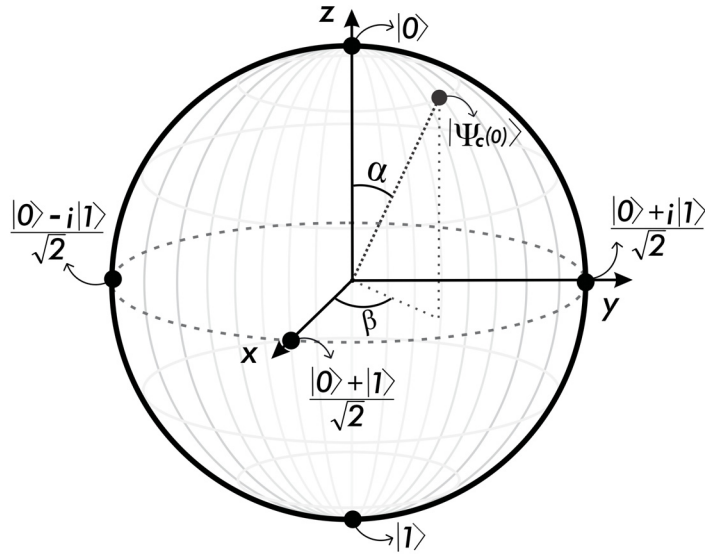


Figura 2.4: Representação de um estado genérico de moeda  $|\Psi_C(0)\rangle$  na esfera de Bloch e dos principais estados de moeda utilizados na literatura em  $t = 0$ . Os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  para cada ponto ilustrado na imagem estão descritos na Tab.2.1.

de moeda inicial,  $t = 0$ , tal que

$$\begin{aligned} |\Psi_C\rangle &= a(j, 0)|0\rangle + b(j, 0)|1\rangle, \\ &= \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)|0\rangle + e^{i\beta}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)|1\rangle, \end{aligned} \quad (2.15)$$

onde  $\alpha \in [0, \pi]$  e  $\beta \in [0, 2\pi]$ , como podemos visualizar na Fig. 2.4.

Nas áreas de informação quântica e computação quântica, é usual representar um estado de moeda, também conhecido como estado de um bit quântico, na esfera de Bloch [103, 209]. Na Fig.2.4 temos a representação de cinco estados de moeda diferentes, para  $t = 0$ , com diferentes valores de  $\alpha$  e  $\beta$ . Ao escolhermos diferentes ângulos para  $\alpha$  e  $\beta$  obtemos pontos distintos da superfície da esfera de Bloch. Na Tab.2.1 temos a representação de seis pontos da esfera de Bloch, com seus respectivos parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$ , utilizados amplamente como estados iniciais de moeda em uma CQ [33, 139, 209]. Para simplificar a representação de alguns estados de moeda, é comum utilizar uma notação [37, 209] associada à medida de estados de spin 1/2 em diferentes direções tal que

$$|+\hat{Z}\rangle = |0\rangle, \quad |-\hat{Z}\rangle = |1\rangle, \quad (2.16)$$

ou ainda

$$\begin{aligned} |+\hat{X}\rangle &= \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, & |-\hat{X}\rangle &= \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}, \\ |+\hat{Y}\rangle &= \frac{|0\rangle + i|1\rangle}{\sqrt{2}}, & |-\hat{Y}\rangle &= \frac{|0\rangle - i|1\rangle}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Por definição, temos que um estado do sistema no instante de tempo  $t$  é dado por

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}^t |\Psi(0)\rangle = \hat{U}^{n\tau} |\Psi(0)\rangle, \quad (2.18)$$

onde o operador unitário responsável pela evolução temporal da partícula na rede é dado por

$$\hat{U} = \hat{S}(\hat{C} \otimes \hat{I}), \quad (2.19)$$

tal que  $\hat{I}$  é operador identidade da posição do caminhante,  $\hat{C}$  é o chamado operador moeda, responsável por colocar o estado da partícula em superposição e, conseqüentemente, atribuir as características da dinâmica para o caminhante. Já  $\hat{S}$  é o operador de translação condicional [33], responsável por transladar o caminhante quântico na rede conforme o estado do grau de liberdade interno do mesmo.

$\alpha$	$\beta$	$\cos(\alpha/2)$	$e^{i\beta}\text{sen}(\alpha/2)$	$ \Psi_C(0)\rangle$
0	0	1	0	$ +\hat{Z}\rangle$
$\pi$	0	0	1	$ -\hat{Z}\rangle$
$\pi/2$	0	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$ +\hat{X}\rangle$
$\pi/2$	$\pi$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	$ -\hat{X}\rangle$
$\pi/2$	$\pi/2$	$1/\sqrt{2}$	$i/\sqrt{2}$	$ +\hat{Y}\rangle$
$\pi/2$	$-\pi/2$	$1/\sqrt{2}$	$-i/\sqrt{2}$	$ -\hat{Y}\rangle$

Tabela 2.1: Os valores dos parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  para os estados de moeda mais utilizados na literatura para  $t = 0$ . Vale notar que os valores na coluna de  $\cos(\alpha/2)$  são as amplitudes de probabilidade associada ao estado de spin *up* em um estado de moeda. Já os valores na coluna de  $e^{i\beta}\text{sen}(\alpha/2)$  são as amplitudes de probabilidade associadas ao estado de spin *down* em um estado de moeda.

Para uma CQMM unidimensional temos que o operador moeda,  $\hat{C}$ , pode ser representado por uma matriz pertencente ao  $SU(2)$  e age sob o estado de moeda do caminhante, colocando-o numa nova superposição entre os estados de base. No caso do sistema de dois

níveis de spin  $1/2$ , é dado por:

$$\hat{C} = c_{00}|0\rangle\langle 0| + c_{01}|0\rangle\langle 1| + c_{10}|1\rangle\langle 0| + c_{11}|1\rangle\langle 1|, \quad (2.20)$$

tal que na representação matricial é descrito por

$$\hat{C} = \begin{pmatrix} c_{00} & c_{01} \\ c_{10} & c_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{q} & \sqrt{1-q}e^{i\theta} \\ \sqrt{1-q}e^{i\phi} & -\sqrt{q}e^{i(\theta+\phi)} \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

onde  $0 \leq q \leq 1$ ,  $0 \leq \theta \leq \pi$  e  $0 \leq \phi \leq 2\pi$ . O parâmetro  $q$  nos diz se o operador moeda é balanceado (justo). Para  $q = 1/2$ , por exemplo, a ação do operador moeda em um estado de moeda do caminhante gera uma superposição igualitária de amplitudes de spin *up* e *down*, portanto, é considerada justa ou balanceada. Os parâmetros  $\theta$  e  $\phi$  são associados a diferenças relativas de fase entre os estados de spin *up* e *down*. Dependendo do tipo de enfoque a ser dado na CQ, pode ser utilizado mais de um tipo de moeda na caminhada, inclusive vários tipos de moedas diferentes ao longo do tempo e/ou das posições da rede [94, 97, 210].

Para ilustrar de maneira mais clara, tomemos o exemplo de duas moedas quânticas amplamente utilizadas: a Hadamard,  $\hat{H}$ , e Fourier,  $\hat{F}$  (ou Kempe). Ambas possuem  $q = 1/2$ , sendo consideradas moedas balanceadas, porém, enquanto para a moeda Hadamard  $\theta = \phi = 0$ , isto é, não há diferença de fase relativa entre os estados de spin, por outro lado, na moeda Fourier,  $\hat{F}$ , temos que  $\theta = \phi = \frac{\pi}{2}$ . Elas são representadas matricialmente como:

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{F} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.22)$$

tal que a moeda Hadamard, também pode ser nomeada de Transformada Discreta de Fourier (TDF) para  $N = 2$ . A moeda Fourier pode ser entendida como um divisor de feixe em experimentos de ópticos [211], já que impõe uma diferença de fase de  $\pi/2$  entre estados relacionados à direção de propagação do feixe [208, 212].

O operador identidade,  $\hat{I}$ , é dado por

$$\hat{I} = \sum_j |j\rangle\langle j|, \quad (2.23)$$

e o operador de translação condicional,  $\hat{S}$ , é responsável por fazer a translação do caminhante ao longo da caminhada condicionado pelo seu estado interno. Formalmente é escrito como:

$$\hat{S} = |0\rangle\langle 0| \otimes \sum_j |j+1\rangle\langle j| + |1\rangle\langle 1| \otimes \sum_j |j-1\rangle\langle j|, \quad (2.24)$$

tal que, se o estado de moeda do caminhante é *spin up* na posição  $|j\rangle$ , então o caminhante é transladado para à direita, para posição  $|j+1\rangle$ . Por outro lado, se o estado de moeda do caminhante é *down*, ele é transladado para à esquerda, para posição  $|j-1\rangle$ .

Para exemplificar a evolução temporal de um estado de uma CQ, consideremos a ação de  $\hat{U}$  em um estado inicial  $|\Psi(0)\rangle$  tal que de acordo com a Eq.(2.18), temos que

$$|\Psi(1)\rangle = \hat{U}|\Psi(0)\rangle = \hat{S}(\hat{C} \otimes \hat{I})|\Psi(0)\rangle, \quad (2.25)$$

tal que o estado inicial da CQ será dada pelo estado  $|\Psi_0^A\rangle$  definido como

$$|\Psi(0)\rangle = |\Psi_0^A\rangle = |+\hat{Z}\rangle \otimes |0\rangle, \quad (2.26)$$

isto é, um estado de moeda de *spin up* no vértice  $j = 0$ , vide Eq.(2.16). Considerando uma caminhada quântica com a mesma moeda quântica para todos os instantes de tempo, e, que  $\hat{C} = \hat{H}$ , conforme as Eqs.(2.22), (2.23) e (2.25), teremos que

$$\begin{aligned} |\Psi(1)\rangle &= \hat{S}(\hat{H} \otimes \hat{I})|\Psi(0)\rangle \\ &= \hat{S} \left[ \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \otimes \sum_j |j\rangle\langle j| \right) |\Psi_0^A\rangle \right], \\ &= \hat{S} \left[ \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \otimes |0\rangle\langle 0| \right) \left( |+\hat{Z}\rangle \otimes |0\rangle \right) \right], \end{aligned} \quad (2.27)$$

e, como mencionado anteriormente, a ação do operador moeda, neste caso  $\hat{C} = \hat{H}$ , é sempre sob o estado de moeda e, o operador  $\hat{I}$  sob o estado de posição. Além disso, uma vez que o estado inicial só tem amplitudes de probabilidades em  $j = 0$ , neste este caso, o operador  $\hat{I}$ , vide Eq.(2.23) se resume à  $|0\rangle\langle 0|$ . Considerando as Eqs.(2.11) e (2.16), temos

então

$$|\Psi(1)\rangle = \hat{S} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes |0\rangle\langle 0|0\rangle \right), \quad (2.28)$$

que após as devidas operações nos leva a

$$|\Psi(1)\rangle = \hat{S} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes |0\rangle \right) = \hat{S} \left( \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes |0\rangle \right) = \hat{S} \left( |+\hat{X}\rangle \otimes |0\rangle \right), \quad (2.29)$$

e, considerando a Eq.(2.28), podemos notar como a ação do operador  $\hat{H}$  coloca o estado de moeda inicial do caminhante, neste caso spin *up*, em um estado de superposição de estados de spin *up* e spin *down*, vide Eqs.(2.16) e (2.17). Agora podemos aplicar o operador de translação condicional,  $\hat{S}$ , vide Eq.(2.24)

$$|\Psi(1)\rangle = \left[ \left( |0\rangle\langle 0| \otimes \sum_j |j+1\rangle\langle j| + |1\rangle\langle 1| \otimes \sum_j |j-1\rangle\langle j| \right) \left( |+\hat{X}\rangle \otimes |0\rangle \right) \right], \quad (2.30)$$

uma vez que  $|+\hat{X}\rangle$  é dado pela Eq.(2.17) e, o estado inicial do sistema é definido apenas em uma posição, logo

$$\begin{aligned} |\Psi(1)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \left( |0\rangle\langle 0|0\rangle \otimes |1\rangle\langle 0|0\rangle + |1\rangle\langle 1|0\rangle \otimes | -1\rangle\langle 0|0\rangle \right) + \right. \\ &\quad \left. \left( |0\rangle\langle 0|1\rangle \otimes |1\rangle\langle 0|0\rangle + |1\rangle\langle 1|1\rangle \otimes | -1\rangle\langle 0|0\rangle \right) \right], \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |+\hat{Z}\rangle \otimes |1\rangle + |-\hat{Z}\rangle \otimes | -1\rangle \right), \end{aligned} \quad (2.31)$$

ou seja, para uma CQ Hadamard com estado inicial dado por  $|\Psi_0^A\rangle$ , após um instante de tempo, o estado do sistema será expresso pela superposição de um estado de spin *up* na posição  $j = 1$  e um estado de spin *down* em  $j = -1$ , ambos com amplitude de probabilidade de  $1/\sqrt{2}$ .

É importante fazermos uma breve discussão sobre a evolução unitária de um dado estado de uma caminhada quântica. Acima, vimos que para CQMM a evolução unitária de um dado estado de uma CQ está diretamente associada com o(s) operador(es) moeda(s)

e com o estado do sistema. Por fins didáticos, escolhemos um sistema com estado inicial definido apenas na posição  $j = 0$  e sem superposição de estados de moedas. Entretanto, é importante notar que o estado inicial de um CQ é de livre escolha, desde que obedeça às relações de unitariedade e simetria do sistema. Além disso, conceitualmente, após as exemplificações operacionais acima, é nítido como o caminhante quântico é completamente diferente do caminhante clássico. Enquanto em uma CAC com moeda clássica justa o caminhante é transladado para uma certa posição conforme o valor obtido no sorteio da moeda, o caminhante quântico é transladado conforme o princípio de superposição, isto é, possui amplitudes de probabilidades associados a ambos os vértices vizinhos após um passo.

### 2.3.4 Probabilidades e Deslocamento Quadrático Médio

A probabilidade de encontrar o caminhante quântico em um vértice  $j$ , em um instante de tempo  $t$ , é dado por

$$P(j, t) = \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} |a(j, t)|^2 + |b(j, t)|^2, \quad (2.32)$$

isto é, a soma dos módulos ao quadrado das amplitudes de probabilidade dos estados de spin *up/down* associadas a um vértice  $j$ , vide Eqs.(2.12) e (2.13). É importante notar que o caminhante quântico, apesar de receber este nome em alusão ao caminhante clássico abordado na seção anterior, possui uma natureza ondulatória. Desta forma, é possível ter interferências construtivas e destrutivas das amplitudes de probabilidade ao longo de uma CQ e, conseqüentemente, a probabilidade do caminhante ao longo da rede também sofrerá mudanças [33].

O Deslocamento Quadrático Médio do caminhante quântico pela rede infinita unidimensional discreta é dado por

$$D_x = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} P(j, t) x_v^2(j) - \left( \sum_{j=-\infty}^{+\infty} P(j, t) x_v(j) \right)^2, \quad (2.33)$$

tal que  $x_v$  é a função dada pela Eq.(2.9) e  $P(j, t)$  pela Eq.(2.32). Conseqüentemente, a

dispersão,  $s_x$ , é dada por

$$s_x = \sqrt{D_x}. \quad (2.34)$$

Nas Figs.2.5 e 2.6 temos o comportamento da densidade de probabilidade de uma partícula em caminhadas quânticas Hadamard unidimensionais após cem instantes de tempo. Consideramos três estados iniciais diferentes, associados aos polos e um ponto no equador da esfera de Bloch:  $|\Psi_0^A\rangle = |+\hat{Z}\rangle \otimes |0\rangle$ , associado ao polo norte da esfera; o estado  $|\Psi_0^B\rangle = |-\hat{Z}\rangle \otimes |0\rangle$  associado ao polo sul da esfera; e o estado  $|\Psi_0^C\rangle = |+\hat{Y}\rangle \otimes |0\rangle$  associado a um ponto no equador da esfera. Fica muito claro que para uma CQ Hadamard unidimensional, se utilizarmos estados iniciais associados aos polos da esfera de Bloch, teremos caminhadas tendenciosas para direita, para o caso do estado inicial  $|\Psi_0^A\rangle$ , e para a esquerda quando o estado inicial é dado por  $|\Psi_0^B\rangle$ . Em contrapartida, se nosso estado inicial é dado por  $|\Psi_0^C\rangle$ , teremos uma caminhada justa, não tendenciosa, como mostrado na Fig.2.6.

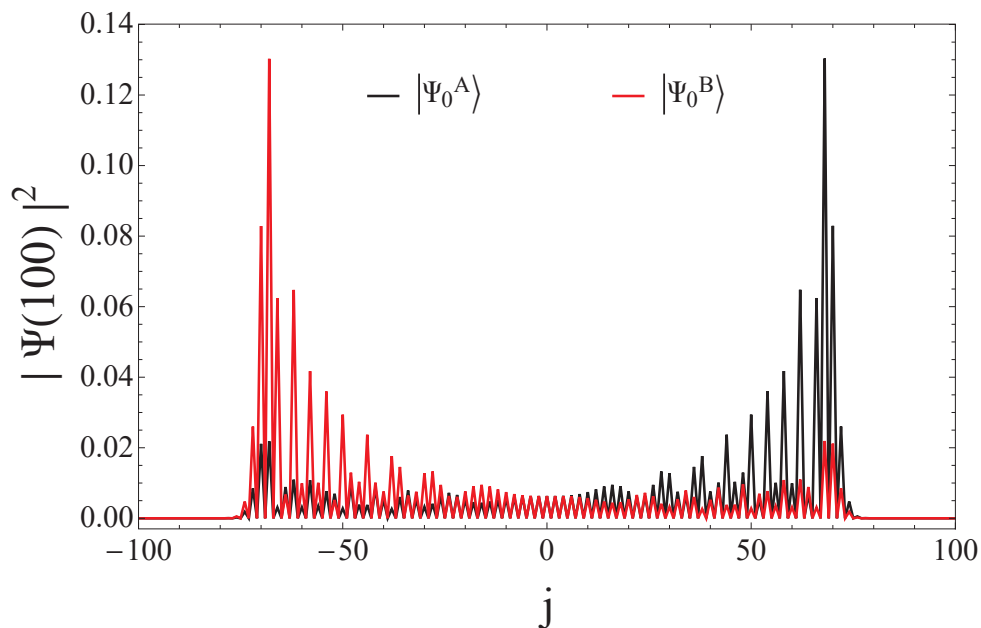


Figura 2.5: Densidade de probabilidade para duas caminhadas quânticas Hadamard com estados iniciais diferentes: a linha preta representa uma CQ de cem passos com estado inicial  $|\Psi_0^A\rangle$ , já a linha vermelha representa uma CQ de cem passos com estado inicial  $|\Psi_0^B\rangle$ .

É muito importante notar que, diferente das CAC's, onde as distribuições de probabilidade ao longo das posições é dada por uma curva Gaussiana, para caminhada quântica com estado inicial não tendencioso a distribuição de probabilidades ao longo das posições será dada por uma curva bimodal [33]. Este perfil de distribuições de probabilidade está



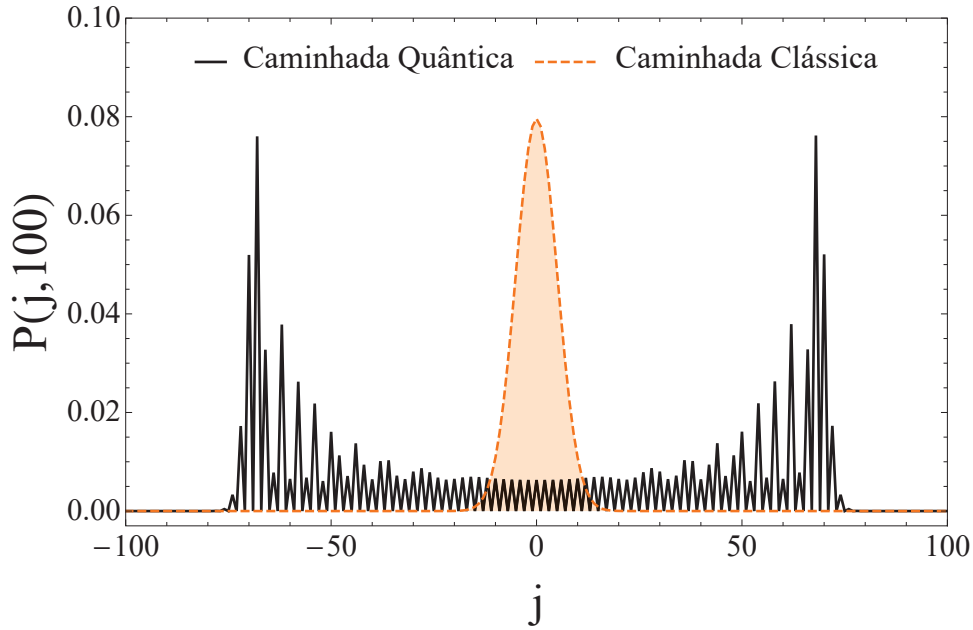


Figura 2.6: Densidade de probabilidade para uma caminhada quântica Hadamard, com o estado inicial não tendencioso  $|\Psi_0^C\rangle$ , em comparação com a distribuição de probabilidade para uma caminhada clássica discreta imparcial ( $p = q = 1/2$ ) e com comprimento de passo constante  $l = 1$  ao longo da CAC. Ambas as caminhadas possuem cem passos.

diretamente relacionado com os fenômenos de interferência entre as amplitudes de probabilidade ao longo da dinâmica. Temos, portanto, interferências destrutivas de amplitude de probabilidade próximo à origem e, interferências construtivas em pontos próximos à  $\pm t/\sqrt{2}$  [84].

O deslocamento quadrático médio de uma CQ unidimensional é quadraticamente superior ao DQM de caminhadas clássicas [33]. Enquanto na caminhada clássica temos que  $D_x \sim t$ , em uma caminhada quântica temos que  $D_x \sim t^2$ , como mostrado na Fig.2.7. Este comportamento, conhecido como superdifusivo (no presente caso balístico), em determinadas aplicações traz muitas vantagens em relação à caminhada clássica, uma delas é a utilização de caminhadas quânticas para algoritmos de busca [50, 52, 55].

## 2.4 Caminhada Quântica por Modelo de Espalhamento

A Caminhada Quântica por Modelo de Espalhamento (CQME) difere da Caminhada Quântica por Modelo de Moeda conceitualmente e também no formalismo. Apesar de serem unitariamente equivalentes, ou seja, podem ser formalmente mapeados um no outro em qualquer topologia de rede e para qualquer tipo de moeda [40, 41]. Nesta seção iremos definir os principais aspectos das CQME's em uma rede unidimensional discreta,

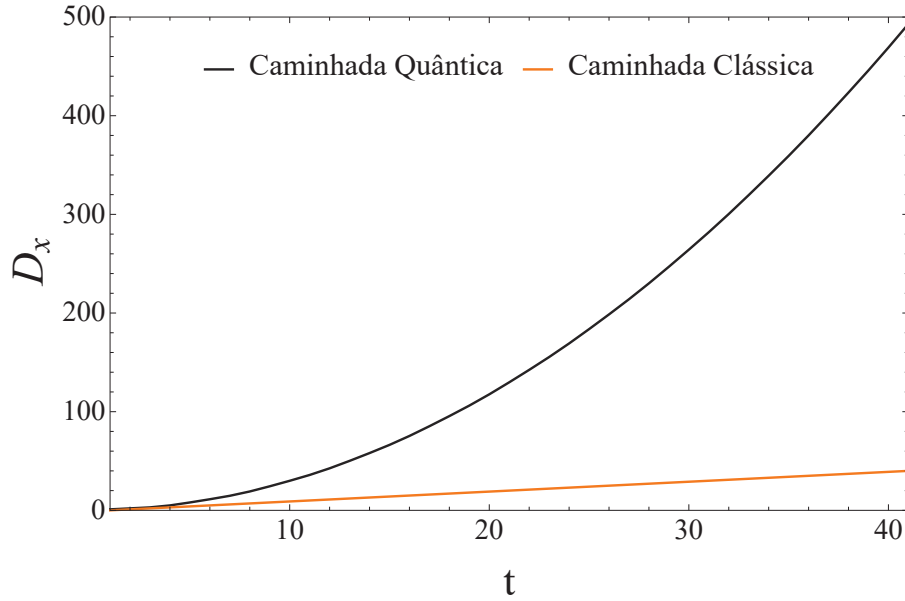


Figura 2.7: Comparativo entre o deslocamento quadrático médio,  $D_x$ , em função do tempo para uma caminhada quântica Hadamard unidimensional, com estado inicial  $|\Psi_0^C\rangle$ , em comparação ao de uma CAC discreta imparcial ( $p = q = 1/2$ ) com comprimento de passo constante  $l = 1$ .

com mesma estrutura topológica da rede apresentada na seção anterior e, desta forma, apresentar as principais diferenças entre os dois modelos.

### 2.4.1 Estados de Base

Primeiramente, consideremos uma rede unidimensional discreta infinita com estrutura topológica tal que todos os vértices da rede estão associados a uma coordenada discreta  $j$ , e cartesiana dada pela Eq.(2.9), onde os vértices estão ligados aos seus primeiros vizinhos por arestas de tamanho  $a$ , como ilustrado na Fig.2.3.

A estrutura do espaço de Hilbert de uma Caminhada Quântica por Modelo de Espalhamento é o mesmo de uma Caminhada Quântica por Modelo de Moeda, representada pela Eq.(2.10). Desta forma, em uma CQME temos que um estado do caminhante quântico é dado pelo produto tensorial entre a direção de propagação  $\sigma$  do caminhante e o vértice destino  $j$  deste, isto é

$$|\sigma, j\rangle = |\sigma\rangle \otimes |j\rangle, \quad (2.35)$$

tal que  $\sigma = \pm 1 \equiv \pm$ , pertencem ao espaço de representação de "direção de movimento" do

caminhante, onde

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.36)$$

e os estados de base de  $|j\rangle$  dados por  $\{\dots, |j-1\rangle, |j\rangle, |j+1\rangle, \dots\}$  tal que  $j \in \mathbb{Z}$ , são pertencentes ao espaço das posições. Aqui vale notar que, no formalismo de CQME's, os caminhantes quânticos se encontram nas arestas da rede e, portanto,  $|\sigma, j\rangle$  representa o estado de um caminhante indo em direção ao vértice  $j$  pela direção de propagação  $\sigma$ , como representado na Fig.2.8.

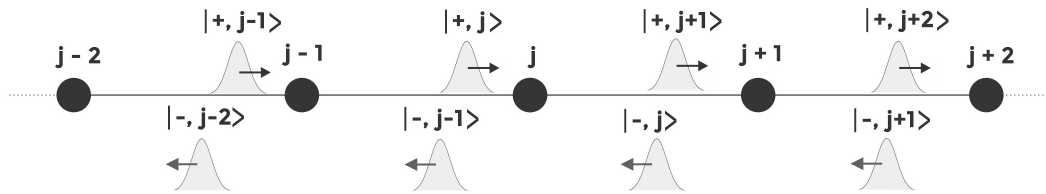


Figura 2.8: Ilustração de alguns estados de base do sistema para uma CQME unidimensional discreta, vide Eq.(2.35). Perceba que, em uma CQME, os caminhantes quânticos estão definidos nas arestas da rede.

Os estados de base seguirão as seguintes relações de ortonormalidade e completude, dadas, respectivamente, por

$$\langle \sigma, j | \sigma', j' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad \hat{1} = \sum_j \sum_{\sigma=\pm 1} |\sigma, j\rangle \langle \sigma, j|. \quad (2.37)$$

## 2.4.2 Evolução Temporal e Matriz Espalhamento

A caminhada quântica de modelo de moeda faz uma analogia com a caminhada clássica em seu operador de evolução temporal, como visto anteriormente. A caminhada quântica de modelo de espalhamento, por outro lado, faz uma analogia com processos interferométricos e de natureza descrita pela teoria quântica do espalhamento [131, 132]. Desta maneira, o que na teoria de espalhamento quântico é tratado como alvo espalhador [37], para nós, será um vértice arbitrário da rede e, neste caso, os vértices por si só se comportam como agentes do processo de evolução temporal, como veremos a seguir.

Um estado de uma Caminhada Quântica por Modelo de Espalhamento em um instante

de tempo  $t$ , tal que  $t = n\tau$  com  $n \in \mathbb{N}$  e  $\tau$  é um tempo característico, é representada por

$$|\psi_t\rangle = \sum_j \psi_+(j, t)|+, j\rangle + \psi_-(j, t)|-, j\rangle, \quad (2.38)$$

onde  $\psi_+(j, t)$  é a amplitude de probabilidade associada a um caminhante se propagando pela direção  $+$  em direção ao vértice  $j$  no instante de tempo  $t$  e,  $\psi_-(j, t)$  é a amplitude de probabilidade associada a um caminhante se propagando pela direção  $-$  em direção ao vértice  $j$  no mesmo instante de tempo. Note que  $\psi_+(j, t)$  e a grandeza  $a(j, t)$  apresentada na seção anterior, são equivalentes assim como  $\psi_-(j, t)$  e  $b(j, t)$ . Porém, vale notar que no modelo apresentado nesta seção os caminhantes simbolicamente se encontram nas arestas da rede, enquanto para CQMM's se encontram nos vértices, como mostrado na Fig.2.8.

Podemos definir o estado  $|\psi_t\rangle$  de uma Caminhada Quântica por Modelo de Espalhamento como

$$|\psi_t\rangle = \hat{U}^t |\psi_0\rangle, \quad (2.39)$$

isto é, considerando um certo estado inicial do sistema  $|\psi_0\rangle$ , após  $n$  passos da caminhada o sistema será descrito pelo estado  $|\psi_t\rangle$ . Desta forma, cada passo de uma Caminhada Quântica por Modelo de Espalhamento é descrito através da ação operador  $\hat{U}$  sob um dado estado do sistema.

Formalmente, temos que para uma CQME unidimensional discreta, a ação do operador evolução temporal  $\hat{U}$  sob um estado de base  $|\sigma, j\rangle$  é dado por

$$\begin{aligned} \hat{U}|\sigma, j\rangle &= \sum_{\sigma'} \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j)} |\sigma', f(\sigma', j)\rangle, \\ &= \Gamma_{++}^{(j)} |+, j+1\rangle + \Gamma_{-+}^{(j)} |-, j-1\rangle + \Gamma_{--}^{(j)} |-, j-1\rangle + \Gamma_{+-}^{(j)} |+, j+1\rangle, \end{aligned} \quad (2.40)$$

onde  $f(\sigma', j)$  é a chamada função topológica e está diretamente relacionada com a translação do caminhante quântico conforme o valor do estado de direção de propagação  $\sigma'$ . É importante notar que, as funções topológicas são obtidas de maneira analítica através da análise de uma dada estrutura de rede e seus respectivos estados de base de direção de propagação. Desta forma, tanto para redes regulares como redes com "defeitos" ou

vacâncias, a princípio, tendo conhecimento do número de ordenação dos vértices e das estruturas das ligações entre eles, é possível descrever a translação de um caminhante pela rede por meio das funções topológicas. No caso unidimensional, temos que os valores que a função topológica pode assumir são dados por

$$f(\sigma', j) = \begin{cases} j + 1, & \text{se } \sigma' = +, \\ j - 1, & \text{se } \sigma' = -. \end{cases} \quad (2.41)$$

Além disso, na Eq.(2.40)  $\Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j)}$  é o coeficiente de espalhamento associado a um estado no qual um caminhante proveniente da direção  $\sigma$  toma a direção  $\sigma'$  após sofrer o processo de espalhamento no vértice  $j$ . Devido a unitariedade relacionada a

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{1}, \quad (2.42)$$

necessariamente, teremos que

$$\sum_{\sigma} \Gamma_{\sigma\sigma'}^{(j)} \Gamma_{\sigma\sigma''}^{*(j)} = \sum_{\sigma} \Gamma_{\sigma'\sigma}^{*(j)} \Gamma_{\sigma''\sigma}^{(j)} = \delta_{\sigma'\sigma''}, \quad (2.43)$$

tal que podemos representar todos os coeficientes de espalhamento associados a um vértice  $j$  pela matriz espalhamento  $\hat{\Gamma}^{(j)}$

$$\hat{\Gamma}^{(j)} = \begin{pmatrix} \Gamma_{++}^{(j)} & \Gamma_{+-}^{(j)} \\ \Gamma_{-+}^{(j)} & \Gamma_{--}^{(j)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{++}^{(j)} & r_{+-}^{(j)} \\ r_{-+}^{(j)} & t_{--}^{(j)} \end{pmatrix}, \quad (2.44)$$

tal que da Eq.(2.40), se  $\sigma' = \sigma$  será um coeficiente associados a um processo de transmissão e, se  $\sigma' = -\sigma$  será um coeficiente associado a um processo de reflexão. Portanto, podemos reescrever a Eq.(2.40) tal que

$$\hat{U}|\sigma, j\rangle = t_{\sigma\sigma}^{(j)}|\sigma, j + \sigma\rangle + r_{-\sigma\sigma}^{(j)}|-\sigma, j - \sigma\rangle, \quad (2.45)$$

lembrando que na subseção anterior definimos que  $\sigma = \pm 1 \equiv \pm$ . Desta forma, temos que  $|t_{\sigma\sigma}^{(j)}|^2$  é a probabilidade associada a um processo de transmissão de um caminhante que incidiu no vértice  $j$  pela direção  $\sigma$  e, após o espalhamento foi transmitido na mesma direção  $\sigma$ . Por outro lado, temos que  $|r_{\sigma'\sigma}^{(j)}|^2$  nos dá a probabilidade de um processo de

reflexão no qual um caminhante incidente pela direção  $\sigma$  foi refletido e, portanto,  $\sigma' = -\sigma$ . Devido às condições de unitariedade da dinâmica, teremos que

$$\sum_{\sigma} |t_{\sigma\sigma}^{(j)}|^2 + |r_{-\sigma\sigma}^{(j)}|^2 = 1. \quad (2.46)$$

Aqui cabe uma discussão sobre a principal diferença conceitual entre uma Caminhada Quântica por Modelo de Espalhamento e uma Caminhada Quântica por Modelo de Moeda. Para uma CQMM, modelo abordado na seção anterior, a evolução unitária do caminhante quântico pela rede é proposta de maneira análoga a uma CAC, isto é, a translação do caminhante quântico está diretamente atrelada ao seu estado de moeda e ao(s) operador(es)  $\hat{C}$  utilizado(s) na caminhada. Além disso, em tal modelo os caminhantes possuem posição definida no(s) vértice(s) da rede e, não há, em um primeiro momento pelo menos, uma motivação fenomenológica em tal modelo. Por outro lado, em uma CQME nós temos uma motivação fenomenológica de teoria quântica do espalhamento, trazendo, portanto, outra interpretação para a evolução do caminhante na rede. Desta forma, a ação de  $\hat{U}$  sob um estado de base do sistema está diretamente associada a um processo de espalhamento. Portanto, a própria ideia de associar probabilidades a um dado processo, seja de reflexão ou transmissão, emerge naturalmente. Desta forma, acreditamos que ao adotarmos o formalismo de CQME's neste trabalho, como veremos nos capítulos seguintes, nos dá a motivação fenomenológica necessária para abordar tópicos como comportamento de condutividade em nanomateriais, bandas de energia em redes bidimensionais, etc.

De maneira análoga ao operador  $\hat{C}$ , a matriz espalhamento  $\hat{\Gamma}^{(j)}$ , vide Eq.(2.44), pode ser parametrizada de acordo com matriz geradora do  $SU(2)$  [33, 202], isto é,

$$\hat{\Gamma}_{(\theta, \phi, \Phi)}^{(j)} = \begin{pmatrix} e^{i(\phi+\Phi)} \cos \theta & e^{i(\Phi-\phi)} \sin \theta \\ e^{-i(\Phi-\phi)} \sin \theta & -e^{-i(\phi+\Phi)} \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (2.47)$$

tal que  $-\pi \geq \phi, \Phi \geq \pi$  e  $0 \geq \theta \geq \pi/2$ . Tais parâmetros nos permitem controlar a parcialidade dos processos de espalhamento, ex: CQME na qual as probabilidades de transmissão (reflexão) são maiores que as probabilidades de reflexão (transmissão), e ainda adicionarmos uma diferença de fase entre os estados transmitidos e refletidos. Além disso, nos permite descrever com grande precisão numérica uma matriz espalhamento conforme a especificidade do sistema a ser estudado. A matriz espalhamento tem um

papel muito semelhante ao operador  $\hat{C}$  na CQMM, sendo responsável por impor ao estado incidente as características do sistema e, além disso, é responsável por manter os estados em superposição ao longo da caminhada de acordo com o espalhamento do caminhante a cada instante de tempo.

Se considerarmos  $\theta = \pi/4$ ,  $\phi = \Phi = 0$ , na Eq.(2.47), teremos então que

$$\hat{\Gamma}_{(\frac{\pi}{4}, 0, 0)}^{(j)} = \begin{pmatrix} \cos(\pi/4) & \sin(\pi/4) \\ \sin(\pi/4) & -\cos(\pi/4) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.48)$$

ou seja,  $\hat{\Gamma}_{(\frac{\pi}{4}, 0, 0)}^{(j)} \equiv \hat{H}$ , vide Eq.(2.22). Desta forma, conforme o formalismo de CQME's, iremos definir que

$$\hat{\Gamma}_H^{(j)} = \begin{pmatrix} t_{H++}^{(j)} & r_{H+-}^{(j)} \\ r_{H-+}^{(j)} & t_{H--}^{(j)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.49)$$

tal que  $\hat{\Gamma}_H^{(j)}$  é matriz de espalhamento Hadamard com coeficientes de reflexão e transmissão representados respectivamente por  $r_{H-\sigma\sigma}$  e  $t_{H\sigma\sigma}$ . Vale notar que a matriz espalhamento  $\hat{\Gamma}_H^{(j)}$  impõem uma imparcialidade entre os fenômenos de reflexão e transmissão na rede, isto é,  $|r_{H-\sigma\sigma}|^2 = |t_{H\sigma\sigma}|^2 = 1/2$ , ou seja, o caminhante não possui nenhuma direção ou natureza de processo preferencial ao ser espalhado pelo vértice  $j$ .

Uma vez que definimos operacionalmente e conceitualmente a ação de  $\hat{U}$  nos estados de base de uma CQME unidimensional discreta, temos então que o estado do sistema em instante de tempo  $t + 1$  é dado por

$$\begin{aligned} |\psi_{t+1}\rangle &= \hat{U}|\psi_t\rangle, \\ &= \sum_j \psi_+(j, t) \left( t_{++}^{(j)}|+, j+1\rangle + r_{-+}^{(j)}|-, j-1\rangle \right) + \\ &\quad \sum_j \psi_-(j, t) \left( t_{--}^{(j)}|-, j-1\rangle + r_{+-}^{(j)}|+, j+1\rangle \right), \end{aligned} \quad (2.50)$$

de tal forma que, se olharmos atentamente para a amplitude de probabilidade  $\psi_+(j, t)$ , veremos que é possível decompô-la em componentes tal que

$$\psi_+(j, t) = t_{++}^{(j-1)}\psi_+(j-1, t-1) + r_{+-}^{(j-1)}\psi_-(j-1, t-1), \quad (2.51)$$

isto é, composta de um termo associado ao estado de transmissão (caso a partícula seja proveniente de  $j - 1$  em  $t - 1$ ) e, de um termo associado à reflexão (caso a partícula seja proveniente de  $j$  em  $t - 1$ ). De maneira semelhante temos que amplitude de probabilidade  $\psi_-(j, t)$  pode ser descrita como

$$\psi_-(j, t) = t_{--}^{(j+1)} \psi_-(j + 1, t - 1) + r_{-+}^{(j+1)} \psi_+(j + 1, t - 1), \quad (2.52)$$

isto é, composta de um termo associado ao estado de transmissão (caso a partícula seja proveniente de  $j + 1$  em  $t - 1$ ) e, de um termo associado à reflexão (caso a partícula seja proveniente de  $j$  em  $t - 1$ ). De maneira mais sucinta, considerando que

$$\psi_+(j, t) = \langle +, j | \psi_t \rangle, \quad \psi_-(j, t) = \langle -, j | \psi_t \rangle, \quad (2.53)$$

então podemos sintetizar as Eqs. (2.51) e (2.52) como

$$\psi_\sigma(j, t) = t_{\sigma\sigma}^{(j-\sigma)} \psi_\sigma(j - \sigma, t - 1) + r_{\sigma-\sigma}^{(j-\sigma)} \psi_{-\sigma}(j - \sigma, t - 1), \quad (2.54)$$

sendo esta a relação de recorrência para as amplitudes de probabilidade de uma CQME unidimensional.

### 2.4.3 Probabilidades e Deslocamento Quadrático Médio

A probabilidade de encontrar um caminhante quântico indo em direção ao vértice  $j$ , em um instante de tempo  $t$  e, o Deslocamento Quadrático Médio do caminhante quântico pela rede infinita unidimensional discreta, são dados, respectivamente, por

$$p(j, t) = \sum_{\sigma} |\langle \sigma, j | \psi_t \rangle|^2 = |\psi_+(j, t)|^2 + |\psi_-(j, t)|^2, \quad (2.55)$$

$$D_x = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} p(j, t) x_v^2(j) - \left( \sum_{j=-\infty}^{+\infty} p(j, t) x_v(j) \right)^2, \quad (2.56)$$

tal que ambas as grandezas são equivalentes, respectivamente, à  $P(j, t)$  e  $s_x$  para uma CQMM, vide Eqs.(2.32) e (2.34), porém, as devidas ressalvas conceituais de cada modelo devem ser mantidas.



### 2.4.4 Um exemplo de CQME

Para exemplificar um passo de um CQME unidimensional discreta, consideremos um estado inicial  $|\psi_0\rangle$  dado por

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+, j\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|-, j\rangle, \quad (2.57)$$

equivalente ao estado inicial  $|\Psi_0^C\rangle$  abordado na seção anterior. Além disso, iremos considerar que

$$\hat{\Gamma}^{(j)} = \hat{\Gamma}_H^{(j)}, \quad (2.58)$$

isto é, todos os vértices da rede estão associados à mesma matriz de espalhamento  $\hat{\Gamma}_H^{(j)}$ , vide Eq.(2.49).

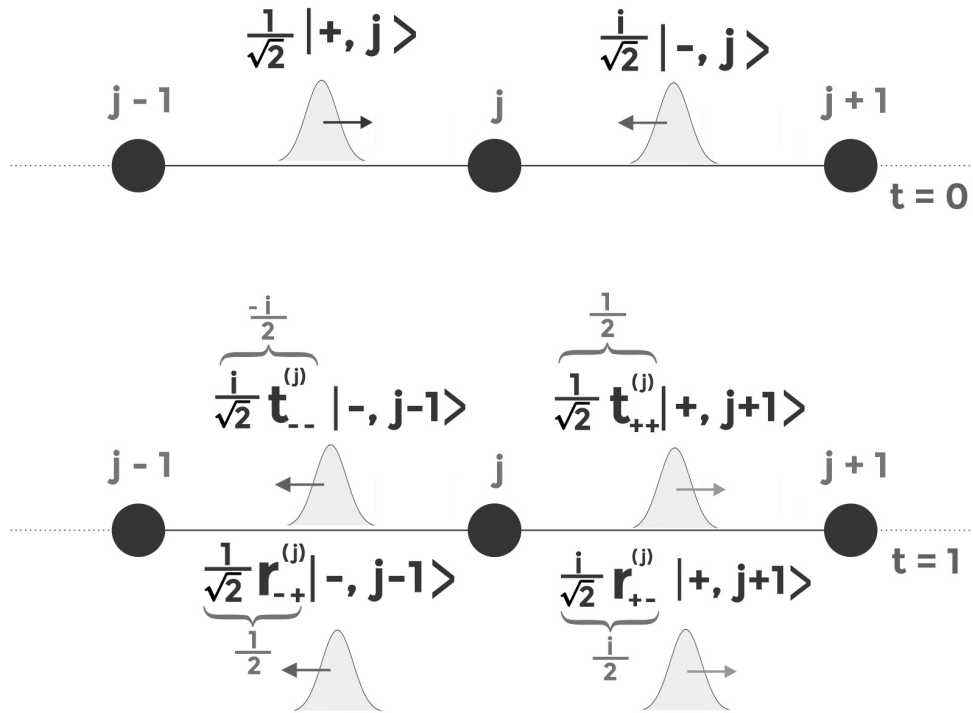


Figura 2.9: Na imagem superior,  $t = 0$ , temos a representação dos dois estados incidentes no vértice  $j$  por duas direções distintas, pelo lado direito,  $\sigma = +$  e, pelo lado esquerdo,  $\sigma = -$ , com amplitude de probabilidade de  $1/\sqrt{2}$  e  $i/\sqrt{2}$ , respectivamente (vide Eq.(2.57)). Na imagem inferior, temos a ilustração do sistema para  $t = 1$  da CQME Hadamard, vide Eqs.(2.59), (2.61) e (2.64). Note que os colchetes em cinza representam os resultados das multiplicações das amplitudes de espalhamento em  $t = 0$  e o respectivo coeficiente de espalhamento. Note também que, para  $t = 1$ , a probabilidade de um caminhante estar se dirigindo rumo ao vértice  $j$  é nula,  $1/2$  para  $j + 1$  e  $1/2$  para  $j - 1$ , vide Eq.(2.55).

Diretamente da Eq.(2.39), teremos então que o estado do sistema de uma CQME Hadamard, para  $t = 1$ , com estado inicial dado pela Eq.(2.57), será dado por

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \hat{U}|\psi_0\rangle, \\ &= \psi_+(j, 0) \left( t_{H^{++}}^{(j)}|+, j+1\rangle + r_{H^{-+}}^{(j)}|-, j-1\rangle \right) + \\ &\quad \psi_-(j, 0) \left( t_{H^{--}}^{(j)}|-, j-1\rangle + r_{H^{+-}}^{(j)}|+, j+1\rangle \right), \end{aligned} \quad (2.59)$$

como definido na Eq.(2.57), temos que

$$\psi_+(j, 0) = \langle +, j | \psi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \psi_-(j, 0) = \langle -, j | \psi_0 \rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}, \quad (2.60)$$

e, portanto, a Eq.(2.59) pode ser descrita como

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( t_{H^{++}}^{(j)}|+, j+1\rangle + r_{H^{-+}}^{(j)}|-, j-1\rangle \right) + \\ &\quad \frac{i}{\sqrt{2}} \left( t_{H^{--}}^{(j)}|-, j-1\rangle + r_{H^{+-}}^{(j)}|+, j+1\rangle \right). \end{aligned} \quad (2.61)$$

Substituindo os valores dos coeficientes de espalhamento dados pela Eq.(2.49) na Eq.(2.61), temos então que

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{1}{\sqrt{2}}|+, j+1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-, j-1\rangle \right) + \\ &\quad \frac{i}{\sqrt{2}} \left( -\frac{1}{\sqrt{2}}|-, j-1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|+, j+1\rangle \right), \end{aligned} \quad (2.62)$$

logo,

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{2} \left( |+, j+1\rangle + |-, j-1\rangle \right) + \frac{i}{2} \left( |+, j+1\rangle - |-, j-1\rangle \right), \quad (2.63)$$

tal que ao analisar os termos, iremos identificar as interferências causadas pela soma e subtração de amplitudes das probabilidades em ambas as componentes associadas ao grau

de liberdade de direção  $\sigma$ . Por fim, temos então que

$$|\psi_1\rangle = \frac{(1+i)}{2}|+, j+1\rangle + \frac{(1-i)}{2}|-, j-1\rangle, \quad (2.64)$$

como ilustrado na Fig.2.9.

É necessário ter em mente que, independente do formalismo usado para CQ's, os principais fatores que determinam as características e propriedades de uma CQ são: a escolha do estado inicial do caminhante quântico e, do operador moeda (CQMM) ou da matriz espalhamento (CQME). Se quisermos simular um ou vários comportamentos específicos de um sistema via CQ's, é extremamente importante levar esses dois fatores em consideração. Apesar de terem comportamentos que podem ser observados independentemente da escolha dos estados iniciais, como, por exemplo, em [119, 120], a escolha da devida matriz espalhamento (ou moeda quântica para CQMM) faz toda diferença na implementação de uma CQ, como veremos no capítulo seguinte.

## CAPÍTULO 3

# CAMINHADAS QUÂNTICAS POR MODELO DE ESPALHAMENTO NA REDE HEXAGONAL: ESPAÇO DE POSIÇÃO

As CQME's na rede hexagonal no espaço de posição e sua fundamentação, já foram estudadas anteriormente em [152, 202], desta forma, neste capítulo iremos focar apenas nos novos resultados.

Ao abordamos as dinâmicas CQME's no espaço de posição, é importante ressaltar que a escolha da matriz espalhamento para os vértices da rede, o estado inicial do sistema e as condições de contorno da rede são de extrema importância para a análise das principais grandezas investigadas. Neste contexto, neste capítulo iremos explorar as principais características das CQME's em redes hexagonais infinitas e em redes hexagonais com condição de contorno simétrica e dentro do limite nanométrico.

### 3.1 Formalismo e Principais Grandezas

#### 3.1.1 Estrutura Topológica da Rede Hexagonal

A rede hexagonal, favo de mel ou *honeycomb*, é uma das onze redes arquimedianas, redes nas quais um plano é completamente ladrilhado com polígonos regulares, e recebe este nome devido à sua semelhança com o formato dos favos de mel. Ela é constituída de dois tipos de vértices topologicamente distintos tal que cada vértice da rede é representado pelo par ordenado de coordenadas discretas  $(j, k)$  e está ligado aos seus primeiros vizinhos por

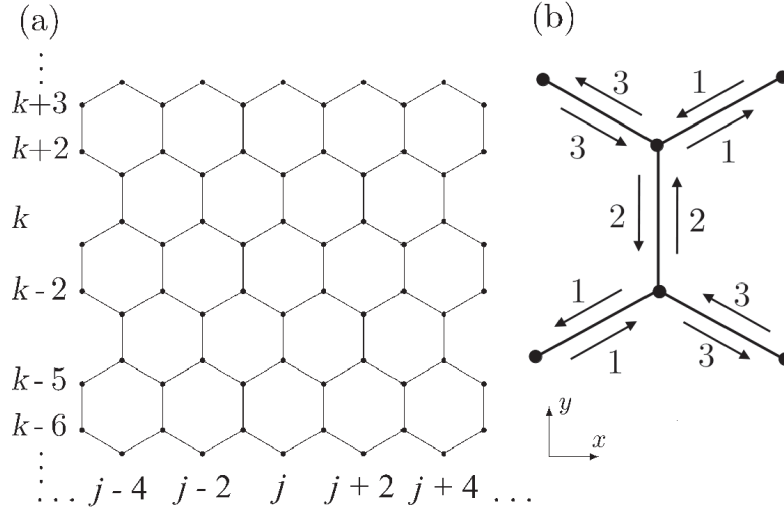


Figura 3.1: (a) A rede hexagonal (*honeycomb*). Aqui nós assumimos que os vértices com mesma estrutura de ligação que o vértice  $(j, k)$  terão ambas as coordenadas pares. (b) A estrutura de referência utilizada para rotular os estados de direção de propagação do caminhante. Os valores possíveis são  $\sigma = 1, 2$  e  $3$ .

uma ligação de tamanho  $a$ . Como mostrado nas Refs.[152, 191, 202], a posição de um dado vértice da rede *honeycomb* na representação cartesiana é dada por:

$$x_j = \frac{\sqrt{3}j a}{2}, \quad y_k = \left( \frac{3k}{4} + \frac{9 - (-1)^k}{8} \right) a. \quad (3.1)$$

A estrutura da rede hexagonal está ilustrada na Fig. 3.1(a) e na Fig. 3.1(b) temos a representação dos graus de liberdade do caminhante nas CQME's.

### 3.1.2 Estados de Base

O espaço de Hilbert dos estados das CQME's hexagonal é formalmente um produto entre um espaço de liberdade interna  $\mathcal{H}_c$  e, um espaço de posição  $\mathcal{H}_p$ , isto é:

$$\mathcal{H}_{CQ} = \mathcal{H}_c \otimes \mathcal{H}_p. \quad (3.2)$$

Os estados de base  $\{|j, k\rangle\}$  de  $\mathcal{H}_p$  são contáveis e infinitos, como ilustrado na Fig.3.1(a). Uma vez que cada vértice da rede possui grau de ordenação  $l = 3$ , os estados de base  $\{|\sigma\rangle\}$  de  $\mathcal{H}_c$  terão dimensão  $l$  e são expressos matricialmente por

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

tal que cada estado de base acima está relacionado com uma direção  $\sigma$  de propagação da partícula ao ser espalhada em um vértice  $(j, k)$  da rede, como ilustrado na Fig.3.1(b).

Nós iremos adotar a notação da supressão do símbolo de produto tensorial, ou seja, um estado de uma CQME hexagonal será representado por

$$|\sigma, j, k\rangle = |\sigma\rangle \otimes |j, k\rangle, \quad (3.4)$$

tal que  $\{|\sigma, j, k\rangle\}$  são os estados de base do sistema. As relações de ortogonalidade e completudeza serão dadas, respectivamente, por

$$\langle \sigma', j', k' | \sigma, j, k \rangle = \delta_{\sigma'\sigma} \delta_{j'j} \delta_{k'k}, \quad \hat{1} = \sum_{\sigma=1}^3 \sum_{(j,k)} |\sigma, j, k\rangle \langle \sigma, j, k|. \quad (3.5)$$

### 3.1.3 Operador Evolução Temporal e Matrizes Espalhamento

Um estado de uma CQME hexagonal em certo instante de tempo  $t$ , onde  $t = n\tau$  (tal que  $n \in \mathbb{N}$  e  $\tau$  é um tempo característico), pode ser representado por

$$|\psi_n\rangle = \hat{U}^t |\psi_0\rangle = \hat{U}^{n\tau} |\psi_0\rangle, \quad (3.6)$$

tal que  $|\psi_0\rangle$  é o estado inicial do sistema e  $\hat{U}$  é o operador evolução unitária. O tempo característico  $\tau$  é um parâmetro livre que pode assumir diferentes valores, de acordo com as condições da rede e do caminhante.

A ação do operador evolução temporal  $\hat{U}$  em um estado  $|\sigma, j, k\rangle$  é descrita por

$$\hat{U} |\sigma, j, k\rangle = \sum_{\sigma'=1}^3 \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j,k)} |\sigma', \mathcal{J}(\sigma', j, k), \mathcal{K}(\sigma', j, k)\rangle, \quad (3.7)$$

representando, portanto, que dado um estado do sistema onde o caminhante se propaga rumo ao vértice  $(j, k)$  pela direção  $\sigma$ , ao sofrer a ação do operador evolução unitária  $\hat{U}$ , irá se propagar rumo ao vértice  $(\mathcal{J}(\sigma', j, k), \mathcal{K}(\sigma', j, k))$  pela direção  $\sigma'$ . Desta forma, como abordado no Capítulo 2, ação do operador evolução temporal  $\hat{U}$  está associada ao processo de espalhamento, no modelo de CQME.

Formalmente,  $\mathcal{J}(\sigma', j, k)$  e  $\mathcal{K}(\sigma', j, k)$  são as funções topológicas das CQME's e, para

a rede hexagonal são descritas por

$$\mathcal{J}(\sigma, j, k) = j + (\sigma - 2)(-1)^k, \quad \mathcal{K}(\sigma, j, k) = k + (-1)^{k+\sigma}. \quad (3.8)$$

Aqui o leitor pode notar que, apesar da rede ter dois tipos de vértices não equivalentes, as funções topológicas já englobam isto em sua composição, sem a necessidade de criar funções distintas para cada tipo de vértice da rede. Vale ressaltar ainda que, as funções topológicas são descritas e formuladas a partir da estrutura topológica de uma dada rede. Portanto, para cada rede distinta teremos diferentes funções topológicas.

O símbolo  $\Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j,k)}$  presente na Eq.(3.7) é o coeficiente de espalhamento associado a um caminhante proveniente de  $\sigma$  tomar a direção  $\sigma'$ , após ter sofrido o processo de espalhamento no vértice  $(j, k)$ . Devido à condição de unitariedade,  $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{1}$ , temos que

$$\sum_{\sigma=1}^3 \Gamma_{\sigma\sigma'}^{(j,k)} \Gamma_{\sigma\sigma''}^{(j,k)*} = \sum_{\sigma=1}^3 \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j,k)*} \Gamma_{\sigma''\sigma}^{(j,k)} = \delta_{\sigma'\sigma''}, \quad (3.9)$$

tal que podemos representar todos os coeficientes de espalhamento associados a um vértice  $(j, k)$  por uma matriz de espalhamento  $\hat{\Gamma}^{(j,k)}$

$$\hat{\Gamma}^{(j,k)} = \begin{pmatrix} \Gamma_{11}^{(j,k)} & \Gamma_{12}^{(j,k)} & \Gamma_{13}^{(j,k)} \\ \Gamma_{21}^{(j,k)} & \Gamma_{22}^{(j,k)} & \Gamma_{23}^{(j,k)} \\ \Gamma_{31}^{(j,k)} & \Gamma_{32}^{(j,k)} & \Gamma_{33}^{(j,k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{11}^{(j,k)} & t_{12}^{(j,k)} & t_{13}^{(j,k)} \\ t_{21}^{(j,k)} & r_{22}^{(j,k)} & t_{23}^{(j,k)} \\ t_{31}^{(j,k)} & t_{32}^{(j,k)} & r_{33}^{(j,k)} \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

tal que no total temos nove coeficientes de espalhamento possíveis: três para processos de reflexão, denotados acima por  $r_{\sigma'\sigma}^{(j,k)}$ , associados a processos em que o caminhante é espalhado na mesma direção em que a incidiu em  $(j, k)$  e, portanto,  $\sigma' = \sigma$  e, seis coeficientes  $t_{\sigma'\sigma}^{(j,k)}$ , associados a processos em que o caminhante é espalhado em uma direção diferente da incidente e, portanto,  $\sigma' \neq \sigma$ . É importante notar que, das Eqs.(3.7)-(3.10), a devida escolha dos coeficientes de espalhamento, juntamente com o estado inicial do sistema, são de extrema importância para determinar o comportamento de uma CQME.

### 3.1.4 Probabilidades e Deslocamentos Quadráticos Médio

A probabilidade de encontrar um caminhante quântico em um vértice  $(j, k)$ , em um instante de tempo  $t$ , é dada por:

$$p(j, k, t) = \sum_{\sigma=1}^3 |\langle \sigma, j, k | \psi_t \rangle|^2 = \sum_{\sigma=1}^3 |\psi_{\sigma}(j, k; t)|^2, \quad (3.11)$$

tal que

$$|\psi_t\rangle = \sum_j \sum_k \sum_{\sigma=1}^3 \psi_{\sigma}(j, k; t) |\sigma, j, k\rangle. \quad (3.12)$$

As distribuições de probabilidade associadas à coordenada  $j$  e à coordenada  $k$ ,  $p_x(j, t)$  e  $p_y(k, t)$  são, respectivamente, descritas por

$$p_x(j, t) = \sum_k p(j, k, t), \quad p_y(k, t) = \sum_j p(j, k, t). \quad (3.13)$$

Além disso, podemos determinar o deslocamento quadrático médio (DQM) para as duas direções cartesianas do sistema como

$$D_x = \sum_j p_x(j, t) x_j^2 - \left( \sum_j p_x(j, t) x_j \right)^2, \quad (3.14)$$

$$D_y = \sum_k p_y(k, t) y_k^2 - \left( \sum_k p_y(k, t) y_k \right)^2, \quad (3.15)$$

e ainda o deslocamento quadrático médio radial,  $D_r$

$$D_r = \Delta r^2 = \sum_{j,k} p(j, k, t) r_{(j,k)}^2 - \left( \sum_{j,k} p(j, k, t) r_{(j,k)} \right)^2, \quad (3.16)$$

tal que a coordenada radial  $r_{(j,k)}$  é descrita por

$$r_{(j,k)} = \sqrt{x_j^2 + y_k^2}. \quad (3.17)$$

Como as caminhadas quânticas geralmente apresentam um comportamento balístico



[34, 38, 190], é esperado que o comportamento de  $D_r$  seja dado por

$$D_r = K t^2 = K \tau^2 n^2, \quad (3.18)$$

tal que, em um primeiro momento, podemos considerar  $K$  como um parâmetro que relaciona  $D_r$  com certas características de uma rede. É importante pontuar que  $K$  pode estar diretamente associado as matrizes de espalhamento definidas em uma rede, assim como o estado inicial do caminhante e as condições de contorno, como veremos adiante neste capítulo.

## 3.2 CQME's com Matriz de Espalhamento AB

### 3.2.1 Matriz AB e seus parâmetros

Como mencionado anteriormente, a devida escolha do estado inicial e da(s) matriz(es) de espalhamento é essencial dentro do estudo de CQME's. Dentro do contexto de informação quântica, por exemplo, há várias matrizes que podem ser estudadas e aplicadas dentro de uma dinâmica de CQ's, como a Grover(N), TDF(N), TDH(N) [202], cada uma com sua particularidade.

A matriz AB, no contexto de CQME's em redes hexagonais, foi inicialmente proposta por B. F. Venancio na Ref.[202]. A principal diferença em relação à definição primordial, é que neste trabalho nós introduzimos uma fase global  $\gamma$  na parametrização da matriz AB. Desta forma, tomando as Eqs.(3.9)-(3.10) e buscando uma matriz com apenas dois valores numéricos distintos para os coeficientes de espalhamento de um vértice  $(j, k)$ , porém, com uma diferença de fases entres coeficientes de reflexão e transmissão, temos então que

$$\hat{\Gamma}_{AB}^{(j,k)} = e^{i\gamma} \begin{pmatrix} ae^{i\theta} & b & b \\ b & ae^{i\theta} & b \\ b & b & ae^{i\theta} \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

tal que  $(-\pi \leq \theta \leq \pi)$  e  $\gamma$  é uma fase global, como dito anteriormente. Ao considerarmos a Eq.(3.9) e as imposições acima em relação aos coeficientes de espalhamento, teremos o

seguinte sistema de equações

$$\begin{cases} a^2 + 2b^2 = 1, \\ bae^{i\theta} + bae^{-i\theta} + b^2 = 0, \end{cases} \quad (3.20)$$

onde considerando a identidade trigonométrica  $2 \cos(\theta) = e^{i\theta} + e^{-i\theta}$  e resolvendo o sistema de equações, iremos encontrar uma parametrização para os coeficientes de espalhamento  $r_A(\theta)$  e  $t_B(\theta)$ , descritos respectivamente por

$$r_A(\theta) = -\frac{\exp[i\theta]}{\sqrt{5 + 4 \cos[2\theta]}}, \quad t_B(\theta) = \frac{2 \cos[\theta]}{\sqrt{5 + 4 \cos[2\theta]}}. \quad (3.21)$$

Desta forma, a Eq.(3.19) pode ser reescrita como

$$\hat{\Gamma}_{AB}^{(j,k)}(\theta, \gamma) = \exp[i\gamma] \begin{pmatrix} r_A(\theta) & t_B(\theta) & t_B(\theta) \\ t_B(\theta) & r_A(\theta) & t_B(\theta) \\ t_B(\theta) & t_B(\theta) & r_A(\theta) \end{pmatrix}. \quad (3.22)$$

Vale notar que a Eq.(3.22) é uma matriz geradora de um conjunto de matrizes  $\{\hat{\Gamma}_{AB}(\theta, \gamma)\}$ . Por comodidade de notação, sempre que denotarmos o termo "matriz AB", nós estamos nos referindo à matriz geradora da Eq.(3.22) e, quando explicitarmos os valores de  $\theta$  e  $\gamma$ , estamos nos referindo a uma matriz específica pertencente a este conjunto. Daqui em diante, toda vez que suprimimos o par de coordenadas associado à matriz de espalhamento, implica que utilizaremos a mesma matriz espalhamento em todos os vértices  $(j, k)$  da rede, por exemplo,  $\hat{\Gamma}_{AB}^{(j,k)} = \hat{\Gamma}_{AB}$ .

As curvas dos módulos ao quadrado dos coeficientes de espalhamento da matriz AB em função de  $\theta$  são mostradas na Fig.3.2. Perceba que, quando  $\theta = \pm\pi/2$ , temos que  $|r_A|^2 = 1$  e, portanto, para este caso o sistema terá apenas processos de reflexão. Por outro lado, quando  $\theta = 0, \pm\pi$  temos que o valor da probabilidade associada aos fenômenos de transmissão terá seu valor máximo  $|t_B(\theta)|^2 = 4/9$  e o de reflexão assumirá o seu menor valor,  $|r_A(\theta)|^2 = 1/9$ . Quando  $\theta = \gamma = 0$ , temos que  $\hat{\Gamma}_{AB}(0,0) = \hat{\Gamma}_{GRO(3)}$ , isto é, conseguimos obter a matriz Grover tridimensional [52, 59, 213, 214].

A partir de agora, iremos explorar CQME's com matrizes pertencentes ao conjunto

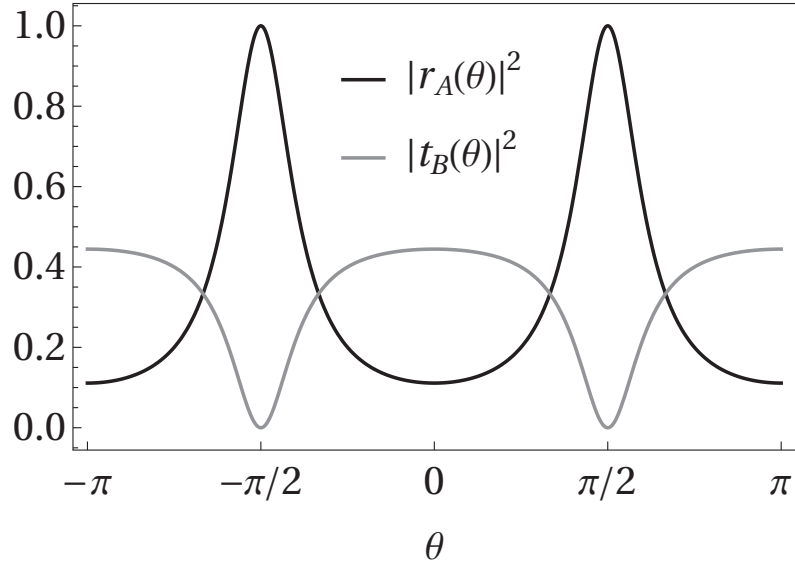


Figura 3.2: Os módulos ao quadrado dos coeficientes de reflexão e transmissão, para uma dada direção incidente  $\sigma$ , da matriz  $\hat{\Gamma}_{AB}(\theta, 0)$ , veja Eq.(3.22), em função do parâmetro  $\theta$ . Note que, para uma matriz AB, a soma dos módulos ao quadrado dos coeficientes de reflexão e transmissão, para uma dada direção incidente  $\sigma$ , é dada por  $|r_A(\theta)|^2 + 2|t_B(\theta)|^2$ , vide Eqs.(3.9) e (3.22).

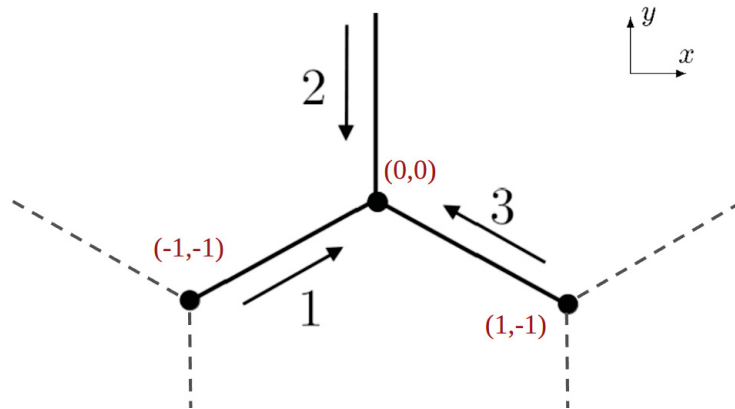


Figura 3.3: Representação do estado inicial descrito pela Eq.(3.23). Em vermelho temos as coordenadas discretas do vértice associado ao estado inicial  $(0, 0)$ , e, de dois de seus primeiros vizinhos, com coordenadas  $(-1, -1)$  e  $(1, -1)$ .

$\{\hat{\Gamma}_{AB}(\theta, \gamma)\}$ . O estado inicial das dinâmicas é dado por

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{\sigma=1}^3 |\sigma, 0, 0\rangle, \quad (3.23)$$

ou seja, um estado inicial dado pela superposição de três estados em direção ao vértice  $(j = 0, k = 0)$  com a mesma amplitude de probabilidade, como representado na Fig.3.3

### 3.2.2 Distribuições de Probabilidade e DQM Radial para CQME's com Matriz AB

Na Fig.3.4 temos as distribuições de probabilidades normalizadas para CQME's de duzentos passos,  $t = 200$ , considerando  $\tau = 1$ , para seis valores distintos de  $\theta$  na Eq.(3.22). Note que à medida que  $\theta \rightarrow \pi/2$ , observamos cada vez mais fenômenos de localização próximo à origem, um comportamento esperado devido aos possíveis valores de  $\theta$  na Eq.(3.22), e, portanto,  $|r_A(\theta)|^2 \rightarrow 0$ . Vale notar que as simetrias de rotação e inversão presente nos padrões das distribuições de probabilidade são uma consequência direta da topologia da rede, da escolha do estado inicial presente na Eq.(3.23) e, é claro, dos parâmetros da  $\hat{\Gamma}_{AB}(\theta, \gamma)$ .

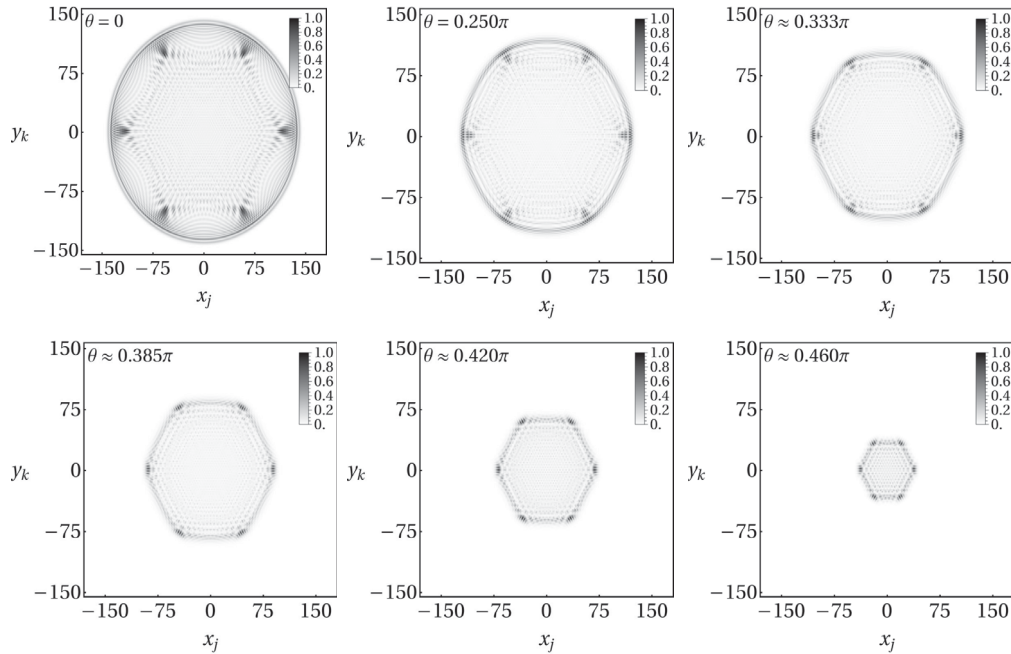


Figura 3.4: As distribuições de probabilidades normalizadas para  $|\psi_{200}\rangle$ , com  $|\psi_0\rangle$  dado pela em Eq.(3.23), para CQME's com matriz espalhamento dado pela Eq.(3.22) com diferentes valores de  $\theta$  e para  $\gamma = 0$ . Para  $\theta = 0$  temos uma CQME com a maior distribuição de probabilidade radial, uma vez que nesta condição temos o maior valor possível associado aos coeficientes de transmissão, vide Eq.(3.21). Por outro lado, à medida que  $\theta \rightarrow \pi/2$  temos que distribuição de probabilidades radial tende a zero, e o caminhante tende a ficar localizado no vértice associado ao estado inicial, comportamento que vai de acordo com a Eq.(3.21) e também é mostrado na Fig.3.2. Os padrões de distribuição de probabilidade formados estão diretamente relacionados com a simetria de rede *honeycomb*, com o estado inicial utilizado na dinâmica e claro com a matriz espalhamento da CQME.

O deslocamento quadrático médio radial,  $D_r$ , descrito pela Eq.(3.16), para CQME's com matrizes  $\{\Gamma_{AB}(\theta, 0)\}$  para diferentes valores de  $\theta$  também foi foco de nossa investigação. Na Fig.3.5 temos o comportamento de  $D_r/a^2$  versus  $n$  para seis CQME's distintas,

vale lembra que, como definido anteriormente,  $t = n\tau$ , tal que  $n \in \mathbb{N}$ . Nesta figura podemos observar o comportamento balístico das CQ's, isto é,  $D_r \propto t^2$ . Para  $\theta = 0$ , vide Eq.(3.21),  $\Gamma_{AB}(0,0) = \Gamma_{GRO(3)}$ , temos o caso da CQME's que possui maior valor de  $D_r/a^2$ , o que justifica o fato desta matriz ser utilizada em algoritmos de busca [54]. Por outro lado, assim como na Fig.3.6, podemos observar que, a medida que  $\theta \rightarrow \pi/2$ , as CQME's tendem a perder o comportamento balístico, uma vez que as CQME's com  $\{\Gamma_{AB}(\theta \rightarrow \pi/2, 0)\}$  tendem a ser localizadas próximas ao vértice de origem.

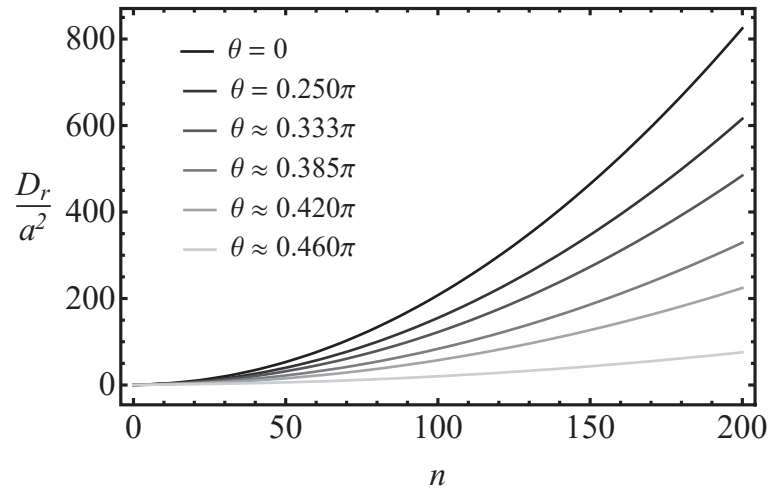


Figura 3.5: O deslocamento quadrático médio radial,  $D_r$ , veja Eq.(3.16), em função de  $n$ , tal que  $t = n\tau$ , para CQME's com matriz espalhamento dado pela Eq.(3.22) com diferentes valores de  $\theta$  e para  $\gamma = 0$ . Para  $\theta = 0$  temos uma CQME com o maior valor de  $D_r$ , uma vez que nesta condição temos o maior valor possível associado aos coeficientes de transmissão, vide Eq.(3.21). Por outro lado, a medida que  $\theta \rightarrow \pi/2$ , isto é, a medida que o coeficiente de reflexão tende ao valor máximo, como mostrado na Fig.3.2 e pela Eq.(3.21), temos que a CQME perde a característica balística do caminhante ao longo da rede e,  $D_r$  tende a um comportamento linear. Neste caso, o caminhante quântico terá comportamento equivalente a um caminhante clássico.

Na Fig.3.7 temos o comportamento de  $D_r/(at)^2$  em função de  $\theta$  para CQME's com diferentes  $t$ 's. É possível notar que mesmo para CQME's com ordem de algumas dezenas de passos, o comportamento quadrático em relação à variação de  $\theta$  é obtido, corroborando o ansatz proposto na Eq.(3.18). Com isto em mente, nós iremos propor um modelo para a descrição de  $K(\theta)$

$$K(\theta) = \frac{a^2}{\tau^2} |t_B(\theta)|^2 \sum_{m=0}^{\infty} b_{2m} \cos^{2m}[\theta], \quad (3.24)$$

tal que  $b_{2m}$  são parâmetros ajustáveis. Ao truncarmos a Eq.(3.24) em  $m = 2$ , temos que

$$K(\theta) = \frac{a^2}{\tau^2} |t_B(\theta)|^2 (b_0 \cos[\theta] + b_2 \cos^2[\theta] + b_4 \cos^4[\theta] + \dots), \quad (3.25)$$

tal que para  $b_0 = 3.42 \times 10^{-2}$ ,  $b_2 = 4.95 \times 10^{-3}$  e  $b_4 = 6.78 \times 10^{-3}$  obtivemos a melhor

modelagem em relação aos valores de  $D_r$  obtidos de maneira numérica, veja Eq.(3.16).

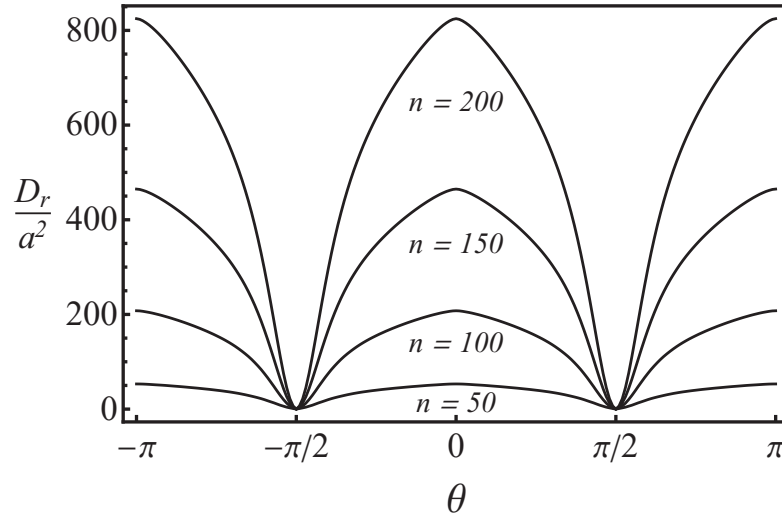


Figura 3.6: Comportamento de  $D_r/a^2$ , veja Eq.(3.16), em função de  $\theta$  para diferentes valores de  $n$ . Perceba que à medida que  $\theta \rightarrow 0$  e  $n \gg 1$  é possível observar o comportamento quadrático de  $D_r/a^2$ . Por outro lado, a medida que  $\theta \rightarrow \pi/2$  fica nítido que  $D_r/a^2 \rightarrow 0$  independente do valor de  $n$ .

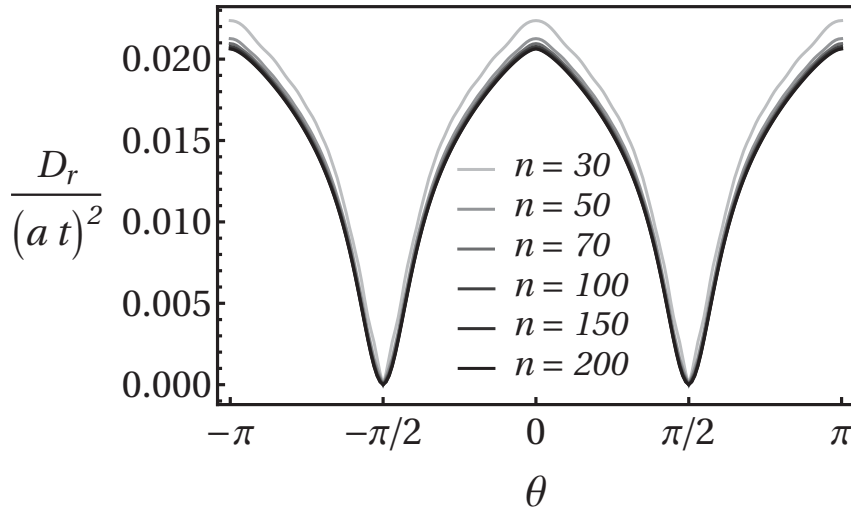


Figura 3.7: Comportamento de  $D_r/(a t)^2$  em função de  $\theta$  para diferentes valores de  $n$ . É possível notar que à medida que  $n \gg 1$  as curvas tendem a um perfil semelhante.

Nas Figs.3.8 e 3.9 temos a comparação entre  $D_r/a^2$  em relação a  $n$  e  $D_r/a^2$  em comparação ao valor de  $\theta$ , respectivamente. As curvas sólidas representam os valores obtidos pela Eq.(3.18) considerando  $K(\theta)$  proposto na Eq.(3.25) e, a curva pontilhada representa os valores obtidos numericamente pelas CQME's. De maneira geral, é possível notar uma boa convergência entre as curvas, com exceção para os casos de CQME's com poucos passos, e/ou com  $\theta \rightarrow \pi/2$ .

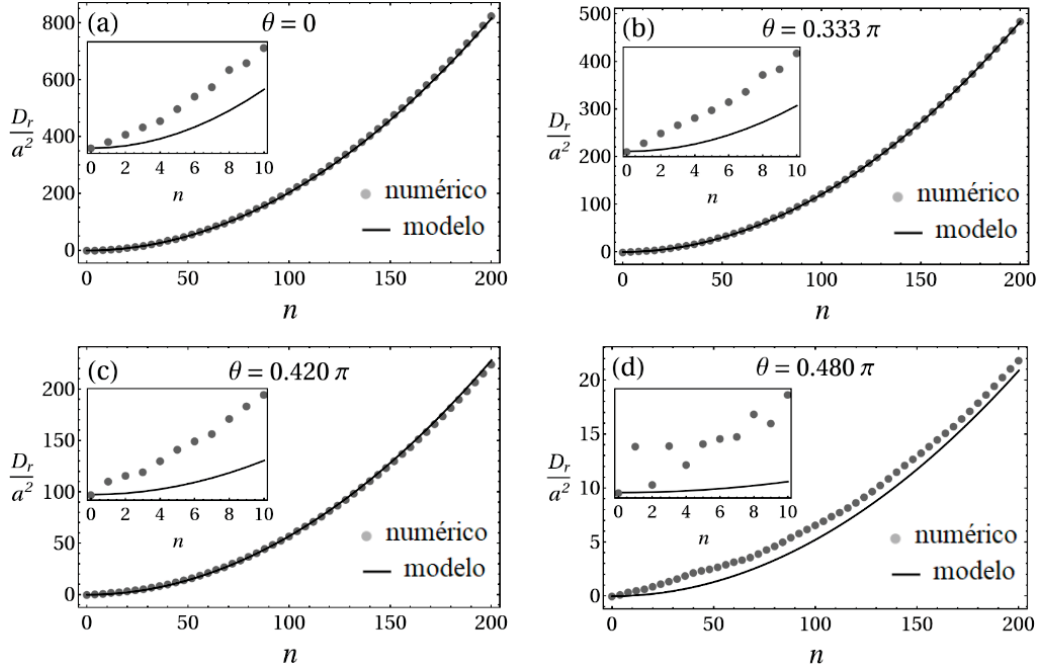


Figura 3.8: Comportamento de  $D_r/a^2$  versus  $n$ , tal que  $t = n\tau$ , para diferentes valores de  $\theta$ , obtido através da evolução dos estados do sistema (numérico) e, para  $D_r = K^2 t^2$  onde  $K(\theta)$  é dado pela Eq.(3.24) e truncado em  $m = 2$  (modelo). As curvas divergem apenas para quando  $\theta \rightarrow \pi/2$ .

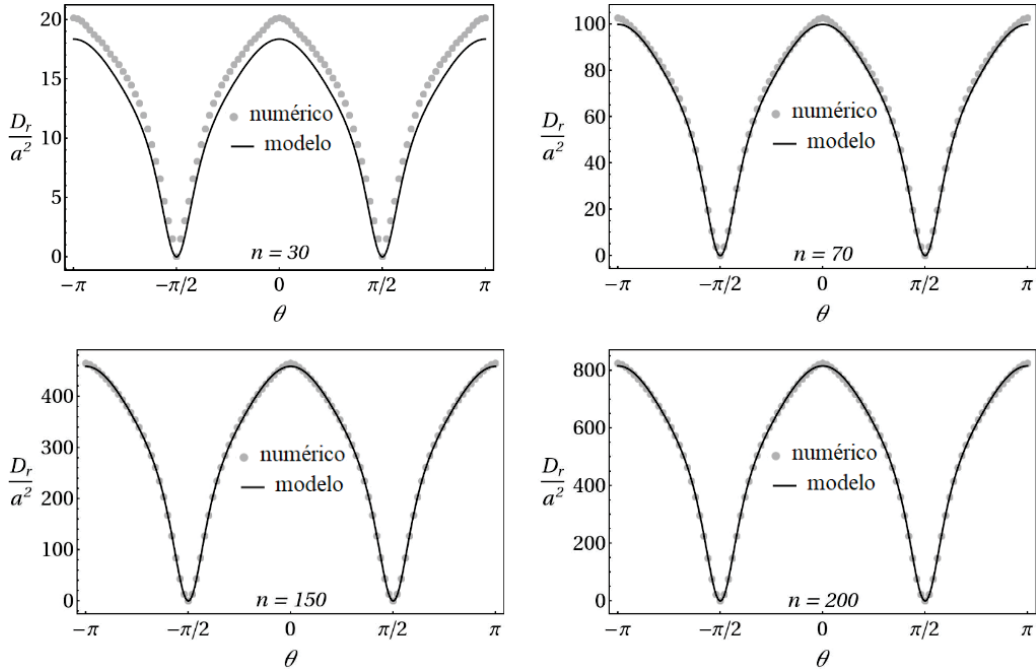


Figura 3.9: Comportamento de  $D_r/a^2$  em relação a  $\theta$  para diferentes valores de  $n$ , tal que  $t = n\tau$ , obtido através da evolução dos estados do sistema (numérico) e, para  $D_r = K^2 t^2$  onde  $K(\theta)$  é dado pela Eq.(3.24) e truncado em  $m = 2$  (modelo). As curvas divergem apenas quando  $n \rightarrow 0$ , uma vez que para pequenos valores de  $n$  o regime balístico ainda não foi atingido.

### 3.3 CQME's com Condições de Contorno: Nanofitas Quadradas

A rede hexagonal pode ser limitada de diversas formas possíveis conforme a escolha das condições de contorno, como nanofitas, nanotubos e demais variações apresentadas na vasta literatura [175, 192, 203, 215–217]. Nesta seção, temos como foco apresentar e discutir como aplicar as devidas condições de contorno para realizar CQ's em nanofitas quadradas de grafeno.

#### 3.3.1 Estrutura Topológica das Nanofitas Quadradas

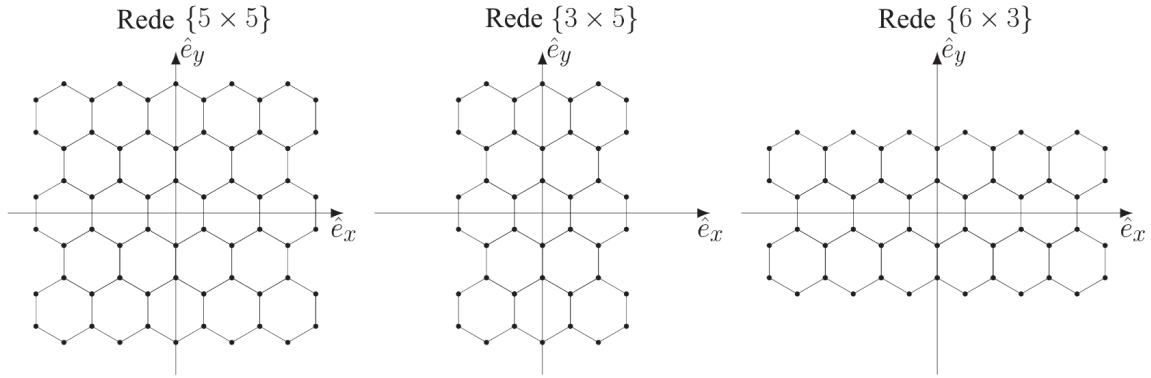


Figura 3.10: Três exemplos de diferentes tipos de nanofitas: quadrada, retangular armchair e retangular zigzag, respectivamente. A forma da nanofita está diretamente ligada a quantidade de anéis em cada uma das direções  $\hat{e}_x$  e  $\hat{e}_y$ , representada por  $\{n_x \times n_y\}$ . Iremos focar nesta seção no caso em que  $n_x = n_y$ , ou seja, nanofitas quadradas.

Dentro dos conceitos de nanofitas de redes hexagonais, com dimensão de 10nm-100nm [192], escolhemos investigar nanofitas retangulares, estas definidas por dois números naturais,  $\{n_x \times n_y\}$ , que definem o número de anéis na direção  $\hat{e}_x$  e  $\hat{e}_y$ , como mostrado na Figura 3.10. Nossa investigação irá se ater a nanofitas que tenham o mesmo número de anéis na direção  $\hat{e}_x$  e  $\hat{e}_y$ , ou seja,

$$n_x = n_y = n, \quad (3.26)$$

de tal forma que devido à topologia da rede hexagonal, teremos necessariamente que

$$n = 4i + 1, \quad (3.27)$$

onde  $i \in \mathbb{N}$  e, portanto, que não há como formar nanofitas quadradas com um número arbitrário de anéis em cada direção  $\hat{e}_x$  e  $\hat{e}_y$ . As coordenadas que delimitam uma dada



nanofita nas direções  $\hat{e}_x$  e  $\hat{e}_y$  são dadas respectivamente por:

$$j_{max} = -j_{min} = n \quad (3.28)$$

e

$$k_{max} = -(k_{min} + 3) = n - 1, \quad (3.29)$$

como ilustrado na Fig.3.11. Iremos classificar os vértices da rede conforme o número de ordenação  $l$ , isto é, um vértice com coordenadas  $(j, k)$  será denotado por  $(j, k)_{l_o}$ , sendo  $o = l$ , tal que

$$(j, k)_{l_3} = \left\{ j_{min} < j < j_{max} \text{ e } k_{min} < k < k_{max}; \right. \quad (3.30)$$

$$(j, k)_{l_2} = \left\{ \begin{array}{l} j = \begin{cases} j_{max}, \\ j_{min}, \end{cases} \text{ e } k; \\ j_{min} < j < j_{max} \text{ e } k = \begin{cases} k_{max}; \\ k_{min}. \end{cases} \end{array} \right. \quad (3.31)$$

A distinção proposta na Eq.(3.31) se faz necessária, uma vez que vértices com valores de  $l$  distintos possuem propriedades intrínsecas a esta grandeza, impactando na definição da matriz espalhamento, operador evolução temporal e também nas grandezas físicas. Como consequência da Eq.(3.31), iremos adotar uma nova notação para os estados de base do sistema levando em conta o número de ordenação de um dado vértice, isto é

$$|\sigma, j, k\rangle \equiv |\sigma, (j, k)_{l_o}\rangle, \quad (3.32)$$

tal que  $o \in \{2, 3\}$  e,  $o = l$ .

### 3.3.2 Evolução Temporal e Matriz Espalhamento

Como mencionado anteriormente e definido pela Eq.(3.31), é necessário distinguir os vértices da rede conforme o número de ordenação. Para vértices que fazem duas ligações a

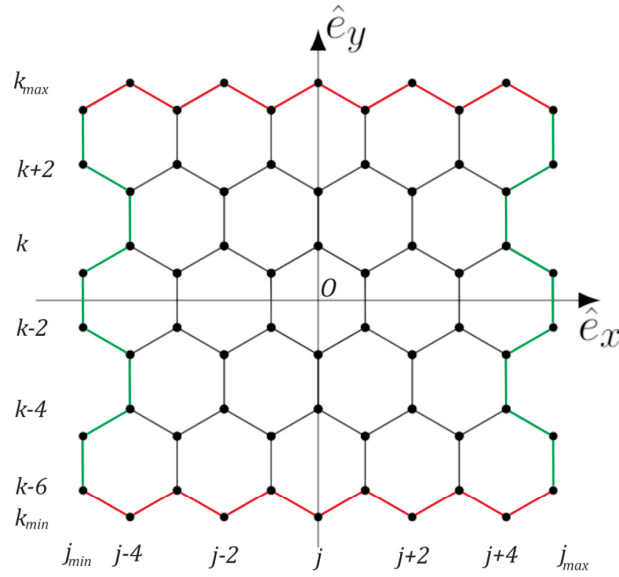


Figura 3.11: Uma nanofita quadrada  $\{5 \times 5\}$ . As bordas zigzag (vermelho) e armchair (verde) delimitam a nanofita quadrada.

matriz de espalhamento será definida por

$$\Gamma^{(j,k)l_2} = \begin{pmatrix} \rho & \xi \\ \xi & \rho \end{pmatrix}, \quad (3.33)$$

onde  $\rho$  e  $\xi$  representam, respectivamente, os coeficientes de amplitude de reflexão e de transmissão.

Pela condição de unitariedade da matriz de espalhamento  $\Gamma^{(j,k)l_2}$ , temos que

$$|\rho|^2 + |\xi|^2 = 1, \quad \rho\xi^* + \rho^*\xi = 0. \quad (3.34)$$

Desta forma, a ação do operador evolução temporal  $\hat{U}$  em estado de base  $|\sigma, (j, k)_{l_2}\rangle$  é dada por

$$\hat{U}_{l_2}|\sigma, (j, k)_{l_2}\rangle = \rho|\sigma, \mathcal{J}_\sigma(j, k)_{l_2}, \mathcal{K}_\sigma(j, k)_{l_2}\rangle + \sum_{\sigma'} \xi|\sigma', \mathcal{J}_{\sigma'}(j, k)_{l_2}, \mathcal{K}_{\sigma'}(j, k)_{l_2}\rangle, \quad (3.35)$$

tal que  $\mathcal{J}_\sigma(j, k)_{l_2}$  e  $\mathcal{K}_\sigma(j, k)_{l_2}$  são as funções topológicas dadas pela Eq.(3.8) e consoante as definições das Eqs.(3.31) e (3.32). É importante notar que nos processos de reflexão associados a  $\hat{U}_{l_2}$ , temos  $\sigma' = \sigma$ , como descrito no primeiro termo da Eq.(3.35).

A ação do operador evolução temporal  $\hat{U}$  em um estado de base  $|\sigma, (j, k)_{l_3}\rangle$  é dada por

$$\hat{U}_{l_3}|\sigma, (j, k)_{l_3}\rangle = \sum_{\sigma'=1}^3 \Gamma_{\sigma'\sigma}|\sigma', \mathcal{J}_{\sigma'}(j, k)_{l_3}, \mathcal{K}_{\sigma'}(j, k)_{l_3}\rangle, \quad (3.36)$$

isto é, equivalente à ação de  $\hat{U}$  em um estado de base de uma rede hexagonal infinita, ver Eq.(3.7).

De maneira geral, da seção anterior, sabemos que a evolução do sistema em um passo de tempo é dada por

$$|\psi_{t+1}\rangle = \hat{U}|\psi_t\rangle. \quad (3.37)$$

É importante notar que  $\hat{U}$  deve agir tanto nos vértices com  $l = 2$  como nos vértices com  $l = 3$ . Desta forma, a Eq.(3.37) será dada por

$$\begin{aligned} |\psi_{t+1}\rangle = \hat{U} & \left( \sum_{(j,k)_{l_3}} \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}((j, k)_{l_3}, t) |\sigma, (j, k)_{l_3}\rangle \right. \\ & \left. + \sum_{(j,k)_{l_2}} \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}((j, k)_{l_2}, t) |\sigma, (j, k)_{l_2}\rangle \right), \end{aligned} \quad (3.38)$$

e, portanto, das Eqs.(3.35) e (3.36), teremos que

$$\begin{aligned} |\psi_{t+1}\rangle = & \sum_{(j,k)_{l_3}} \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}((j, k)_{l_3}, t) \left( \sum_{\sigma'} \Gamma_{\sigma'\sigma} |\sigma', \mathcal{J}_{\sigma'}(j, k)_{l_3}, \mathcal{K}_{\sigma'}(j, k)_{l_3}\rangle \right) + \\ & \sum_{(j,k)_{l_2}} \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}((j, k)_{l_2}, t) \left( \rho |\sigma, \mathcal{J}_{\sigma}(j, k)_{l_2}, \mathcal{K}_{\sigma}(j, k)_{l_2}\rangle + \right. \\ & \left. \sum_{\sigma'} \xi |\sigma', \mathcal{J}_{\sigma'}(j, k)_{l_2}, \mathcal{K}_{\sigma'}(j, k)_{l_2}\rangle \right), \end{aligned} \quad (3.39)$$

e como mencionado anteriormente, nos processos reflexivos associados aos vértices com  $l = 2$ , teremos que  $\sigma' = \sigma$ .

### 3.3.3 Probabilidades e Escala de Tempo

Como visto anteriormente, cada vértice de rede necessita ser classificado de acordo com seu número de ordenação. Se olharmos atentamente para a Fig.3.11 e para a Eq.(3.31),

iremos notar que os vértices com  $l = 2$  estão necessariamente localizados nas bordas da nanofita. Tendo isto em mente e, levando em conta a forma quadrada das nanofitas, queremos investigar qual é a contribuição dos vértices  $(j, k)_{l_2}$  em uma CQME. E em outras palavras, investigaremos como as condições de contorno topológicas podem influenciar nas principais grandezas físicas de uma CQME. Temos que a probabilidade de encontrar o caminhante quântico se propagando rumo aos vértices de borda com  $l = 2$  em um dado tempos  $t$  será definida por

$$p_b(t) = p_{bx} + p_{by}, \quad (3.40)$$

tal que  $p_{bx}$  e  $p_{by}$  são, respectivamente, as probabilidades dos vértices de borda com  $l = 2$  na direção  $\hat{e}_x$  e  $\hat{e}_y$  da rede, definidas por

$$p_{bx}(t) = \sum_{j=j_{min}}^{j_{max}} (p_x(j, k_{min}, t) + p_x(j, k_{max}, t)), \quad (3.41)$$

$$p_{by}(t) = \sum_{k=k_{min}}^{k_{max}} (p_y(j_{min}, k, t) + p_y(j_{max}, k, t)). \quad (3.42)$$

Para os vértices com  $l = 3$ , temos que as probabilidades serão as mesmas que as definidas anteriormente para CQME's em uma rede hexagonal infinita, ver Eqs.(3.11) e (3.13).

Uma importante escala de tempo para CQME's em nanofitas quadradas é o número mínimo de passos necessários para que a partícula vá de um vértice localizado próximo à origem até um vértice de borda com  $l = 2$ , ou seja,

$$t_{min} = \tau(n - 1), \quad (3.43)$$

tal que  $n$  é dado pela Eq.(3.27) e,  $\tau$  é parâmetro de tempo característico. Portanto, se  $t < t_{min}$ , para um estado inicial localizado no anel central da rede, ver Fig.3.11, o sistema evolui de maneira análoga a uma rede *honeycomb* infinita e, conseqüentemente, é natural que teremos que  $D_r \sim t^2$ . Por outro lado, quando  $t \geq t_{min}$  a função de onda começa a sofrer mudanças de acordo com as interações com as bordas, isto é, teremos interferências construtivas e destrutivas que emergem diretamente da devida escolha do estado inicial do sistema, da matriz espalhamento e claro, da topologia da rede hexagonal.

### 3.3.4 CQME's Imparciais em Nanofitas Quadradas: Resultados

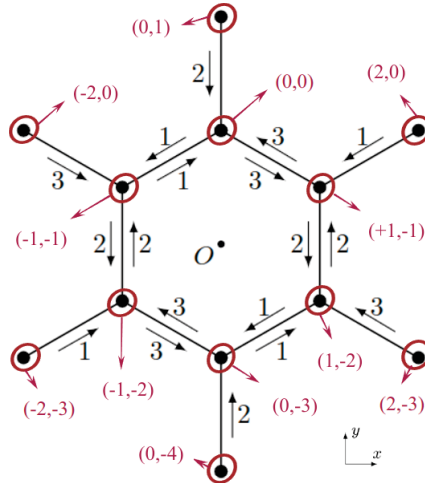


Figura 3.12: Representação do estado inicial descrito pela Eq.(3.44), tal que  $O$  é o ponto de origem do plano cartesiano. Em vermelho temos a indicação dos vértices associados ao estado inicial da Eq.(3.44) com suas respectivas coordenadas discretas  $(j, k)$ .

Para investigação das principais grandezas de CQME's em nanofitas quadradas, iremos considerar um estado inicial de superposição de estados espalhados pelos vértices do primeiro anel (centrado na origem Cartesiana), dado por

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{18}} \sum_{\sigma=1}^3 \left( |\sigma, 0, 0\rangle + |\sigma, 1, -1\rangle + |\sigma, 1, -2\rangle + |\sigma, 0, -3\rangle + |\sigma, -1, -2\rangle + |\sigma, -1, -1\rangle \right), \quad (3.44)$$

como ilustrado na Fig.3.12. Além disso, para os vértices  $(j, k)_{l_3}$  iremos considerar a seguinte matriz espalhamento imparcial

$$\hat{\Gamma}^{(j,k)_{l_3}} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -e^{i\pi/3} & 1 & 1 \\ 1 & -e^{i\pi/3} & 1 \\ 1 & 1 & -e^{i\pi/3} \end{pmatrix}, \quad (3.45)$$

e, portanto,  $|\Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j,k)_{l_3}}|^2 = 1/3$ , para qualquer valor de  $\sigma$  e  $\sigma'$ . Para os vértices  $(j, k)_{l_2}$  iremos tomar a seguinte matriz de espalhamento imparcial

$$\hat{\Gamma}^{(j,k)_{l_2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i & 1 \\ 1 & i \end{pmatrix}, \quad (3.46)$$

tal que  $|\rho|^2 = |\xi|^2 = 1/2$ , isto é, uma matriz na qual há uma imparcialidade entre os processos de reflexão e transmissão. Além disso, vale notar que além de matrizes imparciais, tanto  $\hat{\Gamma}^{(j,k)_{l_3}}$  como  $\hat{\Gamma}^{(j,k)_{l_2}}$  introduzem uma fase nos coeficientes de reflexão, ver Eqs.(3.10) e (3.33).

As Figs.3.13 - 3.17 mostram as distribuições de probabilidade normalizadas para cinco nanofitas quadradas diferentes, com dimensões de  $\{21 \times 21\}$ ,  $\{41 \times 41\}$ ,  $\{61 \times 61\}$ ,  $\{81 \times 81\}$  e  $\{101 \times 101\}$ , respectivamente. Os gráficos das distribuições de probabilidades foram feitos para múltiplos inteiros ou semi-inteiros de  $t_{min}$ , definido como a quantidade mínima de passos para a partícula ser espalhada por um vértice  $(j, k)_{l_2}$ , vide Eq.(3.43).

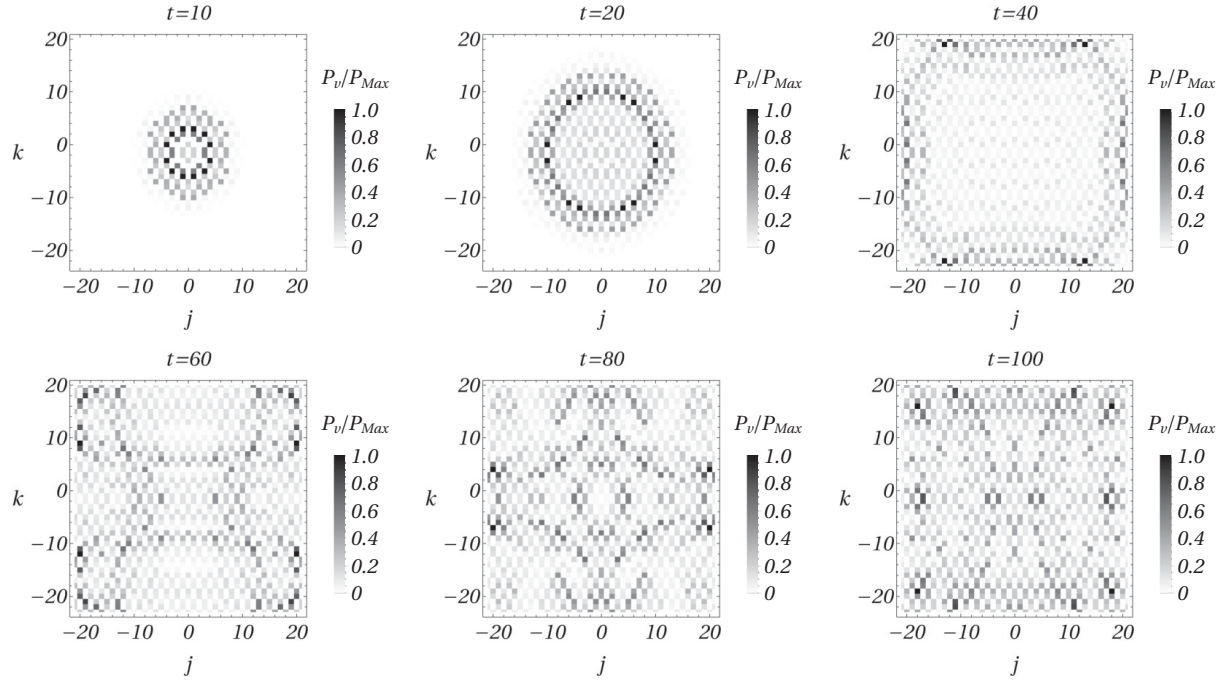


Figura 3.13: Distribuições de probabilidade normalizadas para uma nanofita quadrada com dimensões  $\{21 \times 21\}$  em instantes de tempo múltiplos de  $t_{min} = 20$ . Da esquerda para a direita, de cima pra baixo, distribuição de probabilidade para  $t = \frac{t_{min}}{2}$ ,  $t = t_{min}$ ,  $t = 2t_{min}$ ,  $t = 3t_{min}$ ,  $t = 4t_{min}$  e  $t = 5t_{min}$ , respectivamente.

Analisando as Figs.3.13 - 3.17 notamos um padrão entre as distribuições de probabilidade e tempos múltiplos da escala de tempo  $t_{min}$ . De maneira geral, nas Figs.3.13-3.17, o primeiro gráfico de cada uma das figuras (da esquerda para a direita, de cima para baixo) é da distribuição de probabilidade para  $t = \frac{t_{min}}{2}$ , o segundo gráfico para  $t = t_{min}$ , o terceiro gráfico para  $t = 2t_{min}$ , o quarto gráfico para  $t = 3t_{min}$ , o quinto gráfico para  $t = 4t_{min}$  e o sexto gráfico para  $t = 5t_{min}$ .

Como discutido anteriormente, o sistema tem evolução semelhante a uma rede hexagonal infinita para  $t < t_{min}$ , desta forma a probabilidade associada aos vértices de borda com  $l = 2$ , isto é  $p_b$ , é zero. A partir do instante de tempo  $t = t_{min}$ , o caminhante encontra as condições de contorno da rede e, portanto, o valor de  $p_b$  começa a receber valores diferentes de zero, como mostrado na Fig.3.18 e na Tab.3.1.

Para instantes de tempo  $t \geq t_{min}$  o sistema começa a sofrer inferências construtivas e destrutivas devido a escolha de  $\hat{\Gamma}^{(j,k)}_{l_2}$ ,  $\hat{\Gamma}^{(j,k)}_{l_3}$ , do estado inicial do sistema e da simetria das condições de contorno. Vale notar que, apesar das nanofitas serem quadradas em relação ao números de

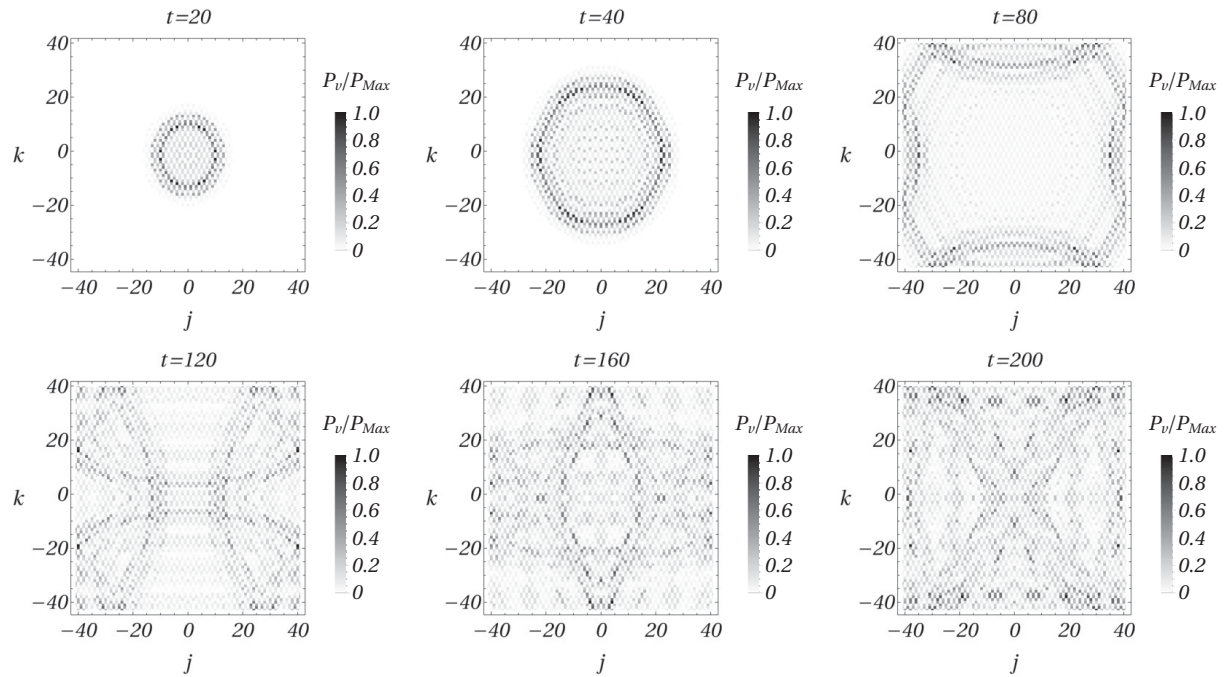


Figura 3.14: Distribuições de probabilidade normalizadas para uma nanofita quadrada com dimensões  $\{41 \times 41\}$  em instantes de tempo múltiplos de  $t_{min} = 40$ . Da esquerda pra direita, de cima pra baixo, distribuição de probabilidade para  $t = \frac{t_{min}}{2}$ ,  $t = t_{min}$ ,  $t = 2t_{min}$ ,  $t = 3t_{min}$ ,  $t = 4t_{min}$  e  $t = 5t_{min}$ , respectivamente.

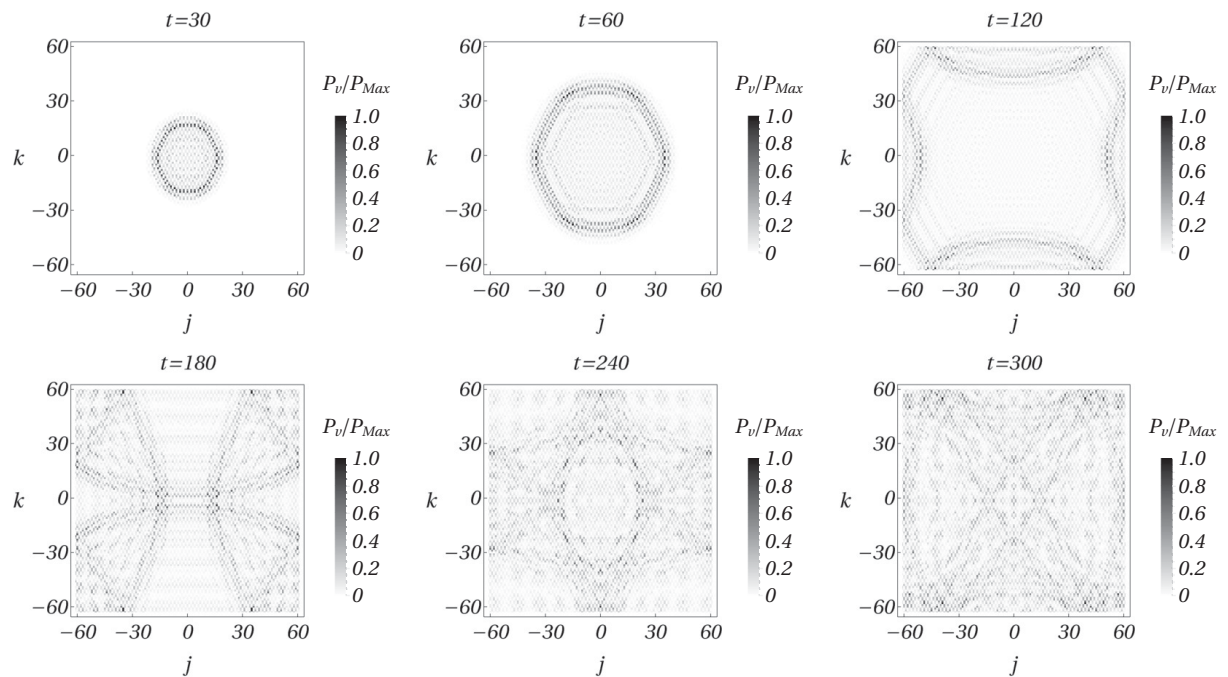


Figura 3.15: Distribuições de probabilidade normalizadas para uma nanofita quadrada com dimensões  $\{61 \times 61\}$  em instantes de tempo múltiplos de  $t_{min} = 60$ . Da esquerda pra direita, de cima pra baixo, distribuição de probabilidade para  $t = \frac{t_{min}}{2}$ ,  $t = t_{min}$ ,  $t = 2t_{min}$ ,  $t = 3t_{min}$ ,  $t = 4t_{min}$  e  $t = 5t_{min}$ , respectivamente.

anéis nas direções  $\hat{e}_x$  e  $\hat{e}_y$ , as funções cartesianas são diferentes para cada direção, vide Eq.(3.1).

Desta forma, podemos notar nas Figs.3.13 - 3.17 que no instante de tempo  $t = 3t_{min}$  as frentes

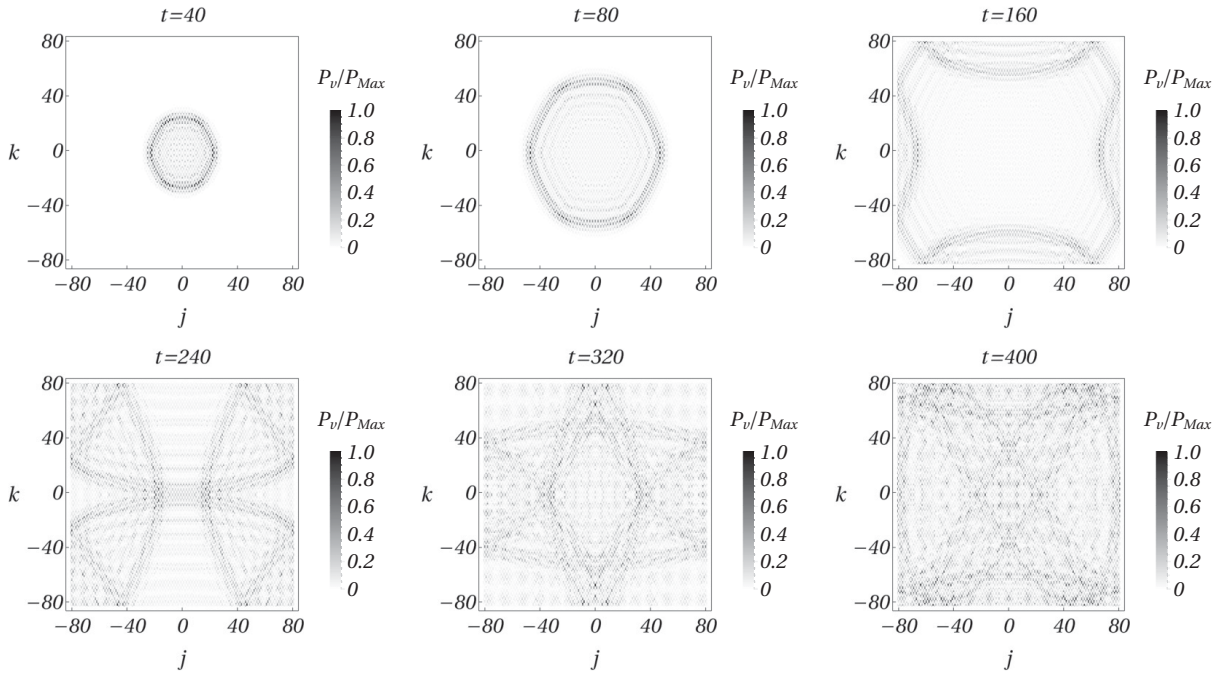


Figura 3.16: Distribuições de probabilidade normalizadas para uma nanofita quadrada com dimensões  $\{81 \times 81\}$  em instantes de tempo múltiplos de  $t_{min} = 80$ . Da esquerda pra direita, de cima pra baixo, distribuição de probabilidade para  $t = \frac{t_{min}}{2}$ ,  $t = t_{min}$ ,  $t = 2t_{min}$ ,  $t = 3t_{min}$ ,  $t = 4t_{min}$  e  $t = 5t_{min}$ , respectivamente.

de onda de probabilidade refletidas pelas bordas na direção  $\hat{e}_y$  se encontram próximas à origem, enquanto as frentes de onda de probabilidade refletidas pelas bordas na direção  $\hat{e}_x$  se encontram próximas a  $j = \pm(t_{min}/4)$ .

Podemos notar que o maior valor de  $p_{b(max)}$  é para redes menores, como mostrado na Fig.3.19. Isto reflete a redução de proporção entre a quantidade de vértices de borda pela quantidade total de vértices da rede: enquanto o número total de vértices da rede aumenta quadraticamente (aumento superficial) com o aumento das dimensões da rede, o número de vértices de borda aumenta de maneira linear (aumento perimétrico).

A quantidade total de vértices de uma nanofita quadrada pode ser obtida através da seguinte relação

$$Q_t = Q_x \cdot Q_y, \quad (3.47)$$

tal que  $Q_x$  é a quantidade de vértices em uma linha  $j$  da nanofita quadrada, e  $Q_y$  é a quantidade de vértices em uma coluna  $k$ . Podemos reescrever a Eq.(3.47) como

$$Q_t = (2j_{max} + 1) \cdot (k_{max} + 2), \quad (3.48)$$

desde que consideremos que a origem de coordenadas  $(j, k)$  está localizada no ponto cartesiano



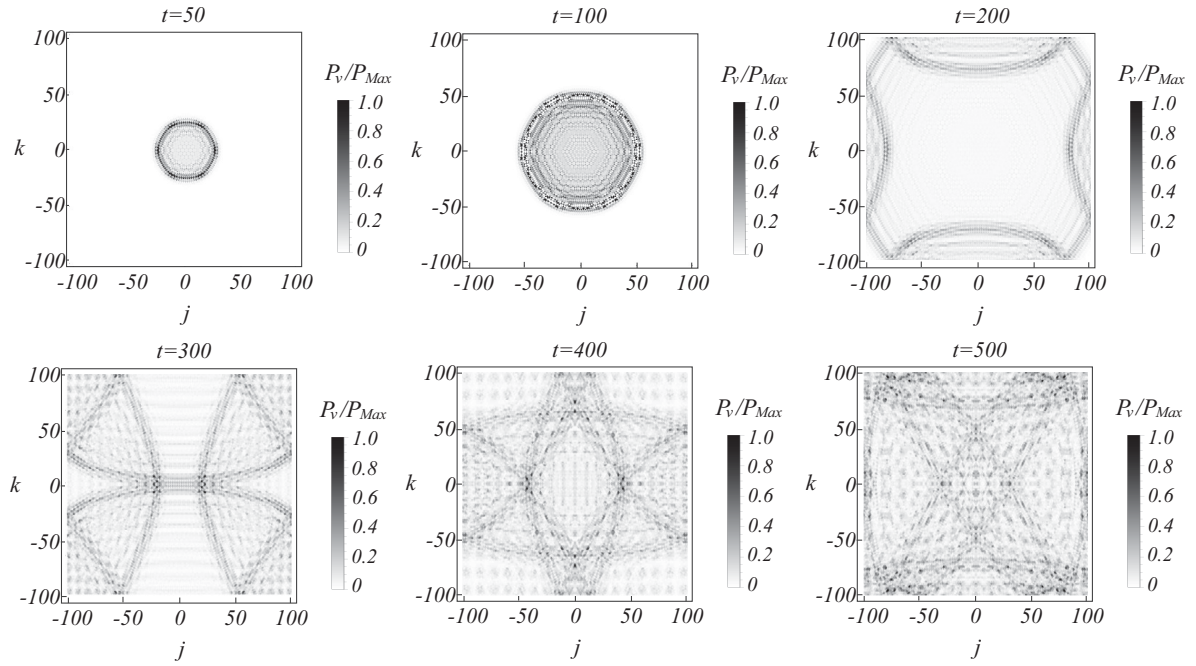


Figura 3.17: Distribuições de probabilidade normalizadas para uma nanofita quadrada com dimensões  $\{101 \times 101\}$  em instantes de tempo múltiplos de  $t_{min} = 100$ . Da esquerda pra direita, de cima pra baixo, distribuição de probabilidade para  $t = \frac{t_{min}}{2}$ ,  $t = t_{min}$ ,  $t = 2t_{min}$ ,  $t = 3t_{min}$ ,  $t = 4t_{min}$  e  $t = 5t_{min}$ , respectivamente.

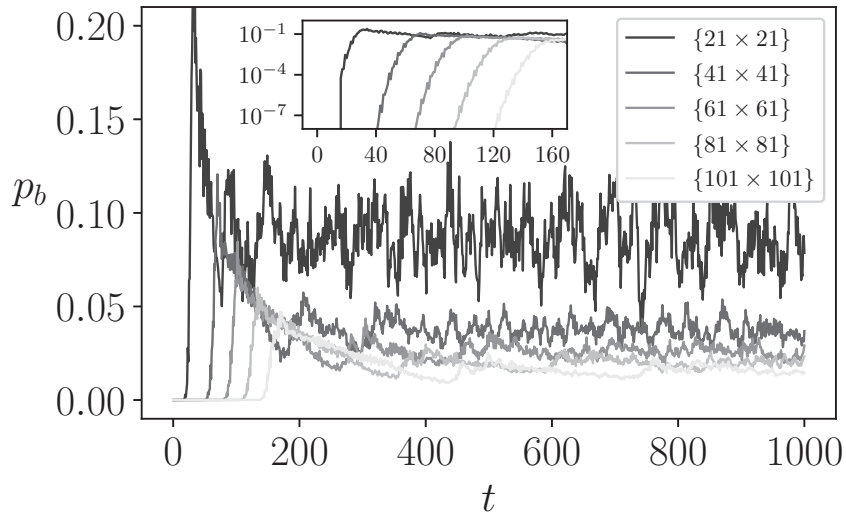


Figura 3.18: Probabilidade de encontrar a partícula em um dos vértices da borda com  $l = 2$ ,  $p_b$ , em relação a  $t$  ( $\tau = 1$ ). O painel mostra  $p_b$  para instantes de tempo muito próximos ao valor de  $t_{min}$  para cada uma das nanofitas.

$O_{(j,k)} = (x_j(0), y_v(0))$ , vide Eq.(3.1). Diretamente das Eqs.(3.28) e (3.29), por definição, que  $k_{max} = j_{max} - 1 = n - 1$ , portanto, a Eq.(3.48) pode ser reescrita como

$$Q_t = 2n^2 + 3n + 1, \quad (3.49)$$

tal que fica nítido como a quantidade total de pontos de uma nanofita quadrada aumenta de maneira quadrática à medida que aumentamos as dimensões  $\{n_x \times n_y\}$  da rede.

Considerando nanofitas quadradas descritas anteriormente, temos que a quantidade total de vértices das bordas com  $l = 2$  será dada por

$$Q_b = Q_{zig} + Q_{arm}, \quad (3.50)$$

tal que  $Q_{zig}$  é a quantidade total de vértices com  $l = 2$  das bordas zigzag, e  $Q_{arm}$  é a quantidade total de vértices com  $l = 2$  das bordas armchair. Portanto, temos que

$$Q_b = Q_{zig} + Q_{arm} = 2j_{max} + 2(k_{max} + 2), \quad (3.51)$$

mas, como por definição  $k_{max} = j_{max} - 1$ , via Eqs.(3.28)e (3.29), então o número total de vértices das bordas com  $l = 2$ ,  $Q_b$ , será dado por

$$Q_b = 4n + 2, \quad (3.52)$$

onde fica nítido como o valor de  $Q_b$  aumenta de maneira linear à medida que aumentamos as dimensões  $\{n_x \times n_y\}$  da rede.

$\{n_x \times n_y\}$	$t_{min}$	$p_b(t_{min})$	$t_{p_b(max)}$	$p_b(max)$
$\{21 \times 21\}$	20	$9.3 \times 10^{-6}$	38	0.189
$\{41 \times 41\}$	40	$1.9 \times 10^{-9}$	70	0.121
$\{61 \times 61\}$	60	$4.7 \times 10^{-13}$	102	0.085
$\{81 \times 81\}$	80	$1.2 \times 10^{-16}$	134	0.060
$\{101 \times 101\}$	100	$3.3 \times 10^{-20}$	169	0.047

Tabela 3.1: Cinco grandezas que possuem relação direta entre si: o tamanho da rede quadrada  $\{n_x \times n_y\}$ , o tempo mínimo para a partícula atingir as condições de contorno espaciais da rede, a probabilidade de encontrar a partícula em um dos vértices com  $l = 2$ ,  $p_b$ , para instante de tempo  $t = t_{min}$ , o instante de tempo em que o sistema atinge  $p_b(max)$ ,  $t_{p_b(max)}$  e, por fim, o valor de  $p_b(max)$ . É possível notar que, quanto maior o tamanho da nanofita quadrada, menor será o valor de  $p_b(t_{min})$  e de  $p_b(max)$ , como nos mostra a Fig.3.18. Os dados obtidos foram para  $\tau = 1$ .

Ao estudarmos as propriedades topológicas das nanofitas quadradas de diferentes dimensões, porém, dentro do limite nanométrico, verificamos via CQME's que a probabilidade  $p_b(max)$  é proporcional à razão entre a quantidade de vértices das bordas,  $Q_b$ , e entre a quantidade total de vértice da rede,  $Q_t$ , isto é

$$p_b(max) = K \frac{Q_b}{Q_t}, \quad (3.53)$$

de tal maneira que, para as nanofitas quadradas, o valor encontrado para  $K$  que melhor correspondeu com os resultados obtidos via CQME foi de  $K = 1.32$ . Na Fig.3.19 temos a comparação

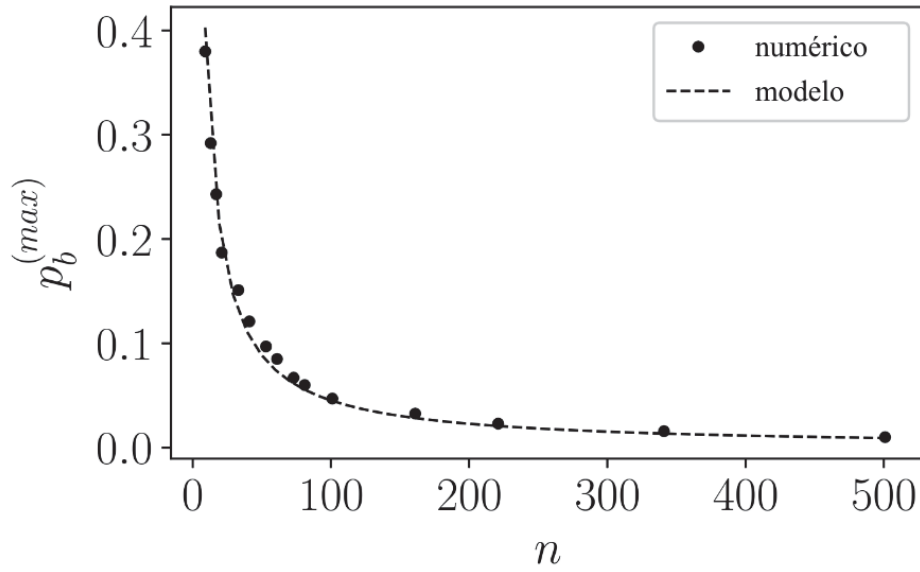


Figura 3.19: Neste gráfico temos a comparação entre  $p_b^{(max)}$  calculado via CQME's em nanofitas e via modelo proposto, ver Eq.(3.53), com os devidos valores de  $Q_b$  e  $Q_t$  para cada rede de dimensão  $\{n_x \times n_y\}$ .

entre a curva com valores de  $p_b^{(max)}$  pelo tamanho da rede  $\{n_x \times n_y\}$ , obtidos numericamente via CQME's, e a curva gerada pelo modelo proposto na Eq.(3.53). Vemos a grande semelhança entre ambas as curvas, porém, é importante pontuar que a constante de proporcionalidade  $K$  depende de alguns fatores como: a escolha das matrizes  $\hat{\Gamma}^{(j,k)l_2}$  e  $\hat{\Gamma}^{(j,k)l_3}$  e o estado inicial do sistema.

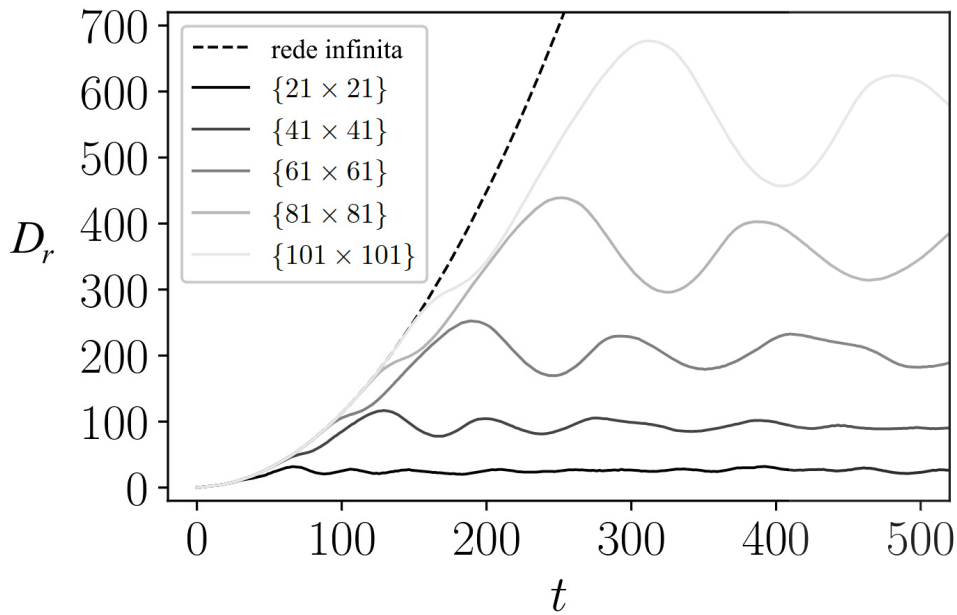


Figura 3.20: Neste gráfico podemos ver como o comportamento do deslocamento quadrático médio radial,  $D_r$ , está diretamente associado com o tamanho da nanofita quadrada e, conseqüentemente, com as interações da partícula (caminhante quântico) com os vértices de bordas. As linhas sólidas representam  $D_r \times t$  para nanofitas de dimensão  $\{n_x \times n_y\}$ , e a linha trastejada para uma rede hexagonal sem condições de contorno (rede infinita).

O fato da partícula começar a ocupar estados de vértices de borda quebra o comportamento quadrático de  $D_r$ , como dito anteriormente. Entretanto, nos primeiros instantes de interação da partícula com os vértices de borda com  $l = 2$ , essa quebra de comportamentos não é perceptível. Só conseguimos perceber essa ruptura de padrão a partir do instante de tempo  $t \approx \frac{5t_{min}}{3}$ , com  $\tau = 1$ . A Fig.3.20 nos mostra o comportamento do deslocamento quadrático médio radial,  $D_r$ , à medida que os sistemas com diferentes dimensões evoluem no tempo. Conseguimos ver o mesmo comportamento oscilatório de  $D_r$  para todas as nanofitas abordadas neste trabalho. Além disso, o valor de  $D_r$ , o qual a amplitude diminui conforme a evolução temporal, está diretamente ligado ao fato da nanofita ser uma rede confinada [139].

Ao tomarmos a normalização do  $D_r$  em relação ao  $t_{min}$  de cada nanofita, observamos que as curvas da Fig.3.21 tendem a convergir para o mesmo valor à medida que o tamanho da rede aumenta. Isto corrobora o fato de que as distribuições de probabilidade para diferentes tamanhos de nanofitas têm padrões de acordo com a escala de tempo de  $t_{min}$  de cada rede. Além disso, considerando que o comportamento oscilatório do  $D_r$  resulta da interação da partícula com as bordas da rede, podemos pontuar que a dependência do valor de convergência com o tamanho da rede pode ser interpretado como uma consequência direta da razão

$$R = Q_b/Q_t, \quad (3.54)$$

e, conseqüentemente com o valor de  $p_b$  para cada rede, mostrado na Fig.3.18.

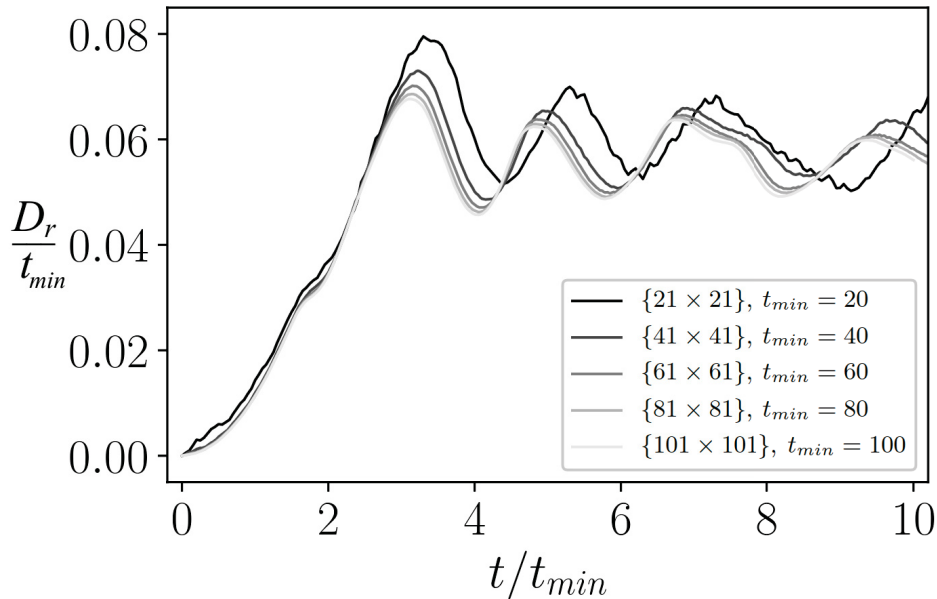


Figura 3.21: Neste gráfico temos o valor normalizado de  $D_r$  em relação a  $t_{min}$  para nanofitas de diferentes tamanhos. A medida que aumentamos as dimensões da nanofitas, as curvas tendem a convergir para valores cada vez mais próximos.

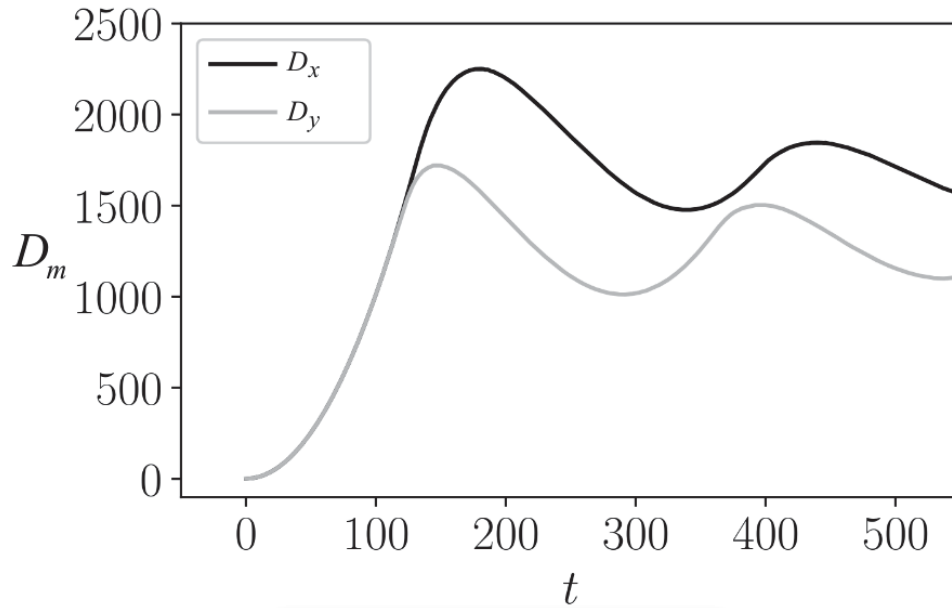


Figura 3.22: Neste gráfico vemos o comportamento oscilatório do deslocamento quadrático médio radial decomposto em  $D_x$  e  $D_y$ , para um nanofita quadrada  $\{81 \times 81\}$ , deixando claro como o caráter oscilatório da DQM radial inicia primeiro na direção  $\hat{e}_y$ . É importante notar que, a simetria da rede, dada pela Eq.(3.1), faz com que  $D_x$  tenha valores maiores ao longo da caminhada.

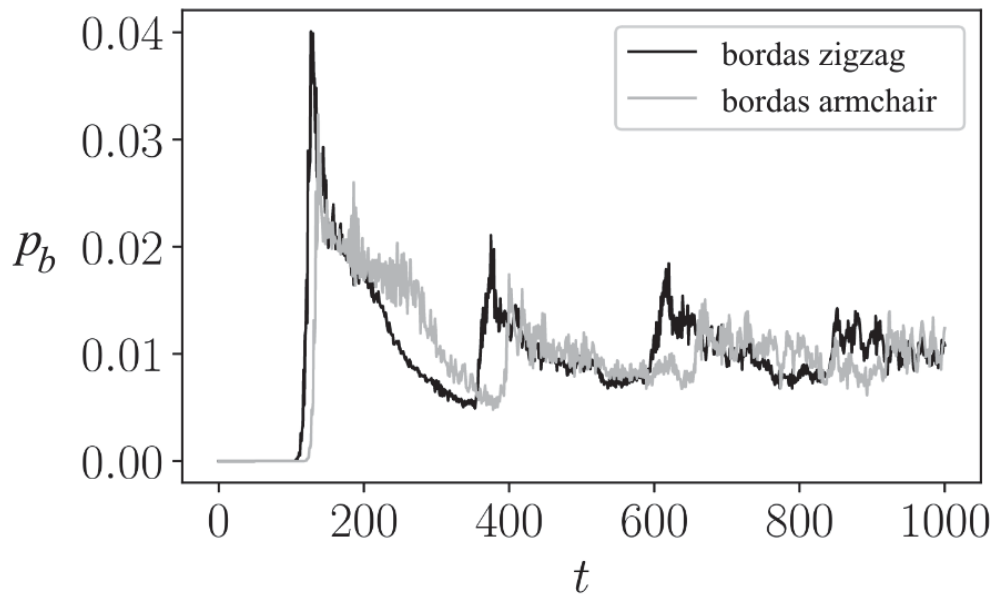


Figura 3.23: Neste gráfico podemos notar como os valores de probabilidade associadas aos vértices de borda com  $l = 2$  de uma nanofita com dimensões  $\{81 \times 81\}$  atingem seu valor máximo primeiro nas bordas zigzag do que nas bordas armchair, corroborando com os resultados da Fig.3.22.

Analizando as Figs.3.13 - 3.17 podemos notar que as distribuições de probabilidade possuem simetria de rotação em relação a eixos  $S_n$ , tal que

$$S_n = \frac{360^\circ}{n}, \text{ onde } n \in \{2, 3, 6, 12\}, \quad (3.55)$$

para  $t < t_{min}$ . Isto é uma consequência direta da escolha da matriz espalhamento, do estado inicial [152] e da estrutura topológica da rede hexagonal. Entretanto, quando a partícula atinge os vértices de borda, essas simetrias deixam de existir. Além disso, podemos notar que, devido aos padrões simétricos formados pelas distribuições de probabilidade, padrões estes relacionados diretamente com  $x_j$  e  $y_k$ , a frente de onda (em sua amplitude máxima) atinge primeiro as bordas zigzag, como mostrado na Fig. 3.23 em  $t = 240$ , para uma nanofita de  $\{81 \times 81\}$ . Uma vez que isso ocorre, temos um impacto direto no DQM na direção  $\hat{e}_y$ ,  $D_y$ , como mostrado na Fig.3.22 para uma rede  $\{81 \times 81\}$ , onde é possível observar nitidamente como o comportamento oscilatório de  $D_r$  inicia primeiro na direção  $\hat{e}_y$ , uma consequência da Eq.(3.1).

Considerando os resultados obtidos para este tipo de nanofitas, esperamos que tais resultados possam embasar estudos futuros relacionando a tipos distintos de nanofitas de redes hexagonais, como, por exemplo, nanofitas retangulares,  $n_x \neq n_y$ , e/ou nanofitas irregulares, com defeitos na rede e condições de contorno também irregulares. Além disso, vale notar que os resultados obtidos foram para matrizes de espalhamento imparciais, tanto para vértices com  $l = 2$  como para  $l = 3$ . Desta forma, esperamos que os resultados apresentados nesta seção possam também servir de base para investigações futuras associadas a CQME's com diferentes tipos de matrizes de espalhamento e focando, por exemplo, na comparação entre as grandezas aqui investigadas e propriedades de transporte em materiais bidimensionais com rede hexagonal e diferentes tipos de condição de contorno.

## CAPÍTULO 4

# CAMINHADAS QUÂNTICAS POR MODELO DE ESPALHAMENTO NA REDE HEXAGONAL: ESPAÇO DE MOMENTO

Neste capítulo, iremos apresentar o formalismo para CQME's no espaço de momento e mostrar dois métodos para construção de estrutura de bandas  $\pi$  e  $\pi^*$  de materiais planares com rede hexagonal: um analítico e centrado na matriz AB e, outro numérico e centrada em uma matriz geradora do  $SU(3)$ .

Nas seções anteriores nós abordamos as CQME's com um formalismo centrado em grafos quânticos [40]. A partir daqui, será necessário explorar outros conceitos e formalismos, em especial os de Física da Matéria Condensada. Recomendamos fortemente ao leitor não habituado uma leitura dos capítulos iniciais dos livros da área [191, 218, 219].

### 4.1 Formalismo e Principais Grandezas

#### 4.1.1 Rede de Bravais e Rede Recíproca

A rede hexagonal é constituída por dois tipos diferentes de vértices, como falado anteriormente. Portanto, para explorarmos as características periódicas de uma rede, é necessário definir a menor unidade desta, denominada de célula unitária/primitiva. No caso da rede hexagonal, sempre teremos dois vértices não equivalentes em sua célula unitária, e, uma das escolhas possíveis é a célula de Wigner-Seitz, mostrada na Fig.4.1. Neste caso, podemos considerar que cada célula unitária está centrada em um vértice  $(j, k)$  da rede hexagonal e, portanto, podemos recobrir todo o plano da rede de Bravais equivalente apenas transladando a célula unitária de acordo com a

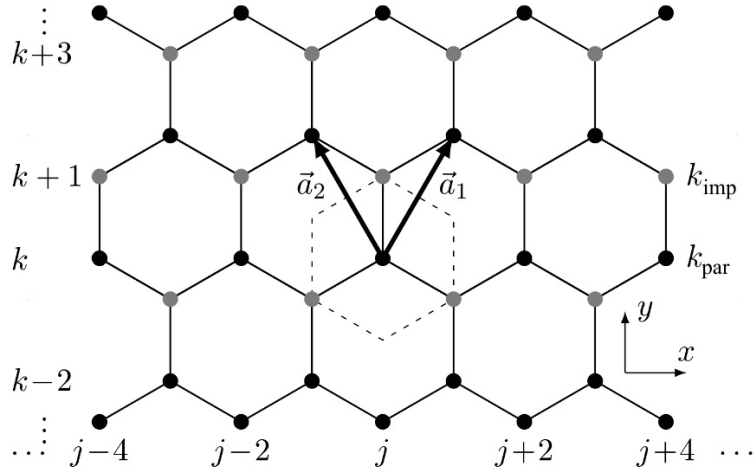


Figura 4.1: Mapeando os vértices da rede hexagonal (vértices pretos) em uma rede triangular de Bravais (pontos cinzas) pela Eq.(4.1). A área pontilhada é a célula de Wigner-Seitz [191], note que, há dois vértices não equivalente dentro desta.

topologia da rede. O vetor gerador da rede de Bravais é dado por

$$\vec{R}_{(m_1, m_2)} = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2, \quad (4.1)$$

onde  $(m_1, m_2)$  são números inteiros e os vetores de base são

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} (\sqrt{3}\hat{e}_x + 3\hat{e}_y), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2} (-\sqrt{3}\hat{e}_x + 3\hat{e}_y). \quad (4.2)$$

Ao mapearmos a rede hexagonal em uma rede de Bravais triangular, podemos então aplicar as demais definições advindas das redes de Bravais para a nossa rede. Uma delas é a definição da rede recíproca [191], de extrema importância para a CQME's no espaço de momento. Da mesma maneira que a rede de Bravais é construída através do vetor  $\vec{R}_{(m_1, m_2)}$ , a rede recíproca é gerada pelo vetor  $\vec{G}_{(n_1, n_2)}$  dado por

$$\vec{G}_{(n_1, n_2)} = n_1 \vec{b}_1 + n_2 \vec{b}_2, \quad (4.3)$$

tal que  $(n_1, n_2)$  são número inteiros e os vetores de base  $\vec{b}_i$  são dados por

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \left( \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{e}_x + \frac{1}{3}\hat{e}_y \right), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \left( -\frac{1}{\sqrt{3}}\hat{e}_x + \frac{1}{3}\hat{e}_y \right), \quad (4.4)$$

e podem ser obtidos diretamente da relação

$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}, \quad (4.5)$$

tal que  $i \in \{1, 2\}$ ,  $j \in \{1, 2\}$ ,  $\delta$  é a função delta de Kronecker.



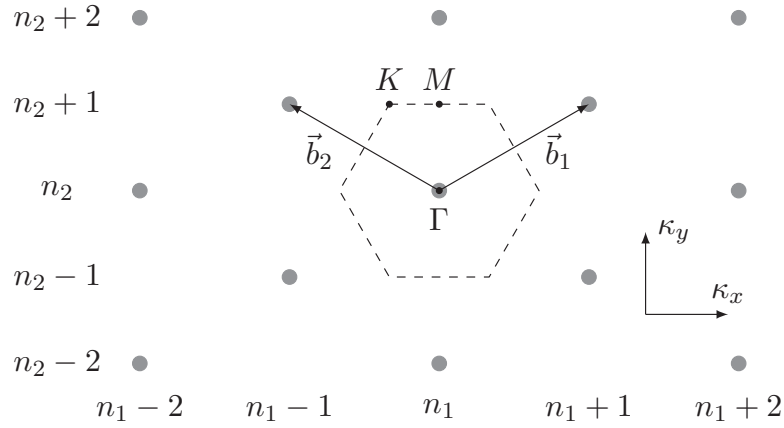


Figura 4.2: A rede recíproca, com pontos gerados pela Eq.(4.3), associada à rede de Bravais mostrada na Fig.4.1, perceba que ela também possui estrutura triangular. A área pontilhada é a primeira Zona de Brillouin tal que  $\Gamma$ ,  $K$  e  $M$  são seus pontos de alta simetria.

A célula unitária da rede recíproca é denominada de primeira Zona de Brillouin (ZB), e, para o caso de um rede de Bravais triangular, a rede recíproca também é uma rede triangular. Na Fig.4.2 temos a ilustração da rede recíproca gerada pela Eq.(4.4) juntamente com os principais pontos de alta simetria da primeira zona de Brillouin,  $\Gamma$ ,  $K$  e  $M$  com coordenadas  $(\kappa_x, \kappa_y)$  dadas respectivamente por  $(0, 0)$ ,  $(-\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a})$  e  $(0, \frac{2\pi}{3a})$ . Estes pontos de alta simetria são essenciais para o estudo das relações de dispersão de energia de um material que apresenta este tipo de rede recíproca, como veremos adiante.

#### 4.1.2 Condições para CQME's Invariantes sob Translação

Uma vez que definimos o vetor  $\vec{R}_{(m_1, m_2)}$ , podemos então definir a ação do operador translação  $\hat{T}_{\vec{R}_{(m_1, m_2)}}$  em um estado de base de posição  $|\vec{r}\rangle$

$$\hat{T}_{\vec{R}_{(m_1, m_2)}} |\vec{r}\rangle = |\vec{r} + \vec{R}_{(m_1, m_2)}\rangle, \quad (4.6)$$

onde  $\vec{R}_{(m_1, m_2)}$  é descrito pela Eq.(4.1).

Considerando um estado de base do sistema,  $|\sigma, j, k\rangle \equiv |\sigma, \vec{r}_{(j, k)}\rangle$ , descrito em função das coordenadas Cartesianas, veja Eq.(3.1), tal que  $\vec{r}_{(j, k)} = (x_j, y_k)$  e, portanto, a ação de  $\hat{T}_{\vec{R}_{(m_1, m_2)}}$  é dada por

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\vec{R}_{(m_1, m_2)}} |\sigma, \vec{r}_{(j, k)}\rangle &= |\sigma, \vec{r}_{(j, k)} + \vec{R}_{(m_1, m_2)}\rangle \\ &= |\sigma, j + m_1 - m_2, k + 2(m_1 + m_2)\rangle. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Para que as CQME's estejam de acordo com a simetria da rede de Bravais, precisamos

garantir que

$$\left[ \hat{U}, \hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)} \right] = \hat{U} \hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)} - \hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)} \hat{U} = 0, \quad (4.8)$$

sendo  $\hat{U}$  o operador evolução temporal definido no capítulo anterior. Primeiramente, considerando a Eq.(3.7), podemos escrever ação de  $\hat{U}$  no estados de base do espaço de posição  $\{|\sigma, j, k_\eta\rangle\}$ , tal que  $k_\eta \in \{k_{par}, k_{imp}\}$ , como

$$\hat{U} = \sum_{j, k_\eta} \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j, k_\eta)} |\sigma', \mathcal{J}(\sigma', j, k_\eta), \mathcal{K}(\sigma', j, k_\eta)\rangle \langle \sigma, j, k_\eta|, \quad (4.9)$$

consequentemente, com objetivo de obter a relação presente na Eq.(4.8), tomamos que

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)} \hat{U} &= \sum_{j, k_\eta} \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j, k_\eta)} |\sigma', \mathcal{J}(\sigma', j, k_\eta) + m_1 - m_2, \mathcal{K}(\sigma', j, k_\eta) + 2(m_1 + m_2)\rangle \\ &\quad \times \langle \sigma, j, k_\eta|, \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} \hat{U} \hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)} &= \sum_{j, k_\eta} \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j, k_\eta)} |\sigma', \mathcal{J}(\sigma', j, k_\eta), \mathcal{K}(\sigma', j, k_\eta)\rangle \\ &\quad \times \langle \sigma, j - m_1 + m_2, k_\eta - 2(m_1 + m_2)|. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Considerando uma mudança de coordenadas tal que

$$j' = j - m_1 + m_2, \quad k'_\eta = k_\eta - 2(m_1 + m_2), \quad (4.12)$$

e, que pela definição das funções topológicas podemos escrever que

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\sigma, j + m_1 - m_2, k_\eta + 2(m_1, m_2)) &= \mathcal{J}(\sigma, j, k_\eta) + m_1 - m_2 \\ \mathcal{K}(\sigma, j + m_1 - m_2, k_\eta + 2(m_1, m_2)) &= \mathcal{K}(\sigma, j, k_\eta) + 2(m_1 + m_2), \end{aligned} \quad (4.13)$$

considerando as Eqs.(4.10),(4.11), (4.12) e (4.13), temos que, para que a Eq.(4.8) seja satisfeita, implica necessariamente que

$$\Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j, k_\eta)} = \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j+m_1-m_2, k_\eta+2(m_1, m_2))}. \quad (4.14)$$

A Eq.(4.14) nos diz que, para que as CQME's sejam invariantes perante translações, necessariamente os vértices pertencentes a mesma subrede precisam ter a mesma matriz espalhamento, isto é

$$\Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j, k_{par})} = \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(+)} \quad \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(j, k_{imp})} = \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(-)}. \quad (4.15)$$

Portanto, para simplificar a notação, denotaremos que um vértice genérico  $(j, k)$  terá a matriz

espalhamento condizente com a paridade da sua coordenada  $k$  tal que

$$\hat{\Gamma}_{\sigma'\sigma}^{(j,k)} = \hat{\Gamma}_{\sigma'\sigma}^{((-1)^k)}. \quad (4.16)$$

Aqui vale notar que, de acordo como formalismo mais geral possível de CQME's no espaço de posição, em tese, cada vértice  $(j, k)$  da rede pode estar associado a uma matriz espalhamento distinta. Entretanto, aqui notamos que neste tipo de rede as CQME's não seriam invariantes sob ação do vetor translação  $\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}$ , uma que a condição imposta na Eq.(4.14) jamais seria satisfeita.

Uma vez que definimos a ação de  $\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}$  no espaço de posição, veja Eq.(4.6), podemos agora definir sua ação no espaço de momento como

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)} &= \exp[i \hat{\vec{K}} \cdot \vec{R}(m_1, m_2)] \\ &= \exp\left[i \frac{3}{2} \left[ \frac{(m_1 - m_2)}{\sqrt{3}} \hat{K}_x + (m_1 + m_2) \hat{K}_y \right]\right], \end{aligned} \quad (4.17)$$

tal que  $\hat{K}_w = \hat{P}_w/\hbar$  é o operador momento na direção  $w$ , ou seja  $w = x, y$ . Iremos então definir os estados de base  $\{|\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle\}$  para CQME's no espaço de momento, dada a constante de normalização  $\mathcal{N}$ , como

$$\begin{aligned} |\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_j \sum_k \exp[i(\kappa_x x_j + \kappa_y y_k)] |\sigma, j, k\rangle \\ &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_j \sum_{k_{par}} \exp[i(\kappa_x x_j + \kappa_y y_k)] |\sigma, j, k\rangle \\ &\quad + \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_j \sum_{k_{imp}} \exp[i(\kappa_x x_j + \kappa_y y_k)] |\sigma, j, k\rangle \\ &= |\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle_{par} + |\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle_{imp}, \end{aligned} \quad (4.18)$$

de tal maneira que a ação do operador momento em uma das direções em um estado de base  $\{|\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle\}$  é dada por

$$\hat{K}_x |\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle = \kappa_x |\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle, \quad \hat{K}_y |\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle = \kappa_y |\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle, \quad (4.19)$$

sendo  $\kappa_x$  e  $\kappa_y$  os respectivos autovalores para cada direção. Apesar de termos definidos, a priori, os estados de bases no espaço de momento, vale notar que, como o operador  $\hat{T}_{\vec{R}(m_1, m_2)}$  translada um certo vértice para outro topologicamente equivalente, isto implica em uma degenerescência nos autovalores  $\kappa_x$  e  $\kappa_y$  associados a  $|\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle_{par}$  e a  $|\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle_{imp}$ .

### 4.1.3 Autovalores e Bandas de Energia: Definições e Formalismo

De maneira análoga a CQME's no estado de posição, as CQME's no estado de momento podem ser uma ferramenta de investigação para sistemas quânticos. A relação de dispersão de energia de um material, por exemplo, é uma das características que pode revelar se este material se trata de um condutor, semicondutor ou isolante dada certas condições. Nesta subseção, nos iremos apresentar um método analítico para obtenção de relações de dispersão de energia e estrutura de bandas para materiais planares com rede hexagonal.

Uma maneira de obter as relações de dispersão de energia e estruturas de banda é calcular os autovalores associados a ação do operador  $\hat{U}$ . Porém, uma vez que a célula unitária da rede de Bravais associada à rede hexagonal possui dois vértices não equivalentes, como mostrado na Fig.4.1, temos como condição para conservação de simetria da rede que a equação de autovalores será descrita por

$$\hat{U}_{ef} |u\rangle = \exp[-2iE/\tilde{\epsilon}] |u\rangle, \quad (4.20)$$

tal que E é o valor de energia para um dado autoestado  $|u\rangle$ , onde

$$\tilde{\epsilon} = \hbar/\tau, \quad (4.21)$$

e,  $\hat{U}_{ef}$  é operador evolução para dois passos de tempo, isto é

$$\hat{U}_{ef} = \hat{U}^{2\tau}. \quad (4.22)$$

Considerando as Eq.(3.7) e (4.16), temos portanto que a ação de  $\hat{U}_{ef}$  em um estado de base  $|\sigma, j, k\rangle$  será dada por

$$\begin{aligned} \hat{U}_{ef} |\sigma, j, k\rangle &= \sum_{\sigma'} \sum_{\sigma''} \Gamma_{\sigma'\sigma}^{((-1)^k)} \Gamma_{\sigma''\sigma'}^{(-(-1)^k)} \\ &\quad |\sigma'', \mathcal{J}(\sigma'', \mathcal{J}(\sigma', j, k), \mathcal{K}(\sigma', j, k)), \mathcal{K}(\sigma'', \mathcal{J}(\sigma', j, k), \mathcal{K}(\sigma', j, k))\rangle, \\ &= \sum_{\sigma'} \sum_{\sigma''} \Gamma_{\sigma'\sigma}^{((-1)^k)} \Gamma_{\sigma''\sigma'}^{(-(-1)^k)} \\ &\quad |\sigma'', j + (-1)^k (\sigma' - \sigma''), k + (-1)^k, ((-1)^{\sigma'} - (-1)^{\sigma''})\rangle. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Desta forma, uma vez definida a ação de  $\hat{U}_{ef}$  podemos, portanto, definir a ação deste no estado

de base  $|\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle$

$$\begin{aligned} \hat{U}_{ef} |\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_j \sum_k \sum_{\sigma''} \sum_{\sigma'} \Gamma_{\sigma'\sigma}^{((-1)^k)} \Gamma_{\sigma''\sigma'}^{(-(-1)^k)} \exp[i(\kappa_x x_j + \kappa_y y_k)] \\ &\quad \times |\sigma'', j + (-1)^k f(\sigma'', \sigma'), k + (-1)^k g(\sigma'', \sigma')\rangle, \end{aligned} \quad (4.24)$$

tal que  $f(\sigma'', \sigma')$  e  $g(\sigma'', \sigma')$  serão definidas como

$$f(\sigma'', \sigma') = (\sigma' - \sigma''), \quad g(\sigma'', \sigma') = (-1)^{\sigma'} - (-1)^{\sigma''}. \quad (4.25)$$

A ação de  $\hat{U}_{ef}$  em um estado de base do sistema associado ao vértice  $(j, k)$  evoluirá o caminhante ao vértices  $(j', k')$  tal que

$$(j', k') \in \{(j, k), (j \pm 2, k), (j \pm 1, k - 2), (j \pm 1, k + 2)\}, \quad (4.26)$$

e, como uma condição direta, as coordenadas  $k$  e  $k'$  terão a mesma paridade, já que a ação de  $\hat{U}_{ef}$  sempre leva a estados de base de vértices topologicamente equivalentes. Desta forma, considerando as Eqs.(3.1) e (4.26) podemos definir que

$$\begin{aligned} x_{(j' - (-1)^{k'} f(\sigma'', \sigma'))} &= x_{j'} - (-1)^{k'} \frac{\sqrt{3}}{2} f(\sigma'', \sigma') a, \\ y_{(k' - (-1)^{k'} g(\sigma'', \sigma'))} &= y_{k'} - (-1)^{k'} \frac{3}{4} g(\sigma'', \sigma') a. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Portanto, considerando a Eq.(4.27) e considerando a devida troca de coordenadas, onde

$$j' = j + (-1)^k f(\sigma'', \sigma'), \quad (4.28)$$

$$k' = k + (-1)^k g(\sigma'', \sigma'), \quad (4.29)$$

podemos, reescrever a Eq.(4.24) como

$$\begin{aligned} \hat{U}_{ef} |\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{j'} \sum_{k'} \sum_{\sigma''} \sum_{\sigma'} \Gamma_{\sigma''\sigma'}^{(-(-1)^{k'})} \Gamma_{\sigma'\sigma}^{((-1)^{k'})} \\ &\quad \times \exp[-i(-1)^{k'} a(\frac{\sqrt{3}}{2} f(\sigma'', \sigma') \kappa_x + \frac{3}{4} g(\sigma'', \sigma') \kappa_y)] \\ &\quad \times \exp[i(\kappa_x x_{j'} + \kappa_y y_{k'})] |\sigma'', j', k'\rangle, \end{aligned} \quad (4.30)$$

tal que considerando as Eqs.(4.15), (4.27) e (4.29), nos leva a

$$\begin{aligned} \hat{U}_{ef} |\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\sigma''} \sum_{\sigma'} \\ &\left\{ \sum_{j'} \sum_{k'_{par}} \Gamma_{\sigma''\sigma'}^{(-)} \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(+)} \exp[-i a \left( \frac{\sqrt{3}}{2} (\sigma' - \sigma'') \kappa_x + \frac{3}{4} ((-1)^{\sigma'} - (-1)^{\sigma''}) \kappa_y \right)] \right. \\ &+ \left. \sum_{j'} \sum_{k'_{imp}} \Gamma_{\sigma''\sigma'}^{(+)} \Gamma_{\sigma'\sigma}^{(-)} \exp[+i a \left( \frac{\sqrt{3}}{2} (\sigma' - \sigma'') \kappa_x + \frac{3}{4} ((-1)^{\sigma'} - (-1)^{\sigma''}) \kappa_y \right)] \right\} \\ &\times \exp[i (\kappa_x x_{j'} + \kappa_y y_{k'})] |\sigma'', j', k'\rangle. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Podemos então definir a ação de  $\hat{U}_{ef}$  em um estado  $|\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle$  como

$$\begin{aligned} \hat{U}_{ef} |\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle &= \sum_{\sigma''} (\hat{F} \hat{\Gamma}^{(-)} \hat{F}^\dagger \hat{\Gamma}^{(+)})_{\sigma''\sigma} |\sigma'', \kappa_x, \kappa_y\rangle_{par} + \\ &\sum_{\sigma''} (\hat{F}^\dagger \hat{\Gamma}^{(+)} \hat{F} \hat{\Gamma}^{(-)})_{\sigma''\sigma} |\sigma'', \kappa_x, \kappa_y\rangle_{imp}, \end{aligned} \quad (4.32)$$

e que os elementos da matriz diagonal  $\hat{F}$  são dados por

$$F_{\sigma''\sigma'} = \exp \left[ i a \left( \frac{\sqrt{3}}{2} \kappa_x \sigma'' + \frac{3}{4} \kappa_y (-1)^{\sigma''} \right) \right] \delta_{\sigma''\sigma'}, \quad (4.33)$$

tal que  $\delta_{\sigma''\sigma'}$  é a função delta de Kronecker.

Como dito anteriormente, tanto  $|\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle$  como  $|\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle_{par}$  e  $|\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle_{imp}$ , nenhum destes é um autoestado de  $\hat{U}_{ef}$ . Portanto, iremos definir a combinação linear

$$\begin{aligned} |u(\kappa_x, \kappa_y)\rangle &= \sum_{\sigma} C_{\sigma}^{(+)} |\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle_{par} + \\ &\sum_{\sigma} C_{\sigma}^{(-)} |\sigma, \kappa_x, \kappa_y\rangle_{imp}, \end{aligned} \quad (4.34)$$

desta forma, temos que a equação de autovalores na nova base será dada por

$$\hat{U}_{ef} |u(\kappa_x, \kappa_y)\rangle = \exp[-2iE/\tilde{\varepsilon}] |u(\kappa_x, \kappa_y)\rangle, \quad (4.35)$$

onde considerando as Eqs.(4.32) e (4.34), temos necessariamente que

$$\begin{pmatrix} \hat{F} \hat{\Gamma}^{(-)} \hat{F}^\dagger \hat{\Gamma}^{(+)} & \hat{O} \\ \hat{O} & \hat{F}^\dagger \hat{\Gamma}^{(+)} \hat{F} \hat{\Gamma}^{(-)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C^{(+)} \\ C^{(-)} \end{pmatrix} = \exp[-2iE/\tilde{\varepsilon}] \begin{pmatrix} C^{(+)} \\ C^{(-)} \end{pmatrix}, \quad (4.36)$$

tal que  $\hat{O}$  é uma matriz  $3 \times 3$  nula e  $C^{(s)} = (C_1^{(s)} C_2^{(s)} C_1^{(s)})^T$  onde  $s = \pm$ . A solução da Eq.(4.36) implica que

$$0 = \det \left( \hat{F} \hat{\Gamma}^{(-)} \hat{F}^\dagger \hat{\Gamma}^{(+)} - \exp[-2iE/\tilde{\varepsilon}] \hat{\mathbf{1}} \right) \\ \times \det \left( \hat{F}^\dagger \hat{\Gamma}^{(+)} \hat{F} \hat{\Gamma}^{(-)} - \exp[-2iE/\tilde{\varepsilon}] \hat{\mathbf{1}} \right), \quad (4.37)$$

onde  $\hat{\mathbf{1}}$  é uma matriz identidade  $3 \times 3$ . Os dois determinantes da Eq.(4.37) levam a mesma expressão e, portanto, a equação característica para CQME's na rede hexagonal é dada por

$$\det \left( \hat{F} \hat{\Gamma}^{(-)} \hat{F}^\dagger \hat{\Gamma}^{(+)} - \exp[-2iE/\tilde{\varepsilon}] \hat{\mathbf{1}} \right) = 0. \quad (4.38)$$

Convido o leitor a refletir um momento sobre a Eq.(4.38). Podemos notar, por exemplo, que os elementos da matriz diagonal  $\hat{F}$  dependem diretamente de  $\kappa_x$  e  $\kappa_y$  e, além disso, descrevem a topologia da rede hexagonal. Desta forma, neste formalismo é possível notar como as estruturas de bandas são constituídas de contribuições topológicas da rede, vide Eq.(4.33), e contribuições relacionadas à interação entre as partículas e os vértices da rede desta, que no formalismo de CQME's estão diretamente associadas as escolhas das matrizes  $\hat{\Gamma}^{(\pm)}$ .

Uma vez que há infinitas matrizes que possam ser tomadas como matrizes espalhamento para o sistema,  $\hat{\Gamma}^{(\pm)} \in U(3)$ , isto pode estar diretamente relacionado com a grande diversidade de materiais de Dirac sendo explorados [165, 220, 221]. Vale notar que isso emerge naturalmente de nosso modelo, já que cada conjuntos de  $\hat{\Gamma}^{(\pm)}$  pode ser interpretado como um material com características específicas.

Além disso, a Eq.(4.38) generaliza resultados de estudos recentes que relacionam as estruturas topológicas associadas a materiais bidimensionais com a extensão dos grupos de simetria  $SU(2) \rightarrow SU(3)$  [222, 223].

Na próxima seção iremos apresentar um exemplo de como é possível encontrar estruturas de bandas de maneira analítica, dada uma certa escolha de parametrização para as matrizes  $\hat{\Gamma}^{(\pm)}$ .

## 4.2 Bandas de Energia e Afins: Um exemplo exato para a Matriz AB

Nesta seção nós iremos mostrar como aplicar o formalismo mostrado na seção anterior para obtenção de estruturas de bandas. Em específico, iremos mostrar como obter as estruturas de banda  $\pi$  e  $\pi^*$  para toda a família de matrizes geradas pela matriz AB.

## 4.2.1 Bandas de Energia

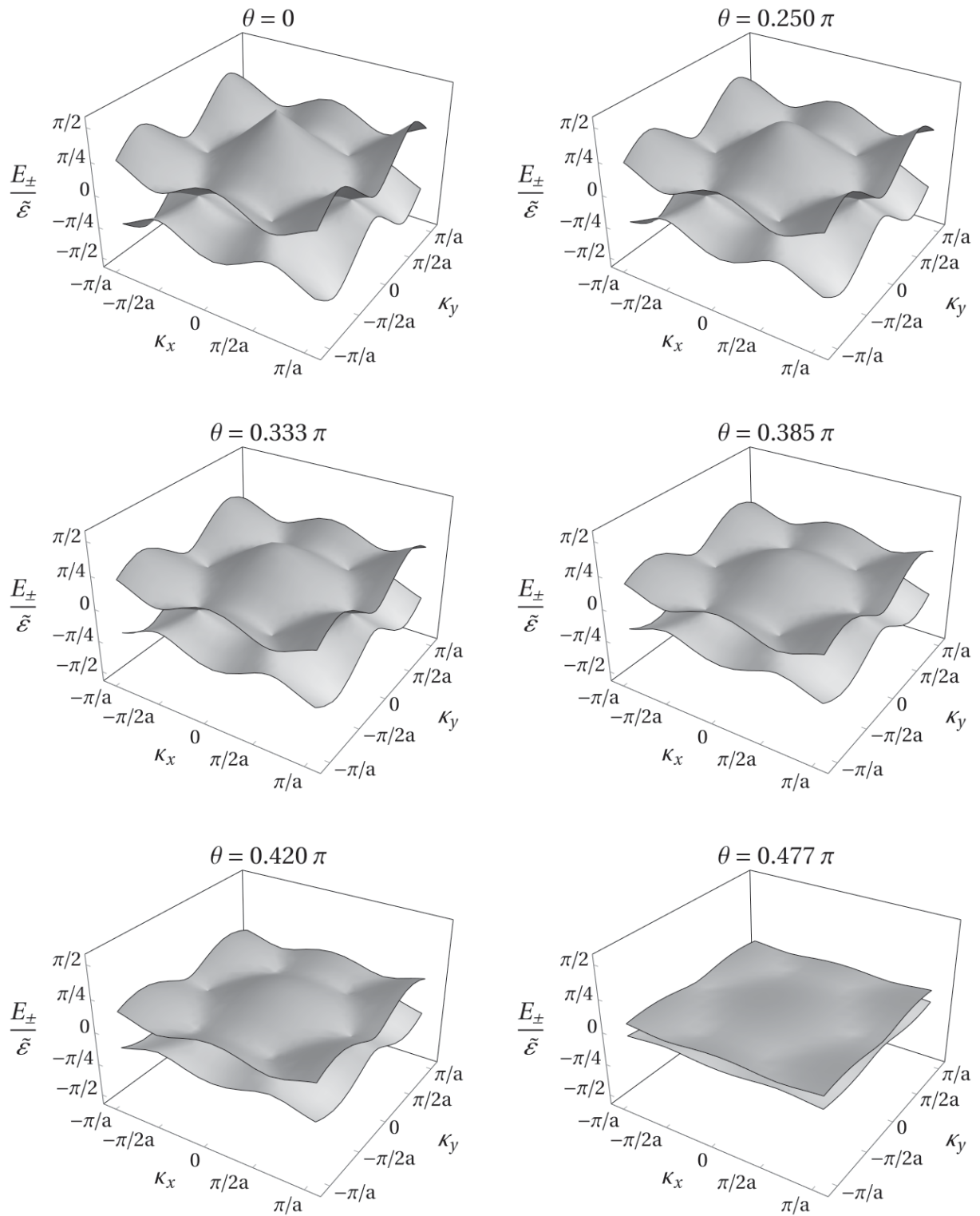


Figura 4.3: Estruturas de bandas, obtidas através da Eq.(4.41) para diferentes matrizes  $\Gamma_{AB}(\theta, \pi/2)$ , ao longo da primeira zona de Brillouin e em unidades de  $E_{\pm}/\tilde{\epsilon}$ .

Primeiramente, devemos fazer algumas considerações para o exemplo em questão. Iremos considerar que, para este caso,  $\hat{\Gamma}^{(+)} = \hat{\Gamma}^{(-)} = \hat{\Gamma}_{AB}$ , dada a Eq.(3.22). Isto implica que todos os



vértices da rede terão a mesma matriz espalhamento, entretanto, vale notar que a não equivalência topológica entre os vértices com diferentes paridades para coordenada  $k$  é mantida.

Considerando as Eqs.(3.21) e (3.22), teremos então que Eq.(4.38), para o caso das matrizes AB, será dada por

$$0 = \left( \frac{|t_B(\theta)|^2}{4} h(\vec{\kappa}) - \cos^2[E/\tilde{\varepsilon} + \gamma] \right) \times (\sin[E/\tilde{\varepsilon} + \gamma - \theta] + 2 \sin[E/\tilde{\varepsilon} + \gamma + \theta]), \quad (4.39)$$

tal que a função  $h(\vec{\kappa})$  é dada por

$$h(\vec{\kappa}) = 3 + 4 \cos \left[ \frac{\sqrt{3}\kappa_x a}{2} \right] \cos \left[ \frac{3\kappa_y a}{2} \right] + 2 \cos \left[ \sqrt{3}\kappa_x a \right], \quad (4.40)$$

e tal que  $0 \leq h(\vec{\kappa}) \leq 9$  para qualquer valor de  $\kappa_x, \kappa_y$ . Uma vez que os argumentos da função seno na Eq.(4.39) não dependem de  $(\kappa_x, \kappa_y)$ , teremos uma solução com dependência em  $\kappa$  para a Eq.(4.39) dada por

$$E_{\pm}(\vec{\kappa}, \theta, \gamma) = \tilde{\varepsilon} \left( \arccos \left[ \mp \frac{|t_B(\theta)|}{2} \sqrt{h(\kappa_x, \kappa_y)} \right] - \gamma \right). \quad (4.41)$$

Podemos notar que a Eq.(4.41) possui três parâmetros livres  $\gamma, \theta$  e  $\tilde{\varepsilon}$ , que a princípio são ajustáveis. Um deles,  $\gamma$ , é um parâmetro de fase global presente na Eq.(3.22) e que na Eq.(4.41) é associado a um controle de gaps entre as bandas.

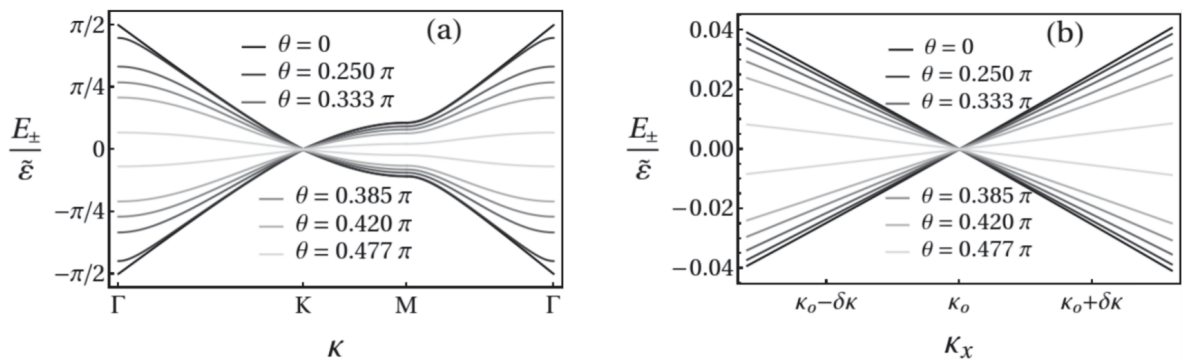


Figura 4.4: (a) Bandas de energia para diferentes valores de  $\theta$  e  $\gamma = \pi/2$  ao longo do caminho fechado  $\Gamma K M \Gamma$ . (b) Relação de dispersão de energia próxima ao ponto de alta simetria  $K$  para diferentes valores de  $\theta$  e  $\gamma = \pi/2$ .

Nas Figs.4.3 e 4.5 temos representações em 3D e 2D, respectivamente, das estruturas de banda obtidas para diferentes valores de  $\theta$  na Eq.(4.41) e considerando  $\gamma = \pi/2$  para a primeira zona de Brillouin. Para o caso em que  $\theta = 0$ , como mencionando no capítulo anterior, a matriz  $\hat{\Gamma}_{AB}(0, \gamma) = \hat{\Gamma}_{GRO(3)}$  e, assume os mesmos coeficientes de espalhamento que o de uma matriz

Grover, na qual  $|t_B(0)|^2 = 4/9$  e é o máximo valor possível como mostrado na Fig.3.2. Ao olharmos as Figs.4.3 e 4.4, veremos que as únicas estruturas de banda que não apresentam um comportamento suave próximo ao ponto de alta simetria  $\Gamma$ , isto é, no ponto  $\kappa_x = \kappa_y = 0$ , é justamente a associada a matriz  $\hat{\Gamma}_{AB}(0, \pi/2)$ .

Na Fig.4.4(a) temos a representação das estruturas de bandas para diferentes matrizes  $\hat{\Gamma}_{AB}(\theta, \pi/2)$  no caminho  $\Gamma K M \Gamma$  ao longo da primeira zona de Brillouin. Aqui vale notar que as estruturas de banda  $E_+(\vec{\kappa}, \theta, \gamma)$  e  $E_-(\vec{\kappa}, \theta, \gamma)$ , sempre serão simétricas, dado os mesmos valores de  $\theta$  e  $\gamma$ , vide Eq.(4.41). A Fig.4.4(b) nos mostra a relação de dispersão de energia próxima ao ponto  $K$ , e fica nítido a relação de dispersão linear nessa região. Além disso, temos que as bandas se tocam em  $E/\tilde{\varepsilon} = 0$ .

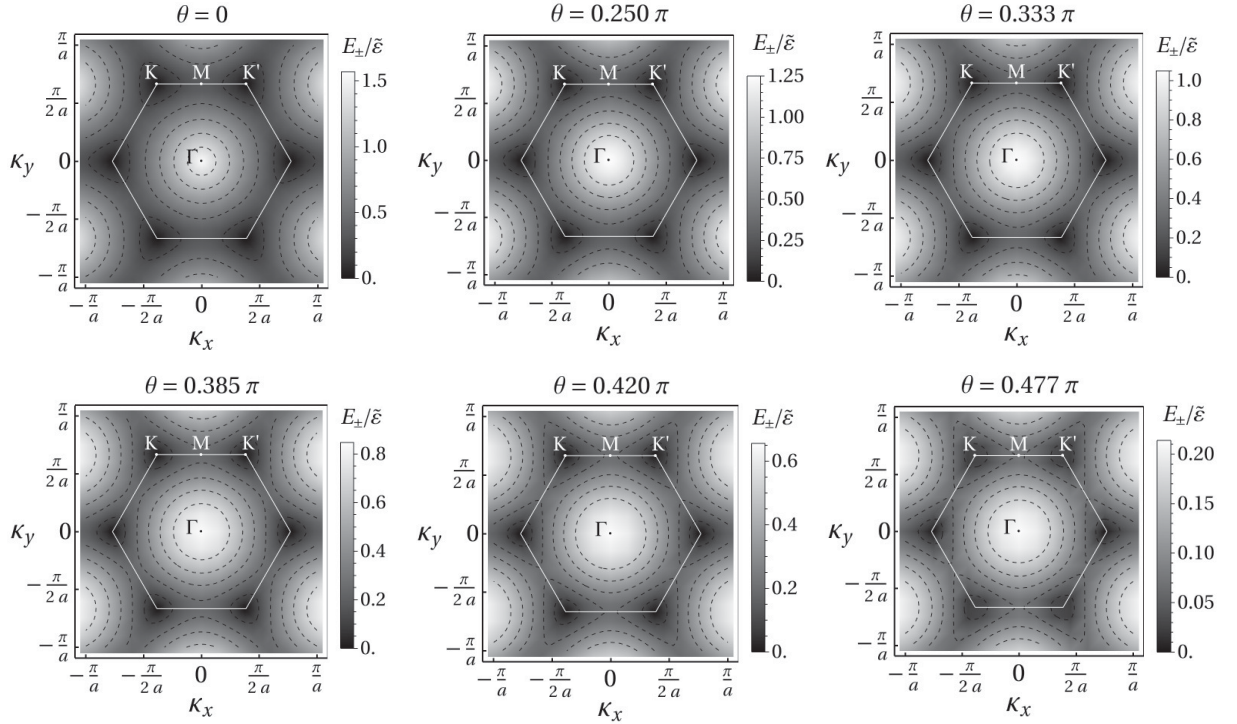


Figura 4.5: Plots de densidade de  $|E_{\pm}/\tilde{\varepsilon}|$  para diferentes valores de  $\theta$  e  $\gamma = \pi/2$  na primeira zona de Brillouin. Os pontos  $\Gamma$ ,  $M$ ,  $K$  são os denotados pontos de alta simetria.

Algo importante a ser analisado é o valor de  $E$  no ponto de alta simetria  $\Gamma$  para diferentes matrizes AB. Nas Figs.4.5 e 4.6 é possível notar que o ponto como maior valor de  $E/\tilde{\varepsilon}$ , independente do valor de  $\theta$  e, considerando  $\gamma = \pi/2$ , sempre será em  $\kappa_x = \kappa_y$ , ou seja, no ponto de alta simetria  $\Gamma$ . Portanto, considerando as Eqs.(4.40) e (4.41), teremos que

$$E_{max}(\theta) = \tilde{\varepsilon} \left( \frac{\pi}{2} - \arccos \left[ \frac{3}{2} |t_B(\theta)| \right] \right), \quad (4.42)$$

ou seja, dado uma certa matriz  $\hat{\Gamma}_{AB}(\theta, \pi/2)$ , a equação acima nos possibilita obter o valor  $E_{max}(\theta)$ .

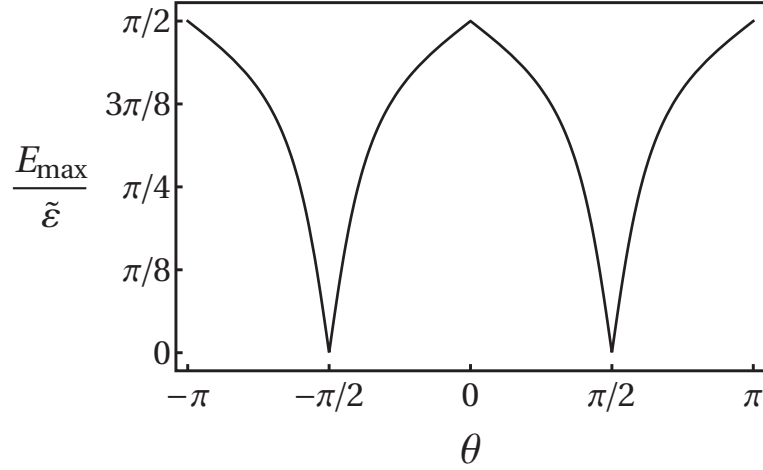


Figura 4.6: Comportamento de  $E_{\max}$  em relação ao parâmetro  $\theta$ , vide Eq.(4.42).

## 4.2.2 Velocidades de Fermi e uma Relação entre CQME's e TB-1NN

Na seção anterior, apresentamos um método para obtenção de estruturas de banda para matrizes AB. Como mencionado anteriormente, a relação de dispersão de energia próxima aos pontos de alta simetria  $K$  e  $K'$  tem comportamento linear. Com o objetivo de explorar outras grandezas próximas a esses pontos de alta simetria, primeiramente, iremos considerar um mudança de coordenadas dada por

$$q_x = \left( \kappa_x + \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right), \quad q_y = \left( \kappa_y - \frac{2\pi}{3a} \right), \quad (4.43)$$

tal que  $\vec{q} = q_x \hat{e}_x + q_y \hat{e}_y$ . Perceba que a origem desse novo sistema de coordenada esta centrado em  $K = \left( -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a} \right)$ , vide Fig.4.2. Além disso, iremos assumir que

$$\phi_{\vec{q}} = \arctan[q_y/q_x]. \quad (4.44)$$

Desta forma, considerando as Eqs.(4.43) e (4.44) e, assumindo que  $\gamma = \pi/2$ , a expansão da Eq.(4.41) próximo à região do ponto de alta simetria  $K$  leva à seguinte relação de dispersão de energia

$$E_{\pm}(\vec{q}, \theta, \pi/2) = \pm \frac{3\tilde{\epsilon}|t_B(\theta)|}{4} \left( a|\vec{q}| + \frac{\cos[3\phi_q]}{4} (a|\vec{q}|)^2 + \frac{(6|t_B(\theta)|^2 - \cos[6\phi_q] - 7)}{64} (a|\vec{q}|)^3 + \dots \right), \quad (4.45)$$

tal que se considerarmos apenas o termo de primeira ordem, podemos definir a relação de dispersão de energia em função da velocidade de Fermi  $\tilde{v}_F$  [203, 224]

$$E_{\pm}(\vec{q}, \theta, \pi/2) = \pm \tilde{v}_F(\theta) |\vec{p}|, \quad (4.46)$$

tal que  $\vec{p} = \hbar\vec{q}$ , e,  $\tilde{v}_F$  é dado

$$\tilde{v}_F(\theta) = \frac{3a\tilde{\varepsilon}|t_B(\theta)|}{4\hbar} = \frac{3a|t_B(\theta)|}{4\tau}. \quad (4.47)$$

Podemos notar que a Eq.(4.47) corrobora com os resultados apresentados no Capítulo 3 sobre um modelo para o deslocamento quadrático médio radial, denotado aqui  $D_r$ , para a matriz AB. Portanto, de maneira análoga à Eq.(3.24), teremos que

$$K(\theta) = \frac{16}{9} \tilde{v}_F^2(\theta) \sum_{m=0}^{\infty} b_{2m} \cos^{2m}[\theta], \quad (4.48)$$

ou seja, podemos afirmar que  $D_r$  é proporcional ao quadrado da velocidade de Fermi.

Outro conceito que podemos explorar é a velocidade de grupo. Considerando a Eq.(4.41) e, tomando que

$$\vec{v}_{\pm}(\vec{\kappa}, \theta) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{\kappa}} E_{\pm}(\vec{\kappa}, \theta, \gamma), \quad (4.49)$$

resultando, portanto, em

$$\vec{v}_{\pm}(\vec{\kappa}, \theta) = \pm \left( \vec{v}_x(\vec{\kappa}, \theta) \hat{e}_x + \vec{v}_y(\vec{\kappa}, \theta) \hat{e}_y \right), \quad (4.50)$$

tal que as componentes da velocidade de grupo são dadas por

$$v_x(\vec{\kappa}, \theta) = \frac{a\tilde{\varepsilon}}{\hbar} \frac{\sqrt{3}|\cos[\theta]|}{\sqrt{|5 + 4\cos[2\theta]|h(\vec{\kappa}) - (\cos[\theta]h(\vec{\kappa}))^2}} \left( 2\cos\left[\frac{\sqrt{3}\kappa_x a}{2}\right] + \cos\left[\frac{3\kappa_y a}{2}\right] \right) \times \sin\left[\frac{\sqrt{3}\kappa_x a}{2}\right], \quad (4.51)$$

$$v_y(\vec{\kappa}, \theta) = \frac{a\tilde{\varepsilon}}{\hbar} \frac{3|\cos[\theta]|}{\sqrt{|5 + 4\cos[2\theta]|h(\vec{\kappa}) - (\cos[\theta]h(\vec{\kappa}))^2}} \sin\left[\frac{3\kappa_y a}{2}\right] \cos\left[\frac{\sqrt{3}\kappa_x a}{2}\right]. \quad (4.52)$$

De maneira geral, a velocidade do grupo está diretamente relacionada com os coeficientes da matriz de espalhamento. Se consideramos, por exemplo, a Eq.(4.50) tal que  $\theta \rightarrow \pi/2$ , conseqüentemente,  $v_{\pm}(\vec{\kappa}, \theta) \rightarrow 0$  e, está completamente de acordo com o caso em que escolhemos uma matriz  $\hat{\Gamma}_{AB}(\theta \rightarrow \pi/2, \gamma = \pi/2)$  na qual o estado inicial ficará confinado entre a região de seus primeiros vizinhos. Vale notar também que, das Eqs.(4.47) e (4.49), o módulo da velocidade de grupo nas regiões próximas aos pontos  $K$  e  $K'$  coincidem com a velocidade de Fermi.

Ao tomar a Eq.(4.41) próximo à região dos pontos de alta simetria  $K$  e  $K'$ , a função  $h(\kappa_x, \kappa_y)$  tende a zero. Portanto, se considerarmos a expansão em séries para a função  $\arccos(x)$  teremos

que

$$\arccos(x) = \frac{\pi}{2} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2} \frac{x^{2n+1}}{2n+1}, \quad (4.53)$$

e, considerando que

$$x = \tilde{\varepsilon} \frac{|t_B(\theta)|}{2} \sqrt{h(\kappa_x, \kappa_y)}, \quad (4.54)$$

teremos que, em primeira ordem, a Eq.(4.41) será descrita por

$$E_{\pm}(\vec{\kappa}, \theta, \gamma) = \pm \varepsilon \sqrt{h(\kappa_x, \kappa_y)}, \quad (4.55)$$

tal que  $\varepsilon$  é denominado parâmetro de *hopping* e será definido por

$$\varepsilon = \tilde{\varepsilon} |t_B(\theta)|/2. \quad (4.56)$$

Perceba que ao fazermos a devida expansão, obtemos diretamente uma equação análoga à do modelo *Tight Binding First Nearest Neighbour* (TB-1NN) para o grafeno [203, 225]. Além disso, diretamente da Eq.(4.56), podemos reescrever a Eq. (4.47) como

$$\tilde{v}_F = \frac{3a\varepsilon}{2\hbar}, \quad (4.57)$$

que é totalmente similar à relação entre  $\tilde{v}_F$  e o parâmetro de *hopping* obtida via TB-1NN [203, 225].

Os resultados acima mostram como as CQME's podem ser um poderoso formalismo para o estudo de materiais. Vale notar que todos os resultados obtidos nessa seção estão diretamente ligados à escolha da parametrização das matrizes espalhamento da rede. Portanto, é natural que se propormos outras parametrizações distintas para as matrizes espalhamento do sistema, iremos obter outras relações para dispersão de energia, velocidade de Fermi e afins.

### 4.3 CQME's e Materiais de Dirac 2D

Na seção anterior mostramos como as CQME's com uma dada parametrização das matrizes espalhamento do sistema nos permite explorar grandezas usualmente estudadas em matéria condensada. Uma vez que todo o formalismo apresentado até o momento é para rede hexagonal, é natural buscarmos alguns materiais que possam ser bons candidatos de investigação. Nesse contexto, o grafeno [172, 182] é sem dúvidas o primeiro candidato, uma vez que ele possui uma rede hexagonal planar e, como mostrado na seção anterior, obtivemos a relação de dispersão de energia para este material de maneira análoga ao modelo TB-1NN. Além disso, há outros

dois candidatos, siliceno e germaneno, materiais que também possuem redes hexagonais planares. Apesar de não serem considerados estáveis na forma planar, há estudos que apontam suas possíveis propriedades nesta forma [194–198, 226, 227].

### 4.3.1 Grafeno

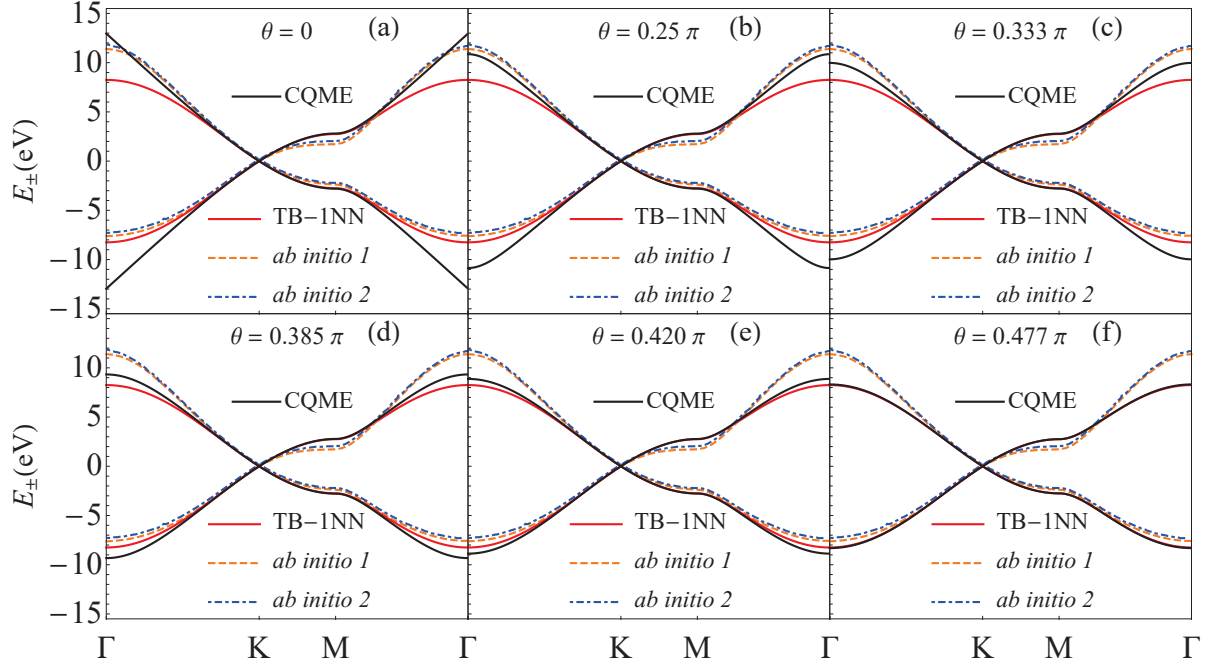


Figura 4.7: Comparação entre as estruturas de banda  $\pi$  e  $\pi^*$  do grafeno obtidas via: TB-1NN com  $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_{TB} = 2.75$ , ver Eq.(4.55); *ab initio* 1 [195]; *ab initio* 2 [228]; e via CQME's tomando a Eq.(4.41) para seis valores distintos de  $\theta$  e  $\gamma = \pi/2$ . As curvas *ab initio* foram digitalizadas das Refs.[195] e [228].

No final da seção anterior mencionamos que o modelo TB-1NN [203] é capaz de definir uma equação para as banda de energia do grafeno, e, através do formalismo proposto no final da última seção, vide Eqs.(4.55) e (4.56), conseguimos traçar uma equivalência entre o método de CQME's no estado momento para matriz AB e o modelo TB-1NN nas regiões próximas aos pontos de alta simetria  $K$  e  $K'$ .

No modelo TB-1NN o parâmetro de *hopping* tem um papel fundamental, de tal forma que seu valor numérico pode ser estipulado de acordo com cada material [191], e está diretamente associado ao parâmetro de rede  $a$ . No caso do grafeno, o parâmetro de *hopping* é estimado como  $\varepsilon \approx 2.7$  eV [203, 216, 217, 229] e, as medidas experimentais transpostas ao modelo levam à  $\varepsilon \approx 3.0$  eV [192, 203, 230–232].

Devido à relação definida na Eq.(4.56), para diferenciar os parâmetros de acordo com cada modelo iremos reescreve-la por

$$\frac{\tilde{\varepsilon} |t_B(\theta)|}{2} = \varepsilon_{eff}, \quad (4.58)$$

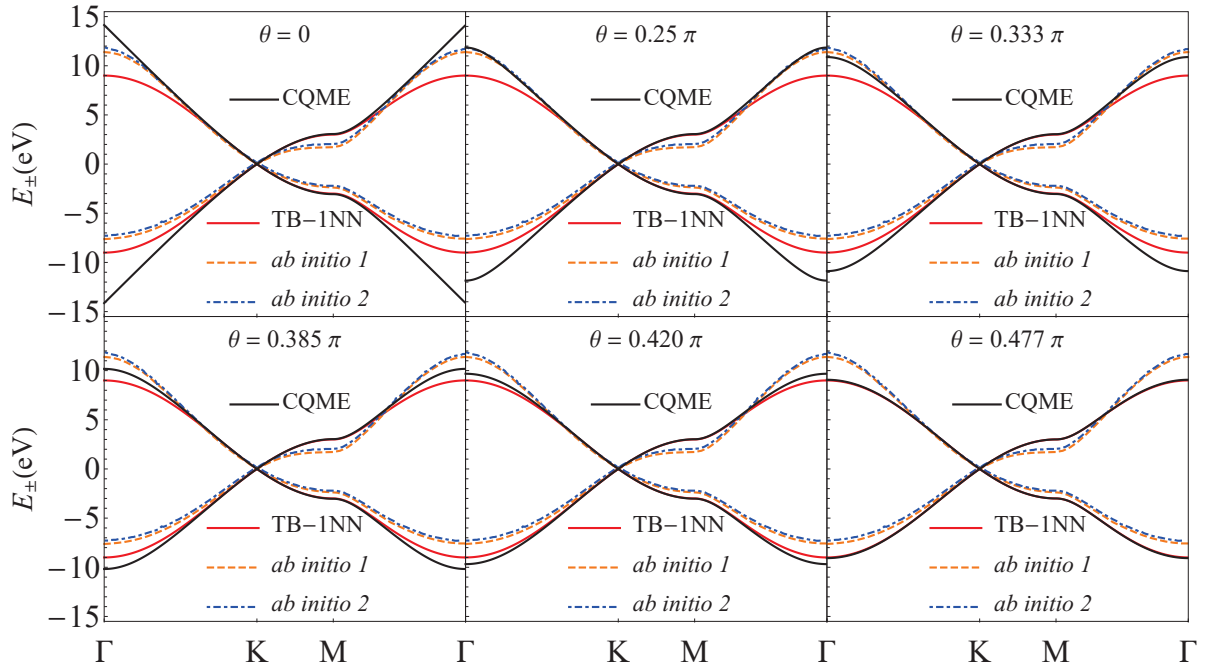


Figura 4.8: Comparação entre as estruturas de banda  $\pi$  e  $\pi^*$  do grafeno obtidas via: TB-1NN com  $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_{TB} = 3.0$ , vide Eq.(4.55); *ab initio* 1 [195]; *ab initio* 2 [228]; e via CQME's tomando a Eq.(4.41) para seis valores distintos de  $\theta$  e  $\gamma = \pi/2$ . As curvas *ab initio* foram digitalizadas das Refs.[195] e [228].

tal que  $\varepsilon_{eff}$  é o parâmetro de *hopping* efetivo associado aos parâmetros  $\tilde{\varepsilon}$  e  $\theta$  do formalismo de CQME's. Para o grafeno, nós iremos definir que  $\varepsilon_{eff}$  pode assumir dois valores distintos, um associado ao valor estimado pelo modelo TB-1NN,  $\varepsilon_{TB} = 2.75$  eV, e outro associado ao valor experimental para o mesmo modelo,  $\varepsilon_{exp} = 3.0$  eV. Desta forma, na Tab.4.1 temos os valores correspondentes de  $\tilde{\varepsilon}$  e  $\tau$ , vide Eq.(4.21), que satisfazem a Eq.(4.58) para os dois valores distintos de  $\varepsilon_{eff}$  para o grafeno.

Atualmente, diversos pesquisadores investigam as propriedades dos grafeno e demais materiais de Dirac através de diversas abordagens diferentes [195, 203, 224, 228, 232–235]. Em particular, para as estruturas de banda há métodos *ab initio* que englobam em seus protocolos diversos parâmetros que permitem uma maior acurácia em relação à outros. Em particular, dois destes métodos merecem uma atenção, um com a abordagem de Teoria do Funcional da Densidade (TFD) [195], que denotaremos daqui em diante como *ab initio* 1 e, outro que utilizada a abordagem de bandas interpoladas de Wannier [228], que denotaremos daqui em diante como *ab initio* 2.

Na Fig. 4.7 nós temos a comparação entre as estruturas de bandas  $\pi$  e  $\pi^*$  do grafeno no caminho  $\Gamma K M \Gamma$  obtidas por quatro abordagens distintas: TB-1NN com  $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_{TB} = 2.75$  eV, *ab initio* 1, *ab initio* 2 e para CQME's, vide Eq.(4.41), com  $a = 1.42$  Å,  $\gamma = \pi/2$  e seis valores distintos de  $\theta$ . É possível notar que, na região próxima ao ponto  $K$  a relação de dispersão de energia é linear e, independentemente do valor de  $\theta$ , as curvas TB-1NN e CQME's são muito

$\theta$	$\tilde{\varepsilon}$ (eV) para $\varepsilon_{TB}$ (para $\varepsilon_{exp}$ )	$\tau$ (fs) para $\varepsilon_{TB}$ (para $\varepsilon_{exp}$ )
0	08.3 (09.0)	0.0798 (0.0731)
$0.250\pi$	08.7 (09.5)	0.0756 (0.0694)
$0.333\pi$	09.5 (10.4)	0.0690 (0.0633)
$0.385\pi$	11.0 (12.0)	0.0598 (0.0548)
$0.420\pi$	13.5 (14.7)	0.0487 (0.0446)
$0.477\pi$	38.9 (25.4)	0.0283 (0.0259)

Tabela 4.1: Os valores dos parâmetros  $\tilde{\varepsilon}$  e  $\tau$  para valores distintos de  $\theta$  na Eq.(4.58).

semelhantes. Por outro lado, nas proximidades do ponto de alta simetria  $\Gamma$  as relações de dispersão de energia só se assemelham quando  $\theta \rightarrow \pi/2$ . Vale notar que as estruturas de banda obtidas via TB-1NN e as obtidas através da Eq.(4.41) só coincidem quando  $\theta \approx \pi/2$ , como mostrado na Fig.4.7 (f). Isto se deve ao fato que, quando  $|t_B(\theta \approx \pi/2)| \approx 0$  e ao truncarmos Eq.(4.53) em primeira ordem, a relação de dispersão de energia funciona bem para qualquer valor de  $h(\kappa_x, \kappa_y)$ .

Na Fig.4.8 nós temos a comparação entre as estruturas de bandas  $\pi$  e  $\pi^*$  do grafeno no caminho  $\Gamma K M \Gamma$  obtidas por quatro abordagens distintas: TB-1NN com  $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_{exp} = 3.0$ , *ab initio* 1, *ab initio* 2 e para CQME's, vide Eq.(4.41), com  $a = 1.42 \text{ \AA}$ ,  $\gamma = \pi/2$  e seis valores distintos de  $\theta$ . Quantitativamente nós temos resultados semelhantes aos discutidos acima para a Fig.4.7.

Considerando as estruturas de banda apresentadas nas Figs.4.7 e 4.8, é possível analisar que as curvas obtidas pelos métodos *ab initio* 1 e *ab initio* 2 possuem uma pequena diferença entre si. Porém, há uma grande diferença em relação às curvas obtidas pelos demais métodos, *Tight Binding First Nearest Neighbour* e *ab initio's* 1 e 2, nas regiões que distam do ponto  $K$ .

Considerando essa diferença entre as estruturas de banda geradas por *ab initio* 1 e *ab initio* 2 em relação ao modelo de CQME, vide Eq.(4.38), podemos fazer algumas reflexões. Uma delas é que, na região próxima ao ponto  $K$ , as bandas apresentam o mesmo comportamento linear e, sem dúvidas, esse comportamento está diretamente associado às principais características dos materiais de Dirac e, portanto, mesmo com disparidades, a Eq.(4.41) captura esta propriedade. Por outro lado, é importante notar o caráter extremamente genérico presente na Eq.(4.38), na qual temos que infinitas matrizes podem ser tomadas como  $\hat{\Gamma}^{(\pm)}$ . Além disso, cabe o questionamento que, considerarmos  $\hat{\Gamma}^{(+)} = \hat{\Gamma}^{(-)}$  pode não ter sido a escolha que leve a descrição do grafeno. Porém, na seção seguinte essas reflexões serão exploradas.



material	$a$ (Å)	$\varepsilon_{eff}$	$v_F^{(TB)}$	$v_F^{(CQME)}$	$\tilde{\varepsilon}$	$\tau(fs)$
grafeno	1.42	2.75	8.73	8.74	9.5263	0.0703
germaneno	2.43	1.05	5.81	5.81	3.6373	0.181
siliceno	2.28	1.03	5.35	5.35	3.5680	0.185

Tabela 4.2: Lista de parâmetros importantes para os três materiais de Dirac 2D abordados nesta seção [195, 198, 236–239]. Os valores de  $\varepsilon_{eff}$  e  $\tilde{\varepsilon}$  estão em unidades de eV. Já os valores associados aos parâmetros  $v_F^{(TB)}$  e  $v_F^{(CQME)}$ , vide Eq. (4.47), estão em unidades de  $10^5$  m/s. Por fim, os parâmetros associados ao modelo CQME foram obtidos para  $\hat{\Gamma}_{AB}(\pi/3, \pi/2)$ .

### 4.3.2 Germaneno e Siliceno

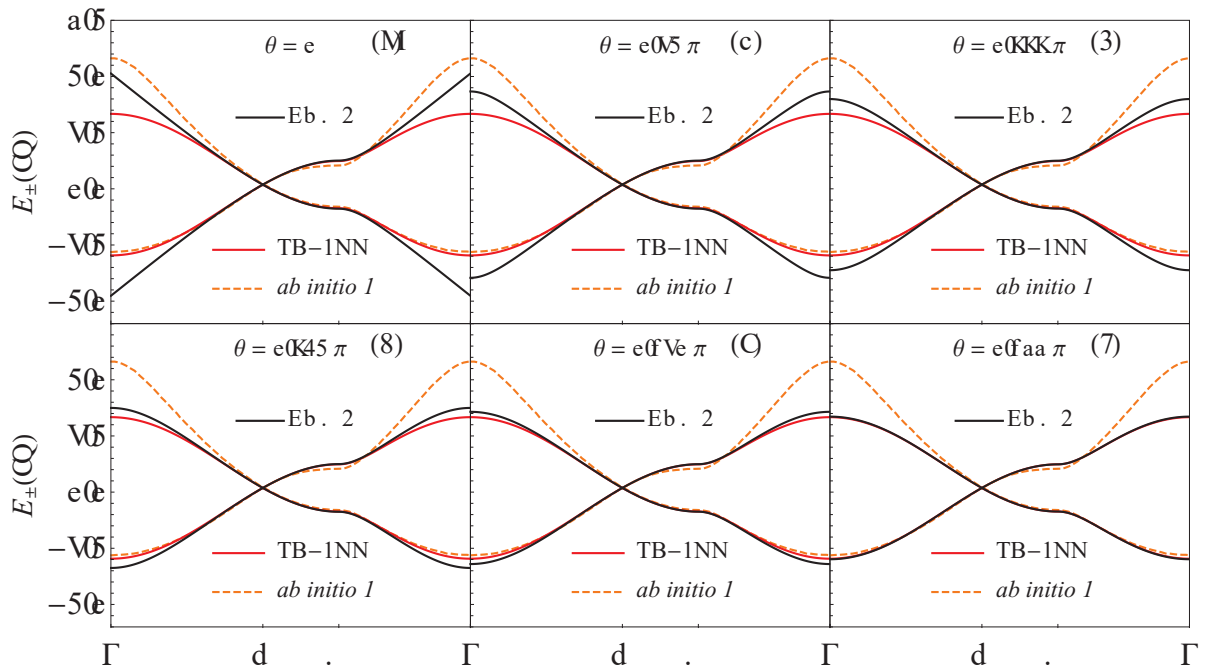


Figura 4.9: Comparação entre as estruturas de banda  $\pi$  e  $\pi^*$  do germaneno obtidas via: TB-1NN com  $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_{TB} = 1.05$ , vide Eq.(4.55); *ab initio* 1 [195]; e via CQME's tomando a Eq.(4.41) para seis valores distintos de  $\theta$  e  $\gamma = \pi/2$ . As curvas *ab initio* 1 foram digitalizadas da Ref.[195].

Diversos trabalhos [194–198, 226, 227, 240] tem mostrado que o siliceno e o germaneno em suas formas planares possuem a mesma estrutura eletrônica que o grafeno e, também são classificados como materiais de Dirac 2D. Vale notar que, apesar das semelhanças já mencionadas, estes possuem valores de parâmetros  $a$  e  $\varepsilon_{eff}$  distintos, como mostrado na Tab.4.2. Nesta subseção iremos fazer uma análise análoga à apresentada na subseção anterior para o grafeno para os materiais em questão.

Na Fig.4.9 nós temos a comparação entre as estruturas de bandas  $\pi$  e  $\pi^*$  do germaneno no caminho  $\Gamma K M \Gamma$  obtidas por três abordagens distintas: TB-1NN com  $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_{TB} = 1.05$ , *ab*

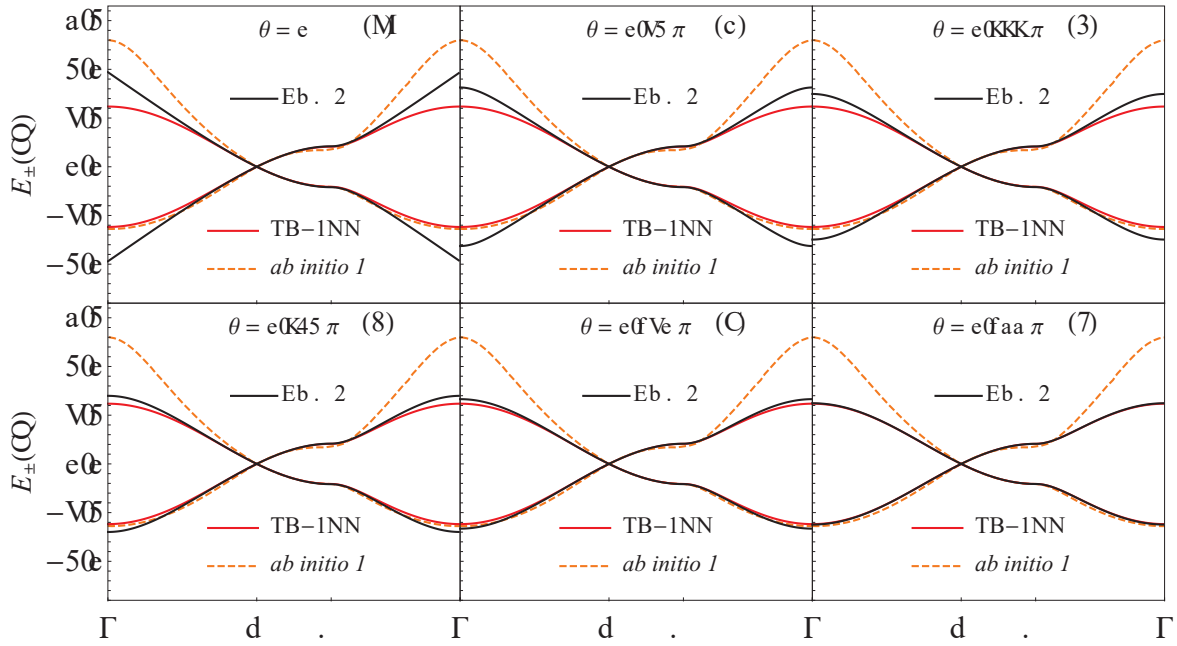


Figura 4.10: Comparação entre as estruturas de banda  $\pi$  e  $\pi^*$  do siliceno obtidas via: TB-1NN com  $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_{TB} = 1.03$ , vide Eq.(4.55); *ab initio* 1 [195]; e via CQME's tomando a Eq.(4.41) para seis valores distintos de  $\theta$  e  $\gamma = \pi/2$ . As curvas *ab initio* 1 foram digitalizadas das Ref.[195].

*initio* 1 e, para CQME's, vide Eq.(4.41), com  $a = 2.43 \text{ \AA}$   $\gamma = \pi/2$  e seis valores distintos de  $\theta$ . Vale ressaltar que os valores de  $a$  para estes materiais estão relacionados a valores teóricos, já que ambos os materiais não são estáveis na forma planar. Já na Fig.4.10, nós temos a mesma comparação, porém, para o siliceno. Nesse caso  $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_{TB} = 1.03$  e  $a = 2.28 \text{ \AA}$ .

De maneira geral, as mesmas considerações feitas a respeito da comparação entre as estruturas de banda obtidas pelos modelo TB-1NN e CQME's para o grafeno, também se aplicam para estes materiais. Entretanto, é possível observar que há algumas diferenças. Podemos notar que as bandas superiores (inferiores), geradas pelo modelo CQME, se assemelham mais às curvas do *ab initio* 1 para menores (maiores) valores de  $\theta$ . Este comportamento é nítido em ambas as bandas do grafeno, enquanto que, para o germaneno e o siliceno, é notado apenas nas bandas inferiores. Se notarmos, as Figs.4.9(a) e 4.10(a) são as que apresentam o valor máximo no ponto  $\Gamma$  dentre os  $\theta$  analisados, vide Eq.(4.42) e, mesmo assim,  $E_{max}$  possui uma diferença significativa em relação ao valor da energia no ponto  $\Gamma$  via *ab initio* 1. Por outro lado, é possível notar que, na região  $KM$ , as bandas de energia para o siliceno e o germaneno obtidas via CQME se assemelham mais as obtidas via *ab initio* 1 que para o grafeno.

Uma grandeza discutida na seção anterior e que pode ser explorada para o grafeno, germaneno e siliceno é a velocidade de Fermi. Considerando que  $\hat{\Gamma}_{AB}(\pi/3, \pi/2)$  é uma matriz imparcial, isto é, o caminhante não tem nenhuma direção  $\sigma$  de espalhamento privilegiada, esta matriz reproduz, em tese, as condições análogas ao comportamento de um elétron livre em um material de Dirac

com rede hexagonal planar. Desta forma, tomando os parâmetros  $a$  e  $\varepsilon_{eff}$  para cada material, vide Tab.4.1, nos calculamos as  $v_F^{(CQME)}$ , assumindo os valores  $\theta = \pi/3$  e  $\gamma = \pi/2$  na Eq.(4.47).

Analisando a Tab.4.1 fica nítido que  $v_F^{(CQME)}$ , calculado com  $\theta = \pi/3$  e  $\gamma = \pi/2$  na Eq.(4.47), e  $v_F^{(TB)}$  convergem de acordo com o esperado, uma vez que os modelos CQME's e TB-1NN possuem o mesmo comportamento linear próximo aos pontos de alta simetria  $K$  e  $K'$ . Vemos, portanto, uma grande congruência entre os valores numéricos obtidos via Eq.(4.47) e os resultados presentes na literatura [195, 237–239].

## 4.4 Bandas de Energia: a matriz geradora do $SU(3)$

Como já destacado, os materiais 2D são considerados sistemas físicos em que as características topológicas são fundamentais. Da mesma forma, a topologia é uma das características mais relevantes dos modelos CQME, onde a dinâmica é totalmente estabelecido pelas matrizes de espalhamento dependentes da conectividade local da rede, de tal forma que, a evolução temporal é condicionada por uma estrutura global da rede. Esses aspectos estão claramente descritos, por exemplo, na expressão geral para as bandas de energia dada pela Eq.(4.38). Portanto, se uma fórmula “nua” como a Eq.(4.38) pudesse descrever com precisão as estruturas de bandas obtidas por métodos mais rebuscados, isso constituiria uma forte evidência da influência das propriedades topológicas nos materiais 2D [241]. Vale notar que a Eq. (4.38) possui uma estrutura na qual é possível identificar as contribuições puramente topológicas, associadas à estrutura da rede em questão e, as contribuições relacionadas às escolhas das matrizes  $\hat{\Gamma}^{(\pm)}$ .

As simplificações tomadas anteriormente neste capítulo, isto é,  $\hat{\Gamma}^{(\pm)} = \hat{\Gamma}$  e que  $\hat{\Gamma} = \hat{\Gamma}_{AB}$ , levam a resultados mais amplos que os obtidos pelo modelo TB-1NN. No entanto, como vimos, a Eq.(4.41) não produz um bom ajuste geral para as bandas  $\pi$  e  $\pi^*$  quando comparado com cálculos precisos de *ab initio*, que muitas vezes utilizam métodos TFD juntamente com esquemas de parametrização, onde os parâmetros pertinentes são estimados empiricamente. A questão é que a matriz  $\hat{\Gamma}_{AB}$  é bastante simples, uma vez que possui apenas dois parâmetros, onde um deles é uma fase global e, portanto, não é capaz de descrever adequadamente outros aspectos físicos, como por exemplo, características de orbitais moleculares de materiais como o grafeno.

Entretanto, mostraremos a seguir que, de fato, a Eq.(4.38) é capaz de gerar resultados muito bons para as bandas de energia, desde que  $\hat{\Gamma}^{(\pm)}$  sejam devidamente definidas. Desta forma, a ideia aqui não é encontrar  $\hat{\Gamma}^{(\pm)}$  através de simulações moleculares, mas, apenas determinar as matrizes  $\hat{\Gamma}^{(\pm)}$  que, ao serem colocadas na Eq.(4.38), levem a estruturas de banda  $E_{\pm}(\kappa_x, \kappa_y)$  semelhantes as obtidas por métodos mais rebuscados.

Do ponto de vista prático, primeiro precisamos escrever  $\hat{\Gamma}^{(\pm)}$  com uma quantidade suficiente

de parâmetros que nos dá a liberdade necessária para encontrarmos as bandas de energia. Nós escolhemos a mesma parametrização utilizada para gerar o  $SU(3)$ , apresentada na Ref. [242], tal que supondo a mesma fase global para ambas as matrizes, isto é,  $\gamma^{(+)} = \gamma^{(-)} = \gamma$ , e, portanto,

$$\hat{\Gamma}^{(\pm)} = \exp[i\gamma] \hat{S}^{(\pm)}, \quad (4.59)$$

tal que as matrizes  $\hat{S} \in SU(3)$  são descritas por

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{pmatrix}, \quad (4.60)$$

onde os coeficientes são dados por

$$\begin{aligned} S_{11} &= \cos[\theta_1] \cos[\theta_2] \exp[i\phi_1], & S_{22} &= \cos[\theta_1] \cos[\theta_3] \exp[i\phi_2], \\ S_{33} &= \cos[\theta_2] \cos[\theta_3] \exp[-i(\phi_1 + \phi_2)] - \sin[\theta_1] \sin[\theta_2] \sin[\theta_3] \exp[i(-\phi_3 + \phi_4 + \phi_5)], \\ S_{21} &= \sin[\theta_2] \sin[\theta_3] \exp[-i(\phi_4 + \phi_5)] - \sin[\theta_1] \cos[\theta_2] \cos[\theta_3] \exp[i(\phi_1 + \phi_2 - \phi_3)], \\ S_{23} &= -\cos[\theta_2] \sin[\theta_3] \exp[-i(\phi_1 + \phi_5)] - \sin[\theta_1] \sin[\theta_2] \cos[\theta_3] \exp[i(\phi_2 - \phi_3 + \phi_4)], \\ S_{31} &= -\sin[\theta_1] \cos[\theta_2] \sin[\theta_3] \exp[i(\phi_1 - \phi_3 + \phi_5)] - \sin[\theta_2] \cos[\theta_3] \exp[-i(\phi_2 + \phi_4)], \\ S_{13} &= \cos[\theta_1] \sin[\theta_2] \exp[i\phi_4], & S_{12} &= \sin[\theta_1] \exp[i\phi_3], & S_{32} &= \cos[\theta_1] \sin[\theta_3] \exp[i\phi_5], \end{aligned} \quad (4.61)$$

tal que  $0 \leq \theta_1, \theta_2, \theta_3 \leq \pi/2$ , e  $0 \leq \phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_4, \phi_5 \leq 2\pi$ .

Na sequência, nós construímos um algoritmo que varia numericamente os parâmetros das matrizes  $\hat{\Gamma}^{(\pm)}$ , parametrizadas pela Eq.(4.61), tal que busque pelo conjunto de matrizes  $\hat{\Gamma}^{(\pm)}$  que ao serem colocadas na Eq.(4.38) levem a uma dada relação de dispersão de energia que mais se assemelha à banda obtida por meio de outros métodos mais rebuscados, como, por exemplo, o *ab initio* 1. Neste caso, nós extraímos os dados diretamente do artigo relacionado ao método *ab initio* 1 [195], mencionado anteriormente, em que as estruturas de bandas para o grafeno, germaneno e siliceno são obtidas utilizando métodos de TFD.

O nosso método computacional de busca pelas matrizes  $\hat{\Gamma}^{(\pm)}$ , levou, em seu estado otimizado, um tempo médio de uma hora para cada material, e, para encontrar as matrizes  $\hat{\Gamma}^{(+)}$  e  $\hat{\Gamma}^{(-)}$  que levam à estrutura de banda  $\pi$  e  $\pi^*$  que mais se aproxima da obtida via *ab initio*, foram testados 523.100 pares de matrizes. Este desempenho é para a implementação do algoritmo em um computador pessoal com processador i7-9750h e com 16 GB de memória RAM.

Nas subseções a seguir iremos apresentar os resultados obtidos para o grafeno, germaneno planar e siliceno planar.

#### 4.4.1 Grafeno

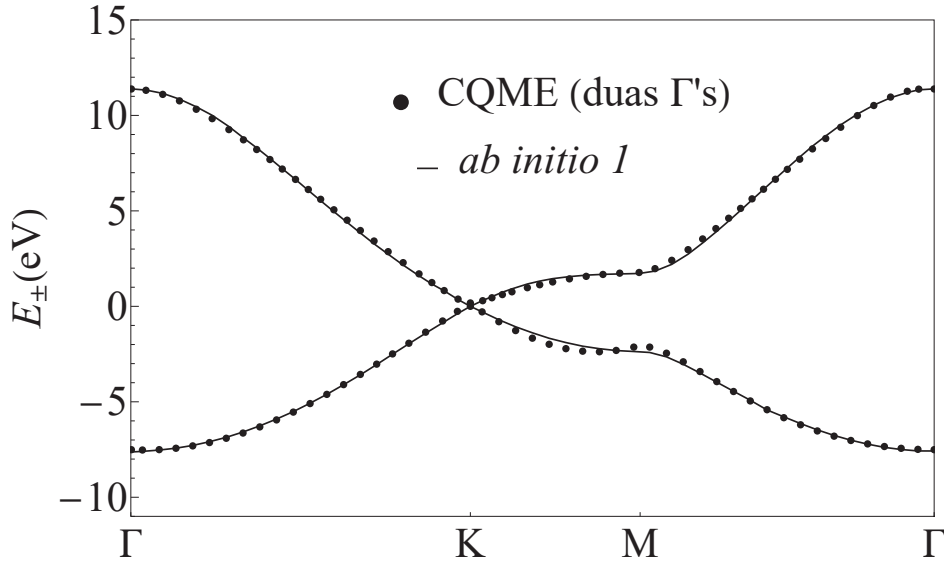


Figura 4.11: Comparação entre as estruturas de banda  $\pi$  e  $\pi^*$  para o grafeno obtidas através do algoritmo de busca de matrizes  $\hat{\Gamma}^{(\pm)}$  e via *ab initio* 1 [195].

Em contraste com os resultados apresentados na seção anterior, na Fig.4.11 temos uma grande semelhança entre as bandas de energia  $\pi$  e  $\pi^*$  do grafeno obtidas com nosso algoritmo de busca de matrizes  $\Gamma^{(\pm)}$  e, as obtidas via *ab initio* 1. Se analisarmos atentamente, iremos notar que para os caminhos  $\Gamma K$  e  $M\Gamma$  temos a maior equivalência entre as curvas *ab initio* e as obtidas pelo método proposto nesta seção.

Abaixo temos as matrizes  $S^{(\pm)} = S_{graf}^{(\pm)}$  e, os parâmetro  $\gamma = \gamma_{graf}$  e  $\tilde{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}_{graf}$ , vide Eq.(4.59), que levam às bandas de energia  $\pi$  e  $\pi^*$  do grafeno no caminho  $\Gamma K M \Gamma$ , mostradas na Fig.4.11

$$\hat{S}_{graf}^{(+)} = \begin{pmatrix} -0.688114 - 0.150771i & -0.246765 - 0.2626i & -0.381596 - 0.477807i \\ -0.180346 + 0.405402i & -0.410796 - 0.418278i & 0.67699 + 0.0331718i \\ -0.546443 + 0.0910583i & 0.317197 + 0.652552i & 0.399643 - 0.0834001i \end{pmatrix},$$

$$\hat{S}_{graf}^{(-)} = \begin{pmatrix} -0.138184 + 0.00919204i & -0.828744 + 0.438194i & -0.315014 + 0.0525038i \\ 0.867777 + 0.0560679i & 0.0422888 + 0.0754977i & -0.424689 - 0.236579i \\ 0.20242 + 0.428562i & -0.124223 - 0.313448i & -0.0501766 + 0.811888i \end{pmatrix},$$

(4.62)

e tal que  $\gamma_{graf} = -0.39870242089536767$  e  $\tilde{\epsilon}_{graf} = -11.073477059111063$ .

#### 4.4.2 Germaneno e Siliceno

Nas Figs.4.12 e 4.13 temos a comparação entre as bandas de energia  $\pi$  e  $\pi^*$  do germaneno/siliceno obtidas com nosso algoritmo de busca de matrizes  $\Gamma^{(\pm)}$  e, as obtidas via *ab initio* 1. É nítido que, para esses materiais, nosso método não encontrou um conjunto de parâmetros correspondentes ao perfil da curva. Porém, algo muito importante de se pontuar é o fato que o siliceno e o germaneno são estáveis na configuração arqueada [194, 195, 201, 240, 243] e, portanto, as estruturas de banda obtidas via *ab initio* 1, no qual os autores apresentam resultados baseados em imposições de estabilidade planar dado um conjunto de parâmetros, podem não ser diretamente comparáveis com o nosso método, como no caso do grafeno que é um material estável na forma planar.

Há outros trabalhos [194, 243–247] que utilizam métodos distinto para o cálculo de bandas deste materiais e, além da não estabilidade do siliceno e do germaneno na forma planar, outros aspectos também são discutidos, como condições para abertura de gap entre as bandas e a energia de Fermi associada aos cones de Dirac (no ponto de alta simetria  $K$ ) de tais materiais. Entretanto, devido à instabilidade destes sistemas na forma planar, temos que os conjuntos de parâmetros escolhidos para métodos *ab initio* semelhantes são determinantes para as estruturas de bandas encontradas, isto é, mesmo com métodos equivalentes é possível obter bandas com notáveis diferenças entre si.

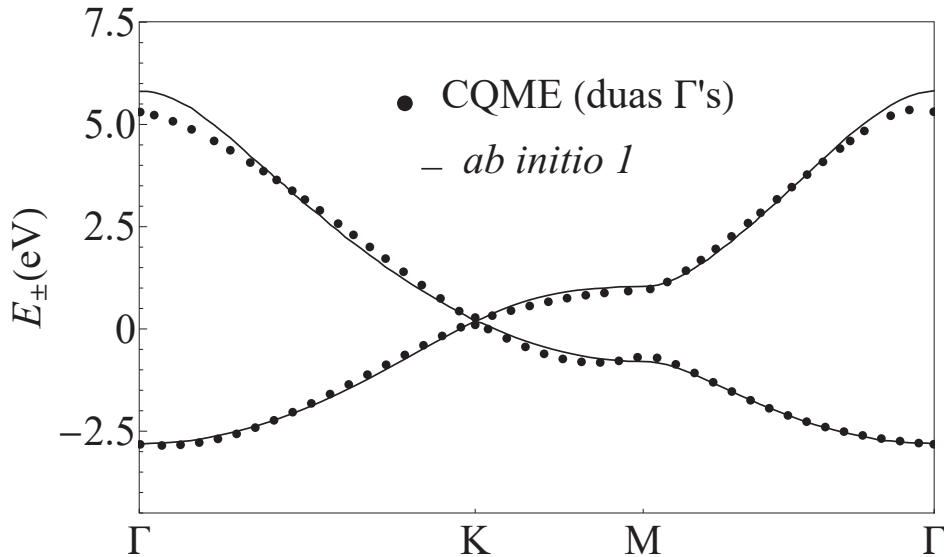


Figura 4.12: Comparação entre as estruturas de banda  $\pi$  e  $\pi^*$  para o germaneno obtidas através do algoritmo de busca de matrizes  $\hat{\Gamma}^{(\pm)}$  e via *ab initio* 1 [195].

Abaixo temos as matrizes  $S^{(\pm)}$ , os parâmetro  $\gamma$  e  $\tilde{\epsilon}$ , vide Eq.(4.59), que levam às bandas de energia  $\pi$  e  $\pi^*$  no caminho  $\Gamma K M \Gamma$  do germaneno e do siliceno, respectivamente, vide Figs.4.12 e

4.13

$$\begin{aligned}
\hat{S}_{germ}^{(+)} &= \begin{pmatrix} -0.235401 - 0.234025i & 0.907655 + 0.00356565i & -0.149145 + 0.209104i \\ -0.50009 - 0.644277i & -0.137028 - 0.0414458i & 0.317586 - 0.46202i \\ 0.473104 + 0.0284348i & 0.269421 - 0.288216i & -0.218807 - 0.756195i \end{pmatrix}, \\
\hat{S}_{germ}^{(-)} &= \begin{pmatrix} -0.38446 - 0.0755964i & 0.12191 - 0.652291i & 0.112986 + 0.627188i \\ -0.316329 + 0.606195i & -0.105728 + 0.454626i & -0.352752 + 0.43608i \\ 0.0840718 - 0.609813i & -0.359216 + 0.461254i & 0.188915 + 0.493539i \end{pmatrix}, \\
\hat{S}_{sili}^{(+)} &= \begin{pmatrix} -0.107015 - 0.00798447i & -0.0265558 + 0.869958i & 0.269032 - 0.398214i \\ -0.690817 - 0.648893i & -0.0470178 + 0.0331329i & -0.306416 + 0.0671659i \\ -0.300254 + 0.0064432i & 0.0124119 - 0.488882i & 0.460001 - 0.677529i \end{pmatrix}, \\
\hat{S}_{sili}^{(-)} &= \begin{pmatrix} -0.457887 + 0.324023i & 0.538585 + 0.326047i & -0.533475 + 0.0661224i \\ -0.35892 + 0.442505i & -0.239453 + 0.39051i & 0.611317 + 0.303022i \\ 0.60042 + 0.0144789i & -0.210423 + 0.591191i & -0.309735 + 0.386738i \end{pmatrix},
\end{aligned} \tag{4.63}$$

e tal que

$$\begin{aligned}
\gamma_{germ} &= 0.309361885861335, \\
\gamma_{sili} &= -0.3565029108304439, \\
\tilde{\epsilon}_{germ} &= 4.371430728147026, \\
\tilde{\epsilon}_{sili} &= -5.38457659978849.
\end{aligned} \tag{4.64}$$

Considerando os resultados obtidos com nosso método numérico de busca de matrizes e, comparando com os obtidos anteriormente na segunda seção deste capítulo, fica claro como a devida escolha da parametrização das matrizes  $\hat{\Gamma}^{(\pm)}$  faz uma total diferença nos resultados obtidos via Eq.(4.38). É nítido como a quantidade de parâmetros influencia diretamente na liberdade de descrição de sistemas físicos, neste caso especificamente os materiais de Dirac com rede *honeycomb* planar. Na parametrização proposta neste capítulo, trabalhamos com um total de dezoito parâmetros no algoritmo, oito associados a cada matriz  $\hat{S}^{(\pm)}$ , um parâmetro livre e uma fase global, em comparação aos os três parâmetros sugeridos no caso da matriz AB.

Por fim, acreditamos que é possível encontrar curvas que tenham semelhança ainda maior dos que as apresentadas aqui nesta subseção. Em primeiro lugar, se conseguíssemos um acesso direto aos resultados do *ab initio* 1 acreditamos que teríamos um erro ainda menor já que como

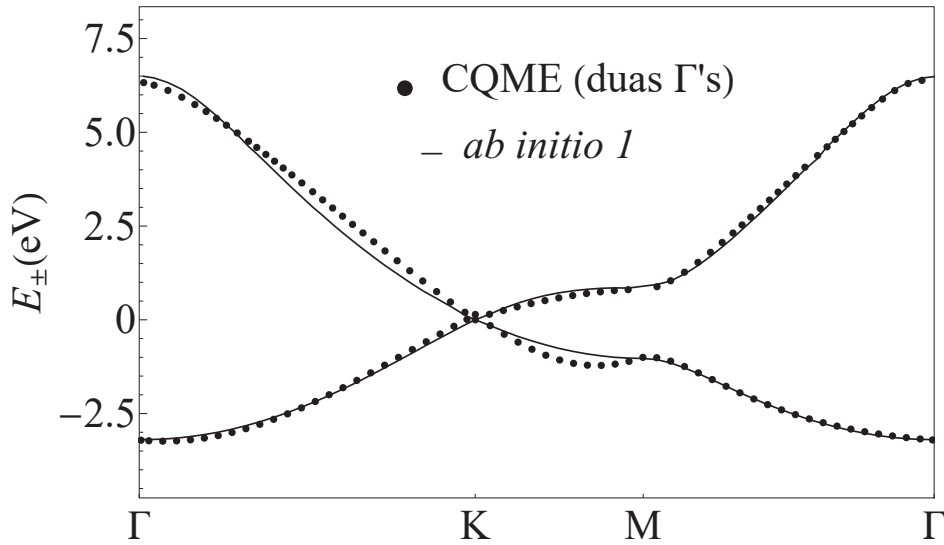


Figura 4.13: Comparação entre as estruturas de banda  $\pi$  e  $\pi^*$  para o siliceno obtidas através do algoritmo de busca de matrizes  $\hat{\Gamma}^{(\pm)}$  e via *ab initio* 1 [195].

nosso algoritmo é baseado em uma rotina de busca/comparação. Outro ponto é que todos os dados foram obtidos em um computador pessoal. Portanto, acreditamos que a implementação do algoritmo em *clusters* computacionais permitiria uma grande incremento entre a taxa de matrizes varridas por unidade de tempo computacional necessário em cada looping de busca e, conseqüentemente, nos permitiria implementar uma busca com mais pontos associados a uma dada curva relacionada a uma banda de energia obtida via *ab initio*.



## CAPÍTULO 5

# CAMINHADAS QUÂNTICAS POR MODELO DE ESPALHAMENTO EM REDES TRIANGULARES

Neste capítulo iremos apresentar a construção do formalismo para CQME's em redes triangulares infinitas. Além disso, iremos apresentar resultados obtidos com o formalismo de teoria de grupos e eixos de simetria aplicados na permutação de rótulos dos estados associados à direção de propagação do caminhante quântico.

Desta forma, o objetivo aqui não é apresentar cálculos numéricos mostrando diferentes situações particulares, mas desenvolver a teoria geral de caminhadas quânticas em redes triangulares, que matematicamente é mais complexa em relação ao caso das redes hexagonais. A ideia é que os presentes resultados sejam úteis em futuras aplicações.

### 5.1 Caminhadas Quânticas por Modelo de Espalhamento em Rede Triangular no Espaço de Posição

#### 5.1.1 Estrutura Topológica da Rede Triangular e Estados de Base

A rede triangular é uma rede periódica com número de ordenação  $l = 6$  e, portanto, cada vértice da rede possui seis primeiros vizinhos. A célula unitária de uma rede triangular pode ser escolhida de diferentes formas, desde que contenha apenas um vértice em sua região e a célula apresente simetria [42].

A estrutura topológica da rede triangular, representada na Fig.5.1, é composta por vértices associados a um par ordenado  $(j, k)$ , onde  $j$  e  $k$  são números inteiros. Portanto, já deixando claro o caráter discreto das posições dos vértices na rede e, conseqüentemente, da caminhada

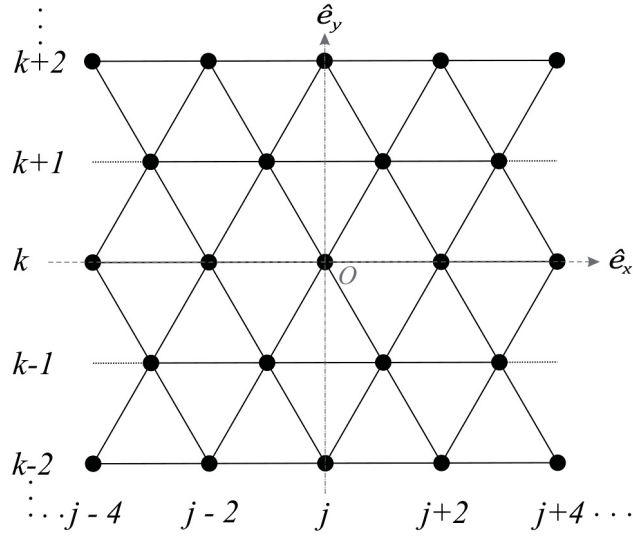


Figura 5.1: Representação de uma rede triangular. Todos os vértices da rede são representados pelas coordenadas discretas  $j$  e  $k$ , formando o par ordenado  $(j, k)$ . As coordenadas cartesianas dos vértices são dadas pela Eq.(5.1).

quântica a ser implementada neste rede. Consideramos arestas de tamanho  $a$  nas coordenadas  $(j, k)$ , de tal forma que a representação de um vértice qualquer da rede no plano cartesiano pode ser expressa através de

$$x_j(j) = \frac{ja}{2}, \quad y_k(k) = \frac{\sqrt{3}ka}{2}. \quad (5.1)$$

Os estados de base do sistema podem ser descritos por um conjunto de kets  $\{|m, j, k\rangle\}$ . Estes kets descrevem direção de propagação  $m$  de uma partícula em direção a um vértice  $(j, k)$  da rede.

Como para rede triangular o número de ordenação (1) é seis, conseqüentemente o espaço  $\mathcal{H}_C$  associado as direções de propagação do caminhante, expresso por  $m$ , será hexadimensional. Desta forma, os estados de bases  $\{m_c\}$  podem ser expressos da seguinte forma

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, | -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, | -2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, | -3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

tal que cada estado de base acima está relacionado com uma direção  $m$  de propagação da partícula ao ser espalhada em um vértice arbitrário  $(j, k)$  da rede, onde  $m \in \{\pm 1, \pm 2, \pm 3\}$ .

De maneira geral, ao representarmos um estado do sistema por  $|m, j, k\rangle$ , temos que

$$|m, j, k\rangle = |m_c\rangle \otimes |j, k\rangle, \quad (5.3)$$

uma vez que

$$\mathcal{H}_{cq} = \mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_p, \quad (5.4)$$

onde  $\mathcal{H}_C$  é o espaço hexadimensional e complexo que contem os estados associados ao número quântico  $m$ , que descreve as direções de propagação até os vértices vizinhos. Já  $\mathcal{H}_p$ , infinito e discreto, é o espaço das posições, contendo os estados associados às posições do nosso caminhante quântico com os números quânticos  $(j, k)$ .

Uma vez definido os estados de base do sistema, teremos que as relações de ortonormalidade e completude, são dadas, respectivamente, por

$$\langle m, j, k | m', j', k' \rangle = \delta_{mm'} \delta_{jj'} \delta_{kk'}, \quad \hat{1} = \sum_j \sum_k \sum_m |m, j, k\rangle \langle m, j, k|, \quad (5.5)$$

onde  $m \in \{\pm 1, \pm 2, \pm 3\}$ .

### 5.1.2 Operador Evolução Temporal e Matrizes Espalhamento

Um estado de uma CQME triangular em um certo instante de tempo  $t$ , onde  $t = n\tau$  (tal que  $n \in \mathbb{N}$  e  $\tau$  é um tempo característico), pode ser representado por

$$|\psi_t\rangle = \hat{U}^t |\psi_0\rangle = \hat{U}^{n\tau} |\psi_0\rangle, \quad (5.6)$$

onde  $|\psi_0\rangle$  é o estado inicial do sistema e  $\hat{U}$  é o operador evolução unitária. O tempo característico  $\tau$  é um parâmetro livre que pode assumir diferentes valores conforme as condições da rede e do caminhante.

A ação de  $\hat{U}$  em um estado  $|m, j, k\rangle$  pode ser descrita por

$$\hat{U}|m, j, k\rangle = \sum_{m'} \Gamma_{m'm}^{(j,k)} |m', f(m', j, k), g(m', j, k)\rangle, \quad (5.7)$$

representando, portanto, que dado um estado do sistema onde o caminhante se propaga rumo ao vértice  $(j, k)$  pela direção  $m$ , ao sofrer a ação do operador evolução unitária  $\hat{U}$ , irá se propagar rumo ao vértice  $(f(m', j, k), g(m', j, k))$  pela direção  $m'$ . Desta forma, como abordado nos Capí-

tulos 2 e 3, a ação do operador evolução temporal  $\hat{U}$  está associada ao processo de espalhamento, no modelo de CQME.

Formalmente,  $f(m', j, k)$  e  $g(m', j, k)$  são as funções topológicas das CQME's para rede triangular e são descritas por

$$f(m, j, k) = j + [m]_2 (-1)^{\delta(m+1)+\delta(m+3)} + 2((-1)^{\delta(m+2)} \cdot \delta(|m| - 2)), \quad (5.8)$$

$$g(m, j, k) = k + [m]_2 (2 - |m|) (-1)^{\delta(m+1)+\delta(m+3)}, \quad (5.9)$$

onde  $m \in \{\pm 1, \pm 2, \pm 3\}$ , tal que  $[m]_2$  é o resto da divisão  $m/2$  e,  $\delta$  é a função delta de Kronecker. Considerando as Eqs.(5.8) e (5.9), as funções topológicas  $f(m, j, k)$  e  $g(m, j, k)$  podem assumir os seguintes valores

$$f(m, j, k) = \begin{cases} j + 1, & \text{se } m = 1; \\ j - 1, & \text{se } m = -1; \\ j + 2, & \text{se } m = 2; \\ j - 2, & \text{se } m = -2; \\ j + 1, & \text{se } m = 3; \\ j - 1, & \text{se } m = -3; \end{cases} \quad g(m, j, k) = \begin{cases} k + 1, & \text{se } m = 1; \\ k - 1, & \text{se } m = -1; \\ k, & \text{se } m = 2; \\ k, & \text{se } m = -2; \\ k - 1, & \text{se } m = 3; \\ k + 1, & \text{se } m = -3. \end{cases} \quad (5.10)$$

Como consequência da Eq.(5.7), a evolução temporal do sistema de um dado instante de tempo  $t$  é dada por

$$\hat{U}|\psi_t\rangle = \sum_j \sum_k \sum_m \psi_m(j, k; t) \left( \sum_{m'} \Gamma_{m'm}^{(j,k)} |m', f(m', j, k), g(m', j, k)\rangle \right), \quad (5.11)$$

e denota, portanto, o estado  $|\psi_{t+1}\rangle$  do sistema.

Na Eq.(5.7),  $\Gamma_{m'm}^{(j,k)}$  são os denominados coeficientes de espalhamento, tal que  $|\Gamma_{m'm}^{(j,k)}|^2$  nos dá a probabilidade de uma partícula se propagando pela direção  $m$  ao vértice  $(j, k)$  ser espalhada para o vértice adjacente  $(f(m', j, k), g(m', j, k))$  pela direção  $m'$ . Devido à condição de unitariedade,  $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{1}$ , temos que

$$\sum_{m=-3^*}^3 \Gamma_{mm'}^{(j,k)} \Gamma_{mm''}^{(j,k)*} = \sum_{m=-3^*}^3 \Gamma_{m'm}^{(j,k)*} \Gamma_{m''m}^{(j,k)} = \delta_{m'm''}, \quad (5.12)$$

e que podemos representar todos os coeficientes de espalhamento associados a um vértice  $(j, k)$

por uma matriz de espalhamento  $\hat{\Gamma}^{(j,k)}$

$$\hat{\Gamma}^{(j,k)} = \begin{pmatrix} \Gamma_{1-1}^{(j,k)} & \Gamma_{1-2}^{(j,k)} & \Gamma_{1-3}^{(j,k)} & \Gamma_{11}^{(j,k)} & \Gamma_{12}^{(j,k)} & \Gamma_{13}^{(j,k)} \\ \Gamma_{2-1}^{(j,k)} & \Gamma_{2-2}^{(j,k)} & \Gamma_{2-3}^{(j,k)} & \Gamma_{21}^{(j,k)} & \Gamma_{22}^{(j,k)} & \Gamma_{23}^{(j,k)} \\ \Gamma_{3-1}^{(j,k)} & \Gamma_{3-2}^{(j,k)} & \Gamma_{3-3}^{(j,k)} & \Gamma_{31}^{(j,k)} & \Gamma_{32}^{(j,k)} & \Gamma_{33}^{(j,k)} \\ \Gamma_{-1-1}^{(j,k)} & \Gamma_{-1-2}^{(j,k)} & \Gamma_{-1-3}^{(j,k)} & \Gamma_{-11}^{(j,k)} & \Gamma_{-12}^{(j,k)} & \Gamma_{-13}^{(j,k)} \\ \Gamma_{-2-1}^{(j,k)} & \Gamma_{-2-2}^{(j,k)} & \Gamma_{-2-3}^{(j,k)} & \Gamma_{-21}^{(j,k)} & \Gamma_{-22}^{(j,k)} & \Gamma_{-23}^{(j,k)} \\ \Gamma_{-3-1}^{(j,k)} & \Gamma_{-3-2}^{(j,k)} & \Gamma_{-3-3}^{(j,k)} & \Gamma_{-31}^{(j,k)} & \Gamma_{-32}^{(j,k)} & \Gamma_{-33}^{(j,k)} \end{pmatrix}, \quad (5.13)$$

tal que a matriz  $\hat{\Gamma}^{(j,k)}$  descreve todo o processo físico que a partícula sofre ao ser espalhada em um vértice  $(j, k)$ . Temos ainda que, se  $m' = -m$ , teremos os coeficientes de reflexão (localizados na diagonal principal da matriz de espalhamento  $\hat{\Gamma}^{(j,k)}$ ) e, portanto,  $|\Gamma_{-mm}^{(j,k)}|^2$  nos dá a probabilidade de a partícula ser refletida. Por outro lado, se  $m' \neq -m$  teremos os coeficientes de transmissão (localizados fora da diagonal principal), onde  $|\Gamma_{m'm}^{(j,k)}|^2$  nos dá a probabilidade da partícula ser transmitida para direção  $m'$  após ser espalhada pelo vértice  $(j, k)$ .

Podemos tomar alguns exemplos de matrizes espalhamento para serem utilizadas em uma CQME na rede triangular. Uma delas é a matriz Grover hexadimensional [202], dada por

$$\hat{\Gamma}_{GRO(6)} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -2 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -2 \end{pmatrix}, \quad (5.14)$$

e possui valores de coeficientes de espalhamento diferentes para elementos da diagonal principal, relacionados aos processos de transmissão e, para elementos fora da diagonal principal, relacionados aos processos de reflexão. A matriz Grover é uma matriz muito utilizada para CQ's que implementam algoritmos de busca [34, 213, 248].

A Transformada Discreta de Fourier (TDF) hexadimensional [202],  $TDF_{(6)}$ , é uma matriz imparcial, isto é, as probabilidades dos processos reflexivos e transmissivos são iguais. Ela pode

ser representada como

$$\hat{\Gamma}_{TDF(6)} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & e^{-i\pi/3} & e^{-2i\pi/3} & -1 & e^{-4i\pi/3} & e^{-5i\pi/3} \\ 1 & e^{-2i\pi/3} & e^{-4i\pi/3} & 1 & e^{-8i\pi/3} & e^{-10i\pi/3} \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & e^{-4i\pi/3} & e^{-8i\pi/3} & 1 & e^{-16i\pi/3} & e^{-20i\pi/3} \\ 1 & e^{-5i\pi/3} & e^{-10i\pi/3} & -1 & e^{-20i\pi/3} & e^{-25i\pi/3} \end{pmatrix}, \quad (5.15)$$

e ela é definida de tal forma que, considerando a notação da Eq.(5.13), os coeficientes  $\Gamma_{m'm}$ , dado uma direção de incidência  $m \in \{\pm 2, \pm 3\}$ , possuem diferentes fases associadas para cada direção  $m' \in \{\pm 2, \pm 3\}$ .

### 5.1.3 Probabilidades e Operadores Cartesianos

A probabilidade de encontrar o caminhante quântico se propagando na rede triangular em direção ao vértice  $(j, k)$ , em um instante de tempo  $t$ , é dado por:

$$p_v(j, k, t) = \sum_m |\langle m, j, k | \psi_t \rangle|^2 = \sum_m |\psi_m(j, k; t)|^2, \quad (5.16)$$

tal que podemos ainda determinar as distribuições probabilidades associadas à coordenada  $j$  e à coordenada  $k$ ,  $p_x(j, t)$  e  $p_y(j, t)$ , respectivamente descritas por

$$p_x(j, t) = \sum_k p_v(j, k, t), \quad p_y(k, t) = \sum_j p_v(j, k, t). \quad (5.17)$$

Por fim, a probabilidade de encontrar o caminhante se propagando em direção ao vértice  $(j, k)$  pela direção  $m$  é dada por:

$$p_m(j, k, t) = \sum_j \sum_k |\langle m, j, k | \psi_t \rangle|^2 = \sum_{j,k} |\psi_m(j, k; t)|^2. \quad (5.18)$$

Uma vez que definimos as distribuições de probabilidades acima, podemos determinar o deslocamento quadrático médio (DQM). O DQM, está associado aos operadores cartesianos e ao operador radial  $\hat{R}$ . Podemos descrever as ações em um dado estado de base da seguinte forma

$$\hat{X}|m, j, k\rangle = x_j|m, j, k\rangle, \quad \hat{Y}|m, j, k\rangle = y_k|m, j, k\rangle, \quad (5.19)$$

e

$$\hat{R}|m, j, k\rangle = r_{(j,k)}|m, j, k\rangle \quad (5.20)$$

onde  $(x_j, y_k)$  são as coordenadas cartesianas dadas pela Eqs;(5.1) e  $r_{(j,k)}$  é a coordenada radial do vértice  $(j, k)$ , definida por

$$r_{(j,k)} = \sqrt{x_j^2 + y_k^2}. \quad (5.21)$$

Portanto, para os operadores  $\hat{X}$ ,  $\hat{Y}$  e  $\hat{R}$ , o DQM é dado respectivamente por

$$D_x = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \sum_j p_x(j, t) x_j^2 - \left( \sum_j p_x(j, t) x_j \right)^2, \quad (5.22)$$

$$D_y = \langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2 = \sum_k p_y(k, t) y_k^2 - \left( \sum_k p_y(k, t) y_k \right)^2, \quad (5.23)$$

$$D_r = \langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 = \sum_{j,k} p_v(j, k, t) r_{(j,k)}^2 - \left( \sum_{j,k} p_v(j, k, t) r_{(j,k)} \right)^2. \quad (5.24)$$

## 5.2 Rótulos de Direção de Propagação e Elementos de Simetria da Rede Triangular

A implementação de caminhadas quânticas em redes regulares bidimensionais podem ser uma ótima maneira de investigar diversos aspectos de materiais bidimensionais, como mencionado no capítulo anterior. Além disso, possibilitam uma investigação topológica de fenômenos quânticos neste tipo de rede [152, 249]. Tendo esses dois pontos em vista, desenvolvemos um formalismo para CQME's que leva em consideração todas as permutações possíveis de rótulos dos estados  $m$  relacionados à direção da propagação da partícula na rede triangular, desde que sejam rótulos associados apenas a estados topologicamente equivalente, como veremos adiante.

Uma vez que os principais conceitos das CQME's em redes triangulares foram apresentados na seção anterior, agora podemos nos aprofundar em alguns conceitos presentes, porém, usualmente pouco explorados no contexto de CQ's.

A permutação de rótulos associados aos estados de base de direção de propagação do caminhante na rede,  $m$ , já foi estudada e formulada para a rede hexagonal [152]. A partir daqui, iremos desenvolver um formalismo que visa explorar características associadas à estrutura da rede triangular e a relação dessas características com as principais grandezas estudadas em CQME's.

Primeiramente, iremos considerar que

$$|m, j, k\rangle = |\Phi_m^{(j,k)}, j, k\rangle, \quad (5.25)$$

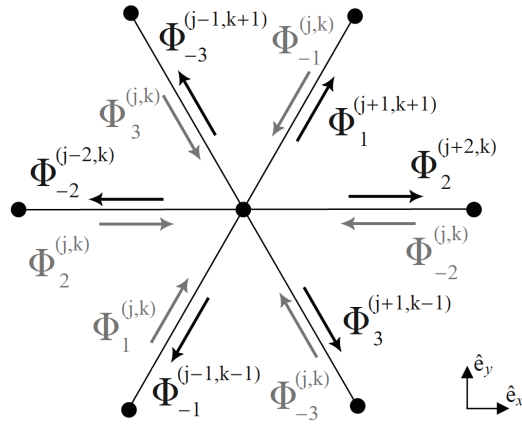


Figura 5.2: Representação dos estados do caminhante quânticos em direção ao vértice  $(j, k)$  (cinza) e em direção aos seus primeiros vizinhos (preto):  $(j + 1, k + 1)$ ,  $(j + 1, k - 1)$ ,  $(j - 1, k + 1)$  e  $(j - 1, k - 1)$ . De maneira genérica,  $\Phi_m^{(j,k)}$  representa um estado no qual o caminhante se propaga em direção ao vértice  $(j, k)$  pela direção  $m$ .

tal que  $\Phi_m^{(j,k)}$  é a função rótulo, e associa um dado rótulo genérico  $L$ , tal que  $L \in \{\alpha, \beta, \xi, \gamma, \lambda, \mu\}$ , à direção de propagação  $m$  do caminhante em direção ao vértice  $(j, k)$ , como mostrado na Fig.5.2.

Considerando a Eq.(5.25), podemos definir a Eq.(5.7) tal que

$$\hat{U}|\Phi_m^{(j,k)}, j, k\rangle = \sum_{m'} \Gamma_{\Phi_{m'}^{(j,k)} \Phi_m^{(j,k)}} |\Phi_{m'}^{(j,k)}, f(\Phi_{m'}^{(j,k)}, j, k), g(\Phi_{m'}^{(j,k)}, j, k)\rangle, \quad (5.26)$$

onde a função rótulo  $\Phi_m^{(j,k)}$ , para as devidas direções  $m$ , assumirá

$$\Phi_m^{(j,k)} = \begin{cases} \alpha_i[j+1]_2 + \alpha[j]_2, & \text{se } m = 1; \\ \beta_i[j+1]_2 + \beta[j]_2, & \text{se } m = -1; \\ \lambda_i[j]_2 + \lambda[j+1]_2, & \text{se } m = 2; \\ \mu_i[j]_2 + \mu[j+1]_2, & \text{se } m = -2; \\ \xi_i[j+1]_2 + \xi[j]_2, & \text{se } m = 3; \\ \gamma_i[j+1]_2 + \gamma[j]_2, & \text{se } m = -3, \end{cases} \quad (5.27)$$

como mostrado na Fig.5.3.

### 5.2.1 Permutação entre quatro rótulos topologicamente equivalentes

Visando explorar diferentes CQME's triangulares, iremos propor permutações de rótulos associados aos estados de direção de propagação do caminhante. Em um primeiro momento, iremos



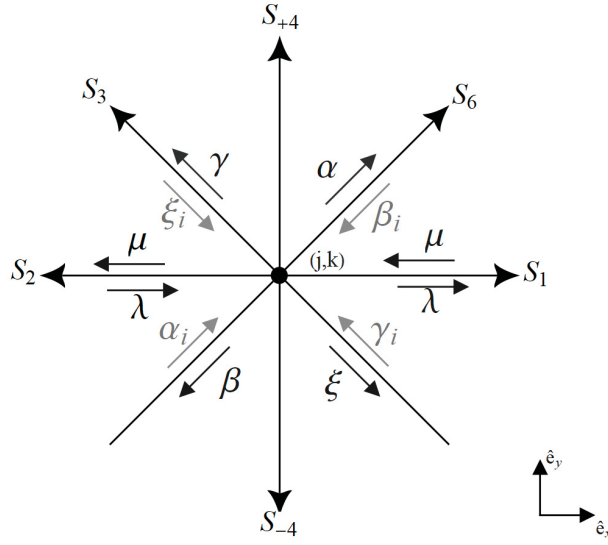


Figura 5.3: Representação dos rótulos segundo a Eq.(5.27). Além disso, temos a representação dos eixos de simetria  $S_1, S_2, S_3, S_{-4}, S_{+4}, S_6$ , vide Eq.(5.32), referências para as trocas de rótulos se acordo com os elementos de simetria da rede triangular.

considerar permutações apenas entre os quatro rótulos topologicamente equivalentes  $\alpha_i, \beta_i, \xi_i, \gamma_i$ , tal que tais rótulos estão associados a estados onde o caminhante se propaga em direção a vértices com coordenadas discretas  $j$  e  $k$  pares, vide Eq.(5.27).

Como temos o objetivo de investigar os elementos de simetria associados as devidas trocas de rótulos na rede triangular, iremos utilizar o formalismo de teoria de grupos [250]. Formalmente, um conjunto  $G$  é um grupo se satisfazer três axiomas:

(a) A multiplicação é associativa, isto é,

$$(xy)z = (z)yz, \tag{5.28}$$

para quaisquer três elementos (não necessariamente distintos) de  $G$ .

(b) Há um elemento  $e$  de  $G$ , elemento identidade, tal que

$$xe = x = ex, \tag{5.29}$$

para qualquer  $x \in G$ .

(c) Para cada elemento  $x$  de  $G$  há um elemento inverso  $x^{-1}$ , tal que  $x^{-1} \in G$ , e satisfaz a seguinte relação

$$x^{-1}x = e = xx^{-1}. \tag{5.30}$$

Considerando esses axiomas, queremos encontrar um grupo,  $G_{tri}$ , que contenha todos os operadores não redundantes de permutação rótulos entre estados de direção de propagação topologicamente equivalentes da rede triangular. Além disso, queremos que  $G_{tri}$ , contenha operadores de permutação que agem apenas sob os rótulos  $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$  e  $\xi_i$ . Escolhemos estes rótulos para serem permutados devido à equivalência topológica entre eles, isto é, das Eqs.(5.1), (5.25) e (5.27), estes rótulos estão associados às funções topológicas de mesmo módulo de deslocamento cartesiano do caminhante em um instante de tempo. Desta forma, do ponto de vista de rótulos associados a estados topologicamente equivalentes, os rótulos  $\lambda_i$  e  $\mu_i$  só podem permutar entre si, e, portanto, iremos considerar daqui em diante que  $\lambda_i = \lambda$  e  $\mu_i = \mu$ . Porém, para investigações posteriores, vale notar que é possível adicionar a permutação entre  $\lambda_i$  e  $\mu_i$  como um dos critérios.

Inspirado nos grupos diedrais e nos grupos de permutação [191], iremos associar as possíveis permutações de rótulos com os elementos e operadores de simetria da rede triangular. Desta forma, iremos definir, em um primeiro momento, os operadores primordiais de permutação de rótulos

$$e, r, s_1, s_2, s_3, s_{-4}, s_{+4}, s_6, \tag{5.31}$$

de tal forma que estes operadores de permutação (e elementos geradores de  $G_{tri}$ ) são essenciais para permutação de rótulos por elementos de simetria da rede triangular. Cada operador presente na Eq.(5.31) está associado a pelo menos um eixo de simetria [250],  $S_n$ , tal que

$$S_n = \frac{360^\circ}{n}, \tag{5.32}$$

onde  $n \in \{1, 2, 3, \pm 4, 6\}$ , como ilustrado na Fig.5.3. Da Eq.(5.31), todos os operadores  $s_n$  serão operadores de reflexão em relação ao eixo  $S_n$ .

O operador  $r$  é o operador de permutação dos rótulos por rotação em  $\pi$  em relação ao vértice referência (vértice  $(j, k)$  no caso da ilustração da Fig.(5.3)). Além disso, o operador  $r$  é equivalente a

$$r = s_3 s_6 = s_6 s_3, \tag{5.33}$$

tal que no formalismo utilizado,  $s_3 s_6$ , por exemplo, representa a ação do operador  $s_6$  e na sequência a ação do operador  $s_3$ .

O elemento identidade,  $e$ , também pode ser obtido por

$$e = r^2 = r s_3 s_6 = r s_6 s_3 = s_3 s_6 r = s_6 s_3 r = s_n s_n, \tag{5.34}$$

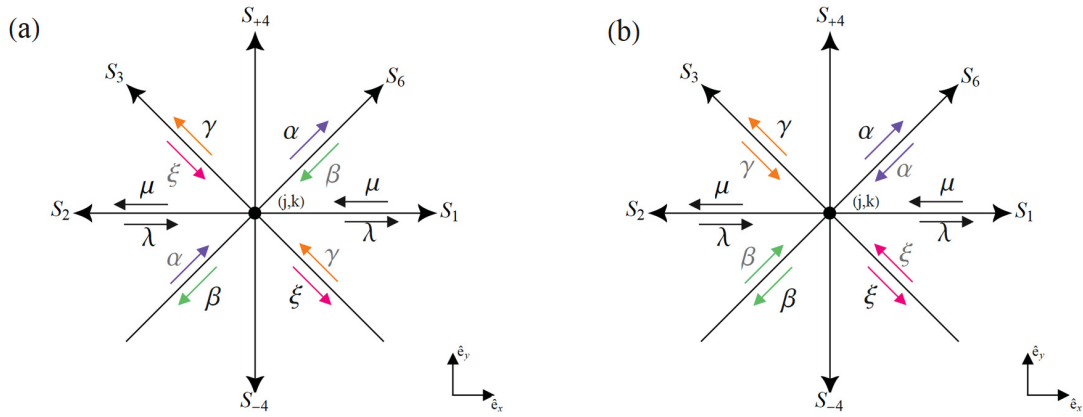


Figura 5.4: (a) Representação da permutação  $p_I$ . Este caso leva a construção de uma CQME na qual os coeficientes de espalhamento dos processos transmissivos, dos quatro estados de direção de propagação  $m = \{-1, +1, -3, +3\}$ , estão associados a estados de mesmo rótulo, como por exemplo,  $\Gamma_{\alpha\alpha}^{(j,k)} = \Gamma_{+1+1}^{(j,k)}$ . (b) Representação da permutação  $p_r$ . Este caso leva a construção de uma CQME na qual os coeficientes de espalhamento dos processos reflexivos, dos quatro estados de direção de propagação citados anteriormente, estão associados a estados de mesmo rótulo, como por exemplo,  $\Gamma_{\alpha\alpha}^{(j,k)} = \Gamma_{+1-1}^{(j,k)}$ .

onde  $n \in \{1, 2, 3, \pm 4, 6\}$ .

É possível notar na Eq.(5.34) que, a ação ou uma dada sequência de ações de alguns operadores de permutação podem equivaler a ação do operador identidade,  $e$ . Nós iremos definir que, a ação do operador  $e$  está associada a permutação fundamental ou identidade,  $p_I$ . Neste caso, os rótulos  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$ ,  $\gamma_i$  e  $\xi_i$  assumem os mesmos rótulos dos estados de direção de propagação em direção a vértices de coordenada  $j$  com paridade ímpar, como ilustrado na Fig.5.4(a). Para denotar os rótulos que foram permutados, iremos adotar a seguinte notação

$$p_I = (\alpha_i\alpha)(\beta_i\beta)(\gamma_i\gamma)(\xi_i\xi), \quad (5.35)$$

tal que  $p_I$  é permutação fundamental ou identidade e, está denotado que, nesta permutação  $\alpha_i$  assume  $\alpha$ ,  $\beta_i$  assume  $\beta$ ,  $\gamma_i$  assume  $\gamma$  e  $\xi_i$  assume  $\xi$ , como ilustrado na Fig.5.4(a). A ação de um mais operadores de permutação de rótulo, que serão definidos a seguir, sempre se baseia na permutação identidade como ponto de partida.

Considerando os elementos geradores, os axiomas e as condições estabelecidas para as permutações dos rótulos, nós conseguimos definir o grupo  $G_{tri}$ , grupo dos operadores de permutação dos rótulos  $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i, \xi_i$ , como

$$G_{tri} = \{e, r, s_1, s_2, s_3, s_{-4}, s_{+4}, s_6, rs_1, rs_2, rs_{-4}, rs_{+4}, s_1s_2, s_{+4}s_{-4}, s_1s_{-4}, s_{-4}s_1, s_1s_{+4}, s_{+4}s_1, s_2s_3, s_3s_2, s_2s_6, s_6s_2, s_1s_2s_3, s_1s_2s_6\}, \quad (5.36)$$

possuindo vinte e quatro elementos, tal que cada elemento está diretamente associado à uma

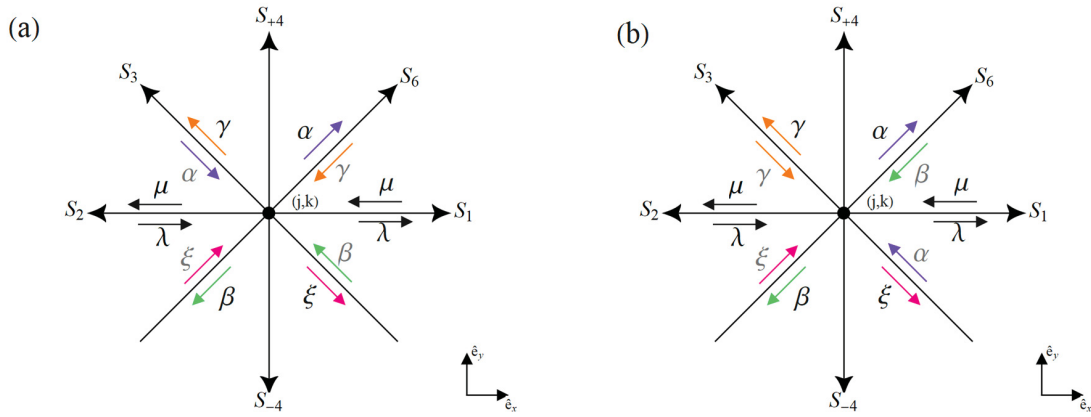


Figura 5.5: Representações de permutações em que teremos CQME's na qual tanto os fenômenos de transmissão como de reflexão possuem diferentes associações entre os rótulos, ver Tab.(5.1). (a) Representação da permutação  $p_{s_1 s_2}$ . (b) Representação da permutação  $p_{s_2 s_6}$ .

permutação, como mostrado na Tab.(5.1).

Nas Figs.5.4 e 5.5 temos a ilustração de algumas das vinte e quatro permutações distintas possíveis. Nestas figuras, por fins didáticos, para cada rótulo associado aos estados de direção de propagação do caminhante atribuímos uma cor. Podemos notar, por exemplo, que a permutação  $p_I$ , ilustrada na Fig.5.4(a), nos leva a construção de uma CQME na qual os coeficientes de espalhamento dos processos transmissivos (dos quatro estados de direção de propagação  $m = \{-1, +1, -3, +3\}$ ) estão associados a estados de mesmo rótulo, ex:  $\Gamma_{\alpha\alpha}^{(j,k)} = \Gamma_{+1+1}^{(j,k)}$ ,  $\Gamma_{\beta\beta}^{(j,k)} = \Gamma_{-1-1}^{(j,k)}$ ,  $\Gamma_{\gamma\gamma}^{(j,k)} = \Gamma_{-3-3}^{(j,k)}$  e  $\Gamma_{\xi\xi}^{(j,k)} = \Gamma_{+3+3}^{(j,k)}$ . Por outro lado, na Fig.5.4(b), temos a construção de uma CQME na qual os coeficientes de espalhamento dos processos reflexivos (dos quatro estados de direção de propagação  $m = \{-1, +1, -3, +3\}$ ) estão associados a estados de mesmo rótulo, ex:  $\Gamma_{\alpha\alpha}^{(j,k)} = \Gamma_{+1-1}^{(j,k)}$ ,  $\Gamma_{\beta\beta}^{(j,k)} = \Gamma_{-1+1}^{(j,k)}$ ,  $\Gamma_{\gamma\gamma}^{(j,k)} = \Gamma_{+3-3}^{(j,k)}$  e  $\Gamma_{\xi\xi}^{(j,k)} = \Gamma_{-3+3}^{(j,k)}$ .

Na Fig.5.5 temos as representações das permutações  $p_{s_1 s_2}$  e  $p_{s_2 s_6}$ , respectivamente. Note que, nestes casos, teremos CQME's na qual tanto os fenômenos de transmissão como de reflexão possuem diferentes associações. No caso de  $p_{s_1 s_2}$ , por exemplo, temos que  $\Gamma_{\alpha\alpha}^{(j,k)} = \Gamma_{+1+3}^{(j,k)}$ ,  $\Gamma_{\beta\beta}^{(j,k)} = \Gamma_{-1-3}^{(j,k)}$ ,  $\Gamma_{\gamma\gamma}^{(j,k)} = \Gamma_{-3-1}^{(j,k)}$  e  $\Gamma_{\xi\xi}^{(j,k)} = \Gamma_{+3+1}^{(j,k)}$ . Estamos elucidando apenas alguns dos coeficientes da matriz de espalhamento, com objetivos didáticos. A construção das matrizes espalhamento para cada uma das vinte e quatro permutações possíveis pode ser feita tomando as Eqs.(5.13),(5.25), (5.27) e a Tab.(5.1).

Ao analisarmos a Tab.(5.1), é possível notar que, todas as permutações (não redundantes) possíveis, podem ser associadas a diferentes CQME's. É importante notar que, a paridade da coordenada  $j$  do(s) vértice(s) destino é que determina se terá ou não permutação, ver Eq.(5.27). Desta forma, estamos propondo CQME's em que os rótulos e, conseqüentemente, os coeficientes das matrizes de espalhamento são dependentes da paridade da coordenada  $j$  do vértice destino do

Permutação	Elemento de $G_{tri}$	Equivalência(s)	Rótulos Permutados
$p_I$	e	$r^2, rs_3s_6, rs_6s_3, s_3s_6r, s_6s_3r, s_n s_n$	$(\alpha_i \alpha) (\beta_i \beta) (\gamma_i \gamma) (\xi_i \xi)$
$p_r$	r	$s_3s_6, s_6s_3$	$(\alpha_i \beta) (\beta_i \alpha) (\gamma_i \xi) (\xi_i \gamma)$
$p_{s_1}$	$s_1$	$s_1^3$	$(\alpha_i \alpha) (\beta_i \gamma) (\gamma_i \beta) (\xi_i \xi)$
$p_{s_2}$	$s_2$	$s_2^3$	$(\alpha_i \xi) (\beta_i \beta) (\gamma_i \gamma) (\xi_i \alpha)$
$p_{s_3}$	$s_3$	$s_3^3, rs_6, s_6r$	$(\alpha_i \beta) (\beta_i \alpha) (\gamma_i \alpha) (\xi_i \xi)$
$p_{s_{-4}}$	$s_{-4}$	$s_{-4}^3$	$(\alpha_i \gamma) (\beta_i \beta) (\gamma_i \alpha) (\xi_i \xi)$
$p_{s_{+4}}$	$s_{+4}$	$s_{+4}^3$	$(\alpha_i \alpha) (\beta_i \xi) (\gamma_i \gamma) (\xi_i \beta)$
$p_{s_6}$	$s_6$	$s_6^3, rs_3, s_3r$	$(\alpha_i \alpha) (\beta_i \beta) (\gamma_i \xi) (\xi_i \gamma)$
$p_{rs_1}$	$rs_1$	$s_2r$	$(\alpha_i \gamma) (\beta_i \alpha) (\gamma_i \xi) (\xi_i \beta)$
$p_{rs_2}$	$rs_2$	$s_1r$	$(\alpha_i \beta) (\beta_i \xi) (\gamma_i \alpha) (\xi_i \gamma)$
$p_{rs_{-4}}$	$rs_{-4}$	$s_{+4}r$	$(\alpha_i \beta) (\beta_i \gamma) (\gamma_i \xi) (\xi_i \alpha)$
$p_{rs_{+4}}$	$rs_{+4}$	$s_{-4}r$	$(\alpha_i \xi) (\beta_i \alpha) (\gamma_i \beta) (\xi_i \gamma)$
$p_{s_1s_2}$	$s_1s_2$	$s_2s_1$	$(\alpha_i \xi) (\beta_i \gamma) (\gamma_i \beta) (\xi_i \alpha)$
$p_{s_{+4}s_{-4}}$	$s_{+4}s_{-4}$	$s_{-4}s_{+4}$	$(\alpha_i \gamma) (\beta_i \xi) (\gamma_i \alpha) (\xi_i \beta)$
$p_{s_1s_{-4}}$	$s_1s_{-4}$	$s_{-4}s_3, s_3s_1$	$(\alpha_i \gamma) (\beta_i \alpha) (\gamma_i \beta) (\xi_i \xi)$
$p_{s_{-4}s_1}$	$s_{-4}s_1$	$s_3s_{-4}, s_1s_3$	$(\alpha_i \beta) (\beta_i \gamma) (\gamma_i \alpha) (\xi_i \xi)$
$p_{s_1s_{+4}}$	$s_1s_{+4}$	$s_{+4}s_6, s_6s_1$	$(\alpha_i \alpha) (\beta_i \gamma) (\gamma_i \xi) (\xi_i \beta)$
$p_{s_{+4}s_1}$	$s_{+4}s_1$	$s_6s_{+4}, s_1s_6$	$(\alpha_i \alpha) (\beta_i \xi) (\gamma_i \beta) (\xi_i \gamma)$
$p_{s_2s_3}$	$s_2s_3$	$s_{+4}s_2, s_3s_{+4}$	$(\alpha_i \xi) (\beta_i \alpha) (\gamma_i \gamma) (\xi_i \beta)$
$p_{s_3s_2}$	$s_3s_2$	$s_2s_{+4}, s_{+4}s_3$	$(\alpha_i \beta) (\beta_i \xi) (\gamma_i \gamma) (\xi_i \alpha)$
$p_{s_2s_6}$	$s_2s_6$	$s_{-4}s_2, s_6s_{-4}$	$(\alpha_i \gamma) (\beta_i \beta) (\gamma_i \xi) (\xi_i \alpha)$
$p_{s_6s_2}$	$s_6s_2$	$s_2s_{-4}, s_{-4}s_6$	$(\alpha_i \xi) (\beta_i \beta) (\gamma_i \alpha) (\xi_i \gamma)$
$p_{s_1s_2s_3}$	$s_1s_2s_3$	$s_2s_1s_3, s_1s_{+4}s_2, s_1s_3s_{+4}$	$(\alpha_i \xi) (\beta_i \gamma) (\gamma_i \alpha) (\xi_i \beta)$
$p_{s_1s_2s_6}$	$s_1s_2s_6$	$s_2s_1s_6, s_1s_{-4}s_2, s_1s_6s_{-4}$	$(\alpha_i \gamma) (\beta_i \xi) (\gamma_i \beta) (\xi_i \alpha)$

Tabela 5.1: As vinte e quatro permutações possíveis, os operadores associados e as atribuições dos rótulos para cada caso. Vale notar que, permutações equivalentes associadas ao elemento identidade, ex:  $s_2s_2s_1 = es_1 = s_1$ , foram omitidas. Afinal, ver Eq.(5.34), tais permutações podem ser simplificadas e relacionadas diretamente com uma das vinte e quatro permutações apresentadas.

caminhante quântico. Note, portanto, que ao propormos as permutações baseadas em eixos de simetria, não só propomos CQME's com matrizes espalhamento com dependência espacial, como também propomos CQME's que carregam consigo diferentes simetrias de direções de propagação para fenômenos de transmissão ou reflexão, por exemplo.

Desta forma, ao apresentarmos este formalismo, tivemos como objetivo fornecer uma nova abordagem para CQME's em rede triangulares. Além disso, esperamos que este formalismo possa servir como base para futuras investigações de CQME's em rede triangulares, tanto no espaço de posição, como no espaço de momento. Por fim, acreditamos que este formalismo possa servir como referência para CQME's em outras estruturas de rede, ex: rede kagomé, rede *maple-leaf*, etc.

Neste trabalho abordamos como implementar Caminhada Quântica por Modelo de Espalhamento (CQME) em dois tipos distintos de rede: hexagonal e na rede triangular infinita. No caso da rede hexagonal, apresentamos os formalismo para CQME's no espaço de posição com e sem condições de contorno e, o formalismo de CQME's no espaço de momento. Já no caso da rede triangular, apresentamos o formalismo para CQME's em redes triangulares infinitas no espaço de posição.

Em um primeiro momento, no Capítulo 1, apresentamos a revisão bibliográfica, o estado da arte e organização desta monografia, traçando as motivações por trás das investigações dos tópicos presentes neste trabalho.

No Capítulo 2 apresentamos o formalismo de uma Caminhada Aleatória Clássica (CAC) e de seus análogos quânticos, a Caminhada Quântica por Modelo de Moeda (CQMM) e a CQME, todos estes com tratamento unidimensional. Além disso, fizemos uma breve comparação conceitual e dimensional entre as CAC's e as CQ's. Este capítulo teve objetivo didático e, não apresenta resultados físicos inéditos.

No Capítulo 3, em um primeiro momento, apresentamos o formalismo para CQME's na rede hexagonal infinita *honeycomb* no espaço de posição e uma parametrização especificada, chamada de AB, para as matrizes de espalhamento do sistema. Após definirmos a matriz AB, mostramos os resultados obtidos relacionados as principais grandezas para CQME's com este tipo de matriz: distribuições de probabilidade, deslocamento quadrático médio radial numérico e o proposto através de um modelo com dependência do parâmetro  $\theta$  de uma dada matriz AB. Por fim, mostramos o formalismo e os resultados para CQME's em nanofitas quadradas, como por exemplo: distribuição de probabilidade ao longo da rede e sua relação com múltiplos de  $t_{min}$ , Deslocamento Quadrático Médio (DQM) radial e nas direções das bordas, relação da distribuição

probabilidade em sítios de borda *versus* dimensão da rede etc. Vale notar que, os resultados de probabilidade de borda obtidos vão de acordo com os resultados experimentais de nanofitas de grafeno. Além disso, os resultados obtidos para matrizes de espalhamento imparciais e, tanto nos sítios internos como nos sítios externos, e com estado inicial balanceado, levam ao mesmo padrão de distribuição de probabilidade para diferentes tamanhos das nanofitas. No Capítulo 4, apresentamos o formalismo geral para CQME's em redes hexagonais *honeycomb* no espaço de momento e na sequência construímos um modelo para CQME's no espaço de momento com matrizes de espalhamento AB e mostramos os principais resultados obtidos: bandas de energia, velocidade de Fermi e uma relação entre o modelo proposto e o modelo *Tight Binding* para primeiros vizinhos, TB-1NN próximos aos pontos de alta simetria K e K'. Além disso, apresentamos um método de parametrização das matrizes espalhamento através da matriz geradora do  $SU(3)$  que, associada a um algoritmo numérico de busca permitiu-nos encontrar as bandas de energia  $\pi$  e  $\pi^*$  de três materiais de Dirac com rede hexagonal planar: grafeno, germaneno e siliceno. Obtivemos um ótimo resultado para as estruturas de banda do grafeno, em comparação à um método *ab initio* 1, corroborando o fato deste material sofrer grande influência das propriedades topológicas da rede hexagonal. Para o siliceno e o germaneno, obtivemos bandas de energia com comportamento diferente do método *ab initio* 1. Entretanto, a não estabilidade destes materiais na forma planar precisa ser levada em consideração.

Na Capítulo 5, apresentamos o formalismo de CQME's em redes triangulares infinitas e, mostramos como é possível construir CQME's distintas permutando os rótulos associados ao estados de direção de propagação do caminhante na rede. Conseguimos definir um grupo,  $G_{tri}$ , que contém todos os operadores de permutação dos rótulos  $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$  e  $\xi_i$ . Além disso, conseguimos associar cada elemento de  $G_{tri}$  a pelo menos um eixo de simetria  $S_n$ . Vale notar que, ao adotar um formalismo que em que a permutação de rótulos depende da paridade da coordenada  $j$  do vértice destino, estamos propondo CQME's com dependência espacial. Por fim, acreditamos que o formalismo apresentado neste capítulo é capaz de ser transposto para outras redes arquimedianas.

Além disso, nós acreditamos que nosso trabalho é capaz de corroborar com o fato de que as CQME's podem ser uma ferramenta muito poderosa para estudo de materiais. Ainda, esperamos que ele possa trazer importantes discussões sobre as características que emergem devido à topologia de uma dada rede e as características que emergem devido à interações entres as partes de um sistema, neste caso, partículas e os vértices espalhadores.

Encerramos esta conclusão apontando possíveis ramificações e aplicações que os resultados nesta tese podem ter:

- Implementação de CQME's em redes hexagonais planares com defeitos e CQME's com

parâmetros de rede distintos em uma mesma rede;

- Implementação de CQME's em redes hexagonais com diferentes condições de contorno: nanofitas retangulares, nanotubos com bordas zigzag/armchair, e análogos do fulereno, por exemplo. Além disso, investigar matrizes de espalhamento e estados iniciais que estejam associados a grandezas físicas presentes na literatura;

- Implementação de CQME's em sistemas em que há empilhamento de monocamadas de materiais de Dirac hexagonal planar, como por exemplo, bicamadas de grafeno AA e AB;

- Investigação de outras parametrizações para as matrizes de espalhamento  $\hat{\Gamma}^{(\pm)}$  associadas à CQME's na rede hexagonal e, conseqüentemente, investigar as grandezas físicas abordas neste trabalho para cada parametrização distinta;

- Implementação de CQME's em redes triangulares para diferentes matrizes de espalhamento, assim como implementar CQME's no espaço de momento para este tipo de rede;

- Investigação de uma parametrização das matrizes de espalhamento da rede triangular que propicie uma implementação equivalente à do algoritmo de busca abordado no Capítulo 4, porém, para materiais de Dirac com rede triangular planar.



- [1] K. Pearson, The problem of the random walk, *Nature* **72**, 294 (1905).
- [2] F. Reif, *Fundamentals of statistical and thermal physics* (Waveland Press, Long Grove, 2009).
- [3] G. H. Weiss, Random walks and their applications: widely used as mathematical models, random walks play an important role in several areas of physics, chemistry, and biology, *Am. Sci.* **71**, 65–71 (1983).
- [4] M. Kac, Random walk and the theory of Brownian motion, *Am. Math. Mon.* **54**, 369–391 (1947).
- [5] A. Einstein, *Investigations on the Theory of the Brownian Movement* (Courier Corporation, North Chelmsford, 1956).
- [6] P. Mörters e Y. Peres, *Brownian Motion*, Cambridge Series in Statistical and Probabilistic Mathematics (Cambridge University Press, Cambridge, 2010).
- [7] A. P. Philipse, *Brownian motion* (Springer International Publishing, Cham, 2018).
- [8] V. Balakrishnan, Brownian Motion, em *Elements of Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Springer International Publishing, Cham, 2021), pp. 107–128.
- [9] N. G. Van Kampen, ed., *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, Third Edition, North-Holland Personal Library (Elsevier, Amsterdam, 2007).
- [10] C. Gardiner e P. Zoller, *Quantum noise: a Handbook of Markovian and Non-Markovian Quantum Stochastic Methods with Applications to Quantum Optics* (Springer Science & Business Media, Berlin, 2004).
- [11] O. C. Ibe, *Elements of Random Walk and Diffusion Processes*, 1st (John Wiley & Sons, 2013).
- [12] I. M. Sokolov e J. Klafter, From diffusion to anomalous diffusion: a century after Einstein’s Brownian motion, *Chaos* **15**, 026103 (2005).
- [13] D. Siegmund, Corrected diffusion approximations in certain random walk problems, *Adv. Appl. Probab.*, 701–719 (1979).
- [14] D. Thomson, Random walk modelling of diffusion in inhomogeneous turbulence, *Q. J. R. Meteorol.* **110**, 1107–1120 (1984).
- [15] T. Aquino e T. Le Borgne, The diffusing-velocity random walk: a spatial-Markov formulation of heterogeneous advection and diffusion, *J. Fluid Mech.* **910** (2021).

- [16] E. Helfand, Theory of inhomogeneous polymers: Fundamentals of the Gaussian random-walk model, *J. Chem. Phys.* **62**, 999–1005 (1975).
- [17] M. Doi e S. F. Edwards, *The Theory of Polymer Dynamics*, vol. 73 (Oxford University Press, 1988).
- [18] E. P. Raposo et al., Random walks: A pedestrian approach to polymers, critical phenomena, and field theory, *Am. J. Phys* **59**, 633–645 (1991).
- [19] C. Monthus, Random walks and polymers in the presence of quenched disorder, *Lett. Math. Phys.* **78**, 207–233 (2006).
- [20] Y. Hu, Z. Shi et al., Minimal position and critical martingale convergence in branching random walks, and directed polymers on disordered trees, *Ann. Probab.* **37**, 742–789 (2009).
- [21] E. Bates et al., Localization of directed polymers with general reference walk, *Electron. J. Probab.* **23**, 1–45 (2018).
- [22] S. O. N. Agwuegbo, A. P. Adewole e A. N. Maduegbuna, A random walk model for stock market prices, *J. Math. Stat.* **6**, 342–346 (2010).
- [23] J. Jia, B. Wang e N. Z. Gong, Random walk based fake account detection in online social networks, em 47th Annual IEEE/IFIP International Conference on Dependable Systems and Networks (DSN) (IEEE, 2017), pp. 273–284.
- [24] N. Burton, *An Analysis of Burton G. Malkiel's A Random Walk Down Wall Street* (CRC Press, 2018).
- [25] D. Aggarwal, Do bitcoins follow a random walk model?, *Res. Econ.* **73**, 15–22 (2019).
- [26] B. A. Berg, Locating global minima in optimization problems by a random-cost approach, *Nature* **361**, 708–710 (1993).
- [27] J. E. Neigel e J. C. Avise, Application of a random walk model to geographic distributions of animal mitochondrial DNA variation., *Genetics* **135**, 1209–1220 (1993).
- [28] E. A. Codling, M. J. Plank e S. Benhamou, Random walk models in biology, *J. R. Soc. Interface.* **5**, 813–834 (2008).
- [29] V. Komkov e V. Dannon, Random Walk Simulation of Chemical Reactions Represented by Nonlinear Reaction-Diffusion Equations, *ZAMM Z. fur Angew. Math. Mech.* **71**, 135–150 (1991).
- [30] J. B. Anderson, Quantum chemistry by random walk. H 2 P, H+ 3 D 3 h 1 A/ 1, H2 3Σ+ u, H4 1 Σ+ g, Be 1 S, *J. Chem. Phys.* **65**, 4121–4127 (1976).
- [31] J. B. Anderson, Quantum chemistry by random walk: higher accuracy, *J. Chem. Phys.* **73**, 3897–3899 (1980).
- [32] J. B. Anderson, C. A. Traynor e B. M. Boghosian, Quantum chemistry by random walk: exact treatment of many-electron systems, *J. Chem. Phys.* **95**, 7418–7425 (1991).
- [33] J. Kempe, Quantum random walks: an introductory overview, *Contemp. Phys.* **44**, 307–327 (2003).
- [34] N. Konno, Quantum Walks, em *Quantum Potential Theory*, ed. por U. Franz e M. Schürmann (Springer, Berlin, 2008).

- 
- [35] A. M. Childs, E. Farhi e S. Gutmann, An example of the difference between quantum and classical random walks, *Quantum Inf. Process.* **1**, 35–43 (2002).
- [36] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloe, *Quantum Mechanics*, vol. 1 (Wiley, 1991).
- [37] J. S. Sakurai e J. Napolitano, *Modern Quantum Mechanics* (Pearson, 2014).
- [38] S. E. Venegas-Andraca, Quantum walks: a comprehensive review, *Quantum Inf. Process.* **11**, 1015–1106 (2012).
- [39] F. W. Strauch, Connecting the discrete-and continuous-time quantum walks, *Phys. Rev. A* **74**, 030301 (2006).
- [40] F. M. Andrade e M. G. E. Da Luz, Equivalence between discrete quantum walk models in arbitrary topologies, *Phys. Rev. A* **80**, 052301 (2009).
- [41] B. F. Venancio, F. M. Andrade e M. G. E. da Luz, Unveiling and exemplifying the unitary equivalence of discrete time quantum walk models, *J. Phys. A Math. Theor.* **46**, 165302 (2013).
- [42] Y. Aharonov, L. Davidovich e N. Zagury, Quantum random walks, *Phys. Rev. A* **48**, 1687 (1993).
- [43] K. R. Parthasarathy, The passage from random walk to diffusion in quantum probability, *J. Appl. Probab.* **25**, 151–166 (1988).
- [44] R. P. Feynman, Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics, *Rev. Mod. Phys.* **20**, 367 (1948).
- [45] R. P. Feynman, A. R. Hibbs e D. F. Styer, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (Courier Corporation, 2010).
- [46] R. P. Feynman, Quantum Mechanical Computers, *Found. Phys.* **16**, 507–531 (1986).
- [47] S. P. Gudder, *Quantum Probability* (Academic Press, 2014).
- [48] D. A. Meyer, From quantum cellular automata to quantum lattice gases, *J. Stat. Phys.* **85**, 551–574 (1996).
- [49] S. Venegas-Andraca, *Quantum walks for Computer Scientists* (Springer Nature, 2022).
- [50] N. Shenvi, J. Kempe e K. B. Whaley, Quantum random-walk search algorithm, *Phys. Rev. A* **67**, 052307 (2003).
- [51] A. Tulsi, Faster quantum-walk algorithm for the two-dimensional spatial search, *Phys. Rev. A* **78**, 012310 (2008).
- [52] F. Magniez et al., Search via quantum walk, *SIAM J. Sci. Comput.* **40**, 142–164 (2011).
- [53] R. Portugal, *Quantum Walks and Search Algorithms* (Springer, 2013).
- [54] G. Abal et al., Spatial search in a honeycomb network, arXiv:1001.1139 (2010).
- [55] I. Foulger, S. Gnutzmann e G. Tanner, Quantum walks and quantum search on graphene lattices, *Phys. Rev. A* **91**, 062323 (2015).
- [56] S. Chakraborty et al., Spatial search by quantum walk is optimal for almost all graphs, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 100501 (2016).
- [57] N. Nahimovs, Lackadaisical quantum walks on triangular and honeycomb 2D grids, arXiv:2007.13564 (2020).

- 
- [58] A. M. Childs, Universal computation by quantum walk, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 180501 (2009).
- [59] N. B. Lovett et al., Universal quantum computation using the discrete-time quantum walk, *Phys. Rev. A* **81**, 042330 (2010).
- [60] R. Balu, D. Castillo e G. Siopsis, Physical realization of topological quantum walks on IBM-Q and beyond, *Quantum Sci. Technol.* **3**, 035001 (2018).
- [61] F. Acasiete et al., Implementation of quantum walks on IBM quantum computers, *Quantum Inf. Process.* **19**, 1–20 (2020).
- [62] C. H. Alderete et al., Quantum walks and Dirac cellular automata on a programmable trapped-ion quantum computer, *Nat. Commun.* **11**, 1–7 (2020).
- [63] C. Vlachou et al., Quantum key distribution with quantum walks, *Quantum Inf. Process.* **17**, 1–37 (2018).
- [64] A. A. Abd El-Latif et al., Secure data encryption based on quantum walks for 5G Internet of Things scenario, *IEEE Trans. Netw. Serv. Manag.* **17**, 118–131 (2020).
- [65] A. A. Abd el-Latif et al., Quantum-inspired cascaded discrete-time quantum walks with induced chaotic dynamics and cryptographic applications, *Sci. Rep.* **10**, 1–16 (2020).
- [66] A. A. Abd El-Latif et al., Providing end-to-end security using quantum walks in IoT networks, *IEEE Access* **8**, 92687–92696 (2020).
- [67] Y. Wang, Y. Shang e P. Xue, Generalized teleportation by quantum walks, *Quantum Inf. Process.* **16**, 221 (2017).
- [68] D. M. Nguyen e S. Kim, The fog on: generalized teleportation by means of discrete-time quantum walks on N-lines and N-cycles, *Mod. Phys. Lett. B* **33**, 1950270 (2019).
- [69] Y. Feng et al., Arbitrated quantum signature scheme with quantum walk-based teleportation, *Quantum Inf. Process.* **18**, 154 (2019).
- [70] Y. Chatterjee et al., Experimental realization of quantum teleportation using coined quantum walks, *Quantum Inf. Process.* **19**, 1–14 (2020).
- [71] A. Nayak e A. Vishwanath, Quantum walk on the line, arXiv:quant-ph/0010117 (2000).
- [72] A. Ambainis et al., One-dimensional quantum walks, em *Proceedings of the Thirty-third Annual ACM Symposium on Theory of Computing (ACM, 2001)*, pp. 37–49.
- [73] T. A. Brun, H. A. Carteret e A. Ambainis, Quantum random walks with decoherent coins, *Phys. Rev. A* **67**, 032304 (2003).
- [74] B. Tregenna et al., Controlling discrete quantum walks: coins and initial states, *New J. Phys.* **5**, 83 (2003).
- [75] P. Ribeiro, P. Milman e R. Mosseri, Aperiodic quantum random walks, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 190503 (2004).
- [76] S. Venegas-Andraca et al., Quantum walks with entangled coins, *New J. Phys.* **7**, 221 (2005).
- [77] G. Abal et al., Quantum walk on the line: Entanglement and nonlocal initial conditions, *Phys. Rev. A* **73**, 042302 (2006).

- 
- [78] G. Abal et al., Erratum: Quantum walk on the line: Entanglement and non-local initial conditions [Phys. Rev. A **73**, 042302 (2006)], Phys. Rev. A **73**, 069905 (2006).
- [79] V. Kendon, Decoherence in quantum walks—a review, Math. Struct. Comp. Sci. **17**, 1169 (2007).
- [80] M. C. Bañuls et al., Quantum walk with a time-dependent coin, Phys. Rev. A **73**, 062304 (2006).
- [81] O. Maloyer e V. Kendon, Decoherence versus entanglement in coined quantum walks, New J. Phys. **9**, 87 (2007).
- [82] P. Zhang et al., Demonstration of one-dimensional quantum random walks using orbital angular momentum of photons, Phys. Rev. A **75**, 052310 (2007).
- [83] P. H. S. Ribeiro et al., Quantum random walks and wave-packet reshaping at the single-photon level, Phys. Rev. A **78**, 012326 (2008).
- [84] A. Kempf e R. Portugal, Group velocity of discrete-time quantum walks, Phys. Rev. A **79**, 052317 (2009).
- [85] M. Annabestani, S. J. Akhtarshenas e M. R. Abolhassani, Decoherence in a one-dimensional quantum walk, Phys. Rev. A **81**, 032321 (2010).
- [86] A. Schreiber et al., Photons walking the line: a quantum walk with adjustable coin operations, Phys. Rev. Lett. **104**, 050502 (2010).
- [87] G. J. de Valcárcel, E. Roldán e A. Romanelli, Tailoring discrete quantum walk dynamics via extended initial conditions, New J. Phys. **12**, 123022 (2010).
- [88] C. M. Chandrashekar, Disordered-quantum-walk-induced localization of a Bose-Einstein condensate, Phys. Rev. A **83**, 022320 (2011).
- [89] Y. Ide, N. Konno e T. Machida, Entanglement for discrete-time quantum walks on the line, Quantum Info. Comput. **11**, 855–866 (2011).
- [90] A. Schreiber et al., Decoherence and Disorder in Quantum Walks: From Ballistic Spread to Localization, Phys. Rev. Lett. **106**, 180403 (2011).
- [91] B. Allés, S. Gündüç e Y. Gündüç, Maximal entanglement from quantum random walks, Quantum Inf. Process. **11**, 211–227 (2012).
- [92] R. Eryiğit e S. Gündüç, Time exponents of asymptotic entanglement of discrete quantum walk in one dimension, Int. J. Quantum Inf. **12**, 1450036 (2014).
- [93] J. C. Matthews e M. G. Thompson, Quantum optics: An entangled walk of photons, Nature **484**, 47–48 (2012).
- [94] R. Vieira, E. P. M. Amorim e G. Rigolin, Dynamically disordered quantum walk as a maximal entanglement generator, Phys. Rev. Lett. **111**, 180503 (2013).
- [95] C. M. Chandrashekar, Two-component Dirac-like hamiltonian for generating quantum walk on one-, two- and three-dimensional lattices, Sci. Rep. **3**, 2829 (2013).
- [96] A. Crespi et al., Anderson localization of entangled photons in an integrated quantum walk, Nat. Photonics **7**, 322–328 (2013).
- [97] R. Vieira, E. P. M. Amorim e G. Rigolin, Entangling power of disordered quantum walks, Phys. Rev. A **89**, 042307 (2014).
- [98] F. Cardano et al., Quantum walks and wavepacket dynamics on a lattice with twisted photons, Sci. Adv. **1**, e1500087 (2015).

- 
- [99] W.-W. Zhang et al., Creating cat states in one-dimensional quantum walks using delocalized initial states, *New J. Phys.* **18**, 093025 (2016).
- [100] D. Lu et al., Chiral quantum walks, *Phys. Rev. A* **93**, 042302 (2016).
- [101] M. Zeng e E. H. Yong, Discrete-time quantum walk with phase disorder: localization and entanglement entropy, *Sci. Rep.* **7** (2017).
- [102] T. Chen e X. Zhang, The defect-induced localization in many positions of the quantum random walk, *Sci. Rep.* **6** (2016).
- [103] A. C. Orthey Jr. e E. P. M. Amorim, Asymptotic entanglement in quantum walks from delocalized initial states, *Quantum Inf. Process.* **16**, 1–16 (2017).
- [104] S. Chakraborty et al., Quantum ratchet in disordered quantum walk, *Ann. Phys.* **529** (2017).
- [105] A. C. Orthey Jr. e E. P. M. Amorim, Weak disorder enhancing the production of entanglement in quantum walks, *Braz. J. Phys.* **49**, 595–604 (2019).
- [106] A. C. Orthey Jr e E. P. Amorim, Connecting velocity and entanglement in quantum walks, *Physical Review A* **99**, 032320 (2019).
- [107] A. Romanelli, Distribution of chirality in the quantum walk: markov process and entanglement, *Phys. Rev. A* **81**, 062349 (2010).
- [108] G. S. Engel et al., Evidence for wavelike energy transfer through quantum coherence in photosynthetic systems, *Nature* **446**, 782 (2007).
- [109] M. Mohseni et al., Environment-assisted quantum walks in photosynthetic energy transfer, *J. Chem. Phys.* **129**, 11B603 (2008).
- [110] S. Hameroff, Quantum walks in brain microtubules—A biomolecular basis for quantum cognition?, *Top. Cogn. Sci.* **6**, 91–97 (2014).
- [111] J. R. Busemeyer, Z. Wang e J. T. Townsend, Quantum dynamics of human decision-making, *J. Math. Psychol.* **50**, 220–241 (2006).
- [112] D. Orrell, A quantum walk model of financial options, *Wilmott* **2021**, 62–69 (2021).
- [113] L. Sansoni, *Integrated Devices for Quantum Information with Polarization Encoded Qubits* (Springer, 2014).
- [114] A. Peruzzo et al., Quantum walks of correlated photons, *Science* **329**, 1500–1503 (2010).
- [115] L. Sansoni et al., Two-particle bosonic-fermionic quantum walk via integrated photonics, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 010502 (2012).
- [116] G. Di Molfetta, M. Brachet e F. Debbasch, Quantum walks as massless Dirac fermions in curved space-time, *Phys. Rev. A* **88**, 042301 (2013).
- [117] G. Di Molfetta e A. Pérez, Quantum walks as simulators of neutrino oscillations in a vacuum and matter, *New J. Phys.* **18**, 103038 (2016).
- [118] P. Arrighi et al., From curved spacetime to spacetime-dependent local unitaries over the honeycomb and triangular Quantum Walks, *Sci. Rep.* **9**, 1–10 (2019).
- [119] E. P. M. Ghizoni Henrique S. and Amorim, Trojan Quantum Walks, *Braz. J. Phys.* **49**, 168–172 (2019).
- [120] H. S. Ghizoni, *Caminhadas Quânticas Troianas*, diss. de mest. (UDESC, 2019).

- 
- [121] A. C. Orthey Jr. e R. M. Angelo, Nonlocality, quantum correlations, and violations of classical realism in the dynamics of two noninteracting quantum walkers, *Phys. Rev. A* **100**, 042110 (2019).
- [122] C. M. Chandrashekar e R. Laflamme, Quantum phase transition using quantum walks in an optical lattice, *Phys. Rev. A* **78**, 022314 (2008).
- [123] J. Wang e K. Manouchehri, *Physical Implementation of Quantum Walks* (Springer, 2013).
- [124] P. Zhang et al., Implementation of one-dimensional quantum walks on spin-orbital angular momentum space of photons, *Phys. Rev. A* **81**, 052322 (2010).
- [125] F. Zähringer et al., Realization of a quantum walk with one and two trapped ions, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 100503 (2010).
- [126] S. K. Goyal et al., Implementing quantum walks using orbital angular momentum of classical light, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 263602 (2013).
- [127] F. Cardano, Exploring topological phases in quantum walks of twisted light, em *Complex Light and Optical Forces XI*, vol. 10120 (International Society for Optics e Photonics, 2017), p. 101200V.
- [128] A. D’Errico et al., Two-dimensional topological quantum walks in the momentum space of structured light, *Optica* **7**, 108–114 (2020).
- [129] C. Esposito et al., Two dimensional multiphoton Quantum Walk in transverse momentum of light, *Bull. Am. Phys. Soc.* (2021).
- [130] D. Aharonov et al., Quantum walks on graphs, em *Proceedings of the Thirty-third Annual ACM Symposium on Theory of computing* (2001), pp. 50–59.
- [131] M. Hillery, J. Bergou e E. Feldman, Quantum walks based on an interferometric analogy, *Phys. Rev. A* **68**, 032314 (2003).
- [132] E. Feldman e M. Hillery, Scattering theory and discrete-time quantum walks, *Phys. Lett. A* **324**, 277–281 (2004).
- [133] O. L. Acevedo e T. Gobron, Quantum walks on Cayley graphs, *J. Phys. A Math.* **39**, 585 (2005).
- [134] V. Kendon, Quantum walks on general graphs, *Int. J. Quantum Inf.* **4**, 791–805 (2006).
- [135] K. Guo, Quantum walks on strongly regular graphs, diss. de mestr. (University of Waterloo, 2010).
- [136] A. Montanaro, Quantum walks on directed graphs, arXiv: quant-ph/0504116 (2005).
- [137] I. Carneiro et al., Entanglement in coined quantum walks on regular graphs, *New J. Phys.* **7**, 156 (2005).
- [138] D. Solenov e L. Fedichkin, Continuous-time quantum walks on a cycle graph, *Phys. Rev. A* **73**, 012313 (2006).
- [139] A. Oliveira, R. Portugal e R. Donangelo, Two-dimensional quantum walks with boundaries, em *Proceedings of the First School Workshop of Computing and Quantum Information* (2006), pp. 211–218.
- [140] H. Krovi e T. A. Brun, Quantum walks on quotient graphs, *Phys. Rev. A* **75**, 062332 (2007).

- [141] B. L. Douglas e J. B. Wang, A classical approach to the graph isomorphism problem using quantum walks, *J. Phys. A Math. Theor.* **41**, 075303 (2008).
- [142] X. Xu, Continuous-time quantum walks on one-dimensional regular networks, *Phys. Rev. E* **77**, 061127 (2008).
- [143] C. Godsil e K. Guo, Quantum walks on regular graphs and eigenvalues, arXiv:1011.5460 (2010).
- [144] S. D. Berry e J. B. Wang, Two-particle quantum walks: Entanglement and graph isomorphism testing, *Phys. Rev. A* **83**, 042317 (2011).
- [145] D. Li et al., Generic quantum walks with memory on regular graphs, *Phys. Rev. A* **93**, 042323 (2016).
- [146] A. A. Melnikov e L. E. Fedichkin, Quantum walks of interacting fermions on a cycle graph, *Sci. Rep.* **6**, 1–13 (2016).
- [147] R. Portugal, Staggered quantum walks on graphs, *Phys. Rev. A* **93**, 062335 (2016).
- [148] Y. Liu et al., Quantum walks on regular uniform hypergraphs, *Sci. Rep.* **8**, 1–8 (2018).
- [149] B. Chagas et al., Staggered quantum walk on hexagonal lattices, *Phys. Rev. A* **98**, 052310 (2018).
- [150] I. Márquez-Martín et al., Electromagnetic lattice gauge invariance in two-dimensional discrete-time quantum walks, *Phys. Rev. A* **98**, 032333 (2018).
- [151] C. Lyu, L. Yu e S. Wu, Localization in quantum walks on a honeycomb network, *Phys. Rev. A* **92**, 052305 (2015).
- [152] B. F. Venancio e M. G. E. da Luz, Construction of distinct discrete time scattering quantum walk formulations on the honeycomb lattice, *Ann. Phys.* **396**, 517–545 (2018).
- [153] P. Arrighi et al., Dirac equation as a quantum walk over the honeycomb and triangular lattices, *Phys. Rev. A* **97**, 062111 (2018).
- [154] G. Jay, F. Debbasch e J. B. Wang, Dirac quantum walks on triangular and honeycomb lattices, *Phys. Rev. A* **99**, 032113 (2019).
- [155] I. G. Karafyllidis, Quantum walks on graphene nanoribbons using quantum gates as coins, *J. Comput. Sci.* **11**, 326–330 (2015).
- [156] H. Bougroura et al., Quantum-walk transport properties on graphene structures, *Phys. Rev. A* **94**, 062331 (2016).
- [157] J. Mareš, J. Novotný e I. Jex, Quantum walk transport on carbon nanotube structures, *Phys. Lett. A*, 126302 (2020).
- [158] M. I. Monastyrsky, ed., *Topology in Condensed Matter* (Springer, Berlin, 2006).
- [159] C. A. Altland e B. D. Simons, *Condensed Matter Field Theory*, 2nd ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 2010).
- [160] F. Ortmann, S. Roche e S. O. Velenzuela, ed., *Topological Insulators: Fundamentals and Perspectives* (Wiley-VCH Verlag, Weinheim, 2015).
- [161] C. Chamon et al., ed., *Topological Aspects of Condensed Matter Physics* (Oxford University Press, Oxford, 2017).



- [162] X. G. Wen, The family of topological phases in condensed matter, *Nat. Sc. Rev.* **1**, 49 (2014).
- [163] X. G. Wen, Zoo of quantum-topological phases of matter, *Rev. Mod. Phys.* **89**, 041004 (2017).
- [164] J. Liu, A short review on first-principles study of gapped topological materials, *Comput. Mat. Sc.* **195**, 110467 (2021).
- [165] D. Culcer et al., Transport in two-dimensional topological materials: recent developments in experiment and theory, *2D Mater.* **7**, 022007 (2020).
- [166] S. Gupta e A. Saxena, A topological twist on materials science, *MRS Bull.* **39**, 265 (2014).
- [167] M. G. Vergniory et al., A complete catalogue of high-quality topological materials, *Nature* **566**, 480 (2019).
- [168] A. R. Ashrafi e M. V. Diudea, ed., *Distance, Symmetry, and Topology in Carbon Nanomaterials* (Springer, Cham, 2016).
- [169] P. Bondavalli, *2D Materials: And Their Exotic Properties* (De Gruyter, Berlin, 2022).
- [170] X. Zou, Y. Xu e W. Duan, 2D materials: rising star for future applications, *Innov.* **2**, 100115 (2021).
- [171] M. Geier et al., Second-order topological insulators and superconductors with an order-two crystalline symmetry, *Phys. Rev. B* **97**, 205135 (2018).
- [172] D. Li e R. B. Kaner, Graphene-based materials, *Science* **320**, 1170–1171 (2008).
- [173] A. K. Geim, Graphene: status and prospects, *Science* **324**, 1530–1534 (2009).
- [174] M. J. Allen, V. C. Tung e R. B. Kaner, Honeycomb carbon: a review of graphene, *Chem. Rev.* **110**, 132–145 (2010).
- [175] E. Kan, Z. Li e Y. Yang, Graphene Nanoribbons: Geometric, Electronic, and Magnetic Properties, em *Physics and Applications of Graphene*, ed. por S. Mikhailov (IntechOpen, Rijeka, 2011).
- [176] L. E. F. F. Torres, S. Roche e J.-C. Charlier, *Introduction to Graphene-based Nanomaterials: from Electronic Structure to Quantum Transport* (Cambridge University Press, 2020).
- [177] R. Peierls, Quelques propriétés typiques des corps solides, em *Ann. Henri Poincaré*, vol. 5, 3 (1935), pp. 177–222.
- [178] R. J. Young et al., The mechanics of graphene nanocomposites: a review, *Compos. Sci. Technol.* **72**, 1459–1476 (2012).
- [179] X. Lu et al., Tailoring graphite with the goal of achieving single sheets, *Nanotechnology* **10**, 269 (1999).
- [180] K. S. Novoselov et al., Electric field effect in atomically thin carbon films, *Science* **306**, 666–669 (2004).
- [181] K. S. Novoselov, Nobel lecture: graphene: materials in the flatland, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 837 (2011).
- [182] K. S. Novoselov et al., Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene, *Nature* **438**, 197–200 (2005).

- [183] A. H. C. Neto e K. S. Novoselov, New directions in science and technology: two-dimensional crystals, *Rep. Prog. Phys.* **74**, 082501 (2011).
- [184] V. Berry, Impermeability of graphene and its applications, *Carbon* **62**, 1–10 (2013).
- [185] B. Wang et al., Graphene-based composites for electrochemical energy storage, *Energy Storage Mater.* **24**, 22–51 (2020).
- [186] R. You et al., Laser fabrication of graphene-based flexible electronics, *Adv. Mater.* **32**, 1901981 (2020).
- [187] Y. Cao et al., Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices, *Nature* **556**, 43–50 (2018).
- [188] H. S. Arora et al., Superconductivity in metallic twisted bilayer graphene stabilized by WSe<sub>2</sub>, *Nature* **583**, 379–384 (2020).
- [189] A. C. Gadelha et al., Localization of lattice dynamics in low-angle twisted bilayer graphene, *Nature* **590**, 405–409 (2021).
- [190] S. Karimi et al., A review on graphene’s light stabilizing effects for reduced photodegradation of polymers, *Crystals* **11**, 3 (2021).
- [191] N. W. Ashcroft e N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Cengage Learning, New York, 1976).
- [192] A. Jorio et al., *Raman Spectroscopy in Graphene Related Systems* (John Wiley & Sons, 2011).
- [193] T. O. Wehling, A. M. Black-Schaffer e A. V. Balatsky, Dirac materials, *Adv. Phys.* **63**, 1–76 (2014).
- [194] G. G. Guzmán-Verri e L. L. Y. Voon, Electronic structure of silicon-based nanostructures, *Phys. Rev. B* **76**, 075131 (2007).
- [195] N. J. Roome e J. D. Carey, Beyond graphene: stable elemental monolayers of silicene and germanene, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **6**, 7743–7750 (2014).
- [196] A. Feyzi e R. Chegel, Heat capacity, electrical and thermal conductivity of silicene, *Eur. Phys. J. B* **89**, 1–8 (2016).
- [197] D. K. Singh, Tight Binding Modeling of Two Dimensional and Quasi-two Dimensional Materials, tese de dout. (Bilkent University, 2017).
- [198] M. H. Rahman, S. Mitra e D. A. Redwan, Electronic band structure of group IV 2D materials: graphene, silicene, germanene, stanene using tight binding approach, em 2020 2nd International Conference on Advanced Information and Communication Technology (ICAICT) (IEEE, 2020), pp. 207–212.
- [199] A. Cortijo, F. Guinea e M. A. H. Vozmediano, Geometrical and topological aspects of graphene and related materials, *J. Phys. A* **45**, 383001 (2012).
- [200] K. K. Gomes et al., Designer Dirac fermions and topological phases in molecular graphene, *Nature* **483**, 306–310 (2012).
- [201] J. Wang et al., The rare two-dimensional materials with Dirac cones, *Natl. Sci. Rev.* **2**, 22–39 (2015).
- [202] B. F. Venancio, Caminhadas Quânticas na Rede Hexagonal, tese de dout. (UFPR, 2016).

- [203] A. C. Neto et al., The electronic properties of graphene, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [204] M. Paty, A noção de determinismo na física e seus limites, *Sci. Stud.* **2**, 465–492 (2004).
- [205] R. A. S. Salinas, *Introdução à Física Estatística* (EDUSP, 2005).
- [206] M. T. Lacey, W. Philipp et al., A note on the almost sure central limit theorem., *Stat. Prob. Lett.* **9**, 201–205 (1990).
- [207] J. D. Valentine e A. . E. Rana, Centroid and full-width at half maximum uncertainties of histogrammed data with an underlying Gaussian distribution-the moments method, *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **43**, 2501–2508 (1996).
- [208] A. C. Orthey Jr., *Caminhadas Quânticas a partir de Estados Deslocalizados*, diss. de maestr. (UDESC, 2018).
- [209] M. A. Nielsen e I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition* (Cambridge University Press, Cambridge, 2010).
- [210] R. Vieira, *Emaranhamento em Caminhadas Quânticas Desordenadas*, diss. de maestr. (UDESC, 2014).
- [211] G. E. M. Cabral, A. F. D. Lima e B. Lula Jr., Interpretando o algoritmo de Deutsch no interferômetro de Mach-Zehnder, *Rev. Bras. Ens. Fis.* **26**, 109–116 (2004).
- [212] G. G. Gomes, M. Pietrocola et al., O experimento de Stern-Gerlach e o spin do elétron: um exemplo de quasi-história, *Rev. Bras. Ens. Fis.* **33**, 1–11 (2011).
- [213] L. K. Grover, A fast quantum mechanical algorithm for database search, em *Proceedings of the Twenty-eighth Annual ACM Symposium on Theory of Computing* (1996), pp. 212–219.
- [214] A. M. Childs e J. Goldstone, Spatial search by quantum walk, *Phys. Rev. A* **70**, 022314 (2004).
- [215] O. A. Shenderova, V. V. Zhirnov e D. W. Brenner, Carbon nanostructures, *Crit. Rev. Solid State Mater. Sci.* **27**, 227–356 (2002).
- [216] K. Wakabayashi et al., Electronic transport properties of graphene nanoribbons, *New J. Phys.* **11**, 095016 (2009).
- [217] D. R. Cooper et al., Experimental review of graphene, *Int. Sch. Res. Notices* **2012** (2012).
- [218] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8th ed. (John Wiley & Sons, 2018).
- [219] I. S. Oliveira, *Introdução à Física do Estado Sólido*, 2nd ed. (Editora Livraria da Física, 2011).
- [220] S. Tang e M. S. Dresslhaus, Constructing a large variety of Dirac-cone materials in the Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub> thin film system, *Nanoscale* **4**, 7786–7790 (2014).
- [221] E. Kalesaki et al., Dirac Cones, topological edge states, and nontrivial flat bands in two-dimensional semiconductors with a honeycomb nanogeometry, *Phys. Rev. X* **4**, 011010 (2014).
- [222] V. P. Gerdt, Y. G. Palli e A. M. Khvedelidze, Light-cone Yang-Mills mechanisms: SU(2) vs. SU(3), *Theor. Math. Phys.* **155**, 557 (2008).

- [223] A. Das e S. Pujari, SU(3) fermions in a three-band graphene-like model, *Phys. Rev. B* **100**, 125152 (2019).
- [224] S. D. Sarma et al., Electronic transport in two-dimensional graphene, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 407 (2011).
- [225] P. R. Wallace, The band theory of graphite, *Phys. Rev.* **71**, 622–634 (1947).
- [226] M. Ali et al., Electronic and magnetic properties of graphene, silicene and germanene with varying vacancy concentration, *AIP Adv.* **7**, 045308 (2017).
- [227] V. Zólyomi et al., Density-Functional and Tight-Binding Theory of Silicene and Silicane, em *Silicene: Prediction, Synthesis, Application* (Springer International Publishing, Cham), pp. 23–41.
- [228] N. Marzari et al., Maximally localized Wannier functions: theory and applications, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1419 (2012).
- [229] S. Reich et al., Tight-binding description of graphene, *Phys. Rev. B* **66**, 035412 (2002).
- [230] C. Thomsen e S. Reich, Double resonant Raman scattering in graphite, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5214 (2000).
- [231] R. Saito et al., Probing phonon dispersion relations of graphite by double resonance Raman scattering, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 027401 (2001).
- [232] M. S. Dresselhaus et al., *Graphite Fibers and Filaments*, vol. 5 (Springer Science & Business Media, 2013).
- [233] G. S. Painter e D. E. Ellis, Electronic band structure and optical properties of graphite from a variational approach, *Phys. Rev. B* **1**, 4747 (1970).
- [234] D. Coello-Fiallos et al., DFT comparison of structural and electronic properties of graphene and germanene: Monolayer and bilayer systems, *Mater. Today:Proc.* **4**, 6835–6841 (2017).
- [235] P. Narang et al., Effects of interlayer coupling on hot-carrier dynamics in graphene-derived Van der Waals heterostructures, *Adv. Opt. Mater.* **5**, 1600914 (2017).
- [236] S. K. Sahoo e K.-H. Wei, A perspective on recent advances in 2D stanene nanosheets, *Adv. Mater. Interfaces* **6**, 1900752 (2019).
- [237] A. Kara et al., A review on silicene—new candidate for electronics, *Surf. Sci. Rep.* **67**, 1–18 (2012).
- [238] Y. Ding e J. Ni, Electronic structures of silicon nanoribbons, *Appl. Phys. Lett.* **95**, 083115 (2009).
- [239] C.-C. Liu, H. Jiang e Y. Yao, Low-energy effective Hamiltonian involving spin-orbit coupling in silicene and two-dimensional germanium and tin, *Phys. Rev. B* **84**, 195430 (2011).
- [240] X. Yang e J. Ni, Electronic properties of single-walled silicon nanotubes compared to carbon nanotubes, *Phys. Rev. B* **72**, 195426 (2005).
- [241] D. X. Dong Sun e S. Wu, ed., *Focus on the Topological Properties of 2D Layered Materials*, 2D Mater. 6, vol. 6, 1 (IOP Publishing, 2018).
- [242] J. B. Bronzan, Parametrization of SU(3), *Phys. Rev. D* **38**, 1994 (1988).

- 
- [243] S. Cahangirov et al., Two-and one-dimensional honeycomb structures of silicon and germanium, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 236804 (2009).
- [244] S. Lebegue e O. Eriksson, Electronic structure of two-dimensional crystals from ab initio theory, *Phys. Rev. B* **79**, 115409 (2009).
- [245] S. Wang, A comparative first-principles study of orbital hybridization in two-dimensional C, Si, and Ge, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 11929–11938 (2011).
- [246] S. Trivedi, A. Srivastava e R. Kurchania, Silicene and germanene: a first principle study of electronic structure and effect of hydrogenation-passivation, *J. Comput. Theor. Nanosci.* **11**, 781–788 (2014).
- [247] G. R. Bhimanapati et al., Recent advances in two-dimensional materials beyond graphene, *ACS Nano* **9**, 11509–11539 (2015).
- [248] T. G. Wong, Grover search with lackadaisical quantum walks, *J. Phys. A Math. Theor.* **48**, 435304 (2015).
- [249] B. F. Venancio, *Caminhadas Quânticas em Redes Regulares 2D, um Tratamento Geral*, diss. de mestr. (UFPR, 2013).
- [250] M. A. Armstrong, *Groups and Symmetry* (Springer Science & Business Media, New York, 1997).