

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
DOUTORADO EM FÍSICA



José Amaro da Silva Neto

Sobre Propriedades Físicas em Anéis Quânticos no
Grafeno

João Pessoa - PB

2017

Catálogo na publicação
Seção de Catalogação e Classificação

S586s Silva Neto, José Amaro da.
Sobre Propriedades Físicas em Anéis Quânticos no Grafeno /
José Amaro da Silva Neto. - João Pessoa, 2017.
113 f. : il.

Orientador: Claudio Benedito Silva Furtado.
Tese (Doutorado) – UFPB/CCEN

1.Física. 2. Defeitos Topológicos. 3. Grafeno. 4. Anel
Quântico. I. Título.

UFPB/BC

JOSÉ AMARO DA SILVA NETO

SOBRE PROPRIEDADES FÍSICAS EM ANÉIS QUÂNTICOS NO GRAFENO

Tese submetida ao Departamento de Física da Universidade Federal da Paraíba, como parte dos requisitos para obtenção do Título de Doutor.

Orientador: Prof. Dr. CLAUDIO BENEDITO SILVA FURTADO

João Pessoa - PB

2017

JOSÉ AMARO DA SILVA NETO

SOBRE PROPRIEDADES FÍSICAS EM ANÉIS QUÂNTICOS NO GRAFENO

Tese submetida ao Departamento de Física da Universidade Federal da Paraíba, como parte dos requisitos para obtenção do Título de Doutor.

Aprovada em 30 de Junho de 2017.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. CLAUDIO BENEDITO SILVA FURTADO - Orientador
(UFPB)

Prof. Dr. JOSÉ ROBERTO DO NASCIMENTO
(UFPB)

Prof. Dr. KNUT BAKKE FILHO
(UFPB)

Prof. Dr. CLAUDIONOR GOMES BEZERRA
(UFRN)

Prof. Dr. ALEXANDRE MANOEL DE MORAIS CARVALHO
(UFAL)

João Pessoa-PB

2017

Ata da Sessão Pública da Defesa de Tese de
Doutorado do aluno **José Amaro da Silva Neto**, candidato ao Título de Doutor em Física
na Área de Concentração Física da Matéria
Condensada.

1 Aos trinta dias do mês de junho do ano de dois mil e dezessete, às 10h00, no Auditório
2 da Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da
3 Universidade Federal da Paraíba, reuniram-se os membros da Banca Examinadora
4 constituída para examinar o candidato ao grau de Doutor em Física na área de Física da
5 Matéria Condensada, **José Amaro da Silva Neto**. A comissão examinadora foi
6 composta pelos professores doutores: *Cláudio Benedito da Silva Furtado* (UFPB),
7 orientador e presidente da banca examinadora, *Knut Bakke Filho* (UFPB), *José Roberto*
8 *Soares do Nascimento* (UFPB), *Alexandre Manoel de Moraes Carvalho* (UFAL) e
9 *Claudionor Gomes Bezerra* (UFRN). Dando início aos trabalhos, o Prof. Cláudio
10 Benedito da Silva Furtado comunicou aos presentes a finalidade da reunião. A seguir,
11 passou a palavra ao candidato para que o mesmo fizesse, oralmente, a exposição do
12 trabalho de tese intitulado “*Sobre Propriedades Físicas em Anéis Quânticos no*
13 *Grafeno*”. Concluída a exposição, o candidato foi arguido pela Banca Examinadora, que
14 emitiu o seguinte parecer: “**aprovado**”. Assim sendo, deve a Universidade Federal da
15 Paraíba expedir o respectivo diploma de Doutor em Física na forma da lei. E para
16 constar, eu, Danilo Wilson Lemos Menezes, redigi esta ata que vai assinada por mim e
17 pelos membros da Banca Examinadora. João Pessoa, Paraíba, **30 de junho de 2017**.

18
Prof. Dr. Cláudio Benedito da Silva Furtado
Orientador - UFPB

Prof. Dr. Knut Bakke Filho
UFPB

Prof. Dr. José Roberto Soares do Nascimento
UFPB

Prof. Dr. Alexandre Manoel de Moraes Carvalho
UFAL

Prof. Dr. Claudionor Gomes Bezerra
UFRN

Lic. Danilo Wilson Lemos Menezes
Técnico em Assuntos Educacionais

Cláudio Furtado

Knut Bakke Filho

José Roberto Soares do Nascimento

Alexandre Manoel de Moraes Carvalho

Claudionor Gomes Bezerra

Danilo Wilson Lemos Menezes

“Olha aí meus caros amigos
Flores do meu caminho
O trabalho é o abrigo
Que nunca nos deixa sozinho
Me dê sua mão num abraço forte
Que o homem é quem faz a história
O homem é quem faz a sorte
E a União é a Vitória
Quando dia amanheceu
E pisei os pés no chão
Firmei o pensamento em Deus
E abri meu coração
Quando vejo um sorriso
De alguém que esteja feliz
Sinto forças para viver
E realizar o que ainda eu não fiz.”

(Trecho da Música “A União é a Vitória” - Juraildes Cruz)

Dedico este trabalho:

à meu pai João Bosco Amaro da Silva;

à minha mãe Eliane de Oliveira Amaro;

à minha companheira Luciana Dantas;

às minhas irmãs Thalita e Raquel;

à minha sobrinha(afilhada) Maria Helloyse.

Agradecimentos

Agradeço ao professor e orientador Dr. Cláudio Benedito Furtado, pelo acolhimento e confiança desde a época de aluno de graduação e estudante de iniciação científica, passando pelo mestrado e posteriormente no doutorado. Por todos estes anos de convívio, sempre estendeu sua mão, até nos momentos mais críticos da minha caminhada, com serenidade e compreensão.

Agradeço ao departamento de Física, onde obtive toda base necessária para minha formação.

Agradeço aos professores da pós-graduação Dr. Eugenio Bezerra, Dr. Fernando Moraes, Dr. Sérgio Azevedo, Dr. Edvaldo Nogueira, Dr. Albert Petrov e Dr. Alexandre Rosas, por contribuírem na minha formação, enquanto aluno de suas respectivas disciplinas.

Agradeço à Dr^a. Jannaira Bueno pelas contribuições em parte deste trabalho; Aos colegas e amigos de pós: Gabriel Queiroz, Thiago de Sousa, Júlio Brandão, Jardison Ricardo, Felipe Freitas e Paulo Porfírio, pela boa convivência e bom humor mesmo nas adversidades da vida. Ao Sr. Mariano, por seu bom humor e bom coração sempre dando uma palavra otimista a cada café consumido em sua cantina.

Agradeço aos meu pais e às minhas irmãs, por ser esta base sólida onde o homem constrói seu caráter, chamada de família.

Agradeço à minha companheira Luciana (Baby!) por seu entusiasmo e pela motivação que vem me ensinando a acreditar que sempre haverá um novo tempo e um lado bom da vida.

Agradeço ao senhor José Gabriel da Costa (Mestre Gabriel), por me guiar na busca de Luz, Paz e Amor na minha vida.

Agradeço ao Programa Nacional de Cooperação Acadêmica - CAPES que deu suporte financeiro, sem o qual não seria possível concluir esta tese.

Sumário

Agradecimentos	vi
Lista de Figuras	xii
Resumo	xiii
Abstract	xiv
1 Introdução	1
2 Considerações sobre o Grafeno	5
2.1 Grafeno : Contexto Histórico	5
2.2 Grafeno: Configuração Eletrônica e Propriedades	7
2.3 A Rede Cristalina do Grafeno	9
2.4 Energia e Estrutura Eletrônica de Bandas no Grafeno	11
2.5 Férmions Livres Sem Massa e Equação de Dirac	13
2.6 Grafeno e Teoria dos Defeitos Topológicos	16
3 Anéis Quânticos e o Confinamento Relativístico 2-D	22
3.1 Anéis Quânticos e suas Aplicações	22
3.2 O modelo de anel 2-D de Tan-Inkson	25
3.3 O oscilador de Dirac e o Anel Relativístico 2-D	28
3.4 O Hamiltoniano de Dirac com o Anel 2-D	29
3.5 Autovalores de Energia no Anel Relativístico 2-D	31
3.6 Limite Não Relativístico: Recuperação do Anel 2-D de Tan-Ikson	34
4 Anel Quântico 2-D na Folha de Grafeno na Presença do Fluxo Aharonov-Bohm	36

4.1	Modelo de Oscilador Não Massivo	36
4.2	O Anel Quântico 2-D no Grafeno Plano	37
4.2.1	Correntes Persistentes em Anéis Quânticos no Grafeno Plano	41
4.3	Anéis Quânticos no Grafeno com Desclinação	42
4.3.1	Corrente Persistente na Presença da Desclinação	47
4.4	Análise Gráfica dos Resultados	48
5	Anel Quântico na Folha de Grafeno Massivo com Desclinação na Presença de um Campo Magnético Uniforme	52
5.1	Anel Quântico em Grafeno Massivo	52
5.2	Confinamento no Grafeno Massivo com Desclinação na Presença do Campo Magnético	54
5.2.1	A equação de Dirac no Grafeno Massivo	54
5.3	A Corrente Persistente no Grafeno Massivo	61
5.4	Magnetização do Anel Quântico 2-D no Grafeno Massivo com Desclinação	63
6	Anel Quântico em Grafeno Massivo com Defeito Topológico no Referencial de Rotação	66
6.1	A Corda Cósmica e o Referencial de Rotação no Grafeno	66
6.2	Equação de Dirac no Grafeno Massivo com Rotação e Confinamento Anelar	70
6.3	A Corrente Persistente no Grafeno Massivo sob Rotação	78
6.4	Magnetização no Anel Quântico 2-D no Grafeno Massivo sob Rotação . .	81
7	Conclusões e Perspectivas	84
A	A Função Hipergeométrica Confluente	88
A.1	Solução da Função Hipergeométrica Confluente	88
A.2	Limites Assintóticos da Função Hipergeométrica Confluente	89
A.3	Derivada da Função Hipergeométrica Confluente	89
A.4	Integração Envolvendo a Hipergeométrica Confluente	90
A.4.1	A Normalização da Função de Onda Radial	90

Lista de Figuras

1.1	Escala microscópica <i>versus</i> escala macroscópica [4].	2
2.1	a) Orbital sp^2 ; b) Orbitais híbridos sp^2 no arranjo trigonal plano; c) Ligações σ formadas pela sobreposição de orbitais sp^2 e orbital atômico vazio $2p$; d) Rede de átomos de carbono (C), e formação das ligações π	8
2.2	Película monoatômica de grafeno como matriz geradora de outros materiais. Da esquerda para a direita: fulereno (0-D), nanotubo (1-D) e o grafite (3-D)[15].	9
2.3	a) Esquema de rede cristalina no grafeno, com as duas sub-redes A (átomos azuis) , B (átomos laranjas), a distância atômica a_0 , os vetores da base no espaço direto $\vec{a}_1$ e $\vec{a}_2$ e os vetores dos primeiros vizinhos $\vec{\delta}_{j=1,2,3}$; b) Primeira zona de Brillouin, com os vetores da rede recíproca $\vec{b}_1$ e $\vec{b}_2$, e os pontos de alta simetria K, K' e M	10
2.4	Estrutura de bandas eletrônica para o grafeno com os ponto de alta simetria Γ, M, K e K' . Ampliado em destaque um ponto de Dirac. [21]	14
2.5	Processo de Volterra: a) Corte de uma secção (“ <i>cunha</i> ”) da rede cristalina (cinza); b) Colagem da rede: desclinação positiva; c) Adição de secção (inserção) na rede plana: desclinação negativa.	18
3.1	Anel quântico construído sobre uma heteroestrutura $AlGaAs/GaAs$ (arsenieto de gálio-alumínio/ arsenieto de gálio), contendo um gás de elétrons 2-D,(2DEG) : a) Imagem obtida por um Microscópio de Força Atômica; b) Esboço com as dimensões do anel, da ordem de nanômetros. Retiradas da referência [45]	23
3.2	Proposta de arranjo experimental Aharonov-Bohm.	24

- 4.1 Anel na folha plana de grafeno com o fluxo *Aharonov-Bohm* passando pelo centro. 38
- 4.2 Representação: Anel quântico no grafeno submetido a desclinação: a) Perspectiva desclinação positiva ; b) Região do anel (violeta), região do fluxo Φ_{AB} no círculo verde. 43
- 4.3 Gráfico da energia como função do fluxo *Aharonov-Bohm* $\phi_{AB} = \Phi/\Phi_0$, para o parâmetro que assinala a desclinação, α , considerando o estado fundamental $0 \leq n \leq 5$. Adotamos a carga elementar sendo $q = e = \sqrt{\alpha_e} = 0,08542454312$, onde $\alpha_e = \frac{1}{137,03599911}$ é a constante de estrutura fina, $a_\varphi = \frac{3}{2}(\alpha - 1)$, $-10 \leq l \leq +10$, $s = 1$ and $a_1 = 9,0122.10^{-6}eV.m^2$ and $a_2 = 2,222.10^{-5}eV.m^{-2}$ são os parâmetros de Tan-Inkson[11]. 48
- 4.4 Gráfico da energia em função do número quântico n , com fluxo fixo $\phi_{AB} = 1$, para o parâmetro que assinala a desclinação, α . Adotamos a carga elementar sendo $q = e = \sqrt{\alpha_e} = 0,08542454312$, onde $\alpha_e = \frac{1}{137,03599911}$ é a constante de estrutura fina, $a_\varphi = \frac{3}{2}(\alpha - 1)$, $-10 \leq l \leq +10$, $s = 1$ and $a_1 = 9,0122.10^{-6}eV.m^2$ and $a_2 = 2,222.10^{-5}eV.m^{-2}$ são os parâmetros de Tan-Inkson[11]. 49
- 4.5 Gráfico da razão de corrente I/I_0 pelo fluxo ϕ_{AB} , para o parâmetro que assinala a desclinação, α . Adotamos a corrente $I_0 = e \frac{\sqrt{2a_2}}{2\pi}$, $a_\varphi = \frac{3}{2}(\alpha - 1)$, $-10 \leq l \leq +10$, $0 \leq n \leq 5$, $s = 1$ and $a_1 = 9,0122.10^{-6}eV.m^2$ and $a_2 = 2,222.10^{-5}eV.m^{-2}$ são os parâmetros de Tan-Inkson[11]. 50
- 5.1 Relação entre a massa e o *gap* entre as bandas de valência e condução: a) Condição de bandas com *gap* nulo e comportamento de massa efetiva nula; b) Separação do *gap*, quando a energia do átomo da sub-rede A é relativamente maior do que o átomo da sub-rede B, sendo $M > 0$ relacionado com a curvatura positiva da banda superior; c) Separação do *gap* quando a energia do átomo da sub-rede B é maior do que o da sub-rede A, com $M < 0$ relacionado com curvatura negativa da banda inferior. Retirado da referência[65]. 53

- 5.2 Gráfico do comportamento da energia em função do número quântico n para vários valores de α . Nós adotamos a carga elementar como $e = \sqrt{\alpha_e} = 0,08542454312$, onde $\alpha_e = \frac{1}{137,03599911}$ é a constante de estrutura fina, $B = 1T$, $M = 1$, $l = 1$, $\phi_{AB} = 1$, $s = 1$ e $a_1 = 9,0122.10^{-6}eV.m^2$ e $a_2 = 2,222.10^{-5}eV.m^{-2}$ são os parâmetros de Tan-Inkson [11]. 59
- 5.3 Gráfico do comportamento da energia em função do número quântico n para vários valores de α , e vários valores de l . Nós adotamos a carga elementar como $e = \sqrt{\alpha_e} = 0,08542454312$, onde $\alpha_e = \frac{1}{137,03599911}$ é a constante de estrutura fina, $B = 1T$, $M = 1$, $-10 \leq l \leq 10$, $\phi_{AB} = 1$, $s = 1$ e $a_1 = 9,0122.10^{-6}eV.m^2$ e $a_2 = 2,222.10^{-5}eV.m^{-2}$ são os parâmetros de Tan-Inkson [11]. 60
- 5.4 Gráfico do comportamento da energia em função de ϕ_{AB} , para vários valores de α , e vários valores de n e l . Nós adotamos a carga elementar como $e = \sqrt{\alpha_e} = 0,08542454312$, onde $\alpha_e = \frac{1}{137,03599911}$ é a constante de estrutura fina, $B = 1T$, $M = 1$, $0 \leq n \leq 5$, $-10 \leq l \leq 10$, $\phi_{AB} = 1$, $s = 1$ e $a_1 = 9,0122.10^{-6}eV.m^2$ e $a_2 = 2,222.10^{-5}eV.m^{-2}$ são os parâmetros de Tan-Inkson [11]. 61
- 5.5 Gráfico do comportamento da corrente persistente em função do fluxo magnético $\phi_{AB} = \frac{\Phi}{\Phi_0}$ para valores de α . Neste caso, nós definimos o termo de corrente topológica $I_0 = \frac{1}{2\phi_0} \left(\sqrt{\frac{8a_2}{M}}s + \frac{eB}{\alpha M} \right)$. Os valores para os outros termos são $B = 1T$, $M = 1$, $s = 1$, $-10 \leq l \leq 10$ e $0 \leq n \leq 5$, e $a_1 = 9,0122.10^{-6}eV.m^2$ e $a_2 = 2,222.10^{-5}eV.m^{-2}$ 63
- 5.6 Gráfico do comportamento da magnetização em função do campo magnético B para os valores do parâmetro de desclinação, α . Neste caso, adotamos $e = \sqrt{\alpha_e}$, $M = 1$, $\phi_{AB} = 1$, $s = -1$, $a_1 = 9,0122.10^{-6}eV.m^2$, $a_2 = 2,222.10^{-5}eV.m^{-2}$ e a soma sobre os valores $-10 \leq l \leq 10$ e $0 \leq n \leq 5$. 64
- 6.1 Gráfico da energia em função do número quântico n para valores da desclinação η e da velocidade de rotação ω . Nós adotamos a carga elementar como $e = \sqrt{\alpha_e} = 0,08542454312$, onde $\alpha_e = \frac{1}{137,03599911}$ é a constante de estrutura fina, $B = 1T$, $M = 1$, $-10 \leq l \leq 10$, $\phi_{AB} = 1$, $s = 1$ e $a_1 = 9,0122.10^{-6}eV.m^2$ e $a_2 = 2,222.10^{-5}eV.m^{-2}$ são os parâmetros de Tan-Inkson [11]. 76

- 6.2 Gráfico da energia em função da velocidade de rotação ω para valores da desclinação η . Adotamos a carga elementar como $e = \sqrt{\alpha_e} = 0,08542454312$, onde $\alpha_e = \frac{1}{137,03599911}$ é a constante de estrutura fina, $B = 1T$, $M = 1$, $0 \leq n \leq 5$, $-10 \leq l \leq 10$, $\phi_{AB} = 1$, $s = 1$ e $a_1 = 9,0122.10^{-6}eV.m^2$ e $a_2 = 2,222.10^{-5}eV.m^{-2}$ são os parâmetros de Tan-Inkson [11]. 77
- 6.3 Gráfico da energia em função da razão de fluxo *Aharonov-Bohm*, para valores da desclinação η e da velocidade de rotação ω . Adotamos a carga elementar como $e = \sqrt{\alpha_e} = 0,08542454312$, onde $\alpha_e = \frac{1}{137,03599911}$ é a constante de estrutura fina, $B = 1T$, $M = 1$, $0 \leq n \leq 5$, $-10 \leq l \leq 10$, $s = 1$ e $a_1 = 9,0122.10^{-6}eV.m^2$ e $a_2 = 2,222.10^{-5}eV.m^{-2}$ são os parâmetros de Tan-Inkson [11]. 78
- 6.4 Gráfico do comportamento da corrente persistente em função da razão de fluxo magnético $\phi_{AB} = \frac{\Phi}{\Phi_0}$ para valores de η e da rotação ω . Neste caso, nós definimos a corrente $I_0 = \frac{1}{2\phi_0}$. Os valores para os outros termos são $B = 1T$, $M = 1$, $s = 1$, $-10 \leq l \leq 10$ e $0 \leq n \leq 5$, e $a_1 = 9,0122.10^{-6}eV.m^2$ e $a_2 = 2,222.10^{-5}eV.m^{-2}$ 80
- 6.5 Gráfico do comportamento da magnetização em função do campo magnético B , para valores de η e da rotação ω . Os valores para os outros termos são $M = 1$, $s = -1$, $-10 \leq l \leq 10$ e $0 \leq n \leq 5$, e $a_1 = 9,0122.10^{-6}eV.m^2$ e $a_2 = 2,222.10^{-5}eV.m^{-2}$ 82

Resumo

Neste trabalho, estudamos o grafeno e suas propriedades físicas associadas com a teoria dos defeitos topológicos de Katanaev e Volovick, sobretudo o tipo de defeito topológico conhecido na literatura como desclinação, obtido através do processo de Volterra. O grafeno é um cristal bidimensional (2-D) semicondutor com “gap” nulo no qual, para o regime de baixas energias, a relação de dispersão de energia é linear e os portadores de carga se comportam como partículas de spin semi-inteiro, férmions, com sua dinâmica descrita pela equação de Dirac. Abordamos também o comportamento dos portadores de carga no grafeno em duas situações: férmions sem massa e os férmions massivos. Este último tem relação ao comportamento de massa efetiva que surge com o aumento do “gap” entre as bandas de condução e valência na estrutura de bandas, conhecido como grafeno massivo. Todavia, existe o problema do confinamento eletrônico neste tipo de material por causa do tunelamento quântico. Uma alternativa a esta questão, é a extensão relativística do modelo de anel quântico (2-D) de Tan-Inkson proposta por Bakke e Furtado, baseada no oscilador de Dirac. A partir deste acoplamento, na primeira parte deste trabalho, foram obtidos o espectro de energia, as correntes persistentes, e os spinores positivos para uma folha de grafeno não massivo com/sem defeito topológico desclinação, via equação Dirac em $(2+1)$ dimensões, na presença de um fluxo Aharonov-Bohm. Na segunda parte, consideramos a adição de um campo magnético perpendicular ao plano da folha de grafeno massivo, onde obtemos, além dos conceitos já citados, a magnetização deste sistema. Finalmente, na terceira etapa deste trabalho, consideramos a rotação deste sistema, de modo a investigar os efeitos não inercias no grafeno submetido a uma desclinação e ao confinamento anelar.

Palavras-chave: Defeitos Topológicos, Grafeno, Desclinação, Equação de Dirac, Anel Quântico, Oscilador de Dirac, Aharonov-Bohm , Rotação, Efeitos Não Inerciais.

Abstract

In this work, we study the graphene and its physical properties associated with the theory of the topological defects in solids of Katanaev and Volovick, mainly the kind of topological defect known in the literature as disclination, obtained through the Volterra process. Graphene is a two-dimensional crystalline (2-D) semiconductor material with null gap in which, for the low energy regime, the energy dispersion relation is linear and the charge carriers behave as particles of half-integer spin, fermions, whose dynamics is described by the Dirac equation. We also discuss the behavior of charge carriers in graphene in two situations: massless fermions and massive fermions. The latter is related to the effective mass behavior that arises with increasing separation of the gap between the conduction and valence bands in the bands structures, known as gapped graphene. However, there is the problem of electronic confinement in this type of material because of quantum tunneling. An alternative to this question is the relativistic extension of Tan-Inkson's (2-D) quantum ring model proposed by Bakke and Furtado, based on the Dirac oscillator. From this coupling, in the first part of this work, the energy spectrum, the persistent currents, and the positive spinors were obtained for a non-massive graphene sheet with/without topological defect disclination, by Dirac equation (2+1) dimensions, in the presence of Aharonov-Bohm flux. The second part, we consider the addition of magnetic field vertical to the plane of the gapped graphene sheet, where we get besides all the concepts already mentioned, the magnetization of this system. Finally, the third step of this work, we consider the rotation of this system, in order to investigate the non-inertial effects on graphene which has been subjected to disclination and the ringed confinement.

Keywords: Topological Defects, Graphene, Disclination, Dirac Equation, Quantum Ring, Dirac Oscillator, Aharonov-Bohm, Rotation, Non-Inertial Effects.

Capítulo 1

Introdução

O físico americano Richard Feynman (1918 - 1988) proferindo sua palestra “*Há muito Espaço lá Embaixo*”¹[1] no ano de 1959, lançou os desafios da construção de uma máquina pequena, do tamanho de uma unha, e a capacidade de escrever todos 24 volumes da Enciclopédia Britânica na cabeça de um alfinete, ambos vencidos alguns anos depois. Nestes desafios propostos por Feynman, a busca pela construção e controle de dispositivos eletrônicos cada vez menores fez com que emergissem problemas de ordem teórica no que diz respeito a natureza dos fenômenos: Como partir da escala macroscópica, onde os fenômenos são descritos pela física clássica e chegar na escala microscópica, onde os fenômenos são descritos pela física quântica? (Ver Figura 1.1) Diante deste quadro, Feynman lançava as bases do que conhecemos hoje em dia como *nanociência* e *nanotecnologia*.

Essencialmente, a *nanociência* é a área multidisciplinar que estuda os fenômenos que ocorrem da ordem de um nanômetro, isto é, a medida de um bilionésimo de metro ($1nm = 1.10^{-9}m$). Já a *nanotecnologia* é toda produção de aparato tecnológico advindo dessa área. Entre estes aparatos nanotecnológicos temos por exemplo o TEM (*Transmission Electron Microscope*) que consegue atingir uma resolução da ordem de $0.1nm$ a $0.2nm$, isto é, a típica separação entre dois átomos num sólido[2]. No campo farmacológico, há avanços nos desenvolvimentos e melhorias na precisão de como o medicamento atua sobre a área de surgimento das doenças, as chamadas “balas mágicas”, medicamentos em nanopartículas direcionadas ao “epicentro” das mesmas [3]. Na área de desenvolvimento de hardware cresce, com o passar do tempo, o interesse na construção de microprocessadores com maiores quantidades de circuitos integrados em uma única placa

¹ *There's Plenty of Room at the Bottom* .

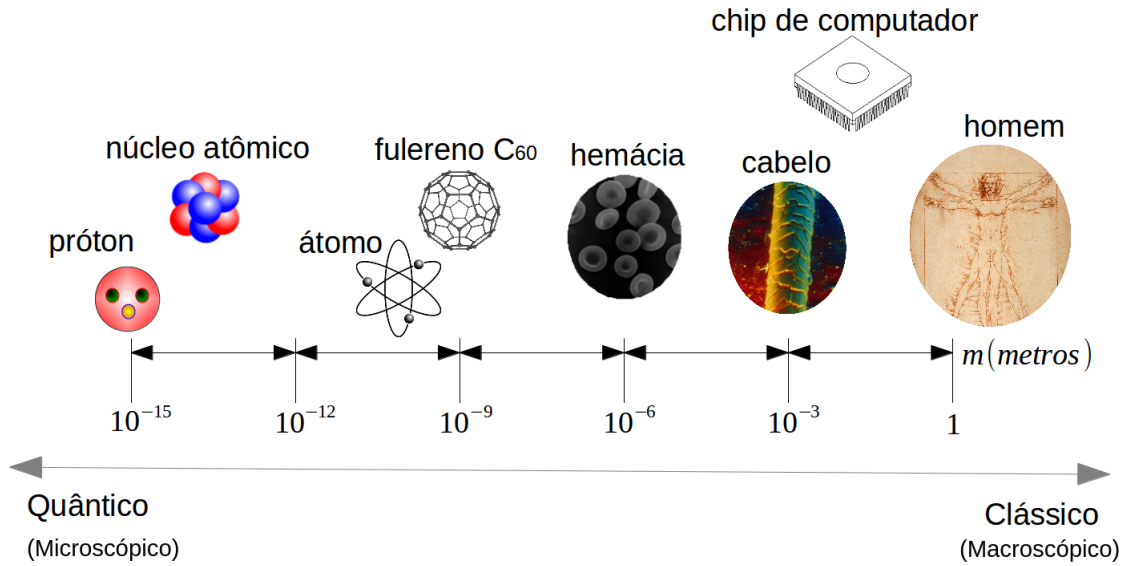


Figura 1.1: Escala microscópica *versus* escala macroscópica [4].

semicondutora, cada vez menor, cujo material mais conhecido é o silício (Si), utilizado em larga escala na indústria eletrônica. Entretanto, este processo de minimalização de componentes eletrônicos abriu um ramo de investigação na área de *nanomateriais* que atuam como semicondutores com potencial de uso para esta finalidade. É neste contexto que o grafeno obteve seu papel de destaque.

O grafeno é um alótropo do carbono, o qual apresenta, entre suas propriedades, a capacidade de ser elemento chave para construção e obtenção de outras nanoestruturas como veremos adiante. Este material também é conhecido como o primeiro exemplar de cristal bidimensional livre termodinamicamente estável, desconstruindo a crença que havia até meados dos anos 90, da inexistência de tais materiais [5]. No grafeno, os elétrons são portadores de carga que se comportam como férmions de Dirac no regime de baixas energias sendo eles, portanto, descritos pela equação de Dirac. Neste panorama é aberto uma gama de aplicações e possibilidades investigáveis de fenômenos físicos como paradoxo de *Klein*[6, 7], efeito *Hall* quântico[8], além de estudos com aplicações em computação quântica[9].

É no presente cenário que será apresentado o estudo sobre o confinamento do elétron no grafeno, especificamente em nanoestruturas conhecidas na literatura como *anéis quânticos*, cujos conceitos serão abordados adiante, na presença de defeitos topológicos.

Para tanto, vamos usar o acoplamento para equação de Dirac desenvolvido por Bakke e Furtado [10], para partículas relativísticas de spin $1/2$, adaptado ao contexto do grafeno. Tal modelo de acoplamento é uma extensão relativística para o modelo de anel bidimensional (2-D) de Tan-Inkson[11], e recupera resultados no limite não relativístico para o mesmo.

Este estudo tem sua devida importância graças as suas contribuições teóricas no campo da física da matéria condensada, visto que os elétrons no grafeno, ao serem confinados, sofrem o efeito de tunelemento quântico. A abordagem deste trabalho permite contornar esta dificuldade ao confinarmos o elétron no anel (2-D), possibilitando um melhor entendimento dos fenômenos de transporte em regiões próximas ao nível de Fermi. Entender tais fenômenos é a chave fundamental para o processo de minimalização dos dispositivos eletrônicos e suas aplicações no campo nanotecnológico.

No capítulo 2 desta tese será feito uma revisão sobre o material conhecido como grafeno. Inicialmente será abordado o contexto histórico a respeito deste material, um cristal bidimensional, o qual se acreditava existir apenas como modelo teórico, até sua obtenção em 2004. Na sequência será explanado a respeito da configuração eletrônica e as propriedades particulares deste material assim como a interpretação do mesmo como duas sub-redes cristalinas trigonais sobrepostas. A partir deste modelo, será mostrado via método *tight-binding* o espectro de energia do grafeno e suas estruturas de bandas. Uma vez obtido esse espectro, será mostrado que, para regiões próximas ao ponto de *Fermi*, a relação de dispersão de energia é linear, ou seja os elétrons comportam-se como *férmions* livres sem massa, o que possibilita usar a equação de Dirac em (2+1) dimensões para descrever sua dinâmica. Por fim será feita uma abordagem sobre defeitos topológicos aplicada ao grafeno. Especificamente, será mostrado o defeito topológico conhecido como desclinação, a partir da abordagem de Katanaev e Volovick, de defeitos em sólidos de modo que, este arcabouço teórico, servirá como plataforma de investigação nesta tese.

No capítulo 3 desta tese, será feita uma revisão sobre as nanoestruturas conhecidas como anéis quânticos e suas aplicações, a partir das quais, podemos obter um significado físico para o potencial vetor, entidade conhecida na teoria eletromagnética. De forma sucinta, será explanado a importância destas nanoestruturas para investigação do chamado efeito *Aharonov-Bohm* assim como outro fenômeno associado a anéis quânticos, as *correntes persistentes*. Neste capítulo também falaremos de maneira resumida do modelo de anel

quântico bidimensional (2-D) de Tan - Inkson e de sua extensão relativística, obtida por Bakke e Furtado, para partículas de spin $1/2$, fundamentada no acoplamento conhecido na literatura como *Oscilador de Dirac*. Este tipo de acoplamento permite recuperar, no limite relativístico o hamiltoniano do oscilador harmônico. A partir deste modelo de anel quântico (2-D), será desenvolvido o cerne desta tese.

No capítulo 4 será abordado aplicação do modelo de anel quântico (2-D) no grafeno. Serão duas situações abordadas: o caso sem defeito topológico ou folha plana de grafeno, e o caso com defeito, com desclinação. Neste caminho será mostrado a obtenção dos autovalores de energia obtidos da equação de Dirac em $(2+1)$ dimensões em ambos casos, os spinors, que neste caso representam sub-redes no grafeno, assim como as correntes persistentes, além da análise gráfica dos resultados.

No capítulo 5 será abordado o confinamento anular dos elétrons, no grafeno massivo submetido ao defeito topológico chamado desclinação. Esta classe de material apresenta a característica peculiar onde a separação do “gap” entre as bandas de condução e valência, comporta-se como uma massa efetiva do material. Será obtido o espectro de energia, e as soluções dos spinors positivos assim como as *correntes persistentes*. Neste contexto será inserido, além do fluxo *Aharonov-Bohm* no centro do anel, um campo magnético uniforme, com o objetivo de estudar outro efeito que surge em anéis quânticos, a *magnetização* do sistema. Na conclusão deste capítulo será feito uma análise gráfica dos resultados.

No capítulo 6, será aplicado um referencial não inercial ao grafeno massivo, com confinamento quântico anelar, com fluxo *Aharonov-Bohm* adicionado a um campo magnético uniforme. Neste contexto será mostrado a desclinação na folha do grafeno com o anel (2-D) submetido a uma rotação, através da corda cósmica girante. Serão abordados os resultados do espectro de energia, as *correntes persistentes* e a *magnetização* do sistema, além da análise gráfica.

No capítulo 7, faremos as considerações finais a respeito da tese e as perspectivas futuras.

Capítulo 2

Considerações sobre o Grafeno

Neste capítulo será feito uma revisão histórica sobre o grafeno. Será visto também, o conceito do grafeno como uma rede cristalina bidimensional plana, destacando a sua constituição química, suas propriedades e configuração eletrônica. Neste desígnio, na perspectiva da física da matéria condensada, será discorrido a respeito da estrutura cristalina do grafeno, seu espectro de energia obtido via modelo *tight-binding* e estruturas de bandas. Com posse destes resultados, no limite de baixas energias, será mostrado como o grafeno pode ser descrito por uma teoria efetiva de dois spinores bidimensionais de Dirac e por fim será mostrada a relação do grafeno com a teoria dos defeitos topológicos aplicada neste material.

2.1 Grafeno : Contexto Histórico

A primeira menção ao que hoje conhecemos por grafeno, ocorreu no trabalho de P.R.Wallace em 1947 [12] que o citava como uma “única camada hexagonal”¹ do grafite. Neste mesmo trabalho, ele tanto conseguiu prever a estrutura eletrônica como o comportamento da dispersão linear das energias, tópicos que serão detalhados mais adiante neste capítulo. Outro trabalho que também teve grande relevância teórica no atual entendimento do grafeno, foi publicado por Semenoff em 1984[13], em que demonstrou um modelo análogo a equação de Dirac em (2+1) dimensões, aplicado a uma monocamada² hexagonal de grafite, na qual, no limite de baixas energias, era observado o comportamento fermiônico.

¹*Single hexagonal layer* [12].

²Camada formada por um único átomo: película monoatômica.

O grafeno é um alótropo do carbono que se apresenta na natureza como uma monocamada de átomos deste material, formando uma rede cristalina hexagonal, bidimensional e plana. Esse material foi obtido experimentalmente pelos pesquisadores Novoselov e Geim através de um processo de esfoliação mecânica do grafite, no qual foram obtidas películas monoatômicas estáveis livres, sendo publicado os resultados em 2004[14]. Este fato chamou muita atenção dos pesquisadores, pois a existência do grafeno, comprovava a existência de cristais bidimensionais livres em condições ambiente, quebrando o paradigma da área de física da matéria condensada que advogava pela inexistência de tais materiais.

Pela visão histórica, era consenso a crença na inexistência de materiais cristalinos bidimensionais. A base desta crença dava-se nas considerações teóricas de Landau, Peierls e Mermin[15], que afirmavam que esta classe de material era termodinamicamente instável. Para uma temperatura finita qualquer, tal instabilidade seria uma consequência das contribuições divergentes das flutuações térmicas que, uma vez presente nas redes cristalinas de baixa dimensionalidade causaria deslocamentos entre os átomos das mesmas, da ordem da distância interatômica. Do ponto de vista experimental não haviam proposto até então, uma maneira de contradizer tais considerações.

A espessura de uma película monoatômica cristalina tem uma relação de proporcionalidade com a temperatura de fusão, no que diz respeito a seu descréscimo: quanto menor a espessura da monocamada, menor a temperatura de fusão e, portanto, maior a sua instabilidade e dissociabilidade. Deste modo, monocamadas atômicas só eram entendidas como partes constituintes de grandes estruturas atômicas tridimensionais [16], originadas no processo de Epitaxia³. Essa inexistência de cristais bidimensionais foi contestada em 2004, com a obtenção experimental do grafeno, como dito anteriormente além de outras formas cristalinas bidimensionais como, por exemplo, o nitreto de boro monocristalino [17], ambos estáveis em condições ambientes.

A obtenção destes novos materiais, em especial, do grafeno abriu uma vasta via de investigação e observação de alguns efeitos físicos interessantes, como veremos adiante e sua potencial aplicabilidade em nanociência.

³Epitaxia é o método de deposição de uma película monocristalina sobre um substrato monocristalino. A película depositada é chamada de camada epitaxial.

2.2 Grafeno: Configuração Eletrônica e Propriedades

Em termos da configuração eletrônica, cada átomo de carbono que compõem a monocamada de grafeno, possui uma hibridização do tipo sp^2 , que é a mais estável do ponto de vista da configuração eletrônica. Esta hibridização⁴ é caracterizada pela combinação de um orbital $2s$ mais dois orbitais $2p$ dando origem a três orbitais idênticos, do tipo sp^2 de modo que, combinados, vão dar origem as quatro ligações conhecidas para o átomo de carbono: uma ligação π e três ligações σ , arranjadas geometricamente na forma trigonal plana: os orbitais híbridos tem máxima densidade de probabilidade para as três direções no plano xy com ângulo máximo de 120° .

As ligações σ são formadas a partir da sobreposição de orbitais sp^2 de átomos de carbono diferentes, localizadas no mesmo eixo. Estes tipos de ligações, que são as mais fortes, são responsáveis pela estabilidade da estrutura molecular na rede cristalina do grafeno. Por outro lado a ligação π , que é a mais fraca, é formada pela sobreposição dos orbitais vazios $2p$. Esta é responsável pela condução, pois é nela que se encontra os elétrons de valência[18].

Com relação as propriedades, o grafeno não só chamou atenção por sua obtenção experimental mas também pela grande potencialidade de suas aplicações numa nova era tecnológica. A importância de sua investigação dá-se, em grande parte, as propriedades únicas associadas a sua obtenção experimental[19]. Entre estas, vamos citar algumas[20]:

A *condutividade elétrica* de uma monocamada de grafeno é da ordem de $0.96 \times 10^6 \Omega^{-1}m^{-1}$ ligeiramente maior que a do cobre, que é $0.6 \times 10^6 \Omega^{-1}m^{-1}$, sendo portanto melhor condutor; sua condutividade térmica é governada por fônons e possui valor aproximado de $5000 Wm^{-1}K^{-1}$, sendo melhor condutor térmico do que o cobre que, em temperatura ambiente, possui valor de $401 Wm^{-1}K^{-1}$; o grafeno apresenta uma *resistência a ruptura* de $42 N/m$ enquanto que uma folha do melhor aço de mesma espessura ($3.35 \text{ \AA} = 3.35 \times 10^{-10} m$) possui uma resistência de $0.40 N/m$, sendo o grafeno cem vezes mais forte do que o aço; Do ponto de vista da óptica física, uma monocamada de grafeno é transparente, absorve apenas 2,3% da intensidade de luz, independentemente do compri-

⁴Propriedade intrínseca aos orbitais atômicos incompletos s e p de se completarem mutuamente, dando origem a orbitais híbridos.

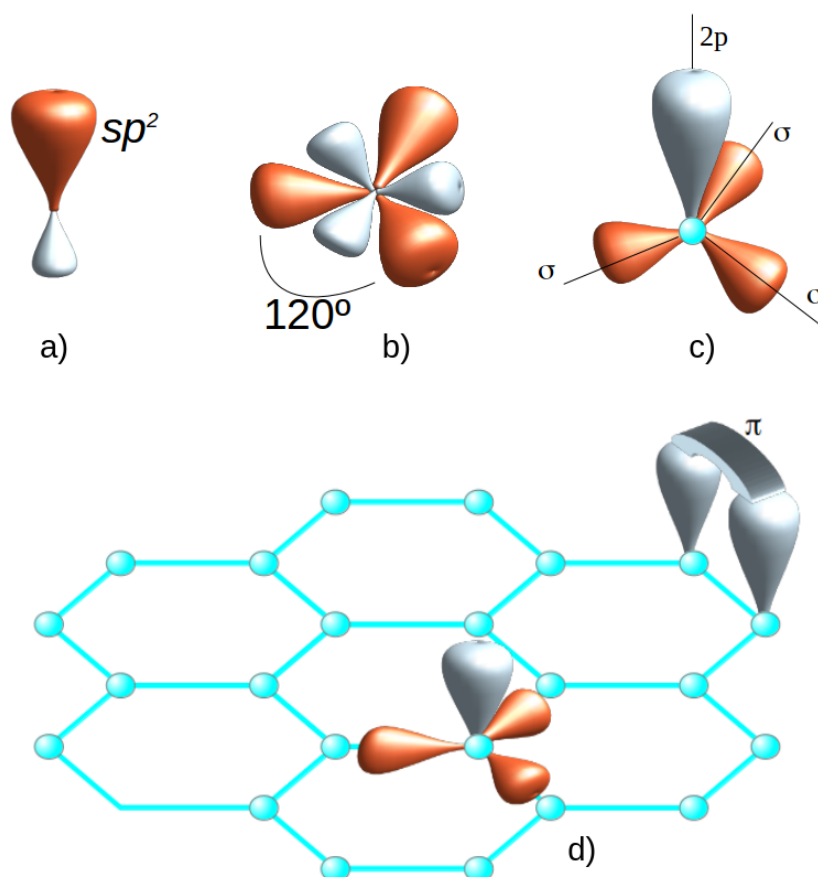


Figura 2.1: a) Orbital sp^2 ; b) Orbitais híbridos sp^2 no arranjo trigonal plano; c) Ligações σ formadas pela sobreposição de orbitais sp^2 e orbital atômico vazio $2p$; d) Rede de átomos de carbono (C), e formação das ligações π .

mento de onda no domínio óptico. Este valor é dado por $\pi\alpha$ obtido através da constante de estrutura fina, α , sendo assim a película de grafeno incolor quando suspensa.

Além das propriedades expostas, há uma outra propriedade fundamental do grafeno: A capacidade de ser elemento raiz para obtenção de outras substâncias alotrópicas. A partir de uma única película monoatômica de grafeno, dependendo da forma como é cortada, (ver figura 2.1), é possível obter outros materiais, com propriedades químicas e físicas distintas, sendo um natural e dois artificiais. O caso natural é o grafite que é um mineral encontrado na natureza. Neste material, as monocamadas de grafeno estão empilhadas entre si, de maneira que, o que as mantém unidas, são as forças de Van der Walls. O fato destas forças serem responsáveis pelas ligações fracas, fazem com que as folhas de grafeno deslizem facilmente uma sobre as outras, quando submetidas a ação de forças externas, deformando assim o grafite, quer sendo na ponta de um lápis, ao es-

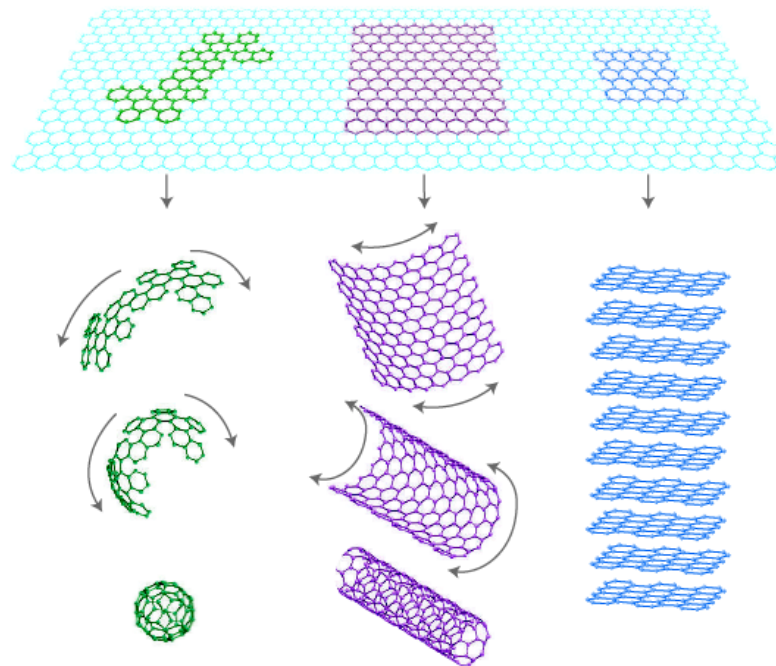


Figura 2.2: Película monoatômica de grafeno como matriz geradora de outras materias. Da esquerda para a direita: fulereno (0-D), nanotubo (1-D) e o grafite (3-D)[15].

crever, quer sendo no processo de esfoliação mecânica utilizado para obter grafeno. Os sintéticos são: o *fulereno* ou “*buckyball*”, que consiste numa película dobrada formando um arranjo zero-dimENSIONAL e *nanotubo* no qual a película é enrolada formando um “tubo”unidimensional⁵.

Outro fato além das informações já mostradas anteriormente, é que o grafeno tanto pode atuar como condutor, como semicondutor por causa da sua estrutura , como veremos adiante.

2.3 A Rede Cristalina do Grafeno

Nesta seção será analisado o arranjo geométrico do grafeno na rede cristalina, com o objetivo de calcular sua relação de energia, a qual permite construir sua estrutura de bandas. O grafeno possui uma rede cristalina com formato hexagonal planar (*honeycomb* ou “*favo de mel*”) e pode ser entendida como a sobreposição de duas sub-redes trigonais,

⁵Por conversão: O *fulereno* tem dimensão zero devido sua estrutura ser semelhante a um “ponto” enquanto que o *nanotubo* tem dimensão um por ser semelhante a um “fio oco”.

(triangulares). Na figura 2.3 a), considerando a simetria de translação dos vetores $\vec{a}_1$ e $\vec{a}_2$, podemos construir duas redes de Bravais: uma sub-rede A com átomos azuis e uma sub-rede B com átomos laranjas.

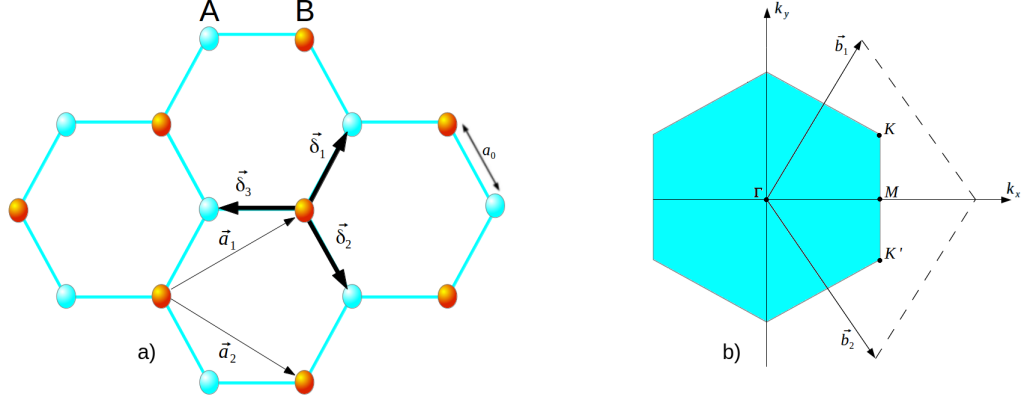


Figura 2.3: a) Esquema de rede cristalina no grafeno, com as duas sub-redes A (átomos azuis) , B (átomos laranjas), a distância atômica a_0 , os vetores da base no espaço direto $\vec{a}_1$ e $\vec{a}_2$ e os vetores dos primeiros vizinhos $\vec{\delta}_{j=1,2,3}$; b) Primeira zona de Brilloin, com os vetores da rede recíproca $\vec{b}_1$ e $\vec{b}_2$, e os pontos de alta simetria K, K' e M .

Estes vetores são conhecidos como vetores da rede e podem ser descritos em termos de coordenadas cartesianas:

$$\vec{a}_1 = \frac{a_0}{2}(3, \sqrt{3}) , \quad \vec{a}_2 = \frac{a_0}{2}(3, -\sqrt{3}), \quad (2.1)$$

com $a_0 \approx 1.42 \text{ \AA}$, sendo a distância entre os átomos de carbono da rede [21]. Se calcularmos os módulos dos vetores na equação (2.1), ou seja, $a_1 = |\vec{a}_1|, a_2 = |\vec{a}_2|$, temos o valor do parâmetro de rede $a_1 = a_2 = 2,46 \text{ \AA}$ [12] relacionado com a dimensão da célula unitária da rede, que contém os átomos A e B.

Na figura 2.3 a), temos também os vetores que representam a posição dos três vizinhos mais próximos, ou seja:

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a_0}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a_0}{2}(1, -\sqrt{3}), \quad \vec{\delta}_3 = -a_0(1, 0). \quad (2.2)$$

Os vetores da rede recíproca ou primeira zona de Brilloin na figura 2.3 b) , são definidos como:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a_0}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a_0}(1, -\sqrt{3}), \quad (2.3)$$

onde temos analogamente o parâmetro de rede no espaço recíproco $b_1 = b_2 = 4\pi/3a_0$. O conhecimento da zona de Brilloin é o passo fundamental para descrição da teoria de banda de energia de elétrons e excitações elementares de outros tipos [22]. Os pontos K e K' representam pontos não equivalente da zona de Brilloin ⁶ e estão associados ao comportamento do elétron no grafeno, como será exposto adiante. As coordenadas destes pontos no espaço dos momentos são definidas como:

$$\vec{K} = \frac{2\pi}{3a_0}(1, \frac{1}{\sqrt{3}}), \quad \vec{K}' = \frac{2\pi}{3a_0}(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}). \quad (2.4)$$

Conhecer estes pontos é particularmente importante pois as curvas de dispersão de energia (estrutura eletrônica de bandas) para o grafeno são obtidas variando o vetor $\vec{k}$, definido adiante, nessas três direções.

2.4 Energia e Estrutura Eletrônica de Bandas no Grafeno

Para um melhor entendimento a respeito do comportamento dos elétrons no grafeno, nesta secção será obtido o espectro de energia nesta rede cristalina pois, de posse desta informação, é possível construir a estrutura eletrônica de bandas, a partir da qual, obtém se informação da relação de energia-momento para os elétrons na rede.

Na análise de uma rede cristalina, o que se observa, em verdade, é um aglomerado de átomos ordenados em intervalos regulares, formando um sistema com potencial periódico. Para cálculos envolvendo este tipo de potencial, existem vários métodos de calcular o espectro de energia, mas neste trabalho, vamos optar pela aproximação *tight-binding*.

⁶K e K' não pertencem a mesma rede cristalina, são independentes, lembrando que o grafeno é a sobreposição de duas redes.

Em síntese, neste tipo de aproximação, o potencial da rede cristalina é forte suficiente de modo que o autoestado de um elétron que se move por ela é descrito pelo orbital ao qual se prende, localizado sobre o sítio atômico. Os elétrons que estão mais próximos dos seus respectivos núcleos atômicos, estão fortemente ligados a estes, de modo que são descritos pelos próprios orbitais atômicos, com níveis discretos de energia. Na rede cristalina os átomos estão bem localizados, de forma que há uma superposição dos orbitais comuns dos elétrons. Esta superposição é encarregada pelo aumento dos níveis de energia, que são contínuos, dando origem as bandas de energia do diagrama de dispersão.

A maneira mais simplificada de abordar este problema é calculando o hamiltoniano *tight-binding* via segunda quantização, na aproximação de acoplamento fraco⁷ como[23]:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{ij} c_i^\dagger c_j + h.c., \quad (2.5)$$

onde a soma é através dos pares de átomos vizinhos mais próximos i, j sobre a rede e $c_i^\dagger, c_j$ são operadores anticomutativos definidos no espaço dos momentos e seus respectivos hermitianos conjugados. O termo t chama-se “hopping”, ou transferência, que é a probabilidade de transição mediante a transferência de energia dos elétrons na rede. Os índices i e j são os sítios da rede onde ocorre a transferência. Os operadores $c_i^\dagger$ e $c_j^\dagger$ são responsáveis pela criação de um elétron nas sub-redes A e B respectivamente, analogamente os operadores de aniquilação c_i e c_j aniquilam um elétron nas sub-redes A e B. Os operadores são definidos como transformadas discretas de Fourier:

$$c_i(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}_i} c_i(\vec{k}), \quad c_j(\vec{r}') = \frac{1}{\sqrt{N'}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}'} c_j(\vec{k}'), \quad (2.6)$$

onde N, N' referem-se aos números de sítios nas sub-redes A e B, e são válidas as relações de anticomutação:

$$\{c_i, c_j\} = \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0, \quad \{c_i^\dagger, c_j\} = \delta_{ij}. \quad (2.7)$$

A ideia básica é impor uma condição de vínculo entre os sítios i e j nas sub-redes do grafeno. Esta condição será $\vec{r}_j' = \vec{\delta}_j + \vec{r}_i$. Considerando o limite termodinâmico $N, N' \rightarrow \infty$ para as ocupações nos sítios, após algumas manipulações algébricas, o hamiltoniano na zona de Brillouin (ZB) (2.5) será reescrito como:

⁷ *Weak-coupling limit* - Na verdade é o hamiltoniano do modelo de Hubbard na aproximação em que o potencial colombiano é menor que a energia de “hopping”, ver capítulo 2 da referência[23].

$$\mathcal{H} = \int_{\text{BZ}} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left(c_i^\dagger(\vec{k}), c_j^\dagger(\vec{k}) \right) \begin{pmatrix} 0 & -t \sum_{j=1}^3 e^{i\vec{k}\vec{\delta}_j} \\ -t \sum_{j=1}^3 e^{-i\vec{k}\vec{\delta}_j} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_i(\vec{k}) \\ c_j(\vec{k}) \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Na sequência resolvendo o problema de autovalores para a matriz 2×2 na equação (2.8), temos:

$$E_k^2 = t^2 \left(\sum_{j=1}^3 e^{i\vec{k}\vec{\delta}_j} \right) \cdot \left(\sum_{j=1}^3 e^{-i\vec{k}\vec{\delta}_j} \right). \quad (2.9)$$

A parti da equação à cima, tomando a somatório sobre os primeiros vizinhos (2.2), obtemos a equação do espectro de energia do grafeno [21]:

$$E_k = \pm t \left[3 + 2\cos(a_0\sqrt{3}k_y) + 4\cos\left(\frac{a_0\sqrt{3}k_y}{2}\right) \cos\left(\frac{3a_0k_x}{2}\right) \right]^{1/2}. \quad (2.10)$$

Na equação (2.10), o espectro de energia de um elétron é compreendido como duas superfícies com valores $E_k > 0$ e $E_k < 0$, da seguinte forma: quando a $t = 0$, o espectro de energia $E_k = 0$ é simétrico. [21]. Para valores finitos de t , a simetria elétron - buraco é quebrada em duas bandas de energia assimétricas: A primeira superfície, caso positivo, corresponde a banda de condução enquanto a segunda, caso negativo, a banda de valência. As bandas tocam-se nos seis pontos que correspondem aos vértices do hexágono da primeira zona de Brillouin (ver figura 2.3). Os estados $E_k < 0$ estão preenchidos, enquanto os estados $E_k > 0$ estão vazios, de modo que a estrutura de bandas de energia é semipreenchida, de modo que o nível de *Fermi* está localizado nestes seis pontos. Na figura (2.4) temos a representação das duas bandas, assim como os pontos de alta simetria, onde estão os chamado cones de Dirac, traçadas para valores finitos de $t = 2.7\text{eV}$ e $t' = -0.2t$:

Estes ponto K e K' são chamados de *pontos de Dirac*, pois é próximo destas regiões, que o elétron comporta-se como um férmion livre sem massa, portanto descrito pela equação de Dirac, o que será abordado na próxima secção.

2.5 Férmions Livres Sem Massa e Equação de Dirac

Para uma melhor compreensão do comportamento dos elétrons no grafeno, vamos escolher na superfície de Fermi, regiões próximas aos pontos de Dirac, onde a energia é

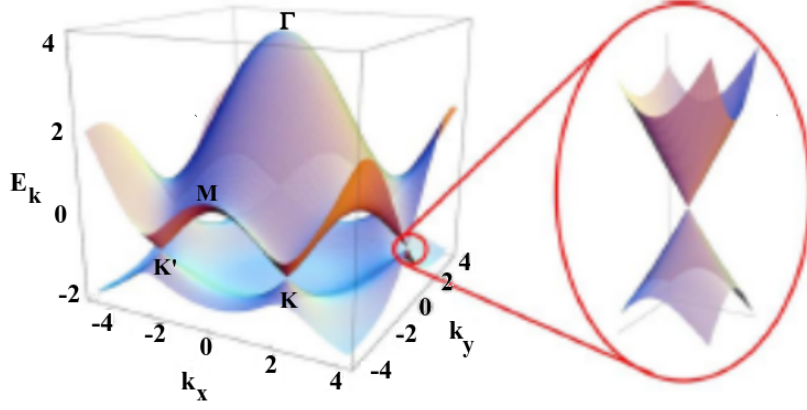


Figura 2.4: Estrutura de bandas eletrônica para o grafeno com os ponto de alta simetria Γ , M, K e K'. Ampliado em destaque um ponto de Dirac. [21]

nula, que neste caso, serão os pontos obtidos em (2.4). Na sequência será substituído as componentes do vetor de onda $\vec{k} = (k_x, k_y)$ por $\vec{k} = \vec{K}(\vec{K}') + \vec{p}$, com $|\vec{p}| \ll |\vec{K}(\vec{K}')|$ e $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, conhecido na literatura como *expansão para pequenos momentos*, na equação da energia (2.10) de modo que obtemos [12, 21]:

$$E_k = \pm a_0 t \sqrt{p_x^2 + p_y^2} = \pm \frac{3}{2} a_0 t |\vec{p}| = \pm \hbar v_F |\vec{k}|, \quad (2.11)$$

que é a equação de dispersão de energia para o grafeno, onde v_F é a velocidade de Fermi ⁸ estimada experimentalmente com valor $v_F \approx \frac{3a_0 t}{2} \approx 10^6 m/s$, ou seja, $v_F \approx \frac{c}{300}$, com $c = 3 \times 10^8 m/s$ sendo a velocidade da luz no vácuo. Para o fóton, é conhecido que a dispersão de energia relativísticas é linear, assumindo que a massa de repouso seja nula, $m_0 = 0$, ou seja :

$$\begin{aligned} E^2 &= p^2 c^2 + m_0^2 c^4 = p^2 c^2 \\ &= pc. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Assim, de maneira análoga, é possível descrever o comportamento do elétron⁹, nos pontos de Dirac no grafeno, como um férmion livre sem massa, de spin 1/2 via equação de Dirac em (2+1) dimensões, de modo que, a velocidade de Fermi v_F , faz o papel da

⁸Velocidade correspondente a energia cinética do elétron concentrados na banda de condução.

⁹Ou buracos, se consideramos a condução pelo ponto de vista das lacunas que o elétron deixa na banda de valência.

velocidade da luz c . Para isto, é preciso reescrever o hamiltoniano, que é a matriz 2x2 no interior equação (2.8) em termos da *expansão para pequenos momentos* até a primeira ordem, [24] ou seja :

$$H_0 = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x \pm ip_y \\ p_x \mp ip_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

Nesta equação o hamiltoniano H_0 tem sinais $\pm$ dependendo para qual dos pontos de Dirac não equivalente K e K' , a expansão foi feita. Para uma descrição efetiva, na qual inclua em um mesmo hamiltoniano a contribuição dos dois pontos de Dirac para a dinâmica dos portadores de carga [25], a equação (2.13) pode ser reescrita como uma matriz no espaço 4x4, para os pontos de Dirac $(\vec{K}_A, \vec{K}_B, \vec{K}'_A, \vec{K}'_B)$ na forma :

$$H_{ef} = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y & 0 & 0 \\ p_x + ip_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -p_x + ip_y \\ 0 & 0 & -p_x - ip_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

a qual no problemas de autovalores $H_{ef}\Psi = E\Psi$ implica que a função de onda deve ter quatro componentes,

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \\ \Psi'_A \\ \Psi'_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Upsilon \\ \Gamma \end{pmatrix}, \quad (2.15)$$

ou seja Ψ é um bispinor de Dirac, sendo que as componentes deste bispinor Υ e Γ carregam informações a respeito das sub-redes A e B. Em mecânica quântica relativística, trabalha-se com um conjunto de matrizes para descrição da dinâmica de uma partícula de spin $\frac{1}{2}$, ou seja, um férmion. Este conjunto é composto pelas chamadas *matrizes de Pauli* e são definidas como:

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

que satisfazem as relações:

$$\{\sigma^i, \sigma^j\} = 2\delta_{ij}\mathbb{I}, \quad \sigma^i\sigma^j = i\sigma^k, \quad (\sigma^i)^2 = \mathbb{I}, \quad (2.17)$$

onde $\mathbb{I}$ é a matriz identidade, no caso 2×2 , e os índices i, j, k são 1,2,3 respectivamente. Assumindo as matrizes em (2.14), podemos reescrever o hamiltoniano quadrimensional efetivo de Dirac sem o termo de massa como:

$$H_{ef} = v_F \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \vec{p} & 0 \\ 0 & -(\vec{\sigma} \vec{p}) \end{pmatrix} = v_F \vec{\alpha} \vec{p}, \quad (2.18)$$

onde 0 é a matriz nula 2×2 e $\vec{\alpha}$ é matriz 4×4 , tal que [26, 24]:

$$\vec{\alpha} = (\hat{\alpha}^1, \hat{\alpha}^2, \hat{\alpha}^3) = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & -\vec{\sigma} \end{pmatrix}. \quad (2.19)$$

No geral, pode-se concluir que as excitações de baixa energia, ou seja, a *aproximação de pequenos momentos* na rede do grafeno, para a estrutura de banda semipreenchida, é descrita por uma teoria eficaz de dois spinores bidimensionais de Dirac, sendo que cada componente destes spinores corresponde a uma das sub-redes, A ou B.

2.6 Grafeno e Teoria dos Defeitos Topológicos

A rede cristalina de um sólido real, se comparada com o modelo teórico, difere pela presença de defeitos. A presença destes defeitos é consequência de uma série de fatores: estresse mecânico sobre o material, reações elétricas, químicas, impureza, etc. Além disto, a presença destes defeitos nos sítios da rede abre caminho para investigação do comportamento de várias propriedades físicas nos materiais como fenômenos de transporte eletrônico, transição de fase [27], entre outros. No que se refere ao grafeno, observações experimentais com microscópio de transmissão eletrônica [28], constataram que folhas de grafeno, quando suspensas, apresentam ondulações com tamanhos aleatórios formadas espontaneamente, sendo a mesma constatação experimental também obtida via microscópio de tunelamento [29]. Além destas constatações experimentais, verificou-se que tanto a curvatura da folha de grafeno [30], como a presença de impurezas na rede [31] causam um impacto sobre as propriedades eletrônicas o que também foi observado através da teoria de defeitos topológicos aplicada à matéria condensada [32, 33, 34].

Nesta conjuntura, a abordagem de defeitos topológicos é inserida pela representação dos defeitos em sólidos relacionadas com a teoria da gravitação na abordagem de Katanav e Volovick [35]. Não é nossa intenção neste corrente capítulo dissertar todo aparato

matemático por trás da teoria de geometria diferencial aplicada em relatividade, mas apenas o essencial para as aplicações no grafeno que serão propostas adiante. Em particular, vamos nos limitar a um tipo de defeito na rede cristalina do grafeno: a desclinação.

A desclinação é um tipo de defeito topológico que tem relação com a simetria de rotação da rede cristalina. A presença deste tipo de defeito topológico na folha de grafeno causa uma modificação sobre sua curvatura, dando um aspecto cônico. Topologicamente, este tipo de defeito é obtido pelo chamado *processo de Volterra* que é um processo de “corte” e “cola” do material do meio [36]. Aplicada ao grafeno, consiste em cortar e retirar uma secção da rede cristalina plana, em forma de “*cunha*” com um dos átomos que compõem o hexágono de uma das subredes, que é representada na cor cinza na figura 2.5 a). Se colarmos as pontas soltas da rede onde houve o corte, obtemos um cone com curvatura positiva com vértice situado na formação pentagonal central da rede, como mostrado na figura 2.5 b). Por outro lado, se a “*cunha*” for inserida numa rede perfeitamente plana então será formado um cone com curvatura negativa, com vértice centrado no heptágono como mostra a figura 2.5 c). Para uma rede cristalina bidimensional, a métrica que descreve este defeito é dada por [35]:

$$ds^2 = dt^2 - dr^2 - \alpha^2 r^2 d\varphi^2, \quad (2.20)$$

onde o parâmetro α tanto caracteriza a presença do defeito como indica a intensidade da desclinação¹⁰. Este parâmetro pode ser descrito em termos do setor angular θ , o qual é removido ou adicionado na folha de grafeno formando o defeito, de modo que temos

$$\alpha = 1 \pm \frac{\theta}{2\pi}. \quad (2.21)$$

O ângulo θ , é também conhecido como ângulo de déficit e tem uma relação de proporcionalidade com a simetria hexagonal do grafeno $\theta \propto \pi/3$. Como o setor pode ser removido ou adicionado, podemos reescrevê-lo como:

$$\theta = \pm \frac{N\pi}{3}, \quad (2.22)$$

com $N \in \mathbb{Z}$, representando o número de setores removidos ou adicionados, ou seja, $0 < N < 6$. O sinal “+” representa a adição de um setor, dando origem a desclinação negativa enquanto o sinal “-” a remoção de um setor originando a desclinação positiva. Como

¹⁰A métrica de um corda cósmica com a variável z nula.[74] em unidades naturais $c = \hbar = 1$.

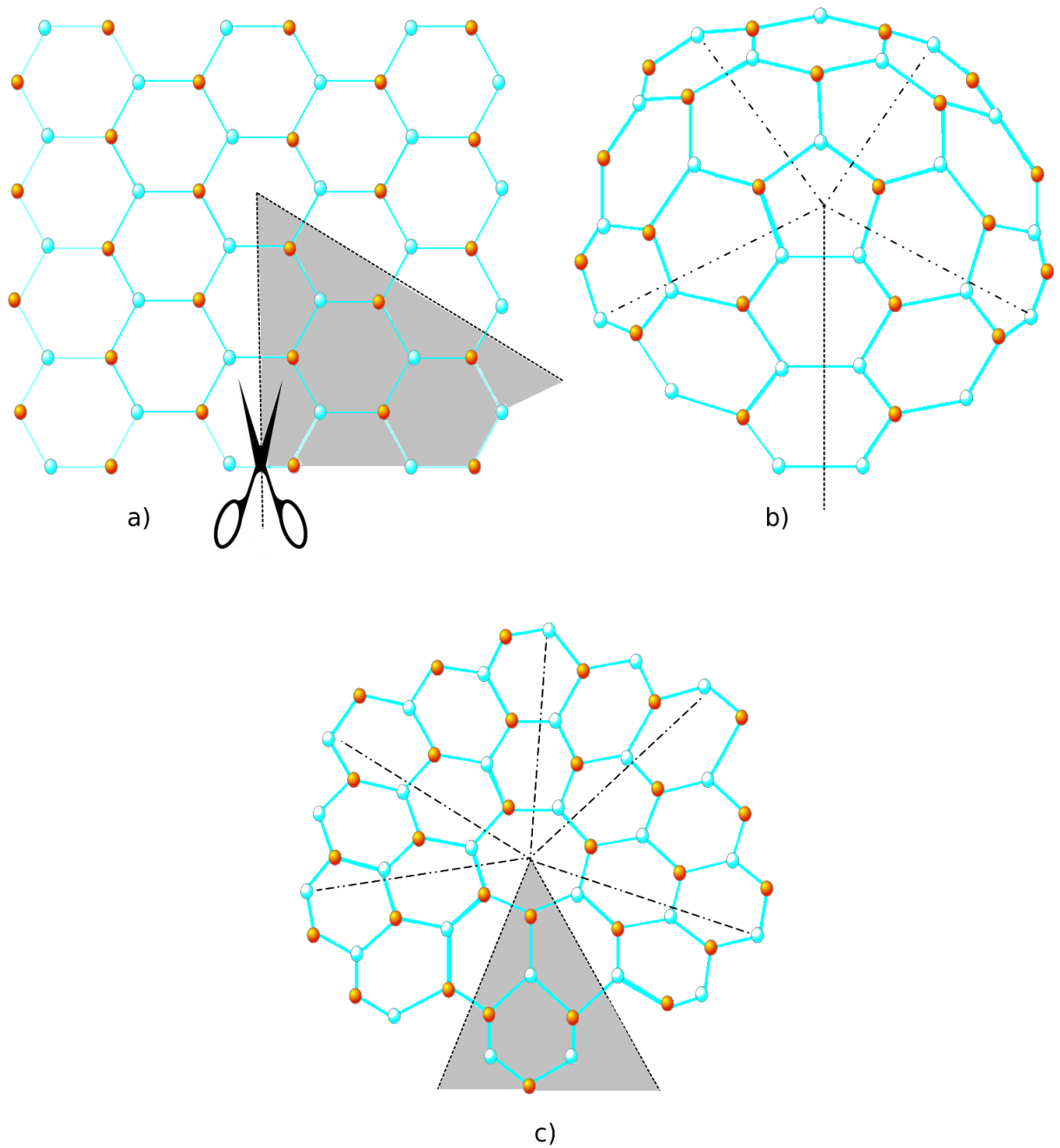


Figura 2.5: Processo de Volterra: a) Corte de uma secção (“*cunha*”) da rede cristalina (cinza); b) Colagem da rede: desclinação positiva; c) Adição de secção (inserção) na rede plana: desclinação negativa.

consequência da definição de α em termos do ângulo de déficit θ , o parâmetro do defeito terá um intervalo de atuação, ou seja, $0 < \alpha < 1$ que corresponde a uma curvatura positiva, no caso desclinação positiva. Se $\alpha = 1$, temos a ausência de defeito, ou seja, uma folha

de grafeno perfeitamente plana. Se $\alpha > 1$, temos uma curvatura negativa do espaço, caracterizando as desclinações negativas.

A presença da curvatura no folha de grafeno, decorrente da adição ou remoção de um setor angular induz uma distorção cônica, que pode ser medida através de um vetor tangencial em volta do vértice do cone, numa trajetória fechada em volta deste defeito. Neste percurso a função de onda adquire uma fase geométrica [37], que é um campo de gauge, responsável por carregar informações a respeito das propriedades eletrônicas da rede com o defeito. Este procedimento é conhecido na literatura como *transporte paralelo*, e a mudança de fase neste percurso é conhecido como *holonomia*. No caminho fechado em volta do vértice, a *holonomia* causa um fluxo topológico efetivo, que atua nas sub-redes A e B do grafeno com defeito, de modo que a expressão é definida como [38, 39, 40]:

$$\oint \Gamma_\mu dx^\mu = \pi(\alpha - 1)\sigma^z, \quad (2.23)$$

onde Γ_μ é a conexão spinorial conhecida na teoria de espaços curvos. Se prestarmos atenção na figura 2.5, tanto no caso de remoção de setor como no caso da adição de setor na rede cristalina, ocorrem ligações de átomos de uma mesma sub-rede, o que sugere uma descontinuidade na função de onda spinorial Ψ . Neste caso, há outra contribuição conhecida como *holonomia quântica*, que no grafeno com defeito, é responsável pelo fluxo de spin. Este fluxo age na mistura dos pontos de Fermi K e K' na rede, de modo que a expressão para o mesmo é dado por [41]:

$$\oint a_\mu dx^\mu = -3\pi(\alpha - 1)\tau^y, \quad (2.24)$$

onde τ^i representa a matriz de Pauli para o espaço dos spins e tem dependência do parâmetro do defeito α . O campo não-abeliano a_μ é encarregado pela correção da descontinuidade de Ψ gerada pelos átomos ligados na mesmas sub-redes.

Neste caminho podemos escrever a equação de Dirac em (2+1) dimensões para férmions sem massa, introduzindo tanto a contribuição do fluxo topológico efetivo (2.23) como a contribuição do fluxo de spin (2.24) de maneira que, para o grafeno com defeito topológico, a equação adquire o seguinte aspecto:

$$\left[i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - i\gamma^\mu \Gamma_\mu - \gamma^\mu \frac{a_\mu}{\rho} \right] \psi = 0, \quad (2.25)$$

onde γ^μ são as matrizes de Dirac definidas no espaço curvo.

O campo a_μ é obtido através da integral (2.24), de modo que a única componente não nula para a folha de grafeno com desclinação é escrito como[42]:

$$a_\phi = \pm \frac{3}{2} (\alpha - 1), \quad (2.26)$$

onde os sinais $\pm$ estão relacionados com o fluxo de spin nos pontos $K_\pm$. Já a conexão spinorial Γ_μ depende exclusivamente da curvatura do espaço causada pela desclinação no grafeno. Para obtermos uma expressão para ela, é preciso considerar a relação entre o referencial geral do espaço-tempo de Minkowski e o referencial local do defeito.

Um defeito topológico está espacialmente relacionado com a curvatura do espaço-tempo que é geometricamente definido através da métrica¹¹[43]

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = e_a^\mu e_a^\nu \eta^{ab} dx^\mu dx^\nu. \quad (2.27)$$

Nesta definição, o tesor métrico $g_{\mu\nu} = e_a^\mu e_a^\nu \eta^{ab}$ relaciona o espaço geral com o espaço local através do campo de tetradas e_a^μ, e_a^ν e pelo tensor métrico de Minkowski η^{ab} . Na presença da curvatura espacial, as matrizes de Dirac também se conectam com o espaço local pela relação $\gamma^\mu = e_a^\mu(x) \gamma^a$ e satisfazem a relação de anticomutação $\{\gamma^a, \gamma^b\} = 2\eta^{ab}$, onde assumimos a assinatura da métrica de Minkowski usual $\eta^{ab} = \text{diag}(+ - -)$. Além disso, o campo de tetradas relaciona a base não coordenada do referencial local, onde se encontra o defeito, com o referencial geral no espaço-tempo pela relação $e^a = e_\mu^a dx^\mu$. Para a métrica da desclinação em (2.20), podemos escrever as relações para a base não coordenada:

$$\begin{aligned} e^0 &= dt ; \\ e^1 &= \cos\varphi dr - \alpha \text{sen}\varphi d\varphi ; \\ e^2 &= \text{sen}\varphi dr + \alpha \text{sen}\varphi d\varphi , \end{aligned} \quad (2.28)$$

de modo que o campo de tetradas é obtido da forma:

$$e_\mu^a = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\varphi & -\alpha \text{sen}\varphi \\ 0 & \text{sen}\varphi & \alpha \cos\varphi \end{pmatrix}, \quad e_a^\mu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\varphi & \text{sen}\varphi \\ 0 & -\frac{\text{sen}\varphi}{\alpha r} & \frac{\cos\varphi}{\alpha r} \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

¹¹Elemento de linha que mede a menor distância entre dois pontos no espaço-tempo.

Na sequência, vamos utilizar a equação de Maurer-Cartan [44] para obtermos as formas diferenciais, $de^a + \omega_b^a \wedge e^b = 0$ (condição para ausência de torção no espaço), com $\omega_b^a = \omega_\mu^a{}_b \wedge dx^\mu$, sendo a conexão um-forma, e $\omega_\mu^a{}_b$ a conexão de spin, necessária para obtermos a conexão spinorial. Depois de alguma manipulação matemática, como consequência da simetria do defeito, há apenas duas componentes não nulas nas conexões um-forma, que são :

$$\omega_1^2 = -\omega_2^1 = -(\alpha - 1)d\varphi, \quad (2.30)$$

de modo que a conexão spinorial é definida como:

$$\Gamma_\mu = \frac{i}{4}\omega_{\mu ab}\Sigma^{ab}, \quad (2.31)$$

onde usamos o tensor métrico de Minkowski para baixar o índice da conexão de spin pela relação $\omega_{\mu ab} = \omega_\mu^c{}_b \eta_{ca}$ e $\Sigma^{ab} = \frac{i}{2}(\gamma^a\gamma^b - \gamma^b\gamma^a)$. Sendo assim, com posse destas definições, podemos escrever a conexão spinorial para a desclinação no grafeno, na forma:

$$\Gamma_\varphi = -\frac{i}{2}(\alpha - 1)\sigma^3. \quad (2.32)$$

Desta maneira, mostramos o essencial sobre o material grafeno, bem como a influência topológica do defeito sobre as características da rede cristalina do material. É diante desta perspectiva, que vamos fazer algumas aplicações físicas associadas a teoria de anéis quânticos e suas aplicações, que será o tema do próximo capítulo.

Capítulo 3

Anéis Quânticos e o Confinamento Relativístico 2-D

Neste capítulo será feito uma breve revisão sobre o conceito de anéis quânticos bem como sua associação ao efeito *Aharonov-Bohm* e o surgimento das *correntes persistentes*. Dando sequência, será abordado de forma sucinta o modelo de confinamento anelar de Tan-Ikson e sua generalização para o caso relativístico para uma partícula de spin $1/2$ através do *Oscilador de Dirac*.

3.1 Anéis Quânticos e suas Aplicações

Anéis quânticos são nanoestruturas fabricadas a partir de materiais semicondutores que confinam os movimentos dos elétrons numa geometria anelar bidimensional(2-D). O estudo destas nanoestruturas tem grande importância em física de sistemas mesoscópicos principalmente por sua associação ao *efeito Aharonov-Bohm*, [45] bem como o fenômeno decorrente desta associação, as *correntes persistentes* [46].

O *efeito Aharonov-Bohm* foi proposto teoricamente em 1959 por Aharonov e Bohm [47], e comprovado experimentalmente pela primeira vez por Chambers[48] em 1960 e posteriormente por Tomura em 1986[49]. Em síntese, consiste de um fenômeno de natureza puramente quântica, que dá um significado físico ao potencial vetor $\vec{A}$, até então entendido como um mero artifício matemático na teoria do eletromagnetismo, utilizado na obtenção de campos elétricos e magnéticos. O hamiltoniano para uma partícula carregada de massa M na presença de um potencial vetor é escrita como[50]:

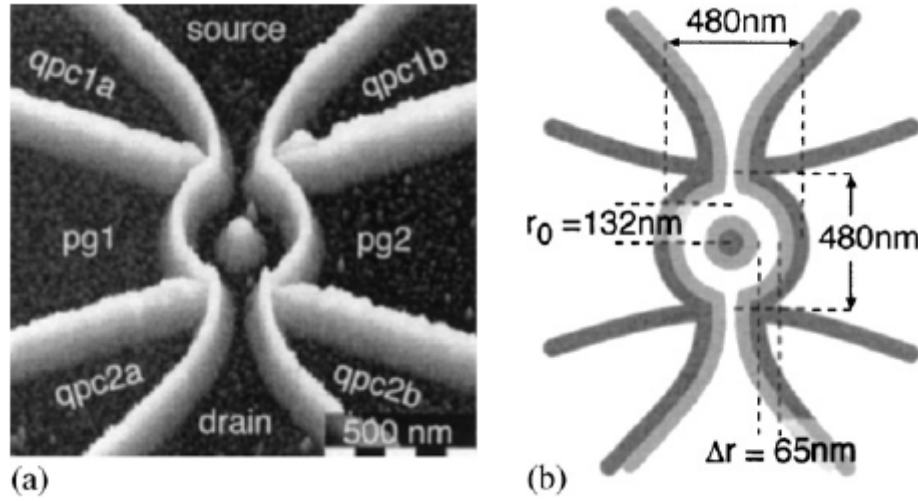


Figura 3.1: Anel quântico construído sobre uma heteroestrutura $AlGaAs/GaAs$ (arsenieto de gálio-alumínio/ arsenieto de gálio), contendo um gás de elétrons 2-D, (2DEG) : a) Imagem obtida por um Microscópio de Força Atômica; b) Esboço com as dimensões do anel, da ordem de nanômetros. Retiradas da referência [45]

$$H = \frac{1}{2M} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2. \quad (3.1)$$

De acordo com este efeito, um feixe de partículas com carga q passa por um caminho, onde o potencial vetor $\vec{A}$ não é nulo, mas o campo magnético $\vec{B}$ é, então a partícula deste feixe adquire uma fase na função de onda, $\Psi = U\Psi' = e^{-i\Delta S}\Psi'$, onde U é a *fase Aharonov-Bohm*, e a função de onda Ψ' representa a solução para o problema quando $\vec{A} = 0$. O termo ΔS é a diferença de fase acumulada pela função de onda da partícula, levando em contas os caminhos 1 e 2, de modo que :

$$S = \frac{q}{\hbar c} \int \vec{A} \cdot d\vec{r}. \quad (3.2)$$

Se consideramos dois feixes de partículas, com mesma origem (fonte) e mesmo alvo (região de interferência), porém com caminhos diferentes em volta de uma região com as condições descritas para equação (3.2), como mostra figura 2.2.

Na região de interferência, é observada uma diferença de fase entre os caminhos, a qual é calculada como:

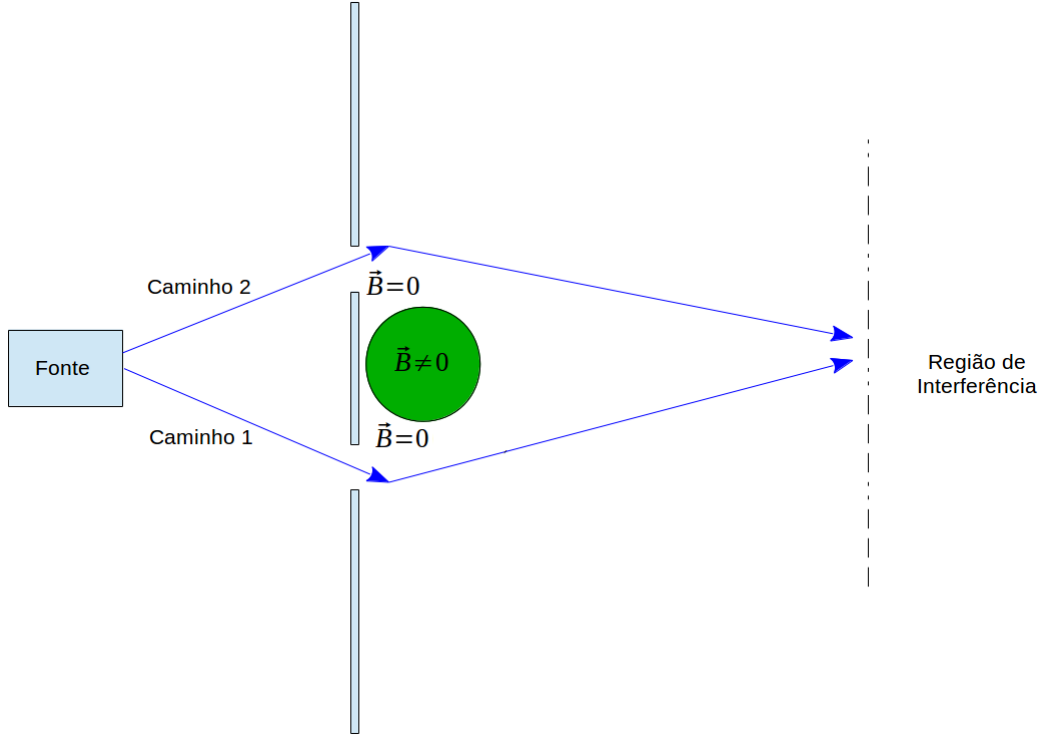


Figura 3.2: Proposta de arranjo experimental Aharonov-Bohm.

$$\Delta S = S_2 - S_1 = \frac{q}{\hbar c} \left(\int_{C_2} \vec{A}(\vec{r}) \cdot d\vec{r} - \int_{C_1} \vec{A}(\vec{r}) \cdot d\vec{r} \right) = \frac{q}{\hbar c} \oint_C \vec{A} \cdot d\vec{r}, \quad (3.3)$$

usando o teorema de Stokes e a definição de campo $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$, obtemos assim¹ a equação

$$\Delta S = \frac{q}{\hbar c} \Phi_{AB}, \quad (3.4)$$

onde Φ_{AB} é o fluxo magnético(fluxo *Aharonov-Bohm*) que atravessa o solenóide (em verde na Figura 2.2) entre os dois caminhos das partículas.

Portanto, caso haja alguma variação do campo magnético dentro do solenóide , será observado uma variação da fase entre dos feixes de partículas, variando assim, o padrão de interferência observado no espectro de energia. No contexto de anéis quânticos, o potencial vetor $\vec{A}$ assume condições relacionadas ao raio médio ² do anel(ver referência [51], de modo que o hamiltoniano (3.1) é reescrito como:

¹ $\oint_C \vec{A} \cdot d\vec{r} = \int_S \vec{\nabla} \times \vec{A} \cdot d\vec{S}$; Usando a definição de fluxo magnético $\Phi = \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S}$.

²A simetria do problema é cilíndrica mas com a coordenada $z = 0$, no plano do anel, para mais detalhes ver a referência [51].

$$H = -\frac{\hbar^2}{2Mr_0^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{\Phi_{AB}}{\Phi_0} \right)^2, \quad (3.5)$$

onde r_0 é o raio médio do anel e $\Phi_0 = \frac{hc}{q}$ é período do fluxo magnético Φ_{AB} que passa pelo centro do anel. Ao aplicarmos o hamiltoniano (3.5) no problema de autovalores com função de onda $\Psi(\varphi) = e^{im\varphi}$, obtemos o espectro de energia mais a contribuição do fluxo *Aharonov-Bohm* no anel na forma:

$$E(m, \Phi_{AB}) = \frac{\hbar^2}{2Mr_0^2} (m_l - \phi_{AB})^2, \quad (3.6)$$

onde assumimos $\phi_{AB} = \frac{\Phi_{AB}}{\Phi_0}$. Assim, o fluxo *Aharonov-Bohm* vai induzir uma contribuição no espectro de energia da partícula confinada ao anel, contribuição esta periódica com os valores do número quântico magnético m_l .

O outro fenômeno, a *corrente persistente*, por sua vez, é relacionado ao fluxo *Aharonov-Bohm* quando estudado em associação com anéis quânticos. O conceito destes tipos de correntes difere do entendimento do eletromagnetismo clássico: sua existência não depende de fonte de energia (alimentação) externa, mas surgem em estruturas anelares como efeito puramente quântico. Existe uma relação analítica para este tipo corrente, que depende do fluxo *Aharonov-Bohm*, a qual é dada pela relação de Byers-Yang [51, 52]

$$I = -c \sum_m \left(\frac{\partial E}{\partial \phi_{AB}} \right). \quad (3.7)$$

A equação (3.7) é desenvolvida para $T=0$, quando os níveis Fermi estão todos ocupados,³ assim a soma é sobre todos os estados do espectro de energia ocupados, ou seja, sobre todos os números quânticos.

3.2 O modelo de anel 2-D de Tan-Inkson

Na secção anterior, vimos dois fenômenos intrínsecos ao estudo de anéis quânticos, que é a presença do fluxo *Aharonov-Bohm* e a existência de *correntes persistentes*. Todavia as observações destes fenômenos em anéis bidimensionais eram complicadas do ponto de vista da obtenção do espectro de energia, pois dependiam de cálculos computacionais para resolver a equação de Schrödinger numericamente. Perante este problema, Tan e Inkson

³Originalmente a corrente persistente é definida através da energia livre de Helmholtz, para os detalhes da dedução ver o artigo [52].

propuseram um modelo analítico que generaliza e engloba outros tipos de confinamentos, como será mostrado a seguir. Este modelo de Anel 2-D é descrito pelo potencial no plano xy [11] como:

$$V(r) = \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0 \quad (3.8)$$

onde $V_0 = 2\sqrt{a_1 a_2}$, e a_1 e a_2 são constantes, parâmetros de controle ajustáveis. A vantagem deste potencial é a aplicabilidade em descrever diferentes tipos de confinamento através da manipulação das constantes a_1 e a_2 mas para isso, será feita a expansão da equação (3.8) em torno de um mínimo, façamos:

$$\frac{dV(r)}{dr} = -\frac{2a_1}{r^3} + 2a_2 r, \quad (3.9)$$

e na sequência igualando a zero, obtemos:

$$r = r_0 = \left(\frac{a_1}{a_2} \right)^{\frac{1}{4}}. \quad (3.10)$$

Na equação (3.10), r_0 é o raio médio do anel, de modo que a expansão em Taylor de $V(r)$ em torno $r = r_0$ é escrita como :

$$V(r) = V(r_0) + \left(\frac{dV}{dr} \right)_{r=r_0} (r - r_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2V}{dr^2} \right)_{r=r_0} (r - r_0)^2 + \dots \quad (3.11)$$

substituindo a equação (3.8) na expansão a cima, obtemos :

$$V(r) \approx \frac{1}{2} M \left(\frac{8a_2}{M} \right) (r - r_0)^2 \approx \frac{1}{2} M \omega_0^2 (r - r_0)^2, \quad (3.12)$$

que é o potencial parabólico do oscilador harmônico de massa efetiva M , com frequência $\omega_0 = \sqrt{\frac{8a_2}{M}}$ e posição de equilíbrio r_0 . Desta forma, o anel obtido a partir do potencial de Tan-Inkson permite deduzir os seguintes tipos de confinamento: quando $a_2 = 0 \rightarrow V(r) = \frac{a_1}{r^2}$, temos o potencial de confinamento de um anti-ponto quântico⁴; fazendo $a_1 = 0 \rightarrow V_2(r) = a_2 r^2$, temos o potencial de confinamento de um ponto quântico⁵; se fizermos o limite $a_2 \rightarrow \infty$ ($\omega_0 \rightarrow \infty$), para r_0 fixo, temos o confinamento de um anel 1-D; por fim, se tomarmos o limite $r_0 \rightarrow \infty$ e ω_0 constante, temos um fio esticado 2-D infinito.

⁴(*Antidot*) : tipo de vácuo quântico que ocorre em semicondutores, gás de elétrons, onde o potencial centrado em r é tão alto que repelem os elétrons.[53]

⁵(Quantum dot): porção de material semiconductor tão pequeno que pode confinar um único elétron nas três dimensões espaciais[54].

Para resolução analítica deste modelo anelar na presença do fluxo magnético através de seu centro vazado, é necessário definir o potencial vetor na forma:

$$\vec{A} = \left(\frac{Br}{2} + \frac{\ell\hbar}{er} \right) \hat{\varphi}, \quad (3.13)$$

onde ℓ mede o número de fluxo magnético $\Phi_{AB} = \ell\Phi_0$ ($\Phi_0 = hc/e$) que passa através do centro do anel e neste modelo o comportamento do spin do elétron é ignorado. Assim, o hamiltoniano de um elétron com massa efetiva M confinado neste modelo, no plano $x - y$ é escrito como:

$$H = \frac{\hbar^2}{2M} \left[-\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} + i\phi_{AB} \right)^2 - i \frac{eB}{\hbar} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} + i\phi_{AB} \right) + \frac{e^2 B^2}{4\hbar^2} r^2 \right] + \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0. \quad (3.14)$$

Os autovalores de energia associados a este hamiltoniano são dados por:

$$E_{n,m_l} = \left(n + \frac{1}{2} + \frac{\mathfrak{M}}{2} \right) \hbar\omega - \frac{m_l - \phi_{AB}}{2} \hbar\omega_c - \frac{M}{4} \omega_0^2 r_0^2, \quad (3.15)$$

onde $n = 0, 1, 2, \dots$ é o número quântico principal, associado aos níveis de energia do movimento radial enquanto que $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ é o número quântico magnético associado ao momento angular. A frequência total deste sistema ω_0 é definido por:

$$\omega = \sqrt{\omega_c^2 + \omega_0^2}, \quad (3.16)$$

onde $\omega_c = \frac{eB}{M}$ é a frequência ciclotrônica clássica associada a interação dos elétrons com campo magnético, e ω_0 é a frequência do oscilador harmônico. As autofunção do sistema são obtidas no mesmo trabalho como:

$$\Psi_{n,m_l}(r, \varphi) = \frac{1}{\lambda} \left(\frac{\Gamma[n + \mathfrak{M} + 1]}{2^{\mathfrak{M}+1} n! (\Gamma[\mathfrak{M} + 1])^2 \pi} \right) \times e^{-im_l \varphi} e^{-\frac{1}{4} \left(\frac{r}{\lambda} \right)^2} \left(\frac{r}{\lambda} \right)^{\mathfrak{M}} {}_1F_1 \left(-n, \mathfrak{M} + 1, \frac{1}{2} \left(\frac{r}{\lambda} \right)^2 \right), \quad (3.17)$$

onde ${}_1F_1$ é a equação hipergeométrica confluyente (ver apêndice A), com parâmetro e comprimento magnético renormalizado respectivamente:

$$\mathfrak{M} = \sqrt{(m_l - \phi_{AB})^2 + \frac{2a_1 M}{\hbar^2}} \quad e \quad \lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}. \quad (3.18)$$

Este modelo de anel 2-D difere do anel 1-D no que diz respeito a forma como o fluxo *Aharonov-Bohm* atua: No caso unidimensional há uma dependência parabólica nas autoenergias (3.6) em função do fluxo, consequência da mudança na fase da função de onda. Por outro lado, no modelo 2-D, no espectro de energia (3.15) e no comprimento magnético (3.18), o fluxo *Aharonov-Bohm* atua mudando o número quântico de m_l para $m_l - \phi_{AB}$, além disso, não muda apenas a fase, mas também a trajetória de seus estados eletrônicos, resultando em uma dependência não parabólica para as autoenergias com relação ao fluxo[11].

Assim, revisamos o essencial a respeito de anéis quântico e fenômenos associados como o fluxo *Aharonov-Bohm* e as correntes persistentes, bem como modelo de Tan- Inkson. Todos estes conceitos servirão como base na abordagem para o confinamento das partículas em sistemas relativísticos.

3.3 O oscilador de Dirac e o Anel Relativístico 2-D

Nos desenvolvimentos teóricos relacionados a interação de uma partícula relativística de spin 1/2 com o potencial do oscilador harmônico simples, constatou-se que havia a impossibilidade de recuperar o hamiltoniano do oscilador harmônico no limite relativístico da equação de Dirac. Todavia este problema foi solucionado em 1989, com o trabalho de Moshinsky e Szczechaniak [55], que introduziram um novo acoplamento ao momento $\vec{p}$ na equação de Dirac, de tal maneira que é possível recuperar no limite não-relativístico o hamiltoniano do oscilador harmônico simples, com um forte acoplamento spin-órbita. Este acoplamento ficou conhecido na literatura por *oscilador de Dirac* e é definido como:

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - iM\omega r \gamma^0 \hat{r}, \quad (3.19)$$

onde M e ω são a massa e a frequência do oscilador respectivamente. Este formalismo vem sendo bastante usado para descrever as propriedades de sistemas físicos em óptica quântica[56], termodinâmica [57] e aplicações na matéria condensada [42].

Baseados no *oscilador de Dirac*, em 2012, Bakke e Furtado desenvolveram um modelo de anel quântico 2-D com o objetivo de estudar o confinamento de uma partícula de spin 1/2, no caso de sistemas ultrarelativísticos de quase-partículas ⁶ onde a relação de

⁶Também escrito como quasipartículas: sistemas que em certas condições específicas, apresentam

dispersão de energia é linear com respeito a velocidade da quasepartícula. Fundamentados na equação (3.19), foi proposto o seguinte acoplamento[10]:

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} + i \left[\frac{\sqrt{2Ma_1}}{r} + \sqrt{2Ma_2r} \right] \gamma^0 \hat{r}, \quad (3.20)$$

com a_1 e a_2 parâmetros de controle. Este acoplamento, como veremos adiante, é uma generalização relativística para o modelo Tan-Inkson.

3.4 O Hamiltoniano de Dirac com o Anel 2-D

Neste secção, será mostrado a obtenção do hamiltoniano de Dirac com confinamento anelar (3.20). Como se trata de um anel quântico, a simetria para este sistemas é cilíndrica de modo que vamos utilizar a equação de Dirac com coordenadas curvilíneas proposta por Fock(1929)[58] :

$$i\gamma^\mu D_\mu \Psi + \frac{i}{2} \sum_{k=1}^3 \gamma^k \left[D_k \ln \left(\frac{h_1 h_2 h_3}{h_k} \right) \right] \Psi = M \Psi, \quad (3.21)$$

onde foi considerado $c = \hbar = 1$ (unidades naturais) e $k = 1, 2, 3$. Na equação (3.21), $D_\mu = \frac{1}{h_\mu} \frac{\partial}{\partial x^\mu}$ é a derivada correspondente ao sistema de coordenadas e os parâmetros h_k são os fatores de escala. Para a simetria cilíndrica, a métrica no espaço-tempo de Minkowski é escrito como:

$$ds^2 = -dt^2 + dr^2 + r^2 d\varphi^2 + dz^2, \quad (3.22)$$

de onde tiramos os fatores de escala $h_0 = 1$, $h_1 = 1$, $h_2 = r$ e $h_3 = 1$ e as respectivas coordenadas associadas $x^0 = t$, $x^1 = r$, $x^2 = \varphi$ e $x^3 = z$, além da assinatura métrica $\eta^{\mu\nu} = (- + ++)$. Outro conceito importante que será bastante útil nesta secção e no desenvolvimento desta tese, são as chamadas matrizes de Dirac $\gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma^i)$. Estas matrizes são próprias da mecânica quântica relativística [59] e são definidas da seguinte maneira:

$$\gamma^0 = \hat{\beta} = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \hat{\beta} \hat{\alpha}^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

partículas emergentes decorrentes das perturbações do meio. Exemplo: Os fônons que aparecem como consequência da vibração dos átomos da rede cristalina.

Observe que esse conjunto de matrizes 4x4 estão relacionadas com as matrizes 2x2, identidade $\mathbb{I}$ e as matrizes de Pauli, respectivamente. As matrizes $\hat{\alpha}^i (i = 1, 2, 3)$ e $\hat{\beta}$ satisfazem o conjunto de propriedades:

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}^i \hat{\alpha}^j + \hat{\alpha}^j \hat{\alpha}^i &= 2\delta_{ij} \mathbb{I} ; \\ \hat{\alpha}^i \hat{\beta} &= -\hat{\beta} \hat{\alpha}^i ; \\ \hat{\alpha}^{i2} &= \hat{\beta}^2 = \mathbb{I} .\end{aligned}\tag{3.24}$$

Usando os fatores de escalas e as coordenadas na equação (3.21) e utilizando as propriedades das matrizes de Dirac definidas em (3.23) e das matrizes α^i em (3.24) podemos reescrever a equação (3.21) na forma

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \beta M \Psi + \left[-i \hat{\alpha}^1 \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r} \right) - \frac{i \hat{\alpha}^2}{r} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} \right) - i \hat{\alpha}^3 \left(\frac{\partial}{\partial z} \right) \right] \Psi. \tag{3.25}$$

Observando a equação (3.25), podemos comparar a mesma com uma equação do tipo Schrödinger

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi, \tag{3.26}$$

de maneira que possamos escrever o hamiltoniano tipo Dirac, $H = (\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + M\beta)$ onde o momento $\vec{p}$ é escrito em termos de suas componentes:

$$\vec{p} = (p_r, p_\varphi, p_z) = \left[-i \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r} \right), -\frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi}, -i \frac{\partial}{\partial z} \right]. \tag{3.27}$$

Dando sequência, a idéia é fazer o acoplamento mínimo do momento com o potencial :

$$\vec{A} = \frac{\Phi_{AB}}{2\pi r} \hat{\varphi}, \tag{3.28}$$

com Φ_{AB} sendo o fluxo *Aharonov-Bohm*. Esse acoplamento será feito pelo momento cinemático

$$\vec{\Pi} = \vec{p} - |q| \vec{A}, \tag{3.29}$$

de tal forma que, o hamiltoniano na presença do fluxo magnético no centro do anel é escrito como $H_{\phi_{AB}} = \vec{\alpha} \cdot \vec{\Pi} + M\beta$ ou de maneira explícita usando as equações (3.20) e (3.27):

$$H_{\phi_{AB}} = \left[-i\hat{\alpha}^1 \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r} - \hat{\beta} \frac{\sqrt{2Ma_1}}{r} - \hat{\beta} \sqrt{2Ma_2} r \right) - \frac{i\hat{\alpha}^2}{r} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i\phi_{AB} \right) - i\hat{\alpha}^3 \frac{\partial}{\partial z} \right], \quad (3.30)$$

com $\phi_{AB} = \Phi_{AB}/\Phi_0$ e $\Phi_0 = \frac{2\pi}{|q|}$.

3.5 Autovalores de Energia no Anel Relativístico 2-D

Para obtenção dos autovalores de energia na partícula relativística de spin 1/2 no modelo de anel 2-D, será utilizado o *ansatz*

$$\Psi = e^{-iEt} \begin{pmatrix} \eta \\ \chi \end{pmatrix}, \quad (3.31)$$

onde $\eta = \eta(r, \varphi, z)$ e $\chi = \chi(r, \varphi, z)$ são biespinores. Aplicando o hamiltoniano (3.30) neste *ansatz* e utilizando as propriedades das matrizes (3.23) e (3.24), são obtidas duas equações acopladas. A primeira para η :

$$(E - M)\eta = -i\sigma^1 \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r} + \frac{\sqrt{2Ma_1}}{r} + \sqrt{2Ma_2} r \right] \chi - i\frac{\sigma^2}{r} \left[\frac{\partial}{\partial \varphi} - i\phi_{AB} \right] \chi - i\sigma^3 \frac{\partial \chi}{\partial z}, \quad (3.32)$$

e a segunda para χ :

$$(E + M)\chi = -i\sigma^1 \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r} - \frac{\sqrt{2Ma_1}}{r} - \sqrt{2Ma_2} r \right] \eta - i\frac{\sigma^2}{r} \left[\frac{\partial}{\partial \varphi} - i\phi_{AB} \right] \eta - i\sigma^3 \frac{\partial \eta}{\partial z}. \quad (3.33)$$

Para desacoplar estas equações, vamos substituir (3.33) em (3.32) de modo a eliminar χ . Nesta substituição serão utilizadas as propriedades das matrizes de Pauli (2.17) de modo que obtemos:

$$\begin{aligned} (E^2 - M^2)\eta = & -\frac{\partial^2 \eta}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \eta}{\partial r} + \frac{\eta}{4r^2} - \frac{\sqrt{2Ma_1}}{r^2} \eta + \sqrt{2Ma_2} \eta + i\frac{\sigma^3}{r^2} \frac{\partial \eta}{\partial \varphi} + \frac{2Ma_1}{r^2} \eta \\ & + 4M\sqrt{a_1 a_2} \eta - 2i\sigma^3 \frac{\sqrt{2Ma_1}}{r} \frac{\partial \eta}{\partial \varphi} - 2\sigma^3 \phi_{AB} \frac{\sqrt{2Ma_1}}{r^2} \eta + 2Ma_2 r^2 \eta \\ & - 2i\sigma^3 \sqrt{2Ma_2} \frac{\partial \eta}{\partial \varphi} - 2\phi_{AB} \sqrt{2Ma_2} \sigma^3 \eta + \phi_{AB} \frac{\sigma^3}{r^2} \eta - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \eta}{\partial r^2} \\ & + \left(\frac{\phi_{AB}}{r} \right)^2 \eta + 2i\frac{\phi_{AB}}{r^2} \frac{\partial \eta}{\partial \varphi} + 2i\sigma^2 \frac{\partial \eta}{\partial z} \left(\frac{\sqrt{2Ma_1}}{r} + \sqrt{2Ma_2} r \right) - \frac{\partial^2 \eta}{\partial z^2}. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Neste arranjo, a partícula está confinada no plano do anel, z é fixo e por consequência $\frac{\partial \eta}{\partial z} = \frac{\partial^2 \eta}{\partial z^2} = 0$. Na equação (3.34), podemos constatar que η é autofunção de σ^3 cujo os autovalores são $s = \pm 1$, o que nos permite escrever $\sigma^3 \eta_s = \pm \eta_s = s \eta$. Também podemos constatar que os operadores $\hat{J}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}$ e $\hat{p}_z = -i \frac{\partial}{\partial z}$, comutam com o hamiltoniano do lado direito da equação (3.34), ou seja, são grandezas compatíveis e consequentemente η é autoestado simultâneo destes operadores.⁷ Neste caminho, podemos escrever a solução para esta equação que dependente apenas da coordenada radial r como:

$$\eta = e^{ij\varphi} e^{ikz} \begin{pmatrix} R_+(r) \\ R_-(r) \end{pmatrix}, \quad (3.35)$$

onde $j = l + \frac{1}{2}$, com $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ e k uma constante qualquer. Para z fixo, no sistema vamos considerar $k = 0$. Substituindo a equação (3.35) em (3.34) e utilizando as propriedade das matrizes de Pauli $\sigma^i \sigma^i = \mathbb{I}$, e adotando a notação $R_s(r) = (R_+(r), R_-(r))$, temos simplesmente:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{\tau_s}{r^2} - 2Ma_2 r^2 + \nu_s \right] R_s(r) = 0 \quad (3.36)$$

que é a equação que descreve o movimento da partícula relativística confinada no anel 2-D. Os parâmetros τ_s , ζ_s e ν_s são definidos como:

$$\begin{aligned} \tau_s &= \zeta_s + s\sqrt{2Ma_1} \\ \zeta_s &= l + \frac{1}{2}(1 - s) - \phi_{AB} \\ \nu_s &= E^2 + M^2 - 2s\sqrt{2Ma_2}\zeta_s - 2\sqrt{2Ma_2} - 4M\sqrt{a_1a_2} \end{aligned} \quad (3.37)$$

A equação (3.36) é uma equação diferencial de segunda ordem e antes de resolvê-la, vamos fazer a mudança de variável

$$\mu = \sqrt{2Ma_2} r^2, \quad (3.38)$$

de maneira que obtemos

$$\left[\mu \frac{d^2}{d\mu^2} + \frac{d}{d\mu} - \frac{\tau_s^2}{4\mu} - \frac{\mu}{4} + \frac{\nu_s}{4\sqrt{2Ma_2}} \right] R_s(\mu) = 0. \quad (3.39)$$

⁷Prova: $[H, \hat{J}_z]\eta = -(E^2 - M^2)i\partial_\varphi \eta + i\partial_\varphi(E^2 - M^2)\eta = 0$
 $[\hat{p}_z, \hat{H}]\eta = -i\partial_z(E^2 - M^2)\eta + (E^2 - M^2)i\partial_z \eta = 0.$

Para corresponder as expectativas do modelo, a solução pra equação a cima deve ser regular na origem e finita em qualquer lugar, ou seja, $R_s \rightarrow 0$ quando $r \rightarrow \infty$. A função que satisfaz essas condições tem a forma

$$R_s(\mu) = e^{\frac{-\mu}{2}} \mu^{\frac{|\tau_s|}{2}} F_s(\mu). \quad (3.40)$$

Substituindo esta equação na anterior (3.39) obtemos:

$$\mu \frac{d^2 F_s}{d\mu^2} + [|\tau| + 1 - \mu] \frac{dF_s}{d\mu} + \left[\frac{\nu_s}{4\sqrt{2Ma_2}} - \frac{|\tau_s|}{2} - \frac{1}{2} \right] F_s(\mu) = 0, \quad (3.41)$$

que corresponde a equação da hipergeométrica confluyente (ver Apêndice A.1)[60], com solução:

$$F_s = {}_1F_1(a, b; z) = {}_1F_1\left(\frac{|\tau_s|}{2} + \frac{1}{2} - \frac{\nu_s}{4\sqrt{2Ma_2}}, |\tau_s| + 1, \mu\right). \quad (3.42)$$

Agora para obter uma solução finita para qualquer lugar, vamos impor a condição onde a solução de série hipergeométrica torne-se um polinômio de grau n , (Ver Apêndice A.2) que é

$$\frac{|\tau_s|}{2} + \frac{1}{2} - \frac{\nu_s}{4\sqrt{2Ma_2}} = -n. \quad (3.43)$$

A partir desta equação, substituindo os parâmetros (3.37), chegamos na expressão do espectro, escrita como:

$$E_{n,l}^2 = M^2 + 4\sqrt{2Ma_2} \left[n + \frac{|l + \frac{1}{2}(1-s) - \phi_{AB} + s\sqrt{2Ma_1}|}{2} \right] + 4\sqrt{2Ma_2} \left[s \frac{(l + \frac{1}{2}(1-s) - \phi_{AB})}{2} + 1 \right] + 4M\sqrt{a_1a_2}, \quad (3.44)$$

podendo ser reescrita ainda como:

$$E_{n,l}^2 = M^2 + 4\sqrt{2Ma_2} \left[n + \frac{|\tau_s|}{2} + s \frac{(\zeta_s)}{2} + 1 \right] + 4M\sqrt{a_1a_2}, \quad (3.45)$$

que é o espectro dos estados ligados de uma partícula carregada de spin $1/2$ confinada em um anel quântico 2-D em um sistema descrito pela equação de Dirac na presença do fluxo *Aharonov-Bohm* no parâmetro ζ_s . No mesmo trabalho foi obtido também a equação da corrente persistente para sistemas relativísticos, também com comportamento periódico quando analisada sobre a ótica do limite não relativístico.

3.6 Limite Não Relativístico: Recuperação do Anel 2-D de Tan-Inkson

Já que falamos sobre este limite, vamos ver de maneira sucinta a sua aplicação ao espectro de energia. Se considerarmos na equação (3.45) apenas as energias positivas da seguinte forma:

$$E_{n,l} = M \left(1 + \frac{4}{M} \sqrt{\frac{2a_2}{M}} \left[n + \frac{|\tau_s|}{2} + s \frac{(\zeta_s)}{2} + 1 \right] + \frac{4}{M} \sqrt{a_1 a_2} \right)^{\frac{1}{2}} = M(1 + \tilde{\mu})^{\frac{1}{2}}, \quad (3.46)$$

com

$$\tilde{\mu} \equiv \frac{4}{M} \sqrt{\frac{2a_2}{M}} \left[n + \frac{|\tau_s|}{2} + s \frac{(\zeta_s)}{2} + 1 \right] + \frac{4}{M} \sqrt{a_1 a_2}. \quad (3.47)$$

No termo entre parênteses, na equação (3.46), fazendo a expansão do binômio para $\tilde{\mu}$ até primeira ordem, tal que $(1 + \tilde{\mu})^{\frac{1}{2}} \approx (1 + \frac{1}{2}\tilde{\mu})$ obtemos:

$$E_{n,l} \approx M + \sqrt{\frac{8a_2}{M}} \left[n + \frac{|\tau_s|}{2} + s \frac{(\zeta_s)}{2} + 1 \right] + 2\sqrt{a_1 a_2}, \quad (3.48)$$

onde foi escolhida a expansão em torno da massa própria do corpo até primeira ordem⁸. Nesta aproximação é recuperada a frequência do modelo de Tan-Inkson com dependência do parâmetro a_2 , ou seja $\omega_0 = \sqrt{\frac{8a_2}{M}}$. Percebe-se também que os autovalores de energia são periódicos no fluxo $\Phi_{AB} \rightarrow \Phi_{AB} - \Phi_0$, de maneira que $E_{n,l}(\Phi_{AB} - \Phi_0) = E_{n,l+1}(\Phi_{AB})$. Assim, este resultado também está em concordância com o modelo de Tan-Inkson, se consideramos uma partícula quântica de spin 1/2.

O fato importante é que este acoplamento proposto por Bakke e Furtado, permitiu escrever tanto os autovalores de energia, como as corrente persistente para uma partícula de spin 1/2 em termos dos parâmetros a_1 e a_2 , veja na referência [11]. A partir deste, assim como no modelo 2-D de Tan-Inkson, temos uma linha de investigação para confinamentos relativísticos equivalentes aos sistemas não relativísticos, como pontos quântico e antipontos quânticos. Se fizermos $a_1 = 0$, é recuperado a energia para o oscilador de Dirac, para sistemas em matéria condensada regidos pela equação de Dirac, tomando $a_1 = 0$ em (3.44) ou (3.45), temos o espectro de uma partícula de spin 1/2 confinada para o ponto quântico:

⁸Como se trata do limite não relativístico, uma boa aproximação consiste em expandir em torno da massa própria do sistema M , pois $M = \frac{M_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$, para $c \gg v$ então $M \approx M_0$. Ver a referência [61].

$$E_{n,l}^2 = M^2 + 4\sqrt{2Ma_2} \left[n + \frac{|\zeta_s|}{2} + s \frac{(\zeta_s)}{2} + 1 \right]. \quad (3.49)$$

A partir destes resultados, também é trivial obter no limite não relativístico os níveis de energia, via expansão de Taylor em torno da massa, como foi feito anteriormente, recuperando resultados compatíveis com o modelo Tan-Inkson. Fazendo $a_2 = 0$ recupera-se o que seria o equivalente ao antiponto quântico, contudo não há estados ligados. Logo podemos concluir que o modelo de acoplamento proposto por Bakke e Furtado é uma generalização relativística do modelo Tan-Inkson, e portanto uma ferramenta que será importante quando aplicada na investigação de sistemas equivalentes ao regime ultrarelativístico de quase-partículas, como ocorre, por exemplo, no grafeno nas regiões bem próximas dos níveis de Fermi. Será esta aplicação que se seguirá nos próximos capítulos.

Capítulo 4

Anel Quântico 2-D na Folha de Grafeno na Presença do Fluxo Aharonov-Bohm

Neste capítulo será mostrado a aplicação do modelo análogo ao oscilador de Dirac proposto por Bakke e Furtado, associado com os parâmetros do potencial anelar de Tan-Inkson aplicado ao grafeno. Neste caso, será feito uma modificação que definimos como caso não massivo devido a sua aplicabilidade na folha de grafeno, lembrando que, o hamiltoniano efetivo de Dirac para este material, é sem o termo de massa. Serão abordados aqui, dois casos estudados: o caso do grafeno plano, ou seja, sem defeito; o caso do grafeno sobre influência do defeito topológico do tipo desclinação. Os resultados apresentados neste capítulo foram publicados na seguinte referência [62].

4.1 Modelo de Oscilador Não Massivo

Com o objetivo de estudar o comportamento de uma quase-partícula fermiônica confinada numa estrutura anelar topológica na folha de grafeno, vamos considerar a extensão relativística proposta para o modelo de potencial Tan-Inkson [11], a qual descreve um modelo de anel 2-D dentro da dinâmica não relativística de elétrons e buracos dado pelo acoplamento similar ao oscilador de Dirac, no caso não massivo [10]:

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} + i \left[\frac{\sqrt{2a_1}}{r} + \sqrt{2a_2}r \right] \gamma^0 \hat{e}_r, \quad (4.1)$$

onde a_1 e a_2 são parâmetros de controles. Note que se tomarmos $a_1 \rightarrow 0$, será obtido o confinamento relativo a um ponto quântico. Caso contrário, se tomarmos $a_2 \rightarrow 0$, será obtido anti-ponto quântico relativístico. Na sequência deste trabalho, vamos utilizar este modelo de acoplamento para descrever um tipo de estrutura de anel quântico no grafeno no limite de baixas energias, via equação de Dirac sem massa.

4.2 O Anel Quântico 2-D no Grafeno Plano

Na dinâmica de quase-partículas próximas aos pontos de Fermi, vamos reescrever o hamiltoniano para o problema de autovalores, adotando o mesmo procedimento feito na secção (3.4) do capítulo anterior, ou seja, associando a equação (3.21) com oscilador não massivo (4.1), fazendo o uso das matrizes de Dirac γ^i definidas em (3.23) e das matrizes α^i e seu conjunto de propriedades definidas em (3.24). Fazendo o procedimento via acoplamento mínimo sem o termo de massa $H_{\phi_{AB}} = \vec{\alpha} \vec{\Pi}$, adotando $v_f = \hbar = 1$, com v_f sendo a velocidade de Fermi, obtemos o hamiltoniano do anel 2-D para o grafeno plano, descrito pela equação:

$$H_{\phi_{AB}} = \left[-i\hat{\alpha}^1 \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r} - \beta \frac{\sqrt{2a_1}}{r} - \beta \sqrt{2a_2} r \right) - \frac{i\hat{\alpha}^2}{r} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i\phi_{AB} \right) \right], \quad (4.2)$$

com $\phi_{AB} = \Phi_{AB}/\Phi_0$ e $\Phi_0 = \frac{2\pi}{|q|}$ o quantum de fluxo magnético. Novamente, consideramos o fluxo *Aharonov-Bohm* na direção do eixo z , no sistema de coordenadas cilíndricas, passando através do centro do anel (Figura 4.1), e o potencial vetor $\vec{A} = \frac{\Phi_{AB}}{2\pi r} \hat{\varphi}$.

A solução da equação de Dirac é definida pelo *ansatz*:

$$\Psi = e^{-iEt} \begin{pmatrix} \psi \\ \phi \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

onde os spinores $\psi = \psi(r, \varphi)$ and $\phi = \phi(r, \varphi)$, como vimos no capítulo 2, representam cada uma das sub-redes A e B na monocamada de grafeno. Aplicando o hamiltoniano (4.2) no *ansatz* (4.3), vamos obter duas equações acopladas para ψ e ϕ respectivamente:

$$E\psi = -i\sigma^1 \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r} + \frac{\sqrt{2a_1}}{r} + \sqrt{2a_2} r \right] \phi - i\frac{\sigma^2}{r} \left[\frac{\partial}{\partial \varphi} - i\phi_{AB} \right] \phi \quad (4.4)$$

e

$$E\phi = -i\sigma^1 \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r} - \frac{\sqrt{2a_1}}{r} - \sqrt{2a_2} r \right] \psi - i\frac{\sigma^2}{r} \left[\frac{\partial}{\partial \varphi} - i\phi_{AB} \right] \psi, \quad (4.5)$$

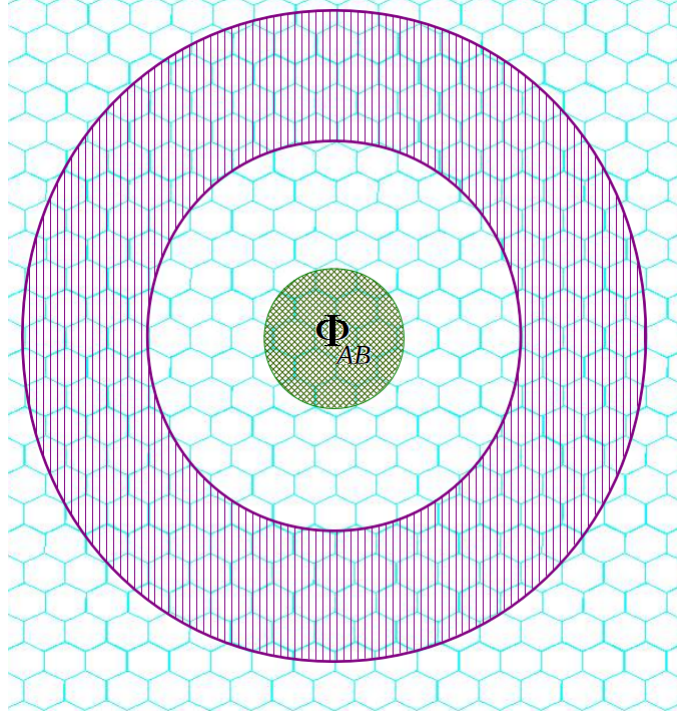


Figura 4.1: Anel na folha plana de grafeno com o fluxo *Aharonov-Bohm* passando pelo centro.

Para eliminar o spinor ϕ , basta substituir (4.5) em (4.4), de modo que vamos a equação diferencial parcial desacoplada:

$$\begin{aligned}
 E^2\psi = & -\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{\psi}{4r^2} - \frac{\sqrt{2a_1}}{r^2}\psi + \sqrt{2a_2}\psi + i\frac{\sigma^3}{r^2}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} + \frac{2a_1}{r^2}\psi \\
 & + 4\sqrt{a_1a_2}\psi - 2i\sigma^3\frac{\sqrt{2a_1}}{r}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} - 2\sigma^3\phi_{AB}\frac{\sqrt{2a_1}}{r^2}\psi + 2a_2r^2\psi \\
 & - 2i\sigma^3\sqrt{2a_2}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} - 2\phi_{AB}\sqrt{2a_2}\sigma^3\psi + \phi_{AB}\frac{\sigma^3}{r^2}\psi - \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} \\
 & + \left(\frac{\phi_{AB}}{r}\right)^2\psi + 2i\frac{\phi_{AB}}{r^2}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}.
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

Na equação (4.6) é possível verificar que ψ é autofunção de σ^3 , cujo os autovalores são $s = \pm 1$, de modo que escreveremos da forma $\sigma^3\psi_s = \pm\psi_s = s\psi_s$. Assim a solução para a mesma é escrita na forma:

$$\psi = e^{ij\varphi} \begin{pmatrix} R_+(r) \\ R_-(r) \end{pmatrix}, \tag{4.7}$$

onde $j = l + \frac{1}{2}$, com $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Substituindo (4.7) na equação (4.6), usando $\sigma^3\psi_s = \pm\psi_s = s\psi$, e considerando a propriedade das matrizes de Pauli $\sigma^i\sigma^i = \mathbb{I}$ assim

como a notação $R_s(r) = (R_+(r), R_-(r))$, vamos obter a seguinte equação radial:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{\vartheta_s^2}{r^2} - 2a_2 r^2 + \varepsilon_s \right] R_s(r) = 0, \quad (4.8)$$

onde definimos os parâmetros ϑ_s , ς_s e ε_s como :

$$\begin{aligned} \vartheta_s &= \varsigma_s + s\sqrt{2a_1}, \\ \varsigma_s &= l + \frac{1}{2}(1-s) - \phi_{AB}, \\ \varepsilon_s &= E^2 - 2s\sqrt{2a_2}\varsigma_s - 2\sqrt{2a_2} - 4\sqrt{a_1a_2}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Todavia, para resolver a equação (4.8), vamos fazer a transformação de variável $\varrho = \sqrt{2a_2}r^2$, de modo que obtemos:

$$\left[\varrho \frac{d^2}{d\varrho^2} + \frac{d}{d\varrho} - \frac{\vartheta_s^2}{4\varrho} - \frac{\varrho}{4} + \frac{\varepsilon_s}{4\sqrt{2a_2}} \right] R_s(\varrho) = 0. \quad (4.10)$$

A solução da equação acima deve ser regular na origem e finita em qualquer lugar, ou seja, $R_s \rightarrow 0$ quando $r \rightarrow \infty$ ($\varrho \rightarrow \infty$). A função que satisfaz a condição citada anteriormente, tem a forma:

$$R_s(\varrho) = e^{-\frac{\varrho}{2}} \varrho^{\frac{|\vartheta_s|}{2}} F_s(\varrho), \quad (4.11)$$

de modo que substituindo (4.11) em (4.10), chegaremos a seguinte equação:

$$\varrho \frac{d^2 F_s}{d\varrho^2} + [|\vartheta| + 1 - \varrho] \frac{dF_s}{d\varrho} + \left[\frac{\varepsilon_s}{4\sqrt{2a_2}} - \frac{|\vartheta_s|}{2} - \frac{1}{2} \right] F_s(\varrho) = 0, \quad (4.12)$$

a qual corresponde a equação da hipergeométrica confluyente[60](ver Apêndice A.1), que tem solução dada por:

$$F_s = {}_1F_1(a, b; z) = {}_1F_1 \left(\frac{|\vartheta_s|}{2} + \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon_s}{4\sqrt{2a_2}}, |\vartheta_s| + 1, \varrho \right). \quad (4.13)$$

Vamos impor a condição que a solução da hipergeométrica seja um polinômio de grau n , ou seja, $\frac{|\vartheta_s|}{2} + \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon_s}{4\sqrt{2a_2}} = -n$, e usando as definições dos parâmetros definidos (4.9), de modo que obtemos as auto-energias para as quase-partículas confinadas no anel quântico 2-D na folha do grafeno, sobre um fluxo *Aharonov-Bohm*, como[62]:

$$\begin{aligned} E_{n,l} &= \pm \left\{ 4\sqrt{2a_2} \left[n + \frac{|l + \frac{1}{2}(1-s) - \phi_{AB} + s\sqrt{2a_1}|}{2} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + s \frac{(l + \frac{1}{2}(1-s) - \phi_{AB})}{2} + 1 \right] + 4\sqrt{a_1a_2} \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Note que as auto-energias estão associadas ao comportamento da estrutura de bandas: $E > 0$ está associada com os elétrons e portando a banda de condução, sendo a solução que descrever a dinâmica de elétrons; $E < 0$ está associada com os buracos(lacunas) na banda de valência, portanto, a solução para dinâmica de buracos. Além disto, o espectro de energia depende dos parâmetros de controle a_1 e a_2 e dos números quânticos n e l , características do modelo de anel quântico analítico 2-D. Se fizermos $a_1 \rightarrow 0$ em (4.14), obtemos o espectro de uma quase-partícula confinada em um ponto quântico na folha de grafeno. Neste etapa do trabalho, obtemos também os spinores correspondentes as energias positivas. Para isto, usando a equação (4.11), reescrevermos (4.7), na seguinte forma:

$$\psi_s = e^{ij\varphi} R_s(\varrho) = A e^{i(l+1/2)\varphi} e^{-\sqrt{\frac{a_2}{2}}r^2} (2a_2)^{\frac{|\vartheta_s|}{4}} r^{|\vartheta_s|} \times {}_1F_1(-n, |\vartheta_s| + 1, \sqrt{2a_2}r^2), \quad (4.15)$$

onde A é a constante de normalização. Fazendo $N_s = A.e^{i(l+1/2)\varphi} e^{-\sqrt{\frac{a_2}{2}}r^2} (2a_2)^{\frac{|\vartheta_s|}{4}} r^{|\vartheta_s|}$, vamos substituir (4.15) na equação desacoplada (4.4), obtendo a solução do espinor ϕ como:

$$\begin{aligned} \phi = \frac{i}{E} N_s \left\{ \left[2\sqrt{2a_2}r - \frac{|\vartheta_s|}{r} - \frac{1}{2r} + \frac{\sqrt{2a_1}}{r} \right] \sigma^1 {}_1F_1(-n, |\vartheta_s| + 1, \sqrt{2a_2}r^2) \right\} \\ + \frac{i}{E} N_s \left\{ \frac{2n\sqrt{2a_2}r}{|\vartheta_s|+1} \sigma^1 {}_1F_1(-n+1, |\vartheta_s| + 2, \sqrt{2a_2}r^2) \right\} \\ + \frac{1}{E} N_s \left\{ \left[\frac{1}{r} \left(l + \frac{1}{2} - \phi_{AB} \right) \right] \sigma^2 {}_1F_1(-n, |\vartheta_s| + 1, \sqrt{2a_2}r^2) \right\}, \end{aligned} \quad (4.16)$$

com N_s a função que contém a constante de normalização. Neste contexto, os biespinores podem ser representados como:

$$\psi(r) = \begin{pmatrix} \psi_+(r) \\ \psi_-(r) \end{pmatrix}. \quad (4.17)$$

Das equações (4.3), (4.16) e (4.17), é possível escrever as soluções de energia positiva para a equação de Dirac, e suas respectivas componentes paralelas e anti-paralelas ao longo da direção z , como [62]:(ver apêndice secção A.4 e sub-secção A.4.1)

$$\begin{aligned}
\Psi_+ = & f_{+ -1} F_1 \left(-n, |\vartheta_+| + 1, \sqrt{2a_2} r^2 \right) \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{i}{E} \left[2\sqrt{2a_2} r + \frac{(\varsigma_+ - |\vartheta_+| + \sqrt{2a_1})}{r} \right] \end{pmatrix} \\
& + \frac{if_+}{E} \left(\frac{2n\sqrt{2a_2} r}{|\vartheta_+| + 1} \right) {}_1F_1 \left(-n + 1, |\vartheta_+| + 2, \sqrt{2a_2} r^2 \right) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.18)
\end{aligned}$$

para $s = +1$ e $\psi_-(r) = 0$, e por analogia,

$$\begin{aligned}
\Psi_- = & f_{- -1} F_1 \left(-n, |\vartheta_-| + 1, \sqrt{2a_2} r^2 \right) \times \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{i}{E} \left[2\sqrt{2a_2} r - \frac{(\varsigma_- + |\vartheta_-| - \sqrt{2a_1})}{r} \right] \\ 0 \end{pmatrix} \\
& + \frac{if_-}{E} \left(\frac{2n\sqrt{2a_2} r}{|\vartheta_-| + 1} \right) {}_1F_1 \left(-n + 1, |\vartheta_-| + 2, \sqrt{2a_2} r^2 \right) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.19)
\end{aligned}$$

para $s = -1$ e $\psi_+(r) = 0$, onde o fator r e f_s nas equações (4.18) and (4.19), são escritos da forma

$$f_s = \left(\frac{\sqrt{8a_2} \Gamma(|\vartheta_s| + n + 1)}{\Gamma(n + 1) [\Gamma(|\vartheta_s| + 1)]^2} \right)^{1/2} \times e^{-iEt} e^{i(l+1/2)\varphi} e^{-\sqrt{\frac{a_2}{2}} r^2} (2a_2)^{\frac{|\vartheta_s|}{4}} r^{|\vartheta_s|}, \quad (4.20)$$

com $\Gamma(n)$ a função gamma de Euler. Estas soluções correspondem ao caso $E > 0$ para equação de Dirac sem massa para a quase-partícula confinada em um anel quântico na folha de grafeno.

4.2.1 Correntes Persistentes em Anéis Quânticos no Grafeno Plano

Nesta subseção, usaremos a relação Byers-Yang [52], dada pela equação (3.7) escrita na foma:

$$I = - \sum_{n,l} \frac{\partial E_{n,l}}{\partial \phi_{AB}},$$

cuja a soma é sobre os números quânticos n e l , dos quais os auto-valores de energia obtidos em (4.14) dependem. Assim, a equação para a corrente persistente é obtida diferenciando a expressão de energia em relação ao fluxo magnético, ou seja [62]:

$$I = \frac{|q|}{2\pi} \sum_{n,l} \sqrt{2a_2} \left(\frac{\pm \vartheta_s}{|\vartheta_s|} + 1 \right) \times \left\{ 4\sqrt{2a_2} \left[n + \frac{|\vartheta_s|}{2} + s \frac{\varsigma_s}{2} + 1 \right] + 4\sqrt{a_1 a_2} \right\}^{-1/2}, \quad (4.21)$$

na qual usamos os parâmetros definidos em (4.19). Além disto, a corrente persistente (4.21) depende dos parâmetros de controle a_1 e a_2 e dos números quânticos n e l . Esta corrente é uma função periódica do fluxo *Aharonov-Bohm* Φ_{AB} . Aqui só consideramos as correntes para os elétrons, ou seja, $E > 0$, sendo o cálculo o mesmo quando consideramos $E < 0$, ou seja, condução por buracos.

4.3 Anéis Quânticos no Grafeno com Desclinação

Para o grafeno deformado pelo defeito topológico de desclinação, submetido a um fluxo magnético passando pelo centro do anel, temos que considerar a equação de Dirac na presença do defeito (2.25) mais a contribuição do potencial vetor:

$$\gamma^\mu \left(i\partial_\mu - i\Gamma_\mu - |q|A_\mu - \frac{a_\mu}{r} \right) \psi = 0. \quad (4.22)$$

Anteriormente, vimos que Γ_μ é a conexão spinorial, que está relacionada com o espaço curvo gerado pela presença do defeito, assim como o campo a_μ responsável pela correção da descontinuidade da função de onda entre átomos da mesma sub-rede, consequência da formação da desclinação (ver Figura 4.2). Levando em consideração a única componente não nula da conexão spinorial obtida Γ_φ na equação (2.32), a componente de campo não nula a_φ e o potencial vetor responsável pelo fluxo magnético $\vec{A} = \frac{\Phi}{2\pi r} \hat{e}_\varphi$, podemos reescrever a equação (4.22), introduzindo o acoplamento similar ao oscilador Dirac não massivo (4.1), como:

$$\left[i\gamma^t \partial_t + i\gamma^r \left(\partial_r + \left[\frac{\sqrt{2a_1}}{r} + \sqrt{2a_2}r \right] + \frac{(\alpha - 1)}{2\alpha r} \right) + \gamma^\varphi \left(i \frac{\partial_\varphi}{\alpha r} + \frac{\phi_{AB}}{r} - \frac{a_\varphi}{r} \right) \right] \Psi = 0, \quad (4.23)$$

onde $\phi_{AB} = \Phi_{AB}/\Phi_0$ e $\Phi_0 = \frac{2\pi}{|q|}$ é o fluxo *Aharonov-Bohm* através do furo central do anel submetido a desclinação.

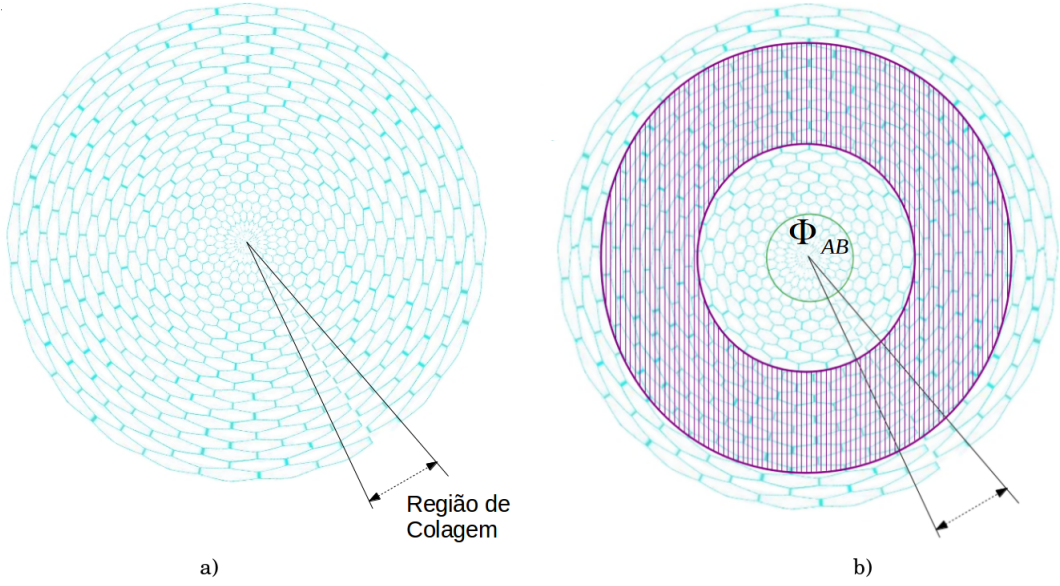


Figura 4.2: Representação: Anel quântico no grafeno submetido a desclinação: a) Perspectiva desclinação positiva ; b) Região do anel (violeta), região do fluxo Φ_{AB} no círculo verde.

Para obtermos a função de onda que satisfaça a equação (4.23), vamos adotar o mesmo procedimento empregado por Villalba na referência[63], que consiste em aplicar uma transformação $S(\varphi) = \exp \left[-\frac{i\varphi}{2} \sigma^3 \right]$ para mudar a representação das matrizes de Dirac. Onde estiver escrito γ^r e γ^φ será feito a transformação de similaridade $S^{-1}(\varphi)\gamma^r S(\varphi) = \gamma^1$ e $S^{-1}(\varphi)\gamma^\varphi S(\varphi) = \gamma^2$ de modo que são mudadas para γ^1 e γ^2 , enquanto o biespinor também sofre a transformação aplicada $\Psi \longrightarrow S(\varphi)\Psi'$. Neste tipo transformação, a equação de Dirac (4.23) passa para uma nova forma, onde a conexão spinorial é desconsiderada. Assim, dentro do contexto desta transformação, o novo *ansatz* para a solução da equação de Dirac é dado por:

$$\Psi' = e^{-iEt - i\frac{\varphi}{2}\sigma^3} \begin{pmatrix} \psi \\ \phi \end{pmatrix}, \quad (4.24)$$

com E representando a auto energia para o grafeno na presença da desclinação. Pela transformação de similaridade e *ansatz* (4.24), obtemos as seguintes equações desacopladas:

$$E\psi = -i\sigma^1 \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r} + \frac{\sqrt{2a_1}}{r} + \sqrt{2a_2}r \right] \phi - i\sigma^2 \left[\frac{1}{\alpha r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{ia_\varphi}{r} - \frac{i}{r} \phi_{AB} \right] \phi \quad (4.25)$$

e

$$E\phi = -i\sigma^1 \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r} - \frac{\sqrt{2a_1}}{r} - \sqrt{2a_2}r \right] \psi - i\sigma^2 \left[\frac{1}{\alpha r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{ia_\varphi}{r} - \frac{i}{r} \phi_{AB} \right] \psi. \quad (4.26)$$

Para eliminarmos ϕ , vamos substituir (4.26) em (4.25), de modo que obtemos a seguinte equação desacoplada:

$$\begin{aligned} E^2\psi &= -\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{\psi}{4r^2} - \frac{\sqrt{2a_1}}{r^2}\psi + \sqrt{2a_2}\psi + \frac{i\sigma^3}{\alpha r^2} \frac{\partial\psi}{\partial \varphi} + \frac{2a_1\psi}{r^2} + \frac{\phi_{AB}}{r^2} \sigma^3 \psi \\ &\quad + 4\sqrt{a_1 a_2} \psi - \frac{2i\sqrt{2a_1}}{\alpha r^2} \sigma^3 \frac{\partial\psi}{\partial \varphi} - \frac{2i\Omega_\varphi}{\alpha r^2} \frac{\partial\psi}{\partial \varphi} - \frac{2\sqrt{2a_1}\phi_{AB}}{r^2} \sigma^3 \psi + 2a_2 r^2 \psi \\ &\quad + \frac{2\sqrt{2a_1}a_\varphi}{r^2} \sigma^3 \psi + 2\sqrt{2a_2}a_\varphi \sigma^3 \psi - \frac{2i\sqrt{2a_2}}{\alpha} \sigma^3 \frac{\partial\psi}{\partial \varphi} - 2\sqrt{2a_2}\phi_{AB} \sigma^3 \psi \\ &\quad - \frac{2\phi_{AB} a_\varphi}{r^2} \psi - \frac{1}{\alpha^2 r^2} \frac{\partial^2\psi}{\partial \varphi^2} - \frac{a_\varphi}{r^2} \sigma^3 \psi + \frac{\phi_{AB}^2}{r^2} \psi + \frac{2i\phi_{AB}}{\alpha r^2} \frac{\partial\psi}{\partial \varphi} + \frac{a_\varphi^2}{r^2} \psi. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Para resolver a equação (4.27), vamos tomar o espinor ψ novamente como *ansatz* (4.7), de maneira que obtemos a equação radial R_s como:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{\delta_s^2}{\alpha^2 r^2} - 2a_2 r^2 + \epsilon_s \right] R_s(r) = 0, \quad (4.28)$$

onde, novamente $j = l + \frac{1}{2}$, com $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ e parâmetros δ_s , κ_s e ϵ_s definidos como:

$$\begin{aligned} \delta_s &= \kappa_s + \alpha s \sqrt{2a_1}, \\ \kappa_s &= \left(l + \frac{1}{2} \right) - \alpha \frac{\Phi}{\Phi_0} + \alpha a_\varphi - \alpha \frac{s}{2}, \\ \epsilon_s &= E^2 - \frac{2s\sqrt{2a_2}}{\alpha} \kappa_s - 2\sqrt{2a_2} - 4\sqrt{a_1 a_2}. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Para resolver a equação (4.28), vamos fazer a mudança de variável $\xi = \sqrt{2a_2}r^2$, de modo que obtemos:

$$\left[\xi \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{d}{d\xi} - \frac{\delta_s^2}{4\alpha^2\xi} - \frac{\xi}{4} + \frac{\epsilon_s}{4\sqrt{2a_2}} \right] R_s(\xi) = 0. \quad (4.30)$$

Fazendo novamente a análise assintótica, no limite que $R_s \rightarrow 0$ e $r \rightarrow \infty$, a solução radial é do tipo:

$$R_s(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|\delta_s|}{2\alpha}} F_s(\xi), \quad (4.31)$$

de modo que substituindo (4.31) em (4.30), obtemos a equação para F_s :

$$\xi \frac{d^2 F_s}{d\xi^2} + \left[\frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1 - \xi \right] \frac{dF_s}{d\xi} + \left[\frac{\epsilon_s}{4\sqrt{2a_2}} - \frac{|\delta_s|}{2\alpha} - \frac{1}{2} \right] F_s(\xi) = 0, \quad (4.32)$$

cujas solução é a equação hipergeométrica confluyente:

$$F_s = {}_1F_1(a, b; z) = {}_1F_1 \left(\frac{|\delta_s|}{2\alpha} + \frac{1}{2} - \frac{\epsilon_s}{4\sqrt{2a_2}}, \frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1, \xi \right). \quad (4.33)$$

A partir deste ponto, vamos considerar o mesmo procedimento adotado para os cálculos envolvendo a equação da hipergeométrica confluyente na folha de grafeno plano, ou seja, impor a condição de convergência para série hipergeométrica:

$$\frac{|\delta_s|}{2\alpha} + \frac{1}{2} - \frac{\epsilon_s}{4\sqrt{2a_2}} = -n. \quad (4.34)$$

Assim substituindo os parâmetros(4.29) na equação (4.34), obtemos os autovalores de energia para a quase-partícula confinada no anel quântico na folha de grafeno com desclinação [62]:

$$E_{n,l} = \pm \left\{ 4\sqrt{2a_2} \left[n + \frac{|(l + \frac{1}{2}) - \alpha\phi_{AB} + \alpha a_\varphi - \alpha \frac{s}{2} + \alpha s\sqrt{2a_1}|}{2\alpha} + s \frac{((l + \frac{1}{2}) - \alpha\phi_{AB} + \alpha a_\varphi - \alpha \frac{s}{2})}{2\alpha} + 1 \right] + 4\sqrt{a_1 a_2} \right\}^{1/2}, \quad (4.35)$$

onde $s = \pm 1$ está relacionado com as sub-rede A e B , e os autovalores $E > 0$ representa elétrons e $E < 0$ representam buracos. Note que no espectro de energia existem as dependências dos números quânticos n e l , dos parâmetros a_1 e a_2 e a contribuição do campo não-abeliano devido à presença da desclinação na rede do grafeno. Além disto, observa-se também a presença do parâmetro α , caracterizando a presença do defeito topológico na rede. No limite que $\alpha \rightarrow 1$, recuperamos os resultados da secção anterior, ou seja, o espectro de energia para um anel quântico na folha plana de grafeno. Se considerarmos o

limite de pontos quânticos $a_1 \rightarrow 0$, obtemos os resultados obtidos na referência [42] que é um ponto quântico na presença de defeito topológico. No limite $a_2 \rightarrow 0$ obtemos o caso de quase-partícula livre devido a natureza do anti-ponto na presença da desclinação na folha de grafeno.

De maneira semelhante ao caso da folha de grafeno plano, obtemos também as componentes spinoriais paralela e antiparalela, para a condução por elétrons, ou seja energia positiva $E > 0$, dado por [62]:

$$\begin{aligned} \Psi_+ = & f_+ {}_1F_1 \left(-n, \frac{|\delta_+|}{\alpha} + 1, \sqrt{2a_2}r^2 \right) \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{i}{E} \left[2\sqrt{2a_2}r + \frac{(\kappa_+ - |\delta_+| + \alpha\sqrt{2a_1})}{\alpha r} \right] \end{pmatrix} \\ & + \frac{if_+}{E} \left(\frac{2n\sqrt{2a_2}r}{\frac{|\delta_+|}{\alpha} + 1} \right) {}_1F_1 \left(-n + 1, \frac{|\delta_+|}{\alpha} + 2, \sqrt{2a_2}r^2 \right) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.36)$$

para $s = +1$ e $\psi_-(r) = 0$, e analogamente,

$$\begin{aligned} \Psi_- = & f_- {}_1F_1 \left(-n, \frac{|\delta_-|}{\alpha} + 1, \sqrt{2a_2}r^2 \right) \times \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{i}{E} \left[2\sqrt{2a_2}r - \frac{(\kappa_- + |\delta_-| - \alpha\sqrt{2a_1})}{\alpha r} \right] \\ 0 \end{pmatrix} \\ & + \frac{if_-}{E} \left(\frac{2n\sqrt{2a_2}r}{\frac{|\delta_-|}{\alpha} + 1} \right) {}_1F_1 \left(-n + 1, \frac{|\delta_-|}{\alpha} + 2, \sqrt{2a_2}r^2 \right) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.37)$$

para $s = -1$ e $\psi_+(r) = 0$. O fator $f_s = N_s e^{-iEt}$ é escrito como:

$$f_s = \left(\frac{\sqrt{8a_2}\Gamma\left(\frac{|\delta_s|}{\alpha} + n + 1\right)}{\Gamma(n+1)\left[\Gamma\left(\frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1\right)\right]^2} \right)^{1/2} \times e^{-iEt} e^{i(l+1/2)\varphi} e^{-\sqrt{\frac{a_2}{2}}r^2} (2a_2)^{\frac{|\delta_s|}{4\alpha}} r^{\frac{|\delta_s|}{\alpha}}. \quad (4.38)$$

Note que se $\alpha = 1$, a contribuição do campo de gauge não-abeliano a_φ vai a zero por consequência direta os parâmetros δ_s , κ_s , ϵ_s reduzem aos parâmetros ϑ_s , ς_s , ε_s respec-

tivamente. Em outras palavras, nós recuperamos o caso da folha plana de grafeno sem defeito.

4.3.1 Corrente Persistente na Presença da Desclinação

Assim como no caso da folha plana de grafeno, obtemos também a corrente persistente para um anel quântico na folha de grafeno com um defeito topológico. Usando novamente a equação de Byers-Young (3.7), diferenciando a equação de autovalores (4.35), obtemos a corrente persistente no anel quântico submetido a desclinação [62]:

$$I = \frac{|q|}{2\pi} \sum_{n,l} \sqrt{2a_2} \left(\frac{\pm\delta_s}{|\delta_s|} + 1 \right) \times \left\{ 4\sqrt{2a_2} \left[n + \frac{|\delta_s|}{2\alpha} + s \frac{\kappa_s}{2\alpha} + 1 \right] + 4\sqrt{a_1 a_2} \right\}^{-1/2}. \quad (4.39)$$

Nesta forma, a corrente persistente é uma função dos parâmetros de controle a_1 e a_2 e dos números quânticos n e l . Outro fator relevante neste resultado, é que observamos o surgimento do termo de correção a_φ . Neste caminho, a corrente persistente é uma função do parâmetro que caracteriza a geometria curvada introduzida pelo defeito topológico. A equação (4.39) é uma função dos fluxos magnético não-abeliano e *Aharonov-Bohm*, ambos presentes no parâmetro κ_s . Neste cenário, a corrente também é uma função oscilante do fluxo de *Aharonov-Bohm* pelo quantum de fluxo magnético Φ_0 , onde a oscilação desaparece para os grandes valores do fluxo. Estes fluxos citados são responsáveis diretos pelo surgimento da corrente persistente no grafeno com desclinação. Note que no limite $a_1 \rightarrow 0$ na Eq. (4.39) obtemos a corrente persistente para um ponto quântico na presença de uma desclinação [42] dada por:

$$I = \frac{|q|}{2\pi} \sum_{n,l} \sqrt{2a_2} \left(\frac{\pm\delta_s}{|\delta_s|} + 1 \right) \times \left\{ 4\sqrt{2a_2} \left[n + \frac{|\delta_s|}{2\alpha} + s \frac{\kappa_s}{2\alpha} + 1 \right] \right\}^{-1/2}. \quad (4.40)$$

No limite $\alpha \rightarrow 1$ na equação (4.39), recuperamos a equação da corrente persistente de um anel quântico numa folha de grafeno plana, problema anteriormente abordado. Aqui consideramos a corrente persistente para elétrons $E > 0$, sendo que, para o caso de buracos, $E < 0$, o cálculo é similar.

4.4 Análise Gráfica dos Resultados

Na sequência, fizemos algumas simulações gráficas dos resultados apresentados: espectro de energia e correntes persistentes para o anel quântico 2-D, tanto para o caso plano, como para o caso com desclinação, ou seja com defeito. Segue abaixo :

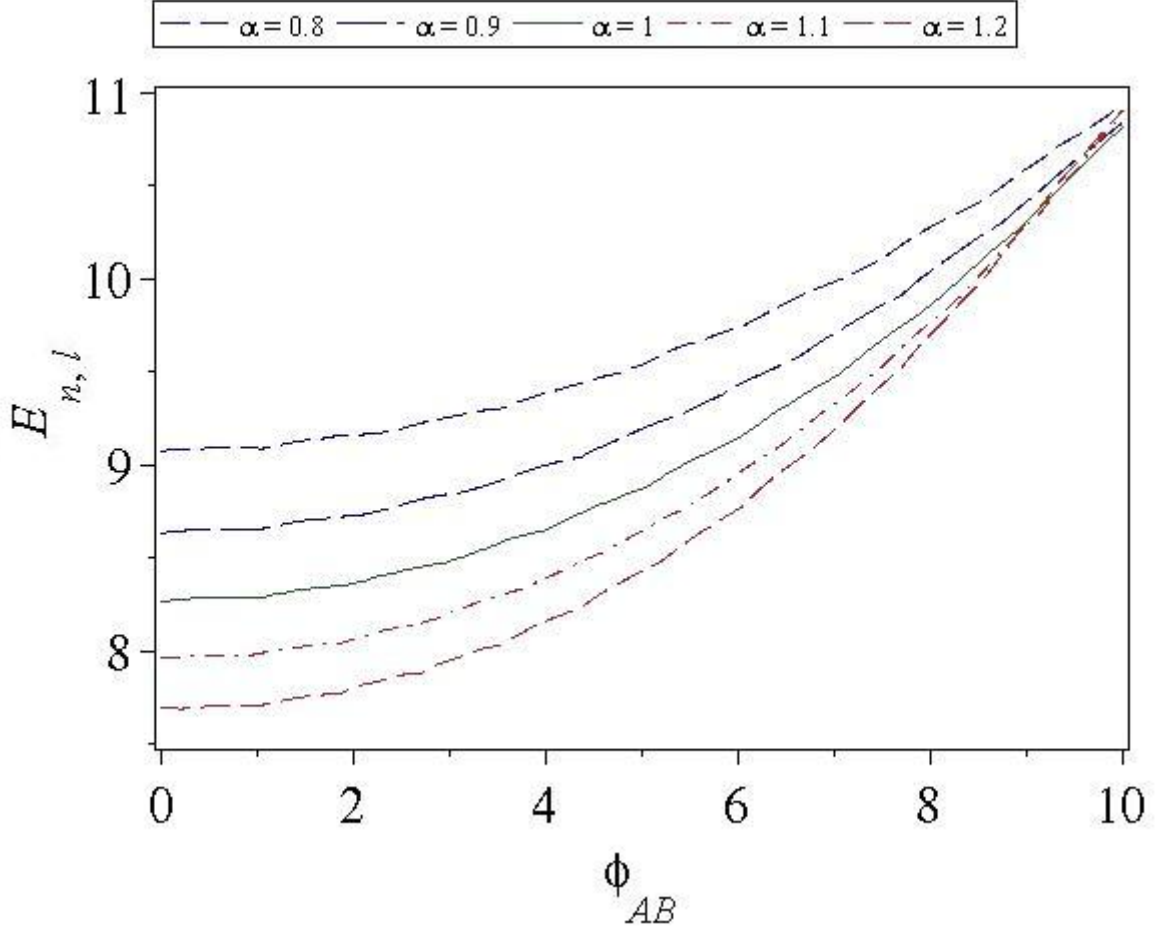


Figura 4.3: Gráfico da energia como função do fluxo *Aharonov-Bohm* $\phi_{AB} = \Phi/\Phi_0$, para o parâmetro que assinala a desclinação, α , considerando o estado fundamental $0 \leq n \leq 5$. Adotamos a carga elementar sendo $q = e = \sqrt{\alpha_e} = 0,08542454312$, onde $\alpha_e = \frac{1}{137,03599911}$ é a constante de estrutura fina, $a_\varphi = \frac{3}{2}(\alpha - 1)$, $-10 \leq l \leq +10$, $s = 1$ and $a_1 = 9,0122 \cdot 10^{-6} eV.m^2$ and $a_2 = 2,222 \cdot 10^{-5} eV.m^{-2}$ são os parâmetros de Tan-Inkson[11].

A figura 4.3 mostra o comportamento energético considerando a atuação do defeito na rede do grafeno, ou seja, os valores de α : Se $0 < \alpha < 1$, temos a desclinação positiva; se $\alpha = 1$ corresponde ao anel sem defeito topológico, isto é, o grafeno plano; Se $\alpha > 1$, temos o caso da desclinação negativa. Também verificamos o comportamento parabólico,

do espectro em função do fluxo, o que é observado nos estudos em anéis[51]. Se aumentarmos o número quântico n , isto é, sair do estado fundamental de energia, e ir para o próximo estado excitado, é observado uma translação nas parábolas para cada α , isto é, um aumento da energia. Também fizemos uma análise do espectro de energia pelo número quântico n fixando o fluxo ϕ_{AB} :

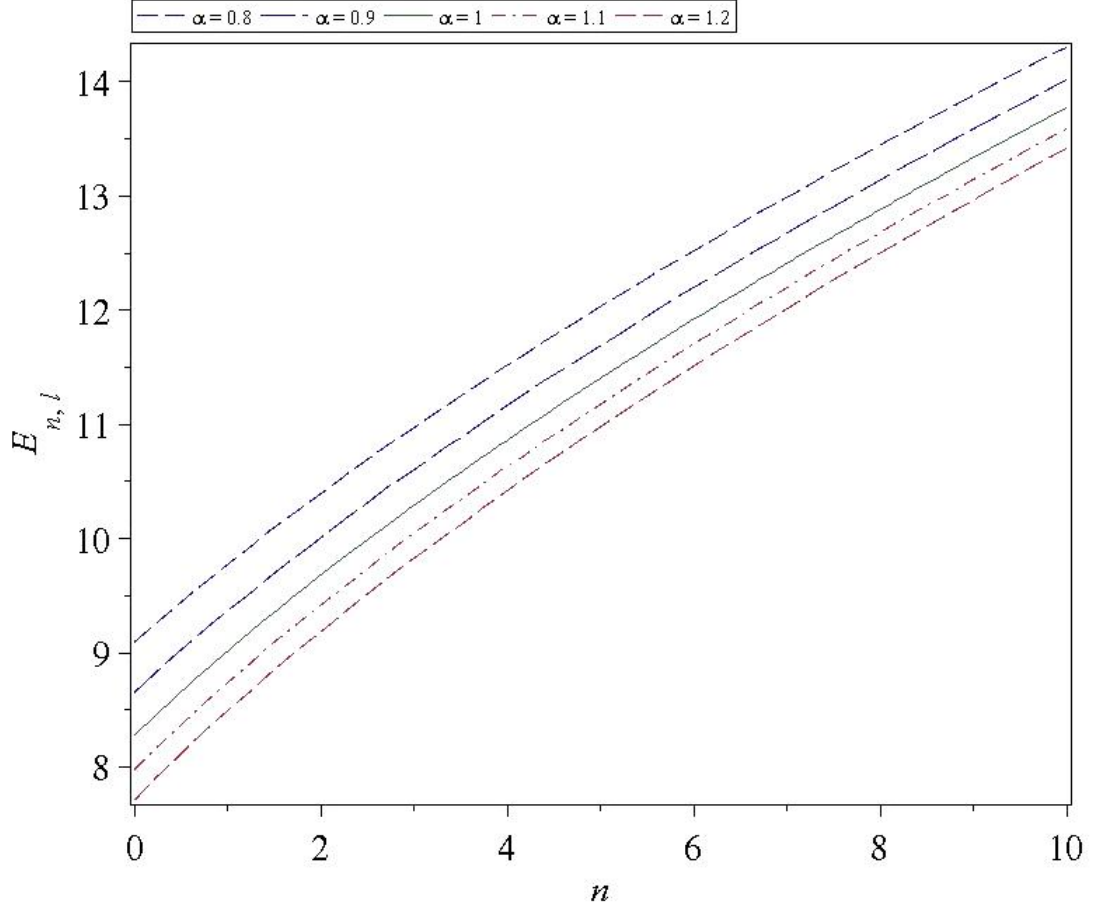


Figura 4.4: Gráfico da energia em função do número quântico n , com fluxo fixo $\phi_{AB} = 1$, para o parâmetro que assinala a desclinação, α . Adotamos a carga elementar sendo $q = e = \sqrt{\alpha_e} = 0,08542454312$, onde $\alpha_e = \frac{1}{137,03599911}$ é a constante de estrutura fina, $a_\varphi = \frac{3}{2}(\alpha - 1)$, $-10 \leq l \leq +10$, $s = 1$ and $a_1 = 9,0122 \cdot 10^{-6} \text{eV} \cdot \text{m}^2$ and $a_2 = 2,222 \cdot 10^{-5} \text{eV} \cdot \text{m}^{-2}$ são os parâmetros de Tan-Inkson[11].

Neste caso, a figura 4.4 mostra também o comportamento parabólico, com relação as energias positivas $E > 0$, que crescem com o aumento de n . Podemos ver também a influência topológica no sistema: para os valores de desclinação positiva ($\alpha = 0.8$, $\alpha = 0.9$) o espectro de energia apresenta maiores valores; na ausência de defeito ($\alpha = 1$) temos o

equivalente a energia do grafeno plano ; na desclinação negativa ($\alpha = 1.1, \alpha = 1.2$) temos os menores valores energéticos do sistema.

As correntes persistentes, por fim, tiveram sua análise na mesma perspectiva anterior, ou seja, vendo seu comportamento tanto para o anel na folha de grafeno plano como na folha de grafeno com defeito. Neste caso, a análise foi feita em termo do fluxo *Aharonov-Bohm* de modo que obtemos:

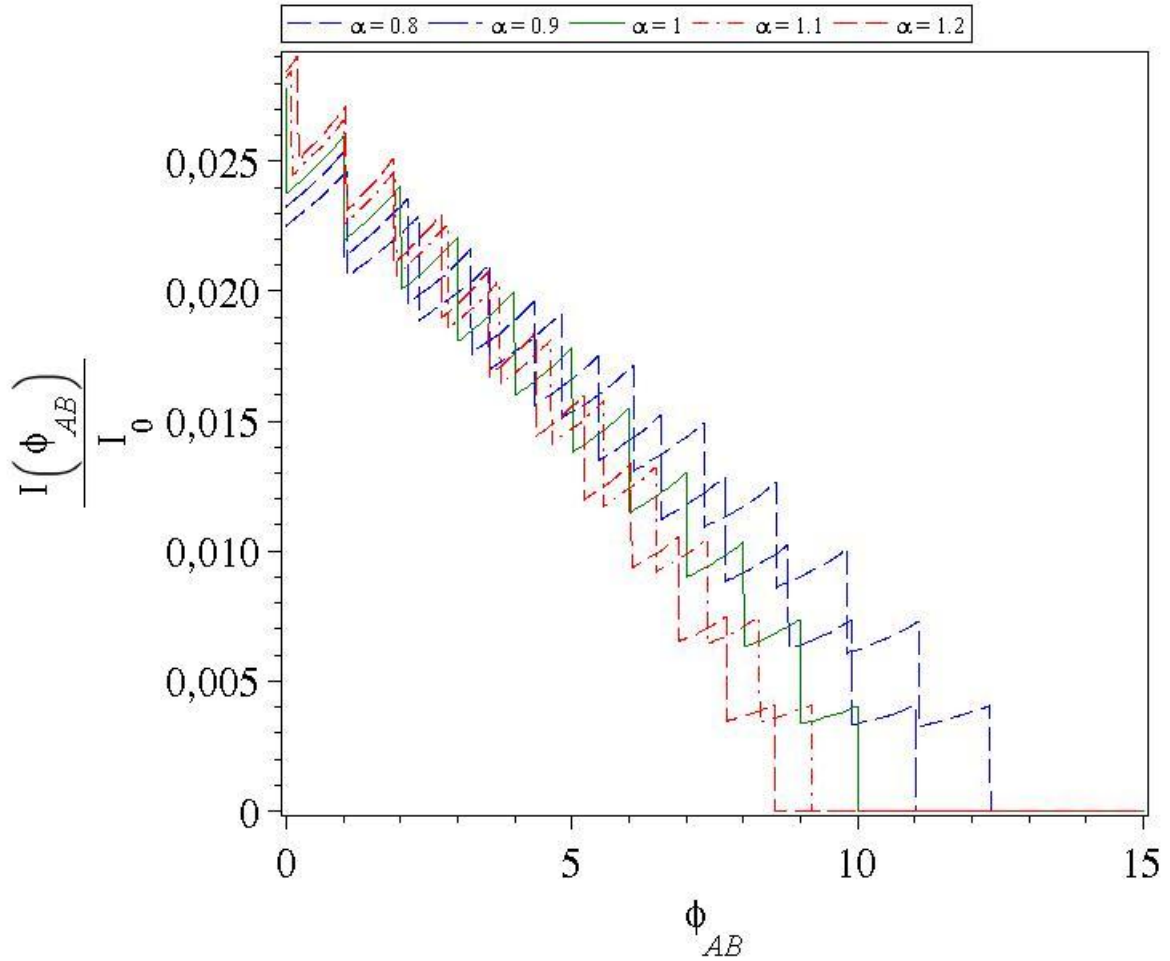


Figura 4.5: Gráfico da razão de corrente I/I_0 pelo fluxo ϕ_{AB} , para o parâmetro que assinala a desclinação, α . Adotamos a corrente $I_0 = e \frac{\sqrt{2a_2}}{2\pi}$, $a_\varphi = \frac{3}{2}(\alpha - 1)$, $-10 \leq l \leq +10$, $0 \leq n \leq 5$, $s = 1$ and $a_1 = 9,0122 \cdot 10^{-6} eV.m^2$ and $a_2 = 2,222 \cdot 10^{-5} eV.m^{-2}$ são os parâmetros de Tan-Inkson[11].

Na figura 4.5, percebemos o comportamento periódico da corrente persistente em termo do fluxo *Aharonov -Bohm* ϕ_{AB} . Ademais, temos a influência da presença ou não da desclinação, caracterizada pelo parâmetro α .

Portanto, a nossa contribuição, neste trabalho, mostrou que o confinamento anelar via oscilado de Dirac é um modelo com potencial de aplicabilidade nos estudos associados a confinamentos de quase-partículas no grafeno.

Obtivemos o espectro de energia de um anel quântico na presença do fluxo ϕ_{AB} e verificamos que a corrente persistente no grafeno é uma função periódica para o mesmo. Constatamos também a influência do defeito topológico que altera a estrutura eletrônica no limite de baixa energias no grafeno, sendo necessário a introdução do campo não abeliano a_μ , como uma correção da descontinuidade dos spinors que representam as sub-redes do mesmo material. Vimos que no caso com defeito o parâmetro α caracteriza a mudança geométrica da monocama do grafeno, consequência da desclinação e que os parâmetros a_1 e a_2 caracterizam o tipo de potencial de confinamento. Também constatamos que as correntes persistentes apresentam dependências dos parâmetros citados, anteriormente para energia, e sua periodicidade em relação aos fluxos *Aharonov-Bohm*, no caso plano, e ao fluxo não abeliano para o caso do grafeno na presença do defeito topológico. Conclui-se que o impacto do potencial de confinamento e da geometria introduzida por defeitos topológicos para as propriedades eletrônicas do grafeno é crucial para a realização de futuras investigações em computação quântica nesses sistemas [9, 64] .

Capítulo 5

Anel Quântico na Folha de Grafeno Massivo com Desclinação na Presença de um Campo Magnético Uniforme

Neste capítulo será mostrado o comportamento para um confinamento anelar quântico no grafeno massivo, com defeito topológico do tipo desclinação, submetido a um fluxo *Aharonov-Bohm* através de seu centro, adicionado a um campo magnético uniforme na direção z . Nesta via, será mostrado os autovalores de energia do anel, a corrente persistente associada e a nova grandeza que surge como consequência da adição do campo magnético: a magnetização. A proposta deste trabalho surgiu como uma continuação natural ao sistema apresentado no capítulo anterior.

5.1 Anel Quântico em Grafeno Massivo

Anteriormente falamos a respeito das propriedades eletrônicas do grafeno, sua estrutura de rede cristalina, e falamos também da sua estrutura de bandas. Quanto a estrutura de bandas, vimos que, próximo aos pontos de Fermi K e K' , onde as bandas se tocam, a relação de dispersão de energia é linear, de modo que a quase-partícula se comporta como um Férmion sem massa, ou seja, garantindo uma descrição via Equação de Dirac para uma partícula relativística de spin $1/2$.

Contudo este comportamento de massa nula ocorre devido a simetria da rede [65], em particular, devido a repetição da célula unitária com dois átomos idênticos das sub-redes A e B ¹. Por causa disto, há dois estados energéticos, nos quais o elétron pode ser encontrado, onde a característica de massa nula ocorre.

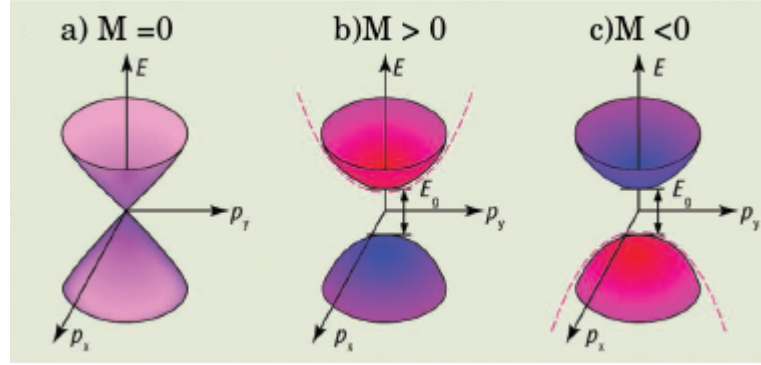


Figura 5.1: Relação entre a massa e o *gap* entre as bandas de valência e condução: a) Condição de bandas com *gap* nulo e comportamento de massa efetiva nula; b) Separação do *gap*, quando a energia do átomo da sub-rede A é relativamente maior do que o átomo da sub-rede B, sendo $M > 0$ relacionado com a curvatura positiva da banda superior; c) Separação do *gap* quando a energia do átomo da sub-rede B é maior do que o da sub-rede A, com $M < 0$ relacionado com curvatura negativa da banda inferior. Retirado da referência[65].

Sendo mais específico, na figura 5.1, a condição de massa nula está diretamente relacionada com o tamanho do *gap*² do grafeno: se o *gap* for nulo entre as bandas, caracteriza-se a condição de massa nula; se a separação do *gap* for não nula, a massa efetiva do sistema, assumirá valores não nulos. Desta maneira, o surgimento do grafeno massivo está relacionado ao controle do *gap* deste material. Uma maneira de fazer a modulação do *gap* no grafeno é através da inserção de impureza na rede [66, 67]. É neste cenário que vamos dar continuidade ao nosso trabalho proposto no capítulo anterior. Vamos introduzir o modelo de confinamento anelar relativístico de Tan-Ikson, proposta por Bakke e Furtado, dado pela equação (3.20) que é um tipo de oscilador de Dirac massivo³, proposto na referência [10]:

¹Mudança da fonte para não haver confusão na notação.

²Espaçamento entre as bandas de valência e condução em semi-condutores.

³Aqui novamente tomamos a liberdade de nomear o acoplamento como massivo para diferenciar do problema anterior.

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} + i \left[\frac{\sqrt{2Ma_1}}{r} + \sqrt{2Ma_2r} \right] \gamma^0 \hat{r},$$

objetivando estudar o comportamento das quase-partículas confinadas no anel 2-D submetido a desclinação na rede com um fluxo Aharonov-Bohm através de seu centro mais a adição de um campo magnético uniforme na direção z .

5.2 Confinamento no Grafeno Massivo com Desclinação na Presença do Campo Magnético

5.2.1 A equação de Dirac no Grafeno Massivo

Considerando a folha de grafeno, na qual existe uma separação do *gap* suficiente para manifestar o surgimento da massa efetiva M , submetida a uma desclinação descrita pela métrica (2.20), a equação de Dirac, na qual desejamos acoplar um potencial vetor A_μ é descrita neste contexto como:

$$\left(i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - i\gamma^\mu \Gamma_\mu - \gamma^\mu e A_\mu - \gamma^\mu \frac{a_\mu}{r} \right) \Psi = M\Psi \quad (5.1)$$

na qual foi feito o acoplamento mínimo $i\partial_\mu \rightarrow i\partial_\mu - eA_\mu$. Temos as matrizes de Dirac γ^μ definidas no espaço curvo. O termo Γ_μ é a conexão spinorial presente no sistema devido à curvatura natural da geometria da rede cristalina submetida a desclinação no meio elástico e contínuo. O termo Γ_μ , como vimos anteriormente é responsável pelo holonomia não trivial que surge no sistema devido o transporte paralelo do spinor na desclinação, dada pela métrica (2.20), como também é responsável pelas fase geométrica que surge nas sub-redes do grafeno A e B [38]. Temos novamente o termo a_μ , o campo de gauge não abeliano, responsável pela correção da descontinuidade da função de onda quando ocorre este tipo de defeito.⁴ O novo potencial vetor A_μ , o qual representa a inclusão do fluxo *Aharonov-Bohm* furando o centro do anel quântico será da forma:

$$\vec{A} = \left[\frac{\Phi_{AB}}{2\pi r} + \frac{Br}{2\alpha} \right] \hat{e}_\varphi. \quad (5.2)$$

⁴Lembrando que no Capítulo 4, na presença da desclinação, ocorre a ligação de átomos de uma mesma sub-rede.

Nesto novo potencial estamos considerando o fluxo Φ_{AB} adicionado com componente do campo magnético no espaço cônico, definido em [68], $A(r) = \frac{Br}{2\alpha} \hat{e}_\varphi$, onde o fator α indica a presença do defeito na folha do grafeno. Para este tipo de defeito, como foi visto no capítulo 2, a única componente de conexão spinorial não nula foi obtida (2.32) como:

$$\Gamma_\varphi = -\frac{i}{2}(\alpha - 1)\sigma^3.$$

Assim considerando a conexão espinorial (2.32) e o potencial vetor (5.2), obtemos a equação de Dirac na forma:

$$\begin{aligned} & \left[i\gamma^t \frac{\partial}{\partial t} + i\gamma^r \left(\frac{\partial}{\partial r} - \left[\frac{\sqrt{2Ma_1}}{r} - \sqrt{2Ma_2r} \right] \gamma^0 + \frac{(\alpha - 1)}{2\alpha r} \right) \right] \Psi \\ & + \left[i\gamma^\varphi \left(\frac{1}{\alpha r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + i\frac{\phi_{AB}}{r} + i\frac{eBr}{2\alpha} + i\frac{a_\varphi}{r} \right) \right] \Psi = M\Psi, \end{aligned} \quad (5.3)$$

onde novamente temos $\phi_{AB} = \frac{\Phi_{AB}}{\Phi_0}$ e $\Phi_0 = \frac{2\pi}{e}$ o quantum de fluxo magnético. Mais uma vez adotamos a transformação de similaridade empregado por Villalba na referência [63] com o objetivo de eliminarmos a conexão spinorial. Outra vez a transformação é dada por $S(\varphi) = \exp \left[-\frac{i\varphi}{2}\sigma^3 \right]$, com o propósito de mudar a representação das matrizes de Dirac. Onde estiver escrito γ^r e γ^φ será feito a transformação de similaridade $S^{-1}(\varphi)\gamma^r S(\varphi) = \gamma^1$ e $S^{-1}(\varphi)\gamma^\varphi S(\varphi) = \gamma^2$ de modo que são mudadas para γ^1 e γ^2 , ao mesmo tempo que o biespinor também sofre a transformação aplicada $\Psi \longrightarrow S(\varphi)\Psi'$. Na presença desta transformação a equação de Dirac (5.3) passa para uma nova forma, onde a conexão spinorial é desconsiderada. Assim, dentro do contexto desta transformação, vimos que o *ansatz* dado pela equação (4.24) para a solução da equação de Dirac é dado por:

$$\Psi' = e^{-iEt - i\frac{\varphi}{2}\sigma^3} \begin{pmatrix} \psi(r, \varphi) \\ \chi(r, \varphi) \end{pmatrix},$$

onde $\psi = \psi(r, \varphi)$ and $\chi = \chi(r, \varphi)$ representam cada uma das sub-rede A e B, respectivamente. Da transformação de similaridade, da equação de Dirac (5.3) e do *ansatz* (4.24), obtemos as equações desacopladas :

$$\begin{aligned}
(E - M)\psi = & -i\sigma^1 \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r} + \frac{\sqrt{2Ma_1}}{r} + \sqrt{2Ma_2r} \right] \chi \\
& -i\sigma^2 \left[\frac{1}{\alpha r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{i\phi_{AB}}{r} + \frac{ieBr}{2\alpha} + \frac{ia_\varphi}{r} \right] \chi
\end{aligned} \tag{5.4}$$

e

$$\begin{aligned}
(E + M)\chi = & -i\sigma^1 \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r} - \frac{\sqrt{2Ma_1}}{r} - \sqrt{2Ma_2r} \right] \psi \\
& -i\sigma^2 \left[\frac{1}{\alpha r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{i\phi_{AB}}{r} + \frac{ieBr}{2\alpha} + \frac{ia_\varphi}{r} \right] \psi.
\end{aligned} \tag{5.5}$$

Na sequência, vamos desacoplar as equações, eliminando χ , pela substituição de (5.5) em (5.4), de modo que obtemos a equação desacoplada:

$$\begin{aligned}
(E^2 - M^2)\psi = & -\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\psi}{4r^2} - \frac{\sqrt{2Ma_1}}{r^2} \psi + \sqrt{2Ma_2r} \psi + \frac{2Ma_1}{r^2} \psi + 2Ma_2r^2 \psi + 4M\sqrt{a_1a_2} \psi \\
& - \frac{1}{\alpha^2 r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + i \frac{\sigma^3}{\alpha r^2} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} - 2i\sigma^3 \frac{\sqrt{2Ma_1}}{\alpha r^2} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} - \frac{2i\sigma^3 \sqrt{2Ma_2}}{\alpha} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} - 2i \frac{\phi_{AB}}{\alpha r^2} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} - \frac{iBe}{\alpha^2} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} - \frac{2ia_\varphi}{\alpha r^2} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \\
& + 2eB\sigma^3 \frac{\sqrt{2Ma_1}}{2\alpha} \psi + 2\sigma^3 a_\varphi \frac{\sqrt{2Ma_1}}{r^2} \psi + 2\sigma^3 \phi_{AB} \frac{\sqrt{2Ma_1}}{r^2} \psi + 2\sigma^3 \phi_{AB} \sqrt{2Ma_2r} \psi \\
& + 2eB\sigma^3 \frac{\sqrt{2Ma_2r^2}}{2\alpha} \psi + 2\sigma^3 \sqrt{2Ma_2r} a_\varphi \psi + \sigma^3 \frac{eB}{2\alpha} \psi - \sigma^3 \frac{a_\varphi}{r^2} \psi - \sigma^3 \frac{\phi_{AB}}{r^2} \psi \\
& + \frac{\phi_{AB}^2}{r^2} \psi + 2eB \frac{\phi_{AB}}{2\alpha} \psi + \frac{a_\varphi^2}{r^2} \psi + \frac{2\phi_{AB} a_\varphi}{r^2} \psi + 2eB \frac{a_\varphi}{2\alpha} \psi + \frac{e^2 B^2 r^2}{4\alpha^2} \psi.
\end{aligned} \tag{5.6}$$

Para solucionar a equação acima, vamos fazer a seguinte consideração sobre o spinor ψ :

$$\psi(r, \varphi) = e^{im\varphi} \begin{pmatrix} R_+(r) \\ R_-(r) \end{pmatrix} = e^{im\varphi} R_s(r), \tag{5.7}$$

onde $m = l + \frac{1}{2}$, é semi-inteiro com $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ e $R_s = (R_+(r), R_-(r))$. Por esta via, obtemos a seguinte equação radial:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{\delta_s^2}{\alpha^2 r^2} - \frac{\omega_\alpha^2 M^2}{4} r^2 + \epsilon_s \right] R_s(r) = 0, \tag{5.8}$$

onde os parâmetros δ_s , ϑ_s , ϵ_s e ω_α são definidos como:

$$\begin{aligned}
\delta_s &= \vartheta_s + \alpha s \sqrt{2Ma_1}, \\
\vartheta_s &= (l + \alpha \phi_{AB}) + \frac{(1 - \alpha s)}{2} + \alpha a_\varphi, \\
\epsilon_s &= E^2 - M^2 - M \frac{(\delta_s + \alpha s)}{\alpha} \left(\omega_0 s + \frac{\omega_c}{\alpha} \right), \\
\omega_\alpha &= \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2\omega_0 \omega_c s}{\alpha} + \frac{\omega_c^2}{\alpha^2}}.
\end{aligned} \tag{5.9}$$

Nesta situação, como foi visto no capítulo 3, $\omega_0 = \sqrt{\frac{8a_2}{M}}$, é a frequência característica do anel associada ao oscilador harmônico e $\omega_c = \frac{eB}{M}$ é a frequência ciclotrônica que surge da interação do elétron com o campo magnético. A frequência ω_α é uma frequência topológica, que surge com a presença do defeito. Para resolver a equação (5.8), fizemos a mudança de varável $\rho = \sqrt{\frac{\omega_\alpha^2 M^2}{4}} r^2$ de modo que, reparametrizando a equação radial, obtemos:

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{d}{d\rho} - \frac{\delta_s^2}{4\alpha^2 \rho} - \frac{\rho}{4} + \frac{\epsilon_s}{2M\omega_\alpha} \right] R_s(\rho) = 0. \quad (5.10)$$

Semelhante ao processo do capítulo 4, foi feita a análise assintótica da equação (5.10). Para os limites $R_s \rightarrow 0$ e $r \rightarrow \infty$, a solução possível para equação radial é dado por:

$$R_s(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{\frac{|\delta_s|}{2\alpha}} F_s(\rho), \quad (5.11)$$

a qual será substituída na equação prévia, de modo que chegamos na equação:

$$\rho \frac{d^2 F_s(\rho)}{d\rho^2} + \left[\frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1 - \rho \right] \frac{dF_s(\rho)}{d\rho} + \left[\frac{\epsilon_s}{2M\omega_\alpha} - \frac{|\delta_s|}{2\alpha} - \frac{1}{2} \right] F_s(\rho) = 0. \quad (5.12)$$

A equação (5.12) é a hipergeométrica confluyente, cuja a solução é escrita como (ver Apêndice) :

$$F_s(\rho) = {}_1F_1(a, b; z) = {}_1F_1 \left(\frac{|\delta_s|}{2\alpha} + \frac{1}{2} - \frac{\epsilon_s}{2M\omega_\alpha}, \frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1, \rho \right). \quad (5.13)$$

A partir deste momento, a solução possível é uma série que vai convergir para um polinômio de grau n (ver apêndice A1), ou seja, $\frac{|\delta_s|}{2\alpha} + \frac{1}{2} - \frac{\epsilon_s}{2M\omega_\alpha} = -n$. Usando os parâmetros (5.9), obtemos os autovalores de energia para o anel quântico com o fluxo *Aharonov-Bohm* mais o campo magnético submetido a desclinação no grafeno massivo, como:

$$E_{n,l}^2 = \left(2n + \frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1 \right) M\omega_\alpha + M \frac{(\delta_s + \alpha s)}{\alpha} \left(\omega_0 s + \frac{\omega_c}{\alpha} \right) + M^2. \quad (5.14)$$

Neste caso, $s = \pm 1$ está relacionado com as sub-rede **A** e **B**, e os autovalores $E > 0$ representam os elétrons e $E < 0$ representam os buracos. Note que, no espectro de energia, há uma dependência dos números quânticos n e l , dos parâmetros a_1 e a_2 , este último, implícito na frequência ω_0 . Note também a dependência do campo magnético uniforme B implícito na frequência ciclotrônica ω_c , além da dependência da nova frequência topológico ω_α , que carrega a dependência do parâmetro α . Além disso, a equação (5.14) tem uma contribuição do campo de gauge não abeliano a_φ que é responsável pelo efeito *Aharonov-bohm* dos spinors, devido à presença da desclinação. Obtemos também as componentes paralelas e anti-parallelas dos spinors correspondente as energias positivas, definidas como:

$$\begin{aligned}
\Psi_+ = & f_+ {}_1F_1 \left(-n, \frac{|\delta_+|}{\alpha} + 1, \frac{\omega_\alpha M}{2} r^2 \right) \times \\
& \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{i}{E+M} \left[\frac{M}{2} [(\omega_0 + \omega_c/\alpha) + \omega_0] r + \frac{(\vartheta_+ - |\delta_+| + \alpha\sqrt{2Ma_1})}{\alpha r} - \frac{M\omega_c r}{2\alpha} \right] \end{pmatrix} \\
& + \frac{if_+}{E+M} \left(\frac{nM(\omega_0 + \omega_c/\alpha)r}{\frac{|\delta_+|}{\alpha} + 1} \right) {}_1F_1 \left(-n + 1, \frac{|\delta_+|}{\alpha} + 2, \frac{\omega_\alpha M}{2} r^2 \right) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.15)
\end{aligned}$$

para $s = +1$ e $\psi_-(r) = 0$, e por analogia

$$\begin{aligned}
\Psi_- = & f_- {}_1F_1 \left(-n, \frac{|\delta_-|}{\alpha} + 1, \frac{\omega_\alpha M}{2} r^2 \right) \times \\
& \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{i}{E+M} \left[\frac{M}{2} [(\omega_0 + \omega_c/\alpha) + \omega_0] r - \frac{(\vartheta_- + |\delta_-| - \alpha\sqrt{2Ma_1})}{\alpha r} + \frac{M\omega_c r}{2\alpha} \right] \\ 0 \end{pmatrix} \\
& + \frac{if_-}{E+M} \left(\frac{nM(\omega_0 + \omega_c/\alpha)r}{\frac{|\delta_-|}{\alpha} + 1} \right) {}_1F_1 \left(-n + 1, \frac{|\delta_-|}{\alpha} + 2, \frac{\omega_\alpha M}{2} r^2 \right) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.16)
\end{aligned}$$

para $s = -1$ e $\psi_+(r) = 0$. Neste caso, para ambas equações (5.15) e (5.16), usamos o procedimento de normalização da função de onda feita no capítulo 2 (ver apêndice A.4 e sub-seção A.4.1), para obtermos o fator f_s , que é escrito como:

$$f_s = \left(\frac{M\omega_\alpha \Gamma \left(\frac{|\delta_s|}{\alpha} + n + 1 \right)}{\Gamma(n+1) \left[\Gamma \left(\frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1 \right) \right]^2} \right)^{1/2} \times e^{-iEt} e^{i(l+1/2)\varphi} e^{-\frac{\omega_\alpha M}{4} r^2} \left(\frac{\omega_\alpha^2 M^2}{4} \right)^{\frac{|\delta_s|}{4\alpha}} r^{\frac{|\delta_s|}{\alpha}}, \quad (5.17)$$

onde $\Gamma(n)$ é a função gama de Euler. Estas são as soluções para anel quântico 2-D atravessado pelo fluxo *Aharonov-Bohm* no centro mais um campo magnético, na mesma direção do fluxo, no grafeno massivo submetido a uma desclinação.

Nestes resultados, se fizermos $\alpha = 1$, o campo de gauge não abeliano vai a zero⁵ e se desligarmos o campo magnético, $B = 0$ e por consequência $\omega_c = 0$, recuperamos o anel quântico 2-D na folha plana de grafeno massivo, e no caso onde não há separação do *gap* ou seja $M = 0$, recuperamos os resultados estudados na referência [62]. Graficamente, temos o comportamento do espectro de energia nas seguintes situações:

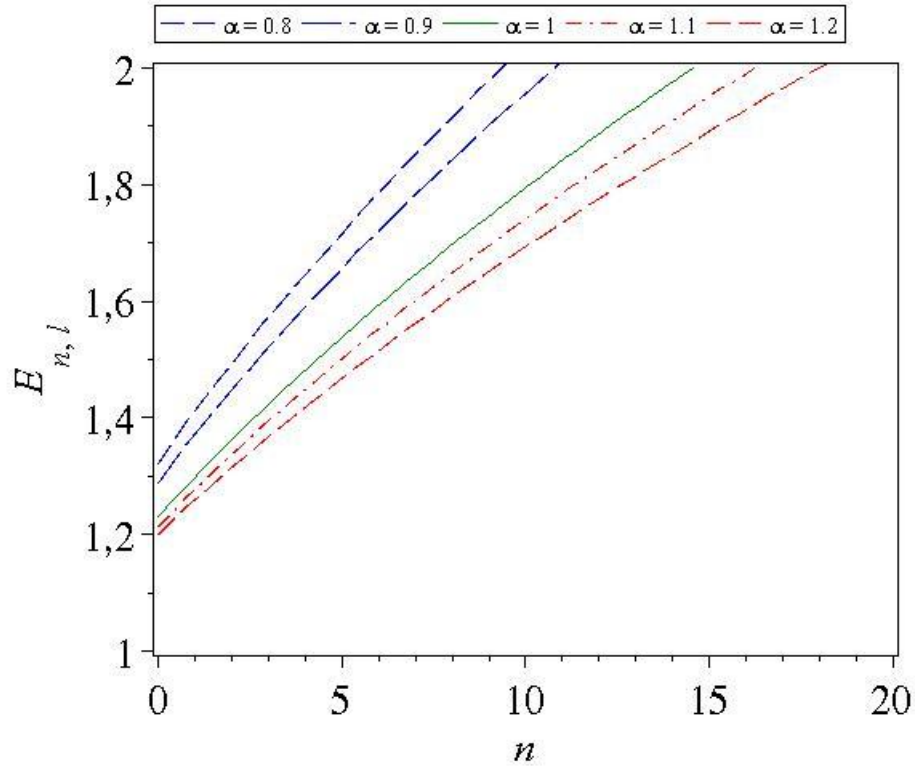


Figura 5.2: Gráfico do comportamento da energia em função do número quântico n para vários valores de α . Nós adotamos a carga elementar como $e = \sqrt{\alpha_e} = 0,08542454312$, onde $\alpha_e = \frac{1}{137,03599911}$ é a constante de estrutura fina, $B = 1T$, $M = 1$, $l = 1$, $\phi_{AB} = 1$, $s = 1$ e $a_1 = 9,0122 \cdot 10^{-6} eV.m^2$ e $a_2 = 2,222 \cdot 10^{-5} eV.m^{-2}$ são os parâmetros de Tan-Inkson [11].

⁵Ver equação (2.21) no capítulo 2.

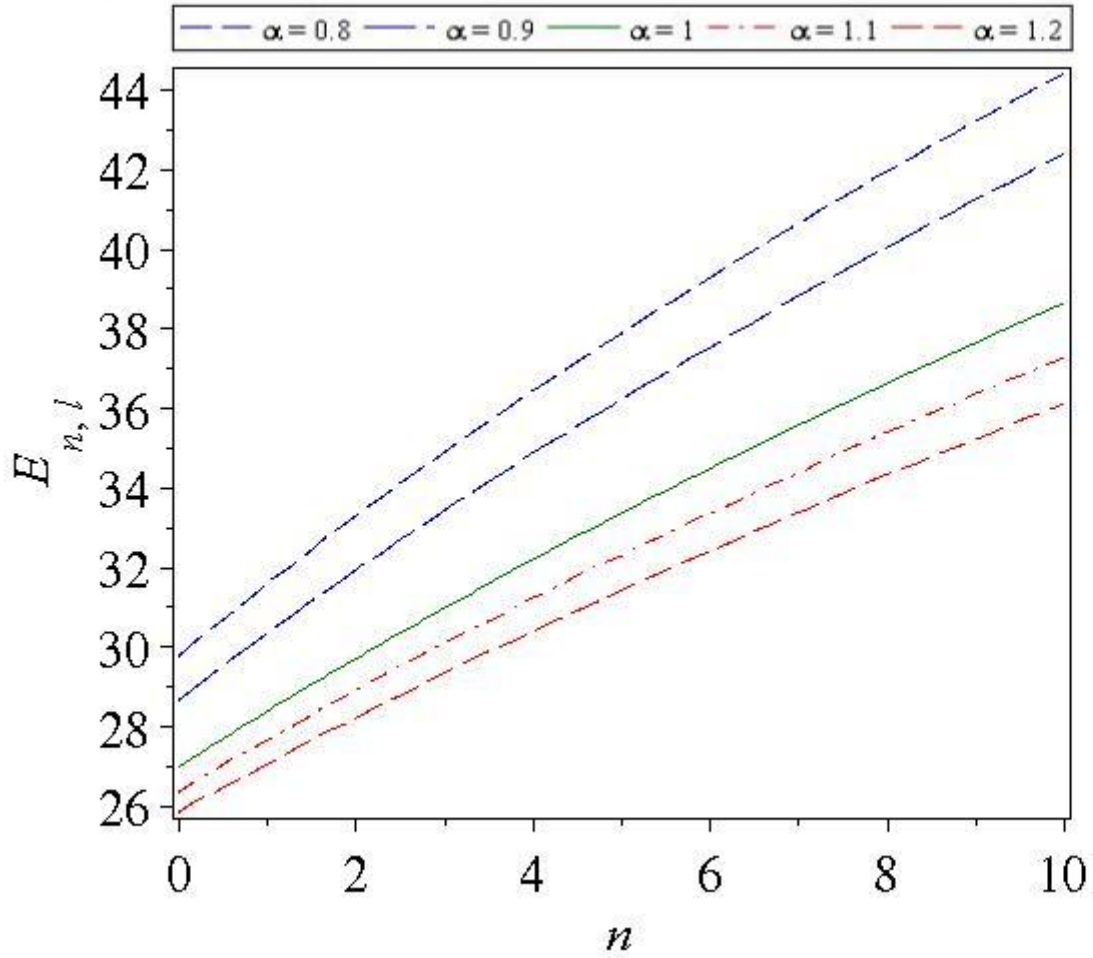


Figura 5.3: Gráfico do comportamento da energia em função do número quântico n para vários valores de α , e vários valores de l . Nós adotamos a carga elementar como $e = \sqrt{\alpha_e} = 0,08542454312$, onde $\alpha_e = \frac{1}{137,03599911}$ é a constante de estrutura fina, $B = 1T$, $M = 1$, $-10 \leq l \leq 10$, $\phi_{AB} = 1$, $s = 1$ e $a_1 = 9,0122.10^{-6}eV.m^2$ e $a_2 = 2,222.10^{-5}eV.m^{-2}$ são os parâmetros de Tan-Inkson [11].

Note que em todos os gráficos, figuras 5.2, 5.3 e 5.4, que os valores de α obtidos para a desclinação positiva em (linha azul), possuem uma magnitude maior que a do caso plano (linha verde), enquanto os caso de desclinação negativa assumem os menores valores energéticos para os mesmo número quântico n nos dois primeiro gráficos, e para ϕ_{AB} no último gráfico. Além disso na figura 5.4 percebemos o comportamento parabólico do espectro pelo fluxo *Aharonov-Bohm*, observado em anéis quânticos [51].

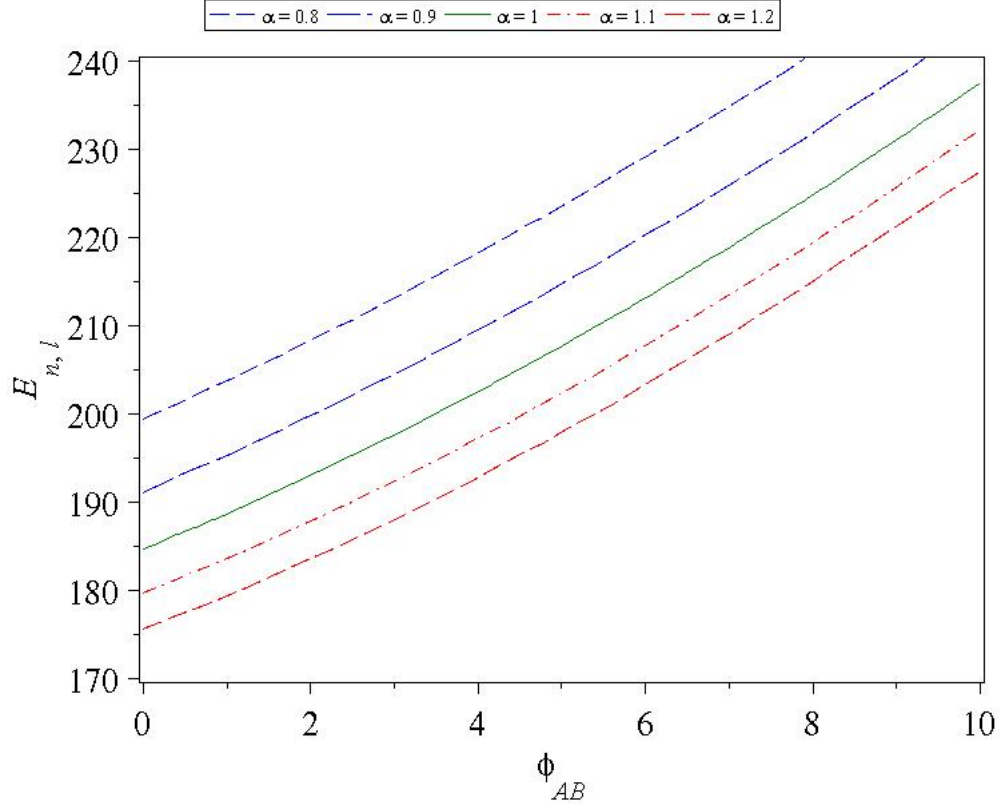


Figura 5.4: Gráfico do comportamento da energia em função de ϕ_{AB} , para vários valores de α , e vários valores de n e l . Nós adotamos a carga elementar como $e = \sqrt{\alpha_e} = 0,08542454312$, onde $\alpha_e = \frac{1}{137,03599911}$ é a constante de estrutura fina, $B = 1T$, $M = 1$, $0 \leq n \leq 5$, $-10 \leq l \leq 10$, $\phi_{AB} = 1$, $s = 1$ e $a_1 = 9,0122.10^{-6}eV.m^2$ e $a_2 = 2,222.10^{-5}eV.m^{-2}$ são os parâmetros de Tan-Inkson [11].

5.3 A Corrente Persistente no Grafeno Massivo

Calculamos também a corrente persistente para o modelo de anel quântico 2-D na folha de grafeno com desclinação. A corrente persistente transportada por um determinado estado de elétrons é calculada usando a relação Byers-Yang [52] dada no capítulo 3. A equação (3.7) expressa a corrente persistente como uma derivada da energia em relação ao fluxo magnético, como:

$$I = - \sum_{n,l} \frac{\partial E_{n,l}}{\partial \phi_{AB}}.$$

Neste contexto, a corrente persistente para o anel 2-D no grafeno massivo submetido a desclinação, com o fluxo *Aharonov-Bohm* ϕ_{AB} adicionado ao campo magnético uniforme

B , vazando pelo seu centro, é obtida na forma:

$$I = \left(\frac{\mp e}{4\pi} \right) \sum_{n,l} M \left(\frac{\delta_s}{|\delta_s|} \omega_\alpha + \frac{\omega_c}{\alpha} + s\omega_0 \right) \times \left\{ M^2 + M \frac{(\delta_s + \alpha s)}{\alpha} \left(\omega_0 s + \frac{\omega_c}{\alpha} \right) + \left(2n + \frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1 \right) M \omega_\alpha \right\}^{-1/2}, \quad (5.18)$$

onde a corrente persistente I é função dos parâmetros de controle a_1 , a_2 , este último implícito na frequência ω_0 , dos números quânticos n e l implícitos no parâmetro δ_s , do campo magnético uniforme B , implícito na frequência ciclotrônica ω_c . Além disso, também observamos a dependência da corrente persistente com o defeito topológico na rede, através da presença do parâmetro α . A expressão da corrente persistente dada por (5.18) é função do fluxo topológico efetivo não abeliano e do fluxo de *Aharonov-Bohm*, ambos presentes no parâmetro δ_s . Neste mesmo trabalho, também obtemos o comportamento da razão de corrente I/I_0 pelo fluxo ϕ_{AB} no centro do anel, como mostra a figura 5.5. Nesta figura, definimos I_0 como uma corrente topológica que surge no anel quando introduzimos no potencial vetor $\vec{A}$, na equação (5.2), a contribuição do campo magnético B além do fluxo ϕ_{AB} . Consideramos também o comportamento para valores α que configurem a presença de desclinação positiva, negativa e a ausência da desclinação, ou seja, o grafeno massivo com folha plana. A corrente é uma função periódica do fluxo ϕ_{AB} , na qual a oscilação desaparece para os grandes valores do mesmo. Podemos também constatar este comportamento na figura 5.5, de modo que, o mesmo comportamento oscilatório da corrente persistente obtida para pontos quânticos no grafeno, investigado na referência [42], é observado em nosso trabalho com confinamento quântico anelar na folha de grafeno massivo.

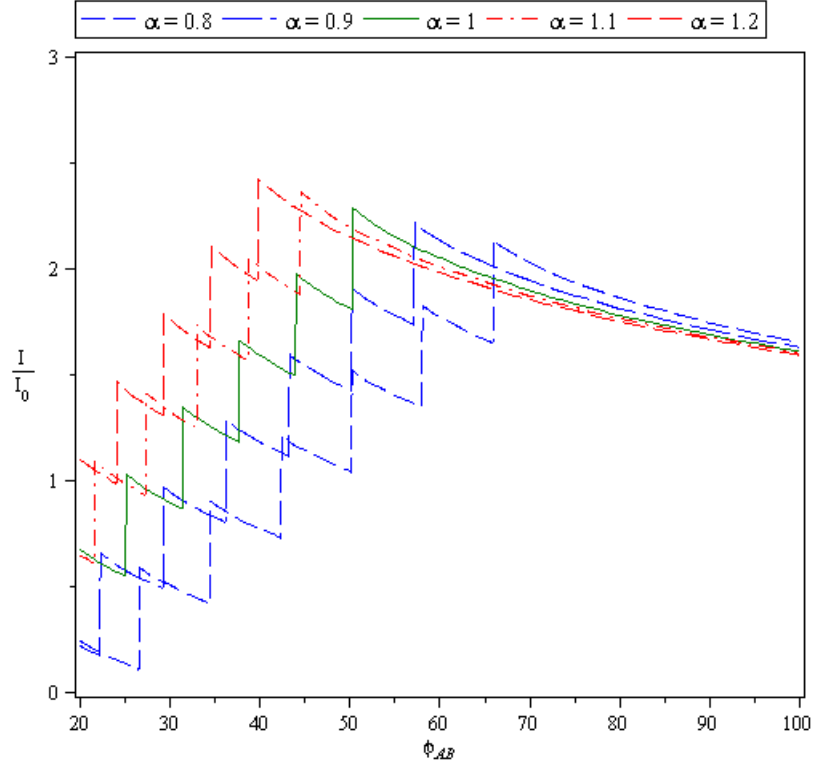


Figura 5.5: Gráfico do comportamento da corrente persistente em função do fluxo magnético $\phi_{AB} = \frac{\Phi}{\Phi_0}$ para valores de α . Neste caso, nós definimos o termo de corrente topológica $I_0 = \frac{1}{2\phi_0} \left(\sqrt{\frac{8a_2}{M}} s + \frac{eB}{\alpha M} \right)$. Os valores para os outros termos são $B = 1T$, $M = 1$, $s = 1$, $-10 \leq l \leq 10$ e $0 \leq n \leq 5$, e $a_1 = 9,0122 \cdot 10^{-6} eV.m^2$ e $a_2 = 2,222 \cdot 10^{-5} eV.m^{-2}$.

5.4 Magnetização do Anel Quântico 2-D no Grafeno Massivo com Desclinação

No presente trabalho, também investigamos a magnetização que surge no anel quântico 2-D, quando introduzimos no potencial vetor $\vec{A}$, uma componente de campo magnético uniforme B , na direção do fluxo *Aharonov-Bohm* ϕ_{AB} e somada ao mesmo. Para a quase-partícula na folha de grafeno massivo com desclinação, podemos obter uma expressão analítica da magnetização $\mathcal{M}$ neste sistema utilizando a definição da referência[69], onde a magnetização é obtida pela diferencial da energia interna do sistema, $U = \sum_{n,l} E_{n,l}$, pelo campo magnético B , ou seja:

$$\mathcal{M}(B) = - \left. \frac{\partial U}{\partial B} \right|_N = - \sum_{n,l} \frac{\partial E_{n,l}}{\partial B}, \quad (5.19)$$

onde consideramos o sistema com temperatura fixa $T = 0$ e a soma sobre todos os N estados ocupados (número de partículas sem spin fixo). Desta forma, substituindo (5.14) na equação anterior, obtemos:

$$\mathcal{M}(B) = - \sum_{n,l} \left(\frac{se}{2} \right) \left[\frac{\left(2n + \frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1 \right)}{\alpha} + \frac{\delta_s + \alpha s}{\alpha^2} \right] \times \left\{ M^2 + M \frac{(\delta_s + \alpha s)}{\alpha} \left(\omega_0 s + \frac{\omega_c}{\alpha} \right) + \left(2n + \frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1 \right) M \omega_\alpha \right\}^{-1/2}, \quad (5.20)$$

que é a magnetização neste sistema. Note que a magnetização depende dos parâmetros a_1 , implícito no parâmetro δ_s , e a_2 implícito na frequência do oscilador ω_0 . A magnetização também depende da frequência topológica ω_α , assim como do campo magnético B , implícito na frequência ciclotrônica ω_c .

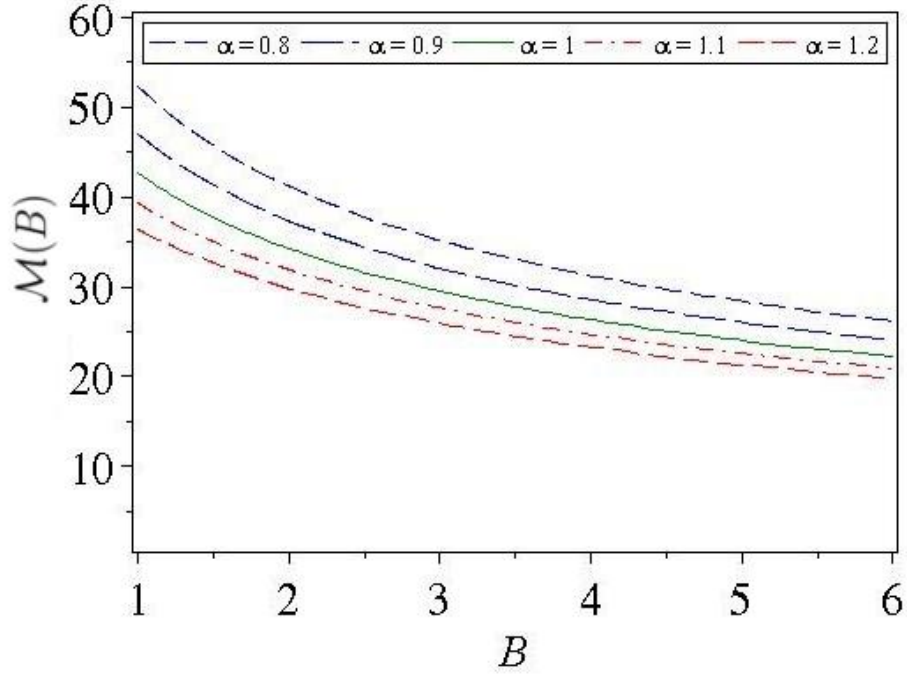


Figura 5.6: Gráfico do comportamento da magnetização em função do campo magnético B para os valores do parâmetro de desclinação, α . Neste caso, adotamos $e = \sqrt{\alpha_e}$, $M = 1$, $\phi_{AB} = 1$, $s = -1$, $a_1 = 9,0122 \cdot 10^{-6} \text{ eV} \cdot \text{m}^2$, $a_2 = 2,222 \cdot 10^{-5} \text{ eV} \cdot \text{m}^{-2}$ e a soma sobre os valores $-10 \leq l \leq 10$ e $0 \leq n \leq 5$.

Aqui há uma clara dependência da magnetização pelo termo topológico α que

assina a desclinação de modo que, este último, modula os valores assumidos pela mesma. Este comportamento de decaimento da magnetização $\mathcal{M}$ pelo campo magnético uniforme B também foi observado na referência[69].

Assim, neste capítulo mostramos que o modelo de confinamento anelar quântico 2-D, baseado no oscilador de Dirac, é uma ferramenta matemática eficaz para o estudo de confinamento eletrônico no grafeno massivo. Mostramos que a adição do campo magnético uniforme B na folha do grafeno massivo sujeitado a uma desclinação, faz surgir uma magnetização no anel, que será afetada pela desclinação, tal qual ocorre com a corrente persistente. Esta última, além de sofrer a influência do defeito topológico, apresenta uma periodicidade relacionada ao fluxo ϕ_{AB} para certo valores; caso haja um fluxo muito intenso (valores altos), a corrente perde esta propriedade de periodicidade.

Capítulo 6

Anel Quântico em Grafeno Massivo com Defeito Topológico no Referencial de Rotação

Neste capítulo será exposto o estudo do confinamento anelar quântico no grafeno massivo na presença do defeito topológico do tipo desclinação, atravessado pelo fluxo *Aharonov-Bohm* somado a um campo magnético uniforme pelo seu centro. Este sistema é submetido ao referencial não inercial de rotação. Neste panorama, será obtido os valores do espectro de energia, da corrente persistente e da magnetização pela ótica do efeito não inercial que a rotação causa ao sistema. Também será feita a análise gráfica destes resultados.

6.1 A Corda Cósmica e o Referencial de Rotação no Grafeno

O estudo de referenciais de rotação em sistemas quântico-relativísticos possibilitou evidenciar as influências não inerciais como o efeito *Sagnac*¹[70, 71] e o efeito

¹Efeito de interferência, no qual, aparece uma fase entre dois feixes luminosos que se propagam em sentidos contrários em uma plataforma rotativa[70]. Este efeito é levado em consideração nos cálculos de correções no sistema de navegação GPS [71].

*Mashhoon*²[72] sobre férmions de Dirac, de maneira efetiva [73]. Como vimos no capítulo 2, na rede cristalina do grafeno, as quase-partículas comportam-se como férmions quando localizados próximos aos pontos de Dirac; neste ínterim, decidimos investigar a influência da rotação sobre o confinamento anelar quântico 2-D na folha cônica de grafeno massivo.

Inicialmente vamos considerar que o defeito topológico na rede cristalina bi-dimensional do grafeno massivo seja originado pela desclinação de modo que, a curvatura espacial, apresente um aspecto cônico. Para esta configuração geométrica, vamos reconsiderar a métrica da corda cósmica aplicada ao grafeno, definida pela equação (2.20)³, reescrita da seguinte forma[74, 75]:

$$ds^2 = -dt'^2 + dr'^2 + \eta^2 r'^2 d\phi'^2, \quad (6.1)$$

onde $\eta = 1 \pm \frac{\theta}{2\pi}$ é o parâmetro relacionado com o ângulo de déficit da corda cósmica $\theta = \pm \frac{N\pi}{3}$, com N sendo o número inteiro referente ao número de setores removidos ou adicionados na rede hexagonal do grafeno, com $0 < N < 6$.

Neste caso, $0 < \eta < 1$ representa a curvatura positiva, desclinação positiva, enquanto $\eta > 1$ representa a curvatura negativa, desclinação negativa, $\eta = 1$ a ausência de desclinação, o caso da folha de grafeno plana. Para introduzirmos a rotação neste sistema, vamos adotar o procedimento das referências [76, 77, 78], no qual, foi feita a transformação de variável na corda cósmica: $t' = t$, $r' = r$ e $\phi' = \phi + \omega t$, onde ω é a frequência angular de rotação do referencial que satisfaz a condição $\omega r \ll v_f$, com $v_f = \hbar = 1$, isto é, a velocidade de rotação é muito menor, se comparada a velocidade de Fermi. Assim a corda cósmica girante é definida como[76, 77, 78]:

$$ds^2 = -(1 - \omega^2 \eta^2 r^2) dt^2 + 2\omega \eta^2 r^2 d\phi dt + dr^2 + \eta^2 r^2 d\phi^2, \quad (6.2)$$

onde a componente radial é limitada ao intervalo $0 < r < \frac{1}{\omega\eta}$. Caso a componente radial seja $r > \frac{1}{\omega\eta}$, a quase-partícula está fora da região cônica, pois sua velocidade é maior do que a rotação do plano. Assim, a função de onda que descreve o comportamento de rotação no grafeno massivo, deve considerar estas limitações espaciais. Além disto, tal restrição na coordenada radial, consequência não inercial advinda da topologia do espaço-tempo

²Efeito que surge com o acoplamento do spin com a velocidade angular de rotação do referencial não inercial [72].

³Aqui vamos fazer uma modificação na notação: $\eta = \alpha$, que identifica o parâmetro topológico do defeito.

na corda cósmica, comporta-se como um potencial confinante do tipo parede rígida[78], ou seja, a função de onda deve se anular quando $r \rightarrow 1/\omega\eta$.

Para relacionarmos o comportamento global da função de onda na rede, com o comportamento local, recorreremos ao a definição da métrica (2.27),[43]:

$$ds^2 = g_{\mu\nu}dx^\mu dx^\nu = e_a^\mu e_a^\nu \eta^{ab} dx^\mu dx^\nu,$$

onde novamente temos o tesor métrico $g_{\mu\nu} = e_a^\mu e_a^\nu \eta^{ab}$, que relaciona o espaço global da rede com o espaço local do defeito, através do campo de tetradas e_a^μ, e_a^ν e pelo tensor métrico de Minkowski η^{ab} . Assim, de maneira análoga ao capítulo 2, na presença da curvatura espacial, as matrizes de Dirac se conectam com o espaço local pela relação $\gamma^\mu = e_a^\mu(x) \gamma^a$ e satisfaz a relação de anticomutação $\{\gamma^a, \gamma^b\} = 2\eta^{ab}$, em particular, assumindo a assinatura da métrica de Minkowski $\eta^{ab} = \text{diag}(-, +, +)$. Como vimos anteriormente, o campo de tetradas relaciona a base não coordenada do referencial local, onde se encontra o defeito, com o referencial global no espaço-tempo pela relação $e^a = e_\mu^a dx^\mu$. Para a métrica da desclinação com rotação em (6.2), podemos escrever a relação para base não coordenada[76]:

$$\begin{aligned} e^0 &= \sqrt{1-\beta^2} dt - \frac{\omega\eta^2 r^2}{\sqrt{1-\beta^2}} d\varphi ; \\ e^1 &= dr ; \\ e^2 &= \frac{\eta r}{\sqrt{1-\beta^2}} d\varphi , \end{aligned} \tag{6.3}$$

de modo que o campo de tetradas e_μ^a usual e sua forma inversa e_a^μ são obtidos como [76]:

$$e_\mu^a = \begin{pmatrix} \sqrt{1-\beta^2} & 0 & -\frac{\omega\eta^2 r^2}{\sqrt{1-\beta^2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\eta r}{\sqrt{1-\beta^2}} \end{pmatrix}, \quad e_a^\mu = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} & 0 & \frac{\omega\eta r}{\sqrt{1-\beta^2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{1-\beta^2}}{\eta r} \end{pmatrix}. \tag{6.4}$$

Neste contexto, nas matrizes apresentadas na equação (6.4), assumimos que $\beta = \omega\eta r$. Na sequência, novamente resolvemos as estruturas Maurer-Cartan [44] com o objetivo de obtermos as formas diferenciais, $de^a + \omega_b^a \wedge e^b = 0$ (ausência de torção no espaço), com $\omega_b^a = \omega_\mu^a{}_b \wedge dx^\mu$, sendo a conexão um-forma, e $\omega_\mu^a{}_b$ a conexão de spin necessária para obtenção da conexão spinorial. Após algumas manipulações matemáticas, foi obtido, assim como nas referências[76, 78], as componentes não nulas das conexões de spin $\omega_\mu^a{}_b$:

$$\begin{aligned}
\omega_{t\ 1}^0 &= \omega_{t\ 0}^1 = -\frac{\omega^2 \eta^2 r}{\sqrt{1-\beta^2}}; \\
\omega_{t\ 2}^1 &= -\omega_{t\ 1}^2 = -\frac{\omega \eta}{\sqrt{1-\beta^2}}; \\
\omega_{r\ 2}^0 &= \omega_{r\ 0}^2 = \frac{\omega \eta}{(1-\beta^2)}; \\
\omega_{\varphi\ 1}^0 &= \omega_{\varphi\ 0}^1 = -\frac{\omega \eta^2 r}{\sqrt{1-\beta^2}}; \\
\omega_{\varphi\ 2}^1 &= -\omega_{\varphi\ 1}^2 = -\frac{\eta}{\sqrt{1-\beta^2}}.
\end{aligned} \tag{6.5}$$

A partir deste conjunto de conexões de spin em (6.5), podemos calcular as conexões spinoriais equivalentes, através da equação (2.31):

$$\Gamma_\mu = \frac{i}{4} \omega_{\mu ab} \Sigma^{ab},$$

na qual, novamente utilizamos o tensor métrico de Minkowski para baixar o índice da conexão de spin, pela relação $\omega_{\mu ab} = \omega_\mu^c{}{}_b \eta_{ca}$ e $\Sigma^{ab} = \frac{i}{2}(\gamma^a \gamma^b - \gamma^b \gamma^a)$. Deste modo, com estas definições, podemos escrever o conjunto de conexões spinoriais, como obtidas nas referências[76, 78], na forma:

$$\begin{aligned}
\Gamma_t &= -\frac{1}{2} \frac{\omega^2 \eta^2 r}{\sqrt{1-\beta^2}} \alpha^1 - \frac{i}{2} \frac{\omega \eta}{\sqrt{1-\beta^2}} \Sigma^3; \\
\Gamma_r &= \frac{1}{2} \frac{\omega \eta}{(1-\beta^2)} \alpha^2; \\
\Gamma_\varphi &= -\frac{1}{2} \frac{\omega \eta^2 r}{\sqrt{1-\beta^2}} \alpha^1 - \frac{i}{2} \frac{\eta}{\sqrt{1-\beta^2}} \Sigma^3.
\end{aligned} \tag{6.6}$$

Uma vez obtido este conjunto de conexões spinoriais, resultantes da topologia do espaço-tempo da corda cósmica girante (6.2), podemos usá-las na equação de Dirac em associação com a extensão relativística do anel quântico 2-D de Tan-Ikson proposta por Bakke e Furtado baseada no oscilador de Dirac. Deste modo o nosso objetivo, que é a descrição da dinâmica de quase-partículas confinadas na folha de grafeno massivo submetidas a uma rotação, será plenamente atendido.

6.2 Equação de Dirac no Grafeno Massivo com Rotação e Confinamento Anelar

Vamos usar novamente o modelo anelar relativístico de Tan-Ikson, dado pela equação (3.20), baseado no oscilador de Dirac massivo, que foi obtido na referência[10], ou seja:

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} + i \left[\frac{\sqrt{2Ma_1}}{r} + \sqrt{2Ma_2r} \right] \gamma^0 \hat{r},$$

de maneira que possamos estudar o comportamento das quase-partículas confinadas no anel para a singularidade cônica gerada pela desclinação no grafeno massivo, com um fluxo Aharonov-Bohm Φ_{AB} através de seu centro adicionado a um campo magnético uniforme B alinhado com o eixo de rotação z . Todavia para introduzirmos o acoplamento proposto anteriormente, mais uma vez usaremos o potencial vetor A_μ na equação de Dirac de modo que seguiremos o procedimento das referências [76, 79], nas quais é abordado o acoplamento do oscilador de Dirac no referencial da rotação. Neste caminho, a equação de autovalores, após algumas manipulações, é escrita na forma:

$$\left(i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - \gamma^\mu e A_\mu - \gamma^\mu \frac{a_\mu}{r} - i\gamma^\mu \left(\frac{\sqrt{2Ma_1}}{r} + \sqrt{2Ma_2r} \right) \gamma^0 \delta_\mu^r + i\gamma^\mu \Gamma_\mu \right) \Psi = M\Psi, \quad (6.7)$$

de modo que, assim como no capítulo 5, o potencial vetor A_μ é responsável pela inclusão do fluxo Φ_{AB} no centro do anel e do campo magnético uniforme B , de tal forma que vamos definir desta vez como [68]:

$$\vec{A} = \left[\frac{\Phi_{AB}}{2\pi r} + \frac{Br}{2\eta} \right] \hat{e}_\varphi. \quad (6.8)$$

A partir das conexões de spinoriais (6.6), do acoplamento (3.20) e do potencial vetor (6.8), reescrevemos a equação de Dirac para rotação no grafeno massivo como:

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} + i\hat{\alpha}^2 \omega \eta r \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \sqrt{1-\beta^2} M \gamma^0 \Psi - i\sqrt{1-\beta^2} \hat{\alpha}^1 \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r} - \left(\frac{\sqrt{2Ma_1}}{r} + \sqrt{2Ma_2r} \right) \right] \gamma^0 \Psi$$

$$-i\frac{\hat{\alpha}^2}{\eta r} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} + i\omega^2 \eta r \hat{\alpha}^2 \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} + \hat{\alpha}^2 \sqrt{1-\beta^2} \left(\frac{\phi_{AB}}{r} + \frac{eBr}{2\eta} + \frac{a_\varphi}{r} \right) \Psi + \frac{\eta}{2\sqrt{1-\beta^2}} \vec{\omega} \cdot \vec{\Sigma} \Psi. \quad (6.9)$$

Na equação (6.9), o termo $\vec{\omega} \cdot \vec{\Sigma}$ é o termo da equação que representa o acoplamento de rotação do spin no caso da referência [73]. A matriz $\vec{\Sigma}$ está relacionada com as matrizes de Pauli da forma:

$$\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}. \quad (6.10)$$

A solução para equação (6.9) é o *ansatz*:

$$\Psi = e^{-iEt} \begin{pmatrix} \psi(r, \varphi) \\ \chi(r, \varphi) \end{pmatrix}, \quad (6.11)$$

onde cada um dos spinores ψ e χ , representam as sub-redes A e B do grafeno massivo. Substituindo a equação (6.11) na equação (6.9), e considerando as propriedades das matrizes (6.10), (2.19), (3.23), após algumas manipulações matemáticas, obtemos as equações desacopladas para cada spinor. A primeira para ψ como

$$\begin{aligned} \left(E - \sqrt{1 - \beta^2} M - \frac{\eta\omega}{2\sqrt{1 - \beta^2}} \sigma^3 \right) \psi &= -i\sigma^1 \sqrt{1 - \beta^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r} \right) \chi \\ &- i\sigma^1 \sqrt{1 - \beta^2} \left(\frac{\sqrt{2Ma_1}}{r} + \sqrt{2Ma_2r} \right) \chi - \frac{i\sigma^2}{\eta r} \frac{\partial \chi}{\partial \varphi} + i\sigma^2 \omega^2 \eta r \frac{\partial \chi}{\partial \varphi} \\ &+ \sigma^2 \sqrt{1 - \beta^2} \left(\frac{\phi_{AB}}{r} + \frac{eBr}{2\eta} + \frac{a_\varphi}{r} \right) \chi - \sigma^2 \omega \eta r E \chi, \end{aligned} \quad (6.12)$$

e a segunda para χ

$$\begin{aligned} \left(E + \sqrt{1 - \beta^2} M - \frac{\eta\omega}{2\sqrt{1 - \beta^2}} \sigma^3 \right) \chi &= -i\sigma^1 \sqrt{1 - \beta^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r} \right) \psi \\ &+ i\sigma^1 \sqrt{1 - \beta^2} \left(\frac{\sqrt{2Ma_1}}{r} + \sqrt{2Ma_2r} \right) \psi - \frac{i\sigma^2}{\eta r} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + i\sigma^2 \omega^2 \eta r \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \\ &+ \sigma^2 \sqrt{1 - \beta^2} \left(\frac{\phi_{AB}}{r} + \frac{eBr}{2\eta} + \frac{a_\varphi}{r} \right) \psi - \sigma^2 \omega \eta r E \psi. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Contudo, para desacoplar as equações acima, é preciso levar em consideração a limitação do confinamento imposta pela rotação, $\omega r \ll 1$. Neste sentido, antes de desacoplar, é necessário expandir até a primeira ordem o fator $\sqrt{1 - \beta^2}$ presentes em ambas equações, de modo que $\sqrt{1 - \beta^2} \approx 1 - \frac{1}{2}\beta^2 + (\dots)$ [76]. Após a expansão, é feita, na sequência, a substituição da equação (6.13) em (6.12) o que nos leva, após um denso cálculo, a obtenção da equação desacoplada:

$$\begin{aligned}
(E^2 - M^2) \psi = & -\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{\eta^2 r^2} \left(\frac{\eta^2 \psi}{4} - \eta^2 \sqrt{2Ma_1} \psi + i\sigma^3 \eta \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} - \sigma^3 \eta^2 \phi_{AB} \right. \\
& + 2\eta^2 Ma_1 \psi - 2i\sigma^3 \eta \sqrt{2Ma_1} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + 2\sigma^3 \eta^2 \sqrt{2Ma_1} \phi_{AB} \psi - \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} - 2i\phi_{AB} \eta \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + \eta^2 \phi_{AB}^2 \psi \\
& \left. - \sigma^3 a_\varphi \eta^2 \psi + 2\eta^2 \sigma^3 a_\varphi \sqrt{2Ma_1} \psi - 2i\eta a_\varphi \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + 2\eta^2 \psi_{AB} a_\varphi \psi + \eta^2 a_\varphi^2 \psi \right) \\
& + r^2 \left(2Ma_2 \psi + \sigma^3 \sqrt{2Ma_2} \frac{eB}{\eta} \psi + \frac{e^2 B^2 \psi}{4\eta^2} \right) + \sqrt{2Ma_2} \psi + i\sigma^3 \frac{\omega^2 \eta}{2} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + \sigma^3 \frac{eB \psi}{2\eta} \\
& + 4M \sqrt{a_1 a_2} \psi - 2Ma_1 \omega^2 \eta^2 \psi + 3i\sigma^3 \omega^2 \eta \sqrt{2Ma_1} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + \sigma^3 \frac{eB}{\eta} \sqrt{2Ma_1} \psi \\
& - 2\sigma^3 \omega^2 \eta^2 \sqrt{2Ma_1} \phi_{AB} \psi - 2\sigma^3 \omega^2 \eta^2 \sqrt{2Ma_1} a_\varphi \psi - \frac{2i\sigma^3}{\eta} \sqrt{2Ma_2} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \\
& + 2\sqrt{2Ma_2} \sigma^3 \phi_{AB} \psi + 2\sqrt{2Ma_2} \sigma^3 a_\varphi \psi + 2\omega^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} - \frac{ieB}{\eta^2} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} - 2\omega^2 \eta^2 \phi_{AB} a_\varphi \psi \\
& + 3i\omega^2 \eta \phi_{AB} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + 3i\omega^2 \eta a_\varphi \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + 2i\omega E \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + \frac{eB}{\eta} \phi_{AB} \psi + \frac{eB}{\eta} a_\varphi \psi \\
& - \omega^2 \eta^2 \phi_{AB}^2 \psi - \omega^2 \eta^2 a_\varphi^2 \psi + \mathcal{O}(\beta^2). \tag{6.14}
\end{aligned}$$

Veja que na equação (6.14), ψ é autofunção de σ^3 , cujo os autovalores são $s = \pm 1$, de modo que escreveremos da forma $\sigma^3 \psi_s = \pm \psi_s = s \psi_s$. Assim a solução para a mesma é escrita semelhante a equação (5.7):

$$\psi(r, \varphi) = e^{im\varphi} \begin{pmatrix} R_+(r) \\ R_-(r) \end{pmatrix} = e^{im\varphi} R_s(r),$$

onde $m = l + \frac{1}{2}$, é semi-inteiro com $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ e $R_s = (R_+(r), R_-(r))$. Neste sentido obtemos a seguinte equação radial:

$$\begin{aligned}
[E + \omega(l + 1/2)]^2 R_s - M^2 R_s = & -\frac{d^2 R_s}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{dR_s}{dr} + \frac{L_s^2 R_s}{\eta^2 r^2} + \frac{M^2 \Omega^2 r^2}{4} R_s \\
& - \omega^2 \left((l + 1/2)(L_s + s\eta) + \left(L_s + \frac{s\eta}{2} \right)^2 \right) R_s + \omega^2 (l + 1/2)^2 R_s \\
& + \frac{M\Omega}{\eta} (L_s + s\eta) R_s + \mathcal{O}(\beta^2) R_s, \tag{6.15}
\end{aligned}$$

na qual definimos os parâmetros:

$$\begin{aligned}
L_s &= \lambda_s + s\eta\sqrt{2Ma_1} \\
\lambda_s &= (l + \eta\phi_{AB}) + \frac{(1 - s\eta)}{2} + \eta a_\varphi \\
\Omega &= \omega_0 s + \frac{\omega_c}{\eta}.
\end{aligned} \tag{6.16}$$

Note que, entre os parâmetros (6.16), definimos uma frequência total Ω como a soma da frequência do oscilador harmônico $\omega_0 = \sqrt{\frac{8a_2}{M}}$ e da frequência ciclotrônica $\omega_c = \frac{eB}{M}$, com as dependências do parâmetro Tan-Ikson a_2 e do campo magnético B respectivamente. Além disto, temos também as dependências implícitas do parâmetro de controle de Tan-Ikson a_1 e da razão entre o fluxo *Aharonov-Bohm* e período do fluxo $\phi_{AB} = \frac{\Phi_{AB}}{\Phi_0}$ além do déficit angular η que assinala o defeito topológico no grafeno massivo, todos presentes em L_s e no momento angular efetivo λ_s . Dando continuidade, descartamos os termos $\mathcal{O}(\beta^2)$ e definimos o novo parâmetro:

$$\begin{aligned}
\nu_s &= [E + \omega(l + 1/2)]^2 - M^2 + \omega^2 \left((l + 1/2)(L_s + s\eta) + \left(L_s + \frac{s\eta}{2} \right)^2 - (l + 1/2)^2 \right) \\
&\quad - \frac{M\Omega}{\eta} (L_s + s\eta),
\end{aligned} \tag{6.17}$$

de modo que obtemos a seguinte equação radial:

$$\frac{d^2 R_s}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR_s}{dr} - \frac{L_s^2 R_s}{\eta^2 r^2} - \frac{M^2 \Omega^2 r^2}{4} R_s + \nu_s R_s = 0. \tag{6.18}$$

Esta equação radial tem semelhança com as resolvidas dos capítulos anteriores, de modo que fazendo a transformação de variável $\vartheta = \sqrt{\frac{M^2 \Omega^2}{4}} r^2$, chegamos na forma:

$$\left(\vartheta \frac{d^2}{d\vartheta^2} + \frac{d}{d\vartheta} - \frac{L_s^2}{4\eta^2 \vartheta} - \frac{\vartheta}{4} + \frac{\nu_s}{2M\Omega} \right) R_s = 0. \tag{6.19}$$

Assim, seguindo o processo de resolução adotado nesta tese, novamente fizemos a análise dos limites assintóticos da equação (6.19), ou seja, $R_s \rightarrow 0$ quando $r \rightarrow \infty$ ($\vartheta \rightarrow \infty$). A solução é do tipo:

$$R_s(\vartheta) = e^{-\frac{\vartheta}{2}} \vartheta^{\frac{|L_s|}{2\eta}} F_s(\vartheta), \tag{6.20}$$

de modo que substituindo (6.20) em (6.19) obtemos a equação da hipergeométrica confluyente (apêndice A):

$$\vartheta \frac{d^2 F_s}{d\vartheta^2} + \left[\frac{|L_s|}{\eta} + 1 - \vartheta \right] \frac{dF_s}{d\vartheta} + \left[\frac{\nu_s}{2M\Omega} - \frac{|L_s|}{2\eta} - \frac{1}{2} \right] F_s = 0, \quad (6.21)$$

cujas a solução é do tipo (ver apêndice A.1): $F_s = {}_1F_1 \left(\frac{|L_s|}{2\eta} + \frac{1}{2} - \frac{\nu_s}{2M\Omega}, \frac{|L_s|}{\eta} + 1, \vartheta \right)$. Impondo a condição de convergência da série $-n = \frac{|L_s|}{2\eta} + \frac{1}{2} - \frac{\nu_s}{2M\Omega}$, e substituindo o conjunto de parâmetros (6.16) e (6.17), obtemos o espectro de energia para o para o anel quântico 2-D no grafeno massivo com topologia cônica submetido a rotação:

$$E_{n,l} = \pm \left\{ M^2 + \left(2n + \frac{|L_s|}{\eta} + \frac{L_s}{\eta} + s + 1 \right) M\Omega + \omega^2 \left[(l + 1/2)^2 - \left(L_s + \frac{s\eta}{2} \right)^2 - (l + 1/2)(L_s + s\eta) \right] \right\}^{1/2} - \omega(l + 1/2). \quad (6.22)$$

Semelhante aos problemas anteriores, na equação (6.22), $s = \pm 1$ está relacionado com as sub-redes do grafeno massivo, **A** e **B**, e os valores das energias $E > 0$ e $E < 0$, representam as conduções por elétrons e buracos, respectivamente. Temos ainda a dependência explícita do parâmetro de desclinação η e dos números quânticos n e l , e as dependências implícitas dos termos de Tan-Ikson a_1 , a_2 , da razão de fluxo *Aharonov-Bohm* ϕ_{AB} e do campo magnético uniforme B , dentro dos parâmetros definidos em (6.16). Além disso, surge um termo no espectro de energia, $-\omega(l + 1/2)$ advindo da rotação do grafeno massivo. Se fizermos $\omega \rightarrow 0$ resgatamos o caso do anel sem rotação:

$$E_{n,l} = \pm \left\{ M^2 + \left(2n + \frac{|L_s|}{\eta} + 1 \right) M\Omega + \left(\frac{L_s + \eta s}{\eta} \right) M(\omega_0 s + \frac{\omega_c}{\eta}) \right\}^{1/2}, \quad (6.23)$$

equação esta semelhante ao grafeno massivo com desclinação, dado pela equação (5.14) visto no capítulo 5 desta tese. Obtemos também as componentes paralelas e anti-paralelas dos spinores correspondentes as energias positivas, definidas como:

$$\begin{aligned}
\Psi_+ = & f_{+ - 1} F_1 \left(-n, \frac{|L_+|}{\eta} + 1, \frac{\Omega M}{2} r^2 \right) \times \\
& \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{i}{E+M-\eta\omega/2} \left[\frac{M}{2} [(\omega_0 + \omega_c/\eta) + \omega_0] r + \frac{(\lambda_+ - |L_+| + \eta\sqrt{2Ma_1})}{\eta r} - \frac{M\omega_c r}{2\eta} \right] \end{pmatrix} \\
& + \frac{if_+}{E+M-\eta\omega/2} \left(\frac{nM(\omega_0 + \omega_c/\eta)r}{\frac{|L_+|}{\eta} + 1} \right) {}_1F_1 \left(-n + 1, \frac{|L_+|}{\eta} + 2, \frac{\Omega M}{2} r^2 \right) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (6.24)
\end{aligned}$$

para $s = +1$ e $\psi_-(r) = 0$, e por analogia

$$\begin{aligned}
\Psi_- = & f_{- - 1} F_1 \left(-n, \frac{|L_-|}{\eta} + 1, \frac{\Omega M}{2} r^2 \right) \times \\
& \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{i}{E+M+\eta\omega/2} \left[\frac{M}{2} [(\omega_0 + \omega_c/\eta) + \omega_0] r - \frac{(\lambda_- + |L_-| - \eta\sqrt{2Ma_1})}{\eta r} + \frac{M\omega_c r}{2\eta} \right] \\ 0 \end{pmatrix} \\
& + \frac{if_-}{E+M+\eta\omega/2} \left(\frac{nM(\omega_0 + \omega_c/\eta)r}{\frac{|L_-|}{\eta} + 1} \right) {}_1F_1 \left(-n + 1, \frac{|L_-|}{\eta} + 2, \frac{\Omega M}{2} r^2 \right) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (6.25)
\end{aligned}$$

para $s = -1$ e $\psi_+(r) = 0$. Nesta caso, para ambas equações (6.24) e (6.25), usamos o procedimento de normalização da função de onda feita no capítulo 2 (ver apêndice A.4 e sub-seção A.4.1), para obtermos o fator f_s , que é escrito, como:

$$f_s = \left(\frac{M\Omega\Gamma\left(\frac{|L_s|}{\eta} + n + 1\right)}{\Gamma(n+1)\left[\Gamma\left(\frac{|L_s|}{\eta} + 1\right)\right]^2} \right)^{1/2} \times e^{-iEt} e^{i(l+1/2)\varphi} e^{-\frac{M\Omega}{4}r^2} \left(\frac{M^2\Omega^2}{4} \right)^{\frac{|L_s|}{4\eta}} r^{\frac{|L_s|}{\eta}}, \quad (6.26)$$

onde $\Gamma(n)$ é a função gamma de Euler. Estas são as soluções para anel quântico 2-D atravessado pelo fluxo *Aharonov-Bohm* em seu centro adicionado a um campo magnético uniforme alinhado ao eixo de rotação, na mesma direção do fluxo, no grafeno massivo com

desclinação. Se fizermos $\omega \rightarrow 0$, retiramos a rotação do sistema e recuperamos as soluções do grafeno massivo com desclinação dado pelas equações (5.15) e (5.16). Graficamente temos os seguintes comportamentos para o espectro de energia do anel 2-D no grafeno massivo com desclinação mais rotação:

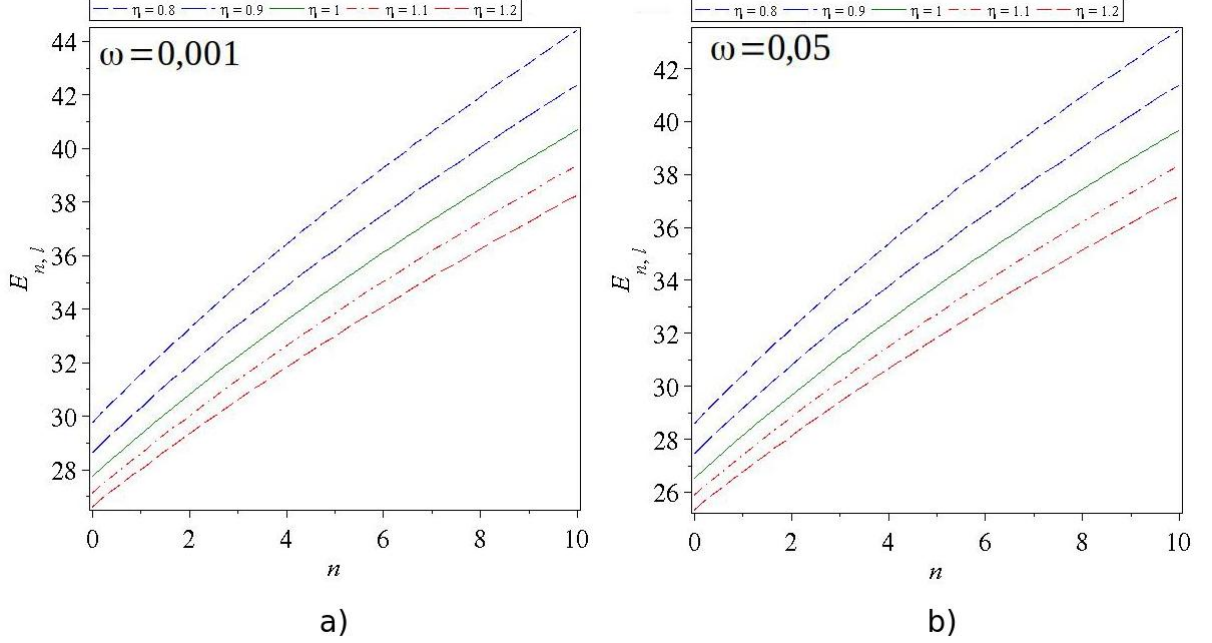


Figura 6.1: Gráfico da energia em função do número quântico n para valores da desclinação η e da velocidade de rotação ω . Nós adotamos a carga elementar como $e = \sqrt{\alpha_e} = 0,08542454312$, onde $\alpha_e = \frac{1}{137,03599911}$ é a constante de estrutura fina, $B = 1T$, $M = 1$, $-10 \leq l \leq 10$, $\phi_{AB} = 1$, $s = 1$ e $a_1 = 9,0122 \cdot 10^{-6} eV.m^2$ e $a_2 = 2,222 \cdot 10^{-5} eV.m^{-2}$ são os parâmetros de Tan-Inkson [11].

Na figura 6.1, os valores de energia foram calculados para velocidade de rotação respeitando o limite $\omega r \ll 1$, ou seja, muito menor que a velocidade de Fermi: a figura 6.1 a), com valor de $\omega = 0,001$ é um regime de baixa rotação; a figura 6.1 b), com valor para $\omega = 0,05$, é um regime de rotação intermediária, ambos em conformidade com a aproximação considerada. Os valores de η descrevem o tipo de defeito topológico, no caso a desclinação que pode ocorrer na folha do grafeno massivo: se $0 < \eta < 1$, a desclinação é dita positiva; se $\eta = 1$, temos uma folha de grafeno massivo sem defeito; se $\eta > 1$ caracteriza-se, então, a desclinação negativa. No que diz respeito ao comportamento do espectro de energia, observamos um decréscimo dos valores de energia para cada curva assinalada pela parâmetro η , quando aumentado o regime de rotação. Este comporta-

mento também é observado num gráfico comparativo do espectro pela rotação dado pela figura a seguir:

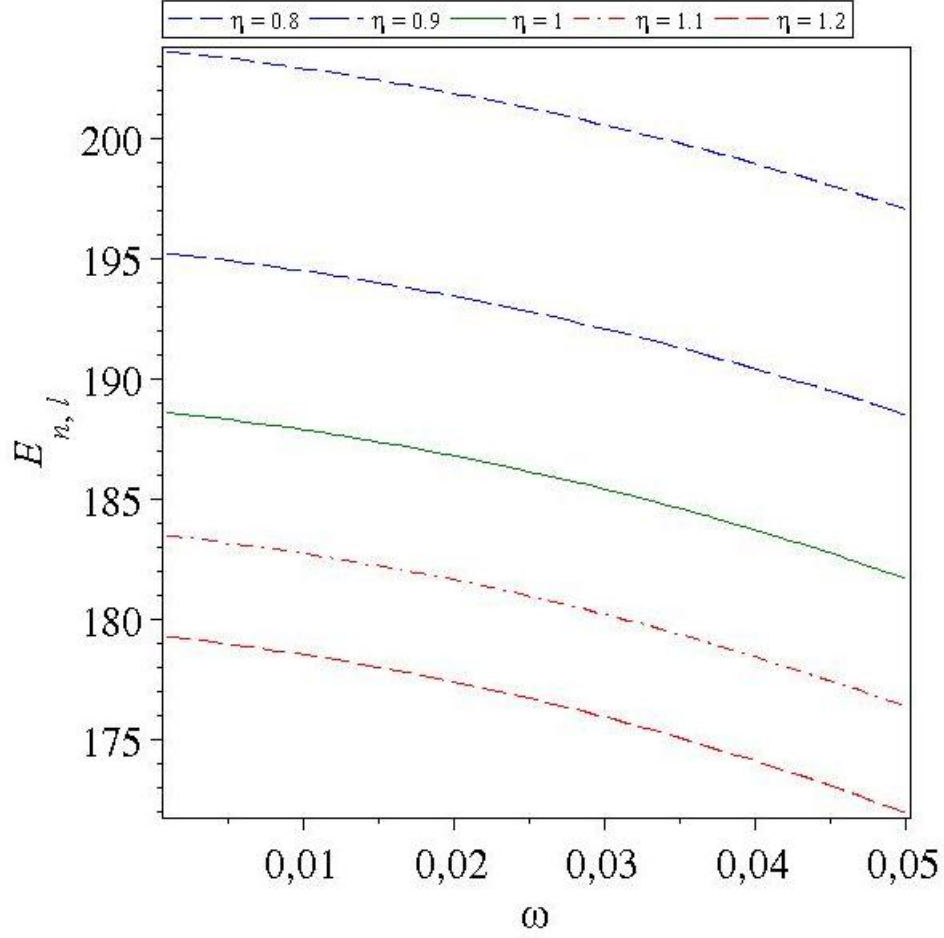


Figura 6.2: Gráfico da energia em função da velocidade de rotação ω para valores da desclinação η . Adotamos a carga elementar como $e = \sqrt{\alpha_e} = 0,08542454312$, onde $\alpha_e = \frac{1}{137,03599911}$ é a constante de estrutura fina, $B = 1T$, $M = 1$, $0 \leq n \leq 5$, $-10 \leq l \leq 10$, $\phi_{AB} = 1$, $s = 1$ e $a_1 = 9,0122 \cdot 10^{-6} eV.m^2$ e $a_2 = 2,222 \cdot 10^{-5} eV.m^{-2}$ são os parâmetros de Tan-Inkson [11].

Na figura 6.2, a energia decresce com o aumento da velocidade de rotação ω . Este decaimento é mais acentuado para valores de desclinação negativa, $\eta > 1$. Outro comportamento que foi objeto de análise, foi a influência da rotação na comparação do espectro de energia pelo fluxo *Aharonov-Bohm*. No contexto dos regimes de rotação, temos os seguintes comportamentos:

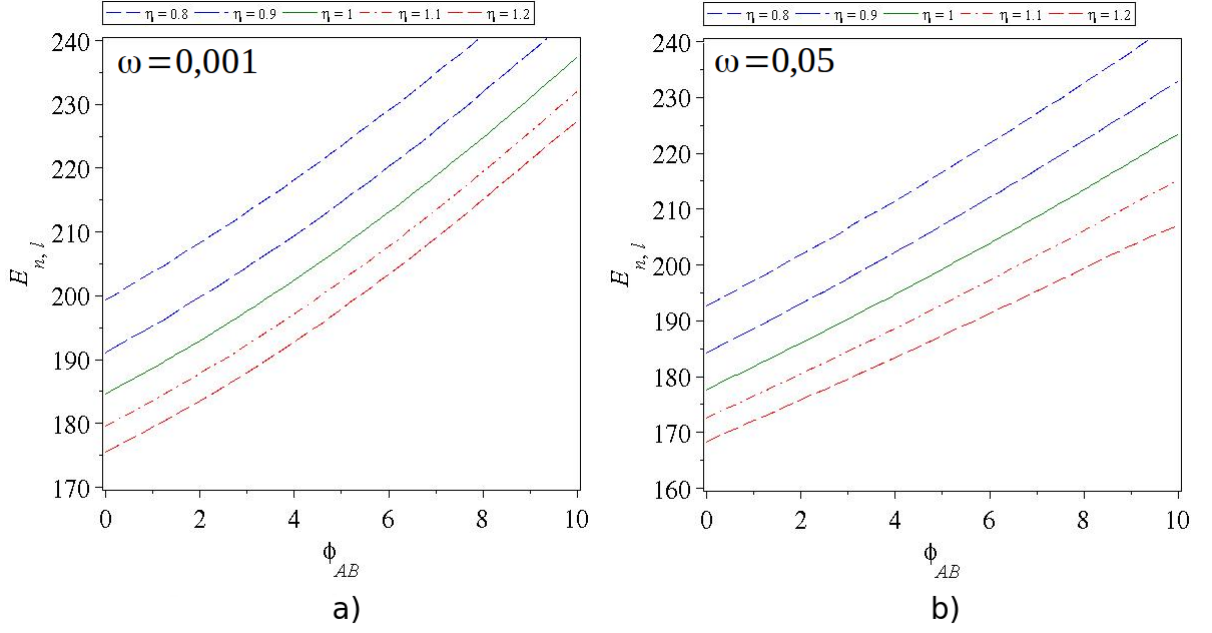


Figura 6.3: Gráfico da energia em função da razão de fluxo *Aharonov-Bohm*, para valores da desclinação η e da velocidade de rotação ω . Adotamos a carga elementar como $e = \sqrt{\alpha_e} = 0,08542454312$, onde $\alpha_e = \frac{1}{137,03599911}$ é a constante de estrutura fina, $B = 1T$, $M = 1$, $0 \leq n \leq 5$, $-10 \leq l \leq 10$, $s = 1$ e $a_1 = 9,0122 \cdot 10^{-6} eV.m^2$ e $a_2 = 2,222 \cdot 10^{-5} eV.m^{-2}$ são os parâmetros de Tan-Inkson [11].

Na figura 6.3, observamos que o espectro de energia quando comparado com a razão de fluxo *Aharonov-Bohm* com relação a rotação tem o seguinte comportamento: a energia cresce com ϕ_{AB} no regime de baixa rotação, mostrado na figura 6.3 a), ou seja, para $\omega = 0,001$; este comportamento se mantém também no regime intermediário $\omega = 0,05$, contudo há uma diminuição dos valores no eixo da energia como mostra a figura 6.3 b).

6.3 A Corrente Persistente no Grafeno Massivo sob Rotação

Em conformidade com os objetos de pesquisa nesta tese, obtemos também a corrente persistente no grafeno massivo com desclinação submetido a rotação. Como foi visto, a corrente persistente transportada por um determinado estado de elétrons é calculada usando a relação Byers-Yang [52] dada no capítulo 3. A equação (3.7) expressa

a corrente persistente como uma derivada da energia em relação ao fluxo magnético Φ_{AB} , ou seja

$$I = - \sum_{n,l} \frac{\partial E_{n,l}}{\partial \phi_{AB}}.$$

Neste cenário, calculamos a diferencial da equação (6.22) com relação ao fluxo *Aharonov-Bohm*, de modo que a corrente persistente no anel 2-D no grafeno massivo com defeito topológico do tipo desclinação, interagindo com campo magnético uniforme B alinhado ao eixo de rotação é escrita na forma extensa:

$$\begin{aligned} I = \sum_{n,l} & \left[\left(\frac{\mp e}{4\pi} \right) \left(\frac{L_s}{|L_s|} + 1 \right) M\Omega + \omega^2 \eta \left(\frac{\pm e}{4\pi} \right) \left(2 \left(L_s + \frac{s\eta}{2} \right) + \left(l + \frac{1}{2} \right) \right) \right] \\ & \times \left\{ M^2 + \left(2n + \frac{|L_s|}{\eta} + \frac{L_s}{\eta} + s + 1 \right) M\Omega \right. \\ & \left. + \omega^2 \left[(l + 1/2)^2 - \left(L_s + \frac{s\eta}{2} \right)^2 - (l + 1/2)(L_s + s\eta) \right] \right\}^{-1/2}. \end{aligned} \quad (6.27)$$

Na equação acima, temos as dependências das frequências do oscilador e ciclotrônica ω_0 e ω_c na devida ordem, dentro da frequência total Ω , além da dependência da velocidade angular ou frequência de rotação ω . Se fizermos $\omega \rightarrow 0$ vamos obter a corrente persistente para o anel quântico 2-D no grafeno massivo com desclinação, ou seja:

$$\begin{aligned} I = \sum_{n,l} & \left[\left(\frac{\mp e}{4\pi} \right) \left(\frac{L_s}{|L_s|} + 1 \right) M\Omega \right] \\ & \times \left\{ M^2 + M \left(\omega_0 s + \frac{\omega_c}{\eta} \right) \left(\frac{L_s + \eta s}{\eta} \right) \left(2n + \frac{|L_s|}{\eta} + 1 \right) M\Omega \right\}^{-1/2}, \end{aligned} \quad (6.28)$$

que é a equação (5.18) vista no capítulo 5 desta tese. Fazendo uma análise na equação (6.27), podemos classificar a corrente persistente total do sistema, como a soma de duas contribuições, ou seja, $I = I_A + I_\omega$, de modo que, temos respectivamente a corrente associada ao anel I_A :

$$\begin{aligned} I_A = \sum_{n,l} & \left[\left(\frac{\mp e}{4\pi} \right) \left(\frac{L_s}{|L_s|} + 1 \right) M\Omega \right] \\ & \times \left\{ M^2 + \left(2n + \frac{|L_s|}{\eta} + \frac{L_s}{\eta} + s + 1 \right) M\Omega \right. \\ & \left. + \omega^2 \left[(l + 1/2)^2 - \left(L_s + \frac{s\eta}{2} \right)^2 - (l + 1/2)(L_s + s\eta) \right] \right\}^{-1/2}, \end{aligned} \quad (6.29)$$

e a corrente associada a rotação I_ω , sendo esta uma corrente efetiva que surge com a rotação do grafeno massivo:

$$I_\omega = \sum_{n,l} \left[\omega^2 \eta \left(\frac{\pm e}{4\pi} \right) \left(2 \left(L_s + \frac{s\eta}{2} \right) + \left(l + \frac{1}{2} \right) \right) \right] \times \left\{ M^2 + \left(2n + \frac{|L_s|}{\eta} + \frac{L_s}{\eta} + s + 1 \right) M\Omega + \omega^2 \left[(l + 1/2)^2 - \left(L_s + \frac{s\eta}{2} \right)^2 - (l + 1/2)(L_s + s\eta) \right] \right\}^{-1/2}, \quad (6.30)$$

ou seja, um efeito puramente não inercial que surgiu neste sistema estudado. Dando sequência ao raciocínio dos capítulos anteriores, fizemos uma análise gráfica da razão de corrente $\frac{I}{I_0}$ pelo razão de fluxo ϕ_{AB} , nos regimes de rotação, como mostra as figuras abaixo:

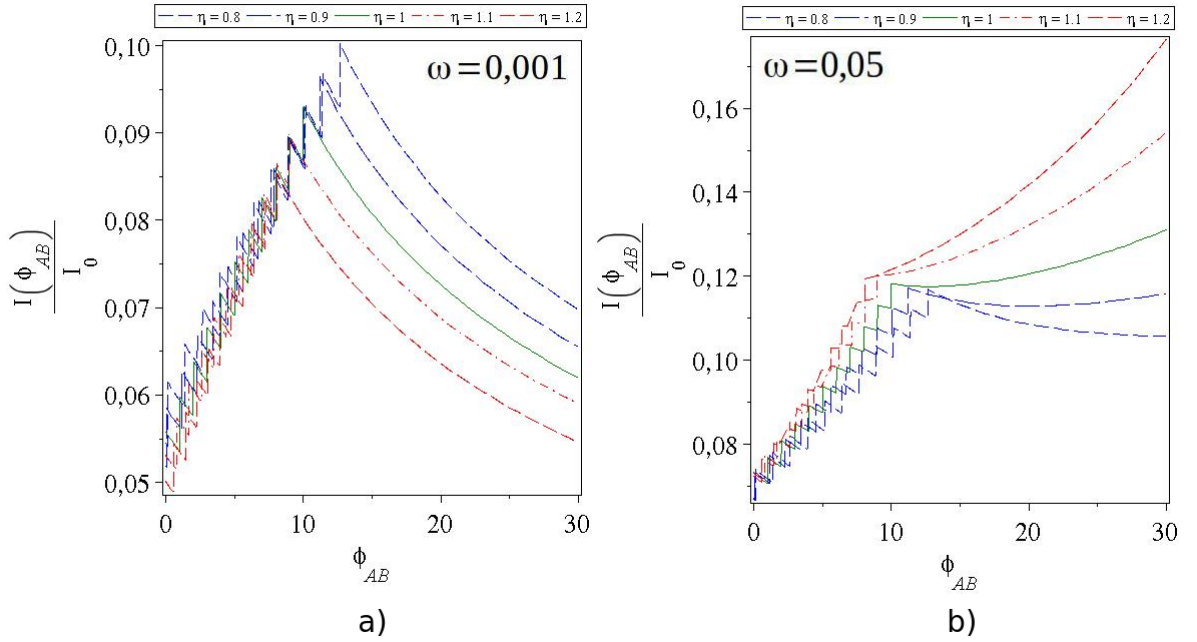


Figura 6.4: Gráfico do comportamento da corrente persistente em função da razão de fluxo magnético $\phi_{AB} = \frac{\Phi}{\Phi_0}$ para valores de η e da rotação ω . Neste caso, nós definimos a corrente $I_0 = \frac{1}{2\phi_0}$. Os valores para os outros termos são $B = 1T$, $M = 1$, $s = 1$, $-10 \leq l \leq 10$ e $0 \leq n \leq 5$, e $a_1 = 9,0122 \cdot 10^{-6} eV.m^2$ e $a_2 = 2,222 \cdot 10^{-5} eV.m^{-2}$.

Na figura 6.4 a), no regime de baixa rotação, $\omega = 0.001$, as correntes persistentes assinaladas pelo parâmetro topológico η , apresentam o comportamento periódico observado na referencia [42]. Neste regime de rotação, as correntes oscilam para uma faixa de

valores da razão de fluxo ϕ_{AB} para depois decair para valores elevados do mesmo. Ao aumentarmos a velocidade de rotação para o regime intermediário, dado pela figura 6.4 b), as correntes mantêm o comportamento periódico para alguns valores de ϕ_{AB} mas, ao contrário do caso anterior, após sair da faixa periódica, eles aumentam em valor com a rotação, ou seja, não decaem com o fluxo.

6.4 Magnetização no Anel Quântico 2-D no Grafeno Massivo sob Rotação

Dando sequência ao nosso estudo, também investigamos a magnetização que surge no anel quântico 2-D no grafeno massivo sob rotação. Assim como foi feito no capítulo 5, vamos considerando $T = 0$, para a quase-partícula na folha de grafeno massivo sobre rotação. Para obtermos uma expressão analítica para uma magnetização $\mathcal{M}$, vamos utilizar a definição da referência [69], onde a magnetização é definida pela derivada da energia interna do sistema, $U = \sum_{n,l} E_{n,l}$, pelo campo magnético B , ou seja a equação(5.19):

$$\mathcal{M}(B) = - \frac{\partial U}{\partial B} \Big|_N = - \sum_{n,l} \frac{\partial E_{n,l}}{\partial B},$$

onde é levado em conta o sistema com temperatura fixa $T = 0$ e a soma sobre todos N estados ocupados (N de partículas sem spin fixo). Desta forma, substituindo (6.22) na equação anterior, obtemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}(B) = & - \sum_{n,l} \frac{(se)}{2} \left[\left(\frac{2n + \frac{|L_s|}{\eta} + 1}{\eta} \right) + \left(\frac{L_s + \eta s}{\eta^2} \right) \right] \\ & \times \left\{ M^2 + \left(2n + \frac{|L_s|}{\eta} + \frac{L_s}{\eta} + s + 1 \right) M\Omega \right. \\ & \left. + \omega^2 \left[(l + 1/2)^2 - \left(L_s + \frac{s\eta}{2} \right)^2 - (l + 1/2)(L_s + s\eta) \right] \right\}^{-1/2}. \end{aligned} \quad (6.31)$$

Na equação (6.31), novamente temos a dependência das frequências do oscilador e ciclotrônica, ω_0 e ω_C , respectivamente, implícitas em Ω . Além disso, também temos a dependência da frequência angular ω como consequência da rotação da folha de grafeno

massivo. Também temos o fator η que caracteriza a presença do defeito topológico desclinação. Novamente se fizermos $\omega \rightarrow 0$, recuperamos o resultado:

$$\mathcal{M}(B) = - \sum_{n,l} \frac{(se)}{2} \left[\left(\frac{2n + \frac{|L_s|}{\eta} + 1}{\eta} \right) + \left(\frac{L_s + \eta s}{\eta^2} \right) \right] \times \left\{ M^2 + M \left(\frac{L_s + \eta s}{\eta} \right) \left(\omega_0 s + \frac{\omega_c}{\eta} \right) + \left(2n + \frac{|L_s|}{\eta} + 1 \right) M \Omega \right\}^{-1/2}, \quad (6.32)$$

que é a mesma equação (5.20), ou seja, a magnetização do anel quântico 2-D na folha de grafeno massivo com desclinação obtida no capítulo 5. Por fim, dando sequência de modo a concluirmos o ciclo desta tese, fizemos a análise gráfica do comportamento da magnetização pelo campo magnético, assim como nos casos anteriores, levando em conta os regimes de rotação:

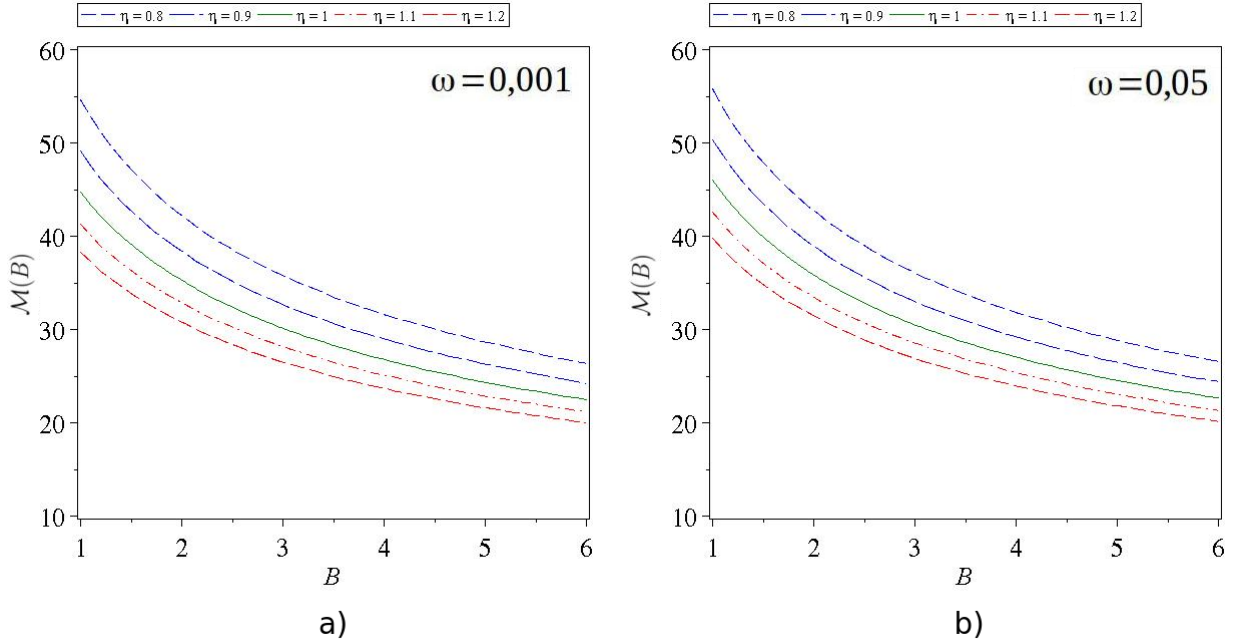


Figura 6.5: Gráfico do comportamento da magnetização em função do campo magnético B , para valores de η e da rotação ω . Os valores para os outros termos são $M = 1$, $s = -1$, $-10 \leq l \leq 10$ e $0 \leq n \leq 5$, e $a_1 = 9,0122 \cdot 10^{-6} \text{ eV} \cdot \text{m}^2$ e $a_2 = 2,222 \cdot 10^{-5} \text{ eV} \cdot \text{m}^{-2}$.

Na figura 6.5 a), o comportamento da magnetização no regime de baixa rotação $\omega = 0.001$, é semelhante ao caso do capítulo 5, do anel 2-D no grafeno massivo sem rotação. Ao aumentarmos para o regime intermediário da rotação dado pela figura 6.5 b), para $\omega = 0.05$, há um aumento dos valores iniciais da magnetização para as curvas caracterizadas

pelo parâmetro topológico η , que identifica a presença de desclinação positiva, negativa ou ausência do defeito.

Assim, neste capítulo nós estudamos a influência da rotação no confinamento do anel quântico bidimensional na folha do grafeno massivo na presença do defeito topológico do tipo desclinação. Neste caminho mostramos que, diante da rotação, dentro da restrição imposta na coordenada radial $0 < r < \frac{1}{\omega\eta}$, e dentro da aproximação $\omega r \ll 1$, surgiram efeitos não inercias na folha de grafeno massivo com desclinação: no espectro de energia dado pela equação (6.22); na corrente persistente (6.28), na qual verificamos uma componente de corrente efetiva de origem puramente rotativa dado pela equação (6.30) e por fim na magnetização deste sistema dado pela equação (6.31). Todas estas contribuições foram caracterizadas pela presença do termo ω introduzido na métrica da corda cósmica girante, demonstrando mais uma vez a versatilidade do grafeno como um grande laboratório para testar a teoria dos defeitos topológicos aplicada na matéria condensada.

Capítulo 7

Conclusões e Perspectivas

Nesta tese, estudamos as propriedades físicas da generalização relativística do modelo de anel quântico bidimensional de Tan-Ikson proposto por Bakke e Furtado, aplicado ao material conhecido como grafeno. Para tal intento, inicialmente no capítulo 2, fizemos uma revisão teórica sobre este material, que foi obtido experimentalmente por Novoselov e Geim, quebrando o paradigma da inexistência de materiais cristalinos bidimensionais livres. No mesmo capítulo, expomos as propriedades eletrônicas, o modelo de rede cristalina, a estrutura de bandas e a energia, obtida a partir do método *tight-binding*. Na sequência do mesmo capítulo, mostramos que o espectro de energia, no regime de baixas energias ou pequenos momentos, descreve a dinâmica dos portadores de carga como férmions sem massa, portanto descritos pela equação de Dirac em $(2+1)$ dimensões.

Vimos que o grafeno pode ser entendido como a sobreposição de duas sub-redes cristalinas A e B, representadas por spinors da equação de Dirac. Estudamos ainda a associação da teoria dos defeitos topológicos de Katanaev e Volovick com o grafeno, elegendo como objeto de investigação para toda a tese, o defeito topológico conhecido como desclinação, obtido pelo processo de “corte-e-cola” ou processo de Volterra, e representado pela métrica da corda cósmica (2.20), onde o parâmetro α assina a presença do defeito. Na aplicação deste processo, o qual dá um aspecto cônico a folha do grafeno, com curvatura positiva ou negativa, demonstrado na figura 2.5, vimos que em ambos os casos, átomos da mesma sub-rede são conectados de modo que tornou-se necessário adicionar um campo não abeliniano a_μ para corrigir a descontinuidade da função de onda Ψ que carrega os spinors de cada rede. Por fim obtemos a conexão spinorial dado pela equação (2.32) que representa a ligação entre o espaço-tempo local do defeito e o espaço-tempo global e que,

assim como o campo a_μ , fazem parte do hamiltoniano de Dirac no grafeno na equação (2.25), sendo os mesmos utilizados nos capítulos 4 e 5 desta tese.

Dando sequência a revisão bibliográfica, no capítulo 3, estudamos os confinamentos conhecidos na literatura como anéis quânticos e os efeitos físicos associados a estes, o efeito *Aharonov-Bohm* e as correntes persistentes. No efeito *Aharonov-Bohm*, o fluxo magnético Φ_{AB} que penetra o centro do anel, induz uma contribuição periódica ao espectro de energia do elétron neste confinamento além de ser reponsável pelo aparecimento das correntes persistentes. Verificou-se que ambos fenômenos são de natureza puramente quântica. Na sequência estudamos o modelo de confinamento anelar analítico bidimensional de Tan-Ikson, o qual engloba em seu potencial de confinamento os parâmetros a_1 e a_2 : se suprimirmos algum destes parâmetros, então serão obtidos pontos quânticos ou anti-pontos quânticos. Neste modelo, para o elétron com massa efetiva M , também é possível obter a frequência característica do oscilador harmônico ω_0 e a frequência ciclotrônica ω_c , quando consideramos além do fluxo Φ_{AB} no centro do anel, um campo magnético uniforme B adicionado no potencial vetor na equação (3.13), de maneira a obtermos o hamiltoniano anelar (3.15) e seus autovalores associados (3.16). Mostramos como este modelo serviu de base para a extensão relativística obtida por Bakke e Furtado na equação (3.20), que é um modelo de anel quântico bidimensional alicerçado no acoplamento conhecido na literatura por oscilador de Dirac. Tal modelo mostrou-se como uma importante ferramenta na investigação de quase-partículas em sistemas ultrarelativísticos, sendo um dos objetos de investigação no corpo desta tese, quando aplicado ao contexto do grafeno.

No capítulo 4, estudamos o confinamento anelar quântico 2-D no grafeno, usando o modelo de oscilador não massivo dado pela equação (4.1), de modo que dividimos nossa investigação em duas etapas: na primeira, estudamos o confinamento anelar 2-D na folha de grafeno plano (sem defeito topológico), na qual obtemos o espectro de energia, as correntes persistentes e as componentes paralelas e antiparalelas dos spinors de energia positiva; na segunda etapa, consideramos a folha de grafeno submetida ao defeito topológico desclinação, de modo que obtemos o espectro de energia, as correntes persistentes e os spinors associados a este sistema. Vimos que o termo de defeito acrescenta contribuições topológicas, indicadas pelo parâmetro α . Estes resultados foram publicados na *Annals of Physics* e poderão ser utilizados em realizações futuras nas quais envolvam computação quântica entre outras.

No capítulo 5, estudamos o confinamento anelar quântico 2-D no grafeno massivo submetido ao defeito topológico do tipo desclinação com a adição de um campo magnético uniforme B ao fluxo Φ_{AB} no potencial vetor, utilizando o confinamento dado pela equação(3.20). Neste sistema em particular, o efeito de massa efetiva M surge com o aumento da separação do *gap* entre as bandas de condução e valência no grafeno. Nesta conjuntura, obtemos as auto-energias, as correntes persistentes e a magnetização, grandeza física que surgiu no sistema ao intruduzimos o campo magnético B somado ao fluxo Φ_{AB} que vaza pelo centro do anel e por fim as componentes paralelas e antiparalelas dos spinores de energia positiva. Verificamos mais uma vez que defeito topológico tem uma influência, de modo que se apresenta nestes resultados, através do parâmetro α . Nesta via, fizemos a análise gráfica destes resultados que foram submetidos para publicação na *The European Physical Journal Plus*.

Finalmente no capítulo 6, assim como no capítulo anterior, estudamos o confinamento quântico anelar 2-D, tendo seu centro vazado pelo fluxo Φ_{AB} adicionado ao campo magnético B , no grafeno massivo submetido a desclinação. Entretanto, impelimos desta vez um efeito de rotação através das transformações de variáveis nas coordenadas temporal $t' = t$, radial $r' = r$ e angular $\varphi' = \varphi + \omega t$ na métrica da corda cósmica, obtendo a métrica conhecida como corda cósmica girante (6.2), que limita o confinamento da quase-partícula ao espaço cônico no intervalo de $0 < r < \frac{1}{\omega r}$, onde ω é a velocidade angular de rotação neste referencial. Nesta perspectiva, a nova métrica produziu um conjunto de conexões spinoriais próprias deste sistema definidas na equação (6.6), cujo parâmetro de assinatura do defeito topológico é definido por η . Tais conexões foram utilizadas na obtenção da equação de Dirac na folha de grafeno massivo cônica sob rotação (6.7). Provocamos a rotação neste sistema essencialmente com o propósito de investigar os efeitos não inercias que surgem no regime $\omega r \ll 1$, ou seja, quando a rotação é muito menor que a velocidade de Fermi. Estes efeitos foram observados no espectro de energia, na corrente persistente, a qual ganhou uma componete de origem puramente rotativa, na magnetização e nas componentes paralelas e antiparalelas dos spinores de energia positiva: em todos esses resultados, surgiram uma dependência de ω , a qual demonstramos que, fazendo $\omega \rightarrow 0$, resgatamos os resultados do capítulo anterior.

Também fizemos a análise gráfica destes resultados que serão em breve submetidos para publicação. Como perspectivas futuras pretendemos usar o modelo de confinamento anelar quântico 2-D, para investigarmos o comportamento do grafeno em espaço topológico de curvatura negativa, na literatura matemática conhecido como plano de Lobachevsky, visando entender as influências que este tipo de topologia pode ocasionar, sendo que este trabalho já está em desenvolvimento.

Apêndice A

A Função Hipergeométrica Confluente

A.1 Solução da Função Hipergeométrica Confluente

A equação diferencial é escrita na forma:

$$z \frac{d^2 F(z)}{dz^2} + (b - z) \frac{dF(z)}{dz} - aF(z) = 0 \quad (\text{A.1})$$

com singularidade $z = 0$ e uma singularidade irregular $z \rightarrow \infty$ é conhecida na literatura como Equação Hipergeométrica Confluente ou *Equação de Kummer*, [60]. A solução desta equação é dado pela série:

$$F(z) = {}_1F_1(a, b; z) = 1 + \frac{a}{b} \frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)x^2}{b(b+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots \quad (\text{A.2})$$

que pode ser escrita de maneira mais compacta como:

$${}_1F_1(a, b; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{(b)_n} \frac{z^n}{n!} \quad (\text{A.3})$$

onde $(a)_n$ e $(b)_n$ são os símbolos de Pochhman, que são definidos como:

$$(a)_n = \frac{(a+n-1)!}{(a-1)!} \quad (a)_0 = 1 \quad (\text{A.4})$$

A série (A.3) é convergente para qualquer z finito. O parâmetro a é arbitrário, enquanto o parâmetro $b \in \mathbb{Z}_+$. Caso a seja um número inteiro negativo ou zero, a série reduz-se para um polinômio de grau $|a|$.

A.2 Limites Assintóticos da Função Hipergeométrica Confluente

A representação integral da Equação de Kummer:

$${}_1F_1(a, b; z) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b-a)} \int_0^1 e^{zt} t^{a-1} (1-t)^{b-a-1} dt \quad (\text{A.5})$$

fazendo a mudança de variável $u = -tz$ obtemos:

$${}_1F_1(a, b; z) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b-a)} (-z)^{-a} (I + II) \quad (\text{A.6})$$

onde

$$I = \int_0^\infty e^{-u} u^{a-1} \left(1 + \frac{u}{z}\right)^{b-a-1} du \quad e \quad II = \int_\infty^{-z} e^{-u} u^{a-1} \left(1 + \frac{u}{z}\right)^{b-a-1} du \quad (\text{A.7})$$

Quando $|z| \rightarrow \infty$ temos

$$I \approx \int_0^\infty e^{-u} u^{a-1} du = \Gamma(a) \quad e \quad II \approx \Gamma(b-a) (-e)^z z^{a-b+1} \quad (\text{A.8})$$

Onde $\Gamma(a)$ é a definição da função Gamma. Usando (A.7) e (A.8) na equação (A.6) obtemos:

$${}_1F_1(a, b; z) \approx \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)} (-z)^{-a} + \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-b} \quad (\text{A.9})$$

Nesta equação como para $b > a$ o primeiro termo domina sobre o segundo termo da equação a cima, ficando, portanto:

$${}_1F_1(a, b; z) \approx \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-b} \quad (\text{A.10})$$

A função tende a zero no limite assintótico somente quando $\Gamma(a) \rightarrow \infty$, por definição isso só ocorre $\Gamma(-n) = \pm\infty$. Assim o parâmetro a desta função deve ser zero ou um número inteiro negativo. De tal forma que a série hipergeométrica confluyente torna-se um polinômio.

A.3 Derivada da Função Hipergeométrica Confluente

A seguinte relação de diferenciação pra esta função será util:

$$\frac{d^n}{dz^n} \{ {}_1F_1(a, b; z) \} = \frac{a_n}{b_n} {}_1F_1(a+n, b+n; z) \quad (\text{A.11})$$

com n sendo a ordem da derivada.

A.4 Integração Envolvendo a Hipergeométrica Confluyente

A integral do tipo:

$$J_\nu = \int_0^\infty e^{-kz} z^{\nu-1} [{}_1F_1(-n', \gamma; kz)]^2 dz \quad (\text{A.12})$$

será útil no cálculo da normalização da equação radial dos problemas expostos neste trabalho. Essa integral é calculada [80] como uma série dado por:

$$J_\nu = \frac{\Gamma(\nu)n'!(\gamma-1)!}{k^\nu(\gamma+n')!} \times \left\{ 1 + \sum_{s=0}^{n'-1} \frac{n'(n'-1)\dots(n'-s)(\gamma-\nu-s-1)(\gamma-\nu-s)\dots(\gamma-\nu+s)}{[(s+1)!]^2\gamma(\gamma+1)\dots(\gamma+s)} \right\} \quad (\text{A.13})$$

A.4.1 A Normalização da Função de Onda Radial

A normalização da função (4.15) é padrão, e ocorrerá em todo desenvolvimento desta tese, ou seja, será aplicado para os capítulos 5 e 6, mudando apenas os parâmetros associados para cada sistema estudado e suas respectivas funções hipergeométricas confluentes. Vamos reescrevê-la na forma:

$$\psi_s = N_s \times {}_1F_1(-n, |\vartheta_s| + 1, \sqrt{2a_2}r^2), \quad (\text{A.14})$$

onde N_s é uma função que contém a constante de normalização A , e pode ser reescrita como:

$$N_s = A.e^{i(l+1/2)\varphi} e^{-\sqrt{\frac{a_2}{2}}r^2} (2a_2)^{\frac{|\vartheta_s|}{4}} r^{|\vartheta_s|}. \quad (\text{A.15})$$

Esta equação também servirá para obtermos o espinor ϕ dado pela equação (4.16). A normalização da função (4.15) é dada por

$$|A| \int_0^\infty \psi^* \psi r dr = 1, \quad (\text{A.16})$$

de modo que será preciso calcular a derivada da hipergeométrica dada pela equação (A.11), ou seja:

$$\frac{d}{dr} \{ {}_1F_1(-n, |\vartheta_s| + 1, \sqrt{2a_2}r^2) \} = \frac{(-n)}{|\vartheta_s| + 1} {}_1F_1(-n + 1, |\vartheta_s| + 2, \sqrt{2a_2}r^2) \times 2\sqrt{2a_2}r. \quad (\text{A.17})$$

Na sequência, será calculado a integração dada por (A.12). De modo que, fazendo a transformação de variável $z = \sqrt{2a_2}r^2$ temos:

$$\frac{|A|^2}{2(2a_2)^{\frac{1}{2}}} \int_0^\infty e^{-z} z^{|\vartheta_s|} [{}_1F_1(-n', |\vartheta_s| + 1; \sqrt{2a_2}r^2)]^2 dz = 1 \quad (\text{A.18})$$

comparando com (A.12) temos a relação de parâmetros: $\gamma = \nu = |\vartheta_s| + 1$, $n' = n$ e $k = 1$. Para estes valores o somatória em (A.13) vai a zero, restando apenas:

$$\frac{|A|^2}{2(2a_2)^{\frac{1}{2}}} \left(\frac{\Gamma(|\vartheta_s| + 1)n!(|\vartheta_s|)!}{(|\vartheta_s| + n + 1)!} \right) = 1 \quad (\text{A.19})$$

contudo da propriedade da função gama : $\Gamma(N + 1) = N!$, reescrevemos a constante de normalização como:

$$|A| = \left(\frac{\sqrt{8a_2}\Gamma(|\vartheta_s| + n + 1)}{\Gamma(n + 1) [\Gamma(|\vartheta_s| + 1)]^2} \right)^{1/2} \quad (\text{A.20})$$

Referências Bibliográficas

- [1] RICHARD P FEYNMAN. There's plenty of room at the bottom. *Engineering and science*, 23(5):22–36, 1960.
- [2] WADE ADAMS LINDA WILLIAMS. *Nanotechnology Demystified*. McGraw-Hill eBooks, 2007.
- [3] PATRICK COUVREUR AND CHRISTINE VAUTHIER. Nanotechnology: intelligent design to treat complex disease. *Pharmaceutical research*, 23(7):1417–1450, 2006.
- [4] RETIRADAS DA WEB. NA ORDEM DE APARIÇÃO. \justify"http:creationwiki.org/pt/Ficheiro:Lithium_Atom.png", "https:en.wikipedia.org/wiki/Fullerene#/media/File:C60a.png", "https:commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=122043", "https://commons.wikimedia.org/wiki/File:ESEM_BSE_blue_cattle_dog_hair_No1198_10kV_1000x_700Pa.jpg", "http:www.webopedia.com/TERM/C/chip.html""https:commons.wikimedia.org/wiki/File:Uomo_Vitruviano.jpg". [Online; acessado em 10 de Abril de 2017].
- [5] N DAVID MERMIN. Crystalline order in two dimensions. *Physical Review*, 176(1):250, 1968.
- [6] MI KATSNELSON, KS NOVOSELOV, AND AK GEIM. Chiral tunnelling and the klein paradox in graphene. *Nature physics*, 2(9):620–625, 2006.
- [7] ANDREA F YOUNG AND PHILIP KIM. Quantum interference and klein tunnelling in graphene heterojunctions. *Nature Physics*, 5(3):222–226, 2009.
- [8] YUANBO ZHANG, YAN-WEN TAN, HORST L STORMER, AND PHILIP KIM. Experimental observation of the quantum hall effect and berry's phase in graphene. *Nature*, 438(7065):201–204, 2005.

- [9] K BAKKE, C FURTADO, AND S SERGEENKOV. Holonomic quantum computation associated with a defect structure of conical graphene. *EPL (Europhysics Letters)*, 87(3):30002, 2009.
- [10] K BAKKE AND C FURTADO. On the confinement of a dirac particle to a two-dimensional ring. *Physics Letters A*, 376(15):1269–1273, 2012.
- [11] WC TAN AND JC INKSON. Electron states in a two-dimensional ring-an exactly soluble model. *Semiconductor science and technology*, 11(11):1635, 1996.
- [12] PHILIP RICHARD WALLACE. The band theory of graphite. *Physical Review*, 71(9):622, 1947.
- [13] GORDON W SEMENOFF. Condensed-matter simulation of a three-dimensional anomaly. *Physical Review Letters*, 53(26):2449, 1984.
- [14] KOSTYA S NOVOSELOV, ANDRE K GEIM, SERGEI V MOROZOV, D JIANG, Y_ZHANG, SERGEY V DUBONOS, IRINA V GRIGORIEVA, AND ALEXANDR A FIRSOV. Electric field effect in atomically thin carbon films. *science*, 306(5696):666–669, 2004.
- [15] ANDRE K GEIM AND KONSTANTIN S NOVOSELOV. The rise of graphene. *Nature materials*, 6(3):183–191, 2007.
- [16] JW EVANS, PA THIEL, AND MARIA C BARTELT. Morphological evolution during epitaxial thin film growth: Formation of 2d islands and 3d mounds. *Surface Science Reports*, 61(1):1–128, 2006.
- [17] KS NOVOSELOV, D JIANG, F SCHEDIN, TJ BOOTH, VV KHOTKEVICH, SV MOROZOV, AND AK GEIM. Two-dimensional atomic crystals. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 102(30):10451–10453, 2005.
- [18] P. LAMBIN AND J. FINK. Carbon materials, electronic states of. In Franco Bassani, Gerald L. Liedl, and Peter Wyder, editors, *Encyclopedia of Condensed Matter Physics*, pages 143 – 151. Elsevier, Oxford, 2005.
- [19] S NOVOSELOV. The nobel prize in physics 2010 honours two scientists, who have made the decisive contributions to this development. they are andre k. geim and

konstantin s. novoselov, both at the university of manchester, uk. they have succeeded in producing, isolating, identifying and characterizing graphene. 2010.

- [20] NARENDRA KUMAR AND SUNITA KUMBHAT. *Carbon-Based Nanomaterials*, pages 189–236. John Wiley & Sons, Inc, 2016.
- [21] AH CASTRO NETO, F GUINEA, NUNO MR PERES, KOSTYA S NOVOSELOV, AND ANDRE K GEIM. The electronic properties of graphene. *Reviews of modern physics*, 81(1):109, 2009.
- [22] CHARLES KITTEL. *Introduction to Solid State Physics*,. John Wiley and Sons, November 2004.
- [23] EDUARDO FRADKIN. *Field theories of condensed matter physics*. Cambridge University Press, 2013.
- [24] VP GUSYNIN, SG SHARAPOV, AND JP CARBOTTE. Ac conductivity of graphene: from tight-binding model to 2+ 1-dimensional quantum electrodynamics. *International Journal of Modern Physics B*, 21(27):4611–4658, 2007.
- [25] CRISTINA BENA AND GILLES MONTAMBAUX. Remarks on the tight-binding model of graphene. *New Journal of Physics*, 11(9):095003, 2009.
- [26] MARÍA AH VOZMEDIANO, MI KATSNELSON, AND FRANCISCO GUINEA. Gauge fields in graphene. *Physics Reports*, 496(4):109–148, 2010.
- [27] AL MACKAY ET AL. The language of shape-the role of curvature in condensed matter physics, chemistry and biology, by s. hyde, s. andersson, k. larsson, z. blum, t. landh, s. lidin, bw ninham. *Nature*, 387(6630):249–249, 1997.
- [28] JANNIK C MEYER, ANDRE K GEIM, MIKHAIL I KATSNELSON, KONSTANTIN S NOVOSELOV, TIM J BOOTH, AND SIEGMAR ROTH. The structure of suspended graphene sheets. *Nature*, 446(7131):60–63, 2007.
- [29] ELENA STOLYAROVA, KWANG TAEG RIM, SUNMIN RYU, JANINA MAULTZSCH, PHILIP KIM, LOUIS E BRUS, TONY F HEINZ, MARK S HYBERTSEN, AND GEORGE W FLYNN. High-resolution scanning tunneling microscopy imaging of mesoscopic graphene sheets on an insulating surface. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 104(22):9209–9212, 2007.

- [30] EUN-AH KIM AND AH CASTRO NETO. Graphene as an electronic membrane. *EPL (Europhysics Letters)*, 84(5):57007, 2008.
- [31] TO WEHLING, AV BALATSKY, MI KATSNELSON, AI LICHTENSTEIN, K SCHARNBERG, AND R WIESENDANGER. Local electronic signatures of impurity states in graphene. *Physical Review B*, 75(12):125425, 2007.
- [32] J GONZÁLEZ, F GUINEA, AND MAH VOZMEDIANO. Electron-electron interactions in graphene sheets. *Physical Review B*, 63(13):134421, 2001.
- [33] ALBERTO CORTIJO AND MARIA AH VOZMEDIANO. Electronic properties of curved graphene sheets. *EPL (Europhysics Letters)*, 77(4):47002, 2007.
- [34] ALBERTO CORTIJO AND MARÍA AH VOZMEDIANO. Effects of topological defects and local curvature on the electronic properties of planar graphene. *Nuclear Physics B*, 763(3):293–308, 2007.
- [35] MO KATANAEV AND IV VOLOVICH. Theory of defects in solids and three-dimensional gravity. *Annals of Physics*, 216(1):1–28, 1992.
- [36] ROLAND A PUNTIGAM AND HARALD H SOLENG. Volterra distortions, spinning strings, and cosmic defects. *Classical and Quantum Gravity*, 14(5):1129, 1997.
- [37] MICHAEL V BERRY. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. In *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, volume 392, pages 45–57. The Royal Society, 1984.
- [38] CLAUDIO FURTADO, FERNANDO MORAES, AND AM DE M CARVALHO. Geometric phases in graphitic cones. *Physics Letters A*, 372(32):5368–5371, 2008.
- [39] CLAUDIO FURTADO, AM DE M. CARVALHO, AND CA DE LIMA RIBEIRO. Aharonov–bohm effect and disclinations in an elastic medium. *Modern Physics Letters A*, 21(17):1393–1403, 2006.
- [40] PAUL E LAMMERT AND VINCENT H CRESPI. Graphene cones: Classification by fictitious flux and electronic properties. *Physical Review B*, 69(3):035406, 2004.
- [41] JIANNIS K PACHOS. Manifestations of topological effects in graphene. *Contemporary Physics*, 50(2):375–389, 2009.

- [42] MJ BUENO, J LEMOS DE MELO, CLAUDIO FURTADO, AND ALEXANDRE M DE M CARVALHO. Quantum dot in a graphene layer with topological defects. *The European Physical Journal Plus*, 129(9):1–11, 2014.
- [43] DAVID MCMAHON. *Relativity demystified*. Tata McGraw-Hill Education, 2006.
- [44] MIKIO NAKAHARA. *Geometry, topology and physics*. CRC Press, 2003.
- [45] T. IHN, A. FUHRER, T. HEINZEL, K. ENSSLIN, W. WEGSCHEIDER, AND M. BICHLER. Marvellous things in marvellous rings: energy spectrum, spins and persistent currents. *Physica E Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 16:83–89, January 2003.
- [46] MARKUS BÜTTIKER, YOSEPH IMRY, AND ROLF LANDAUER. Josephson behavior in small normal one-dimensional rings. *Physics letters a*, 96(7):365–367, 1983.
- [47] YAKIR AHARONOV AND DAVID BOHM. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory. *Physical Review*, 115(3):485, 1959.
- [48] RG CHAMBERS. Shift of an electron interference pattern by enclosed magnetic flux. *Physical Review Letters*, 5(1):3, 1960.
- [49] AKIRA TONOMURA, NOBUYUKI OSAKABE, TSUYOSHI MATSUDA, TAKESHI KAWASAKI, JUNJI ENDO, SHINICHIRO YANO, AND HIROJI YAMADA. Evidence for aharonov-bohm effect with magnetic field completely shielded from electron wave. *Physical Review Letters*, 56(8):792, 1986.
- [50] J.J. SAKURAI. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
- [51] S VIEFERS, P KOSKINEN, P SINGHA DEO, AND M MANNINEN. Quantum rings for beginners: energy spectra and persistent currents. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 21(1):1–35, 2004.
- [52] N. BYERS AND C. N. YANG. Theoretical considerations concerning quantized magnetic flux in superconducting cylinders. *Phys. Rev. Lett.*, 7:46–49, Jul 1961.
- [53] GREGORY L. TIMP. *Nanotechnology*. Springer, 1999.

- [54] RC ASHOORI. Electrons in artificial atoms. *Nature*, 379(6564):413, 1996.
- [55] M MOSHINSKY AND A SZCZEPANIAK. The dirac oscillator. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 22(17):L817, 1989.
- [56] A BERMUDEZ, MA MARTIN-DELGADO, AND A LUIS. Nonrelativistic limit in the $2+1$ dirac oscillator: A ramsey-interferometry effect. *Physical review A*, 77(3):033832, 2008.
- [57] MH PACHECO, RR LANDIM, AND CAS ALMEIDA. One-dimensional dirac oscillator in a thermal bath. *Physics Letters A*, 311(2):93–96, 2003.
- [58] P SCHLUTER, K-H WIETSCHORKE, AND W GREINER. The dirac equation in orthogonal coordinate systems. i. the local representation. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 16(9):1999, 1983.
- [59] WALTER GREINER. Relativistic quantum mechanics-wave equation, 2000.
- [60] FRANK WJ OLVER. *NIST Handbook of Mathematical Functions Hardback and CD-ROM*. Cambridge University Press, 2010.
- [61] LESLIE L FOLDY AND SIEGFRIED A WOUTHUYSEN. On the dirac theory of spin $1/2$ particles and its non-relativistic limit. *Physical Review*, 78(1):29, 1950.
- [62] JOSÉ AMARO NETO, MJ BUENO, AND CLAUDIO FURTADO. Two-dimensional quantum ring in a graphene layer in the presence of a aharonov–bohm flux. *Annals of Physics*, 373:273–285, 2016.
- [63] VICTOR M VILLALBA. Exact solution of the two-dimensional dirac oscillator. *Physical Review A*, 49(1):586, 1994.
- [64] KNUT BAKKE AND CLAUDIO FURTADO. Holonomic quantum computation with the aharonov–casher setup associated with topological defects. *Quantum Information & Computation*, 11(5):444–455, 2011.
- [65] MICHAEL S FUHRER. Critical mass in graphene. *Science*, 340(6139):1413–1414, 2013.

- [66] B HUNT, JD SANCHEZ-YAMAGISHI, AF YOUNG, M YANKOWITZ, BRIAN J LEROY, K WATANABE, T TANIGUCHI, P MOON, M KOSHINO, P JARILLO-HERRERO, ET AL. Massive dirac fermions and hofstadter butterfly in a van der waals heterostructure. *Science*, 340(6139):1427–1430, 2013.
- [67] SIVABRATA SAHU AND GC ROUT. Study of band gap opening in graphene by impurity and substrate-mediated interactions. *Advanced Science Letters*, 20(3-4):834–837, 2014.
- [68] GEUSA DE A MARQUES, CLÁUDIO FURTADO, VB BEZERRA, AND FERNANDO MORAES. Landau levels in the presence of topological defects. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 34(30):5945, 2001.
- [69] W-C TAN AND JC INKSON. Magnetization, persistent currents, and their relation in quantum rings and dots. *Physical Review B*, 60(8):5626, 1999.
- [70] L HERRERA. The relativistic transformation to rotating frames. *arXiv preprint gr-qc/9911015*, 1999.
- [71] NEIL ASHBY. The sagnac effect in the global positioning system. In *Relativity in Rotating Frames*, pages 11–28. Springer, 2004.
- [72] BAHRAM MASHHOON. Neutron interferometry in a rotating frame of reference. *Physical review letters*, 61(23):2639, 1988.
- [73] FRIEDRICH W HEHL AND WEI-TOU NI. Inertial effects of a dirac particle. *Physical Review D*, 42(6):2045, 1990.
- [74] ALEXANDER VILENKIN. Cosmic strings and domain walls. *Physics reports*, 121(5):263–315, 1985.
- [75] MUKUNDA ARYAL, LH FORD, AND ALEXANDER VILENKIN. Cosmic strings and black holes. *Physical Review D*, 34(8):2263, 1986.
- [76] K BAKKE. Rotating effects on the dirac oscillator in the cosmic string spacetime. *General Relativity and Gravitation*, 45(10):1847–1859, 2013.

- [77] K BAKKE, C FURTADO, AND JR NASCIMENTO. Geometric quantum phase in the spacetime of topological defects. In *Journal of Physics: Conference Series*, volume 306, page 012069. IOP Publishing, 2011.
- [78] KNUT BAKKE AND CLAUDIO FURTADO. Geometric phase for a neutral particle in rotating frames in a cosmic string spacetime. *Physical Review D*, 80(2):024033, 2009.
- [79] PAUL STRANGE AND LEWIS H RYDER. The dirac oscillator in a rotating frame of reference. *Physics Letters A*, 380(42):3465–3468, 2016.
- [80] LEV DAVIDOVICH LANDAU AND EVGENII MIKHAILOVICH LIFSHITZ. *Quantum mechanics: non-relativistic theory*, volume 3. Elsevier, 2013.