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

Felipe Azevedo Gomes

Uso de Geometria no Estudo de Nanocones Duplos de Carbono e Mantos de Invisibilidade.

JOÃO PESSOA
2018

Felipe Azevedo Gomes

Uso de Geometria no Estudo de Nanocones Duplos de Carbono e Mantos de Invisibilidade.

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal da Paraíba, como requisito parcial para a obtenção do Título de Doutor em Física. Área de concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes

Coorientador: Prof. Dr. Valdir Barbosa Bezerra

JOÃO PESSOA
2018

Catalogação na publicação
Seção de Catalogação e Classificação

G633u Gomes, Felipe A.
Uso de Geometria no Estudo de Nanocones Duplos de Carbono e Mantos de Invisibilidade / Felipe A Gomes. - João Pessoa, 2018.
92 f. : il.

Orientação: Fernando JS Moraes.
Coorientação: Valdir B Bezerra.
Tese (Doutorado) - UFPB/CCEN.

1. Grafeno, Cones Duplos, Metamateriais. I. Moraes, Fernando JS. II. Bezerra, Valdir B. III. Título.

UFPB/CCEN

Felipe Azevedo Gomes

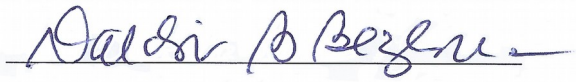
Uso de Geometria no Estudo de Nanocones Duplos de Carbono e Mantos de Invisibilidade.

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal da Paraíba, como requisito parcial para a obtenção do Título de Doutor em Física. Área de concentração: Física da Matéria Condensada.

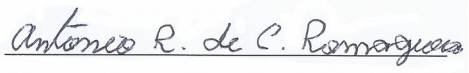
Aprovada em 30/07/2018

Banca Examinadora

Prof. Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes
Universidade Federal da Paraíba – UFPB
Orientador



Prof. Dr. Valdir Barbosa Bezerra
Universidade Federal da Paraíba – UFPB
Coorientador



Prof. Dr. Antônio Rodrigues de Castro Romaguera
Universidade Federal Rural de Pernambuco – UFRPE

Prof. Dr. Anderson Luiz da Rocha e Barbosa
Universidade Federal Rural de Pernambuco – UFRPE

Prof. Dr. Bertúlio de Lima Bernardo
Universidade Federal da Paraíba – UFPB

Prof. Dr. Tierry Marcelino Passerat de Silans
Universidade Federal da Paraíba – UFPB

JOÃO PESSOA
2018

Esta tese é dedicada a minha esposa
e aos meus pais, por sempre me apoiarem
e estarem ao meu lado.

AGRADECIMENTOS

Agradeço em primeiro lugar a Jeová Deus, pelo dom da vida e por sempre me guiar. Agradeço também ao meu orientador prof. Dr. Fernando Moraes, pela confiança demonstrada e conselhos oportunos, bem como ao meu coorientador prof. Dr. Valdir Bezerra por acreditar no andamento do projeto e me incentivar nos momentos mais difíceis.

Toda minha família desempenhou um papel fundamental nessa jornada. Em especial gostaria de agradecer a minha esposa Lília Gomes pelo amor incondicional e pela coragem de seguir junto comigo através dos meus sonhos. A meus pais José Maria Ramos e Any Margareth, agradeço por me apoiarem mesmo envolvendo estarmos tão longe, a eles devo a essência de quem eu sou.

Esse trabalho não seria o mesmo sem o apoio de colegas e amigos que de uma forma ou de outra me ajudaram durante essa jornada. Dentre eles, gostaria de agradecer aos colegas de sala David Figueiredo e Anderson Lima e aos professores Carlos Romero, Jonas Lima e Edilberto Silva.

Obrigado ao CNPq e a UFPB pelo apoio prestado ao projeto.

"Quantas são as tuas obras, ó Jeová!
Fizeste todas elas com sabedoria.
A terra está cheia dos teus trabalhos."
(Salmo 104:24)

RESUMO

Nesta tese estudamos a influência da geometria nas propriedades eletrônicas de nanocones duplo de carbono. Também propomos uma forma de detecção do manto de invisibilidade explorando a geometria do manto construído utilizado a teoria de ótica de transformação. Para o estudo dos nanocones duplos de carbono, utilizamos o modelo contínuo baseado num hamiltoniano tipo Dirac para férmions sem massa onde os defeitos topológicos são descritos através de campos de gauge não abelianos. Para isso demonstramos como a equação de Dirac pode ser obtida a partir do acoplamento do spin ao análogo relativístico da energia cinética e demonstramos como as propriedades eletrônicas do grafeno podem ser modeladas por uma equação de Dirac efetiva para férmions sem massa. Desenvolvemos então a abordagem geométrica que descreve dois cones em uma única estrutura, pela extensão da coordenada radial ao inteiro conjunto dos números reais. Para uma melhor compreensão das características desse tipo de superfície, demonstramos a dinâmica de uma partícula nesta superfície nos casos clássicos, quântico e quântico-relativístico. Resolvemos então a equação de Dirac efetiva para uma partícula livre na superfície de um nanocone duplo de carbono, mostramos que para algumas combinações de diferentes nanocones, a densidade local de estados próxima do vértice dos cones não é nula na energia de Fermi e apresenta uma forte dependência com o momento angular. Obtemos também os níveis de Landau para uma partícula carregada sob influência de um campo magnético azimutal e fazemos uma análise detalhada do espectro de energia considerando as combinações dos números quânticos. Mostramos como o campo magnético quebra a "simetria" entre os cones introduzindo estados de classes diferentes em cada cone. A geometria de superfícies também é explorada no estudo dos metamateriais através da teoria de ótica de transformação. Demonstramos como é possível manipular em laboratório a permissividade elétrica (ϵ) e a permeabilidade magnética (μ) de um material dielétrico e, desta forma, obter controle sobre o índice de refração do meio. Essa abordagem nos permite modelar a geometria que reproduza um efeito desejado e determinar os parâmetros do material dielétrico que reproduz a geometria desejada. Mais especificamente, exploramos como construir um material capaz de camuflar completamente um objeto em seu interior, o chamado manto de invisibilidade. Ao mesmo tempo que mostramos como o manto de invisibilidade pode ser construído, propomos uma estratégia de detectar a presença desse manto através da diferença de fase gerada pela curvatura resultante da sua construção.

Palavras-chave: Grafeno, Cones duplos, Níveis de Landau, Ótica de transformação e Metamateriais.

ABSTRACT

In this thesis we study the influence of the geometry on the electronic properties of double carbon nanocones. We also propose an invisibility cloak detecting strategy by exploring the geometry of the cloak built using the theory of transformation optics. For the study of double carbon nanocones, we use the continuous model based on a Dirac Hamiltonian for massless fermions where topological defects are described through non-abelian gauge fields. For this we demonstrate how the Dirac equation can be obtained from the coupling of spin to the relativistic analogue of kinetic energy and demonstrate how the electronic properties of graphene can be modeled by an effective Dirac equation for massless fermions. We then develop the geometric approach that describes two cones in a single structure, by extending the radial coordinate to the whole set of real numbers. For a better understanding of the characteristics of this type of surface, we demonstrate the dynamics of a particle on this surface in classical, quantum and quantum-relativistic regimes. We then solve the effective Dirac equation for a free particle on double carbon nanocone surfaces. We show that for some combinations of different nanocones, the local density of states near the apex of the cones is not zero in the Fermi energy and presents a strong dependence on angular momentum. We also get Landau levels for charged particles under the influence of an azimuthal magnetic field and do a detailed analysis of the energy spectrum considering the combinations of quantum numbers. We show how the magnetic field breaks the "symmetry" between the cones by introducing states of different classes in each cone. The geometry of surface is also explored in the study of metamaterials through the theory of transformation optics. We show how it is possible to manipulate in the laboratory the electric permittivity (ϵ) and the magnetic permeability (μ) of a dielectric and, in this way, obtain control over the refractive index of the medium. This approach allows us to model the geometry that reproduces a desired effect and determine the parameters of the dielectric that reproduces the desired geometry. More specifically, we explore how to construct a material capable of completely camouflaging an object within it, the so-called invisibility cloak. At the same time, we show how the invisibility cloak can be built, we propose a strategy to detect the presence of this cloak through the difference of phase generated by the curvature resulting from its building.

Keywords: Graphene, Double Cones, Landau levels, Transformation optics and Metamaterials.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Energias permitidas para uma partícula livre em um espaço plano. . . 23

Figura 2 – Em (a) vemos a estrutura hexagonal do grafeno construída com duas subredes A e B. Os vetores da rede são $\vec{a_1}$ e $\vec{a_2}$, dados em (2.47). A Figura (b) apresenta a zona de Brillouin correspondente, com os vetores da rede recíproca $\vec{b_1}$ e $\vec{b_2}$ no espaço recíproco. Os pontos de Dirac são localizados por K e $K^{'}$. 28

Figura 3 – Método de Volterra para a formação de uma superfície cônica. Em (a), uma fatia com ângulo λ é retirada de uma superfície plana e as arestas restantes são unidas formando uma superfície cônica (b). Esta superfície pode ser mapeada em coordenadas esféricas considerando θ constante. . 33

Figura 4 – Sistema de coordenadas para a superfície de um cone duplo. 34

Figura 5 – Trajetória de uma partícula livre clássica na superfície de um cone duplo considerando momento angular j nula. Fonte: referência (36). 36

Figura 6 – Trajetória de uma partícula livre clássica na superfície de um cone duplo considerando momento angular j não nulo e constante. Fonte: referência (36). 37

Figura 7 – Superfície de um cone duplo sob influência de um campo magnético azimutal uniforme na direção do eixo z. 44

Figura 8 – Níveis de energia para um valor fixo do campo magnético $|B_0| = 1$. Novamente consideramos $\hbar = 6,582 \cdot 10^{-16} eV \cdot s$, $c = 3 \cdot 10^8 m/s$ e $m = 9,11 \cdot 10^{-31} Kg$ com os parâmetros $Q = -1$, $b = s = \lambda = +1$ e $j = -\frac{5}{2}$. Níveis de corpo são representados na cor verde, enquanto os níveis de ápice estão representados em roxo. Temos em (a) o caso plano, ou seja $\alpha = 1$, onde todos os estados são níveis de corpo. Em (b), temos o cone duplo com $\alpha = 0,5$, neste caso, níveis de ápice aparecem para o cone superior ($\eta = +1$). 48

Figura 9 – Processo de Volterra para o nanocone duplo de carbono. em (a partimos de uma folha de grafeno e retiramos uma fatia de ângulo $\frac{\pi}{3}$. As ligações quebradas são refeitas de forma a obtermos um cone simples em (b). Neste processo de colagem átomos da mesma subrede são conectados entre si. Em (c) dois cones são ligados pelo vértice para formar um cone duplo. 51

Figura 10 – Nanocones de carbono. (a), (b) e (c) são compostos de vértices pentagonais, sendo que (b) tem coordenadas paramétricas (1,1) e (c) (2,0). As superfícies (d), (e) e (f) são compostos de vértices heptagonais, sendo que (e) têm coordenadas paramétricas (1,1) e (f) (2,0). 52

Figura 11 – Nanocones duplos de cabono construídos pela justaposição das superfícies na Figura (10). 53
Figura 12 – Diagrama esquemático da densidade de estados próximo do vértice do cone de acordo com as equações (4.23) e (4.24). Plotamos a DLE para cones com defeitos pentagonais em (a), (c) and (e), onde (a) são superfícies de cones simples, (c) são superfícies de cones duplos idênticos e (e) contem combinações de diferentes cones com um cone do tipo (2,0). A mesma sequência é seguida para estruturas heptagonais em (b), (d) and (f). 57
Figura 13 – Espectro de energia para superfícies de cônicas. Em todos os casos, consideramos $L = 50$ nm, $v_F = 10^6$ m/s and $\nu = \nu_0$. 59
Figura 14 – Níveis de Landau para superfícies cônicas com $\sigma = Q = \tau = -1$ e $|B_0| = b = +1$. Níveis de corpo são representados na cor verde e níveis de ápice na cor roxa. Plotamos os níveis de energia para valores de $n = 1, 2, 3, 4, 5$, com $j = -\frac{5}{2}$. Em (a), temos os níveis de corpo para o caso do grafeno plano. Superfícies cônicas com defeitos pentágonais são plotadas em (b) and (c), sendo (b) para cones simples e (c) para cones duplos. Defeitos heptagonais são plotados em (14d) e (14e), sendo (14d) para cones simples e (14e) para cones duplos. Consideramos $\hbar = 6,582 \cdot 10^{-16} eV \cdot s$, $v_f = 10^6 m/s$. 63
Figura 15 – O copo de Lycurgus. (Créditos: Tesouros do museu britânico.) 65
Figura 16 – Gráfico ϵ vs μ. No gráfico são apresentadas as classes de metamateriais de acordo com o quadrante correspondente. Fonte: referência (47). . . . 66
Figura 17 – Sistema ortogonal formado pelos vetores $\vec{E}$, $\vec{H}$ e $\vec{k}$. Em (a), temos um sistema de mão direita, onde o vetor de Poynting $\vec{S}$ tem a mesma direção e sentido do vetor de onda $\vec{k}$ e em (b), temos um sistema de mão esquerda onde $\vec{S}$ e $\vec{k}$ tem a mesma direção, porém com sentidos opostos. Fonte: referência (49). 68
Figura 18 – Refração entre um material de mão direita (índice 1) e um material de mão esquerda (índice 2). Temos representadas a direções dos vetores de Poynting ($\vec{S}$) e dos vetores de onda ($\vec{k}$). Fonte: referência (49). 69
Figura 19 – Realização experimental de um metamaterials de mão esquerda. A amostra é composta de anéis ressonantes quadrados e veretas de cobre na placa de circuito de fibra de vidro. Fonte: referência (96). 70

Figura 20 – Transformação de coordenadas no espaço virtual. Em (a), temos um espaço livre em grid cartesiano. Como o espaço é livre, uma onda eletromagnética, representada pelas linhas vermelhas, segue linhas retas. Em (b), é aplicado uma transformação de coordenadas que mapeia o ponto na origem em um disco de raio a, comprimindo o espaço entre o buraco de raio a e a borda do manto com raio b. A região interno ao buraco é excluída do espaço, portanto um objeto, representado pelo peixe, colocado nesta região não sofrerá interferência da onda eletromagnética. A onda seguirá o menor caminho ótico, que agora serão trajetórias curvas dentro do manto evitando a região do buraco. Fonte referência (55). 75
Figura 21 – Espaço virtual com valores de ϵ e μ dados em termos da relação (6.6). A geometria segue o mesmo grid plano do espaço virtual original. Porém, como os valores de ϵ e μ definem um índice de refração que simula a geometria do espaço virtual transformado a onda segue uma trajetória curva evitando a região em azul escuro. Fonte referência (55). 77

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO 12
2 A EQUAÇÃO DE DIRAC E O GRAFENO 18
2.1 A equação de Dirac 18
2.2 Solução para a partícula livre 22
2.3 Acoplamentos 24
2.4 Forma Quadrática 27
2.5 Grafeno 28
3 DINÂMICA DE UMA PARTÍCULA NA SUPERFÍCIE DE UM CONE DUPLO 32
3.1 Sistema de coordenadas 32
3.2 Equação de Movimento Clássica 35
3.3 Equação de Schrödinger para a partícula livre 37
3.4 Equação de Dirac para a partícula livre 40
3.5 Níveis de Landau 44
4 DINÂMICA DE UMA PARTÍCULA NA SUPERFÍCIE DE UM NANOCONE DUPLO DE CARBONO 50
4.1 Acoplamentos para o nanocone duplo de carbono 50
4.2 Partícula livre na superfície de um nanocone duplo de carbono 54
4.3 Densidade de estados local 56
4.4 Espectro de energia para nanocones finitos 58
4.5 Níveis de Landau para o nanocone duplo de carbono 59
5 ÓTICA DE TRANSFORMAÇÃO NO ESTUDO DE METAMATERIAIS 65
5.1 Introdução aos metamateriais 65
5.2 Materiais de mão esquerda 67
5.3 Design de metamateriais 70
5.4 Ótica de transformação 71
6 O MANTO DE INVISIBILIDADE E SUA DETECÇÃO . . . 75
6.1 O Manto de Invisibilidade 75
6.2 Estratégia para detecção do manto de invisibilidade 78
7 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS 83
REFERÊNCIAS 86

1 INTRODUÇÃO

O conhecimento científico vem se desenvolvendo de forma gradativa. Cada ano que se passa conhecemos novas teorias, novas técnicas, teorias são comprovadas experimentalmente e outras são refutadas.

Isaac Newton foi um renomado pesquisador que contribuiu muito para o desenvolvimento do conhecimento cientifico em diversas áreas. Ele reconhecia que o conhecimento que ele foi capaz de produzir só foi possível graças ao que outros tinham feito antes dele. Quanto mais avançamos no conhecimento científico mais portas se abrem para que avancemos um pouco mais. Uma das fundamentações da física é sem dúvida a matemática, alguns chegam a mencionar em suas conversas sobre o assunto que a "matemática é a mãe de todas as ciências". Nesse contexto, a geometria tem desempenhado um papel muito importante em diversas áreas. A descrição matemática dos formatos dos objetos e das suas trajetórias nos permite compreender e descrever a posição dos astros no universo, sendo possível até mesmo prever a sua trajetória daqui a centenas de anos. Mesmo objetos minúsculos como átomos e moléculas tem sua forma descrita em termos geométricos.

Nesta tese, vamos explorar aspectos geométricos da matéria em duas áreas: A dinâmica de partículas na superfície de um cone duplo e a construção do manto de invisibilidade e sua detecção. Dentro do estudo da dinâmica de partícula, a teoria quântica vem sendo usada com bastante sucesso. Atualmente a mecânica quântica é parte fundamental em áreas como a física de partículas, matéria condensada, computação quântica, dentre outras. A mecânica quântica descreve o comportamento de partículas em escala atômica, onde a maioria dos seus efeitos são percebidos. No entanto, alguns efeitos macroscópicos também são explicados pela mecânica quântica, como o efeito Hall [1] e a supercondutividade [2] .

A base da mecânica quântica foi estabelecida na primeira metade do século XX. Nesse mesmo período se desenvolvia a teoria da relatividade. No intuito de fundamentar um teoria quântica que fosse compatível com o princípio de covariância relativístico e que ao mesmo tempo incorporasse o spin do elétron de forma natural, Paul A. M. Dirac, em 1922, propôs uma equação para descrever a dinâmica quântico–relativística de uma partícula de spin $\frac{1}{2}$, equação que ficou conhecida como equação de Dirac. Uma grande conquista dessa teoria foi a previsão da existência da antimatéria, que foi confirmada em laboratório posteriormente. Em anos recentes, a equação de Dirac vem sendo usada como modelo efetivo em outras áreas. Em particular, no estudo de partículas em superfícies em $2+1$ dimensões em materiais como o grafeno [3] e os isolantes topológicos [4].

Efeitos quânticos relacionados à geometria de espaços curvos também são alvo de estudos [5, 6]. Superfícies cônicas, em particular, são de interesse especial no estudo de fenômenos quânticos devido à curvatura singular que elas carregam [7]. Efetivamente, eles aparecem na investigação de defeitos topológicos em meios contínuos [8, 9], cordas

cósmicas [10, 12] e mesmo em buracos negros [11].

A dinâmica quântica de partículas carregadas na presença de diferentes defeitos topológicos na física de materiais também vem sendo alvo de intensas pesquisa. Materiais feitos de carbono, em especial, tem atraído grande atenção nos últimos anos devido às suas propriedades incomuns e seu amplo potencial de aplicações [13]. O crescimento nos estudos desses materiais ocorreu especialmente depois da descoberta do fulereno em 1985 [14] e dos nanotubos de carbono em 1991 [15]. Desde então, vários nanomateriais de carbono tem sido obtidos, tais como nanocones [16], grafeno [3], nanoespiras [17], anéis [18] e nanotoros [19]. Os nanocones de carbono, em especial, foram observados experimentalmente pela primeira vez em 1992 como tampas cônicas de nanotubos de carbono [20, 21], e em 1994 como estruturas livres [22]. Nanocones de carbono com ângulos de $19°, 39°, 60°, 85°$ e $113°$ já foram observados [23]. Esse tipo de estrutura é resultado da introdução de um defeito topológico chamado desclinação na folha plana de grafeno, resultando na substituição de um hexágono por um pentágono ou um heptágono na estrutura do grafeno.

O estudo das propriedades eletrônicas dos nanocones de carbono revelaram um ganho na densidade eletrônica de estados na vizinhança do vértice do cone, como obtido por primeiros princípios [24, 25, 26], ou pelo modelo de tight-binding [27, 28, 29, 30]. Esse ganho pode ser usado em aplicações em campos de emissões [31] e sondas de varredura [26], por exemplo. Um dispositivo de retificação baseado em nanocones de carbono também foi proposto [32], e foi demonstrado que nanocones de carbono são excelentes retificadores térmicos [33], que os tornam materiais promissores para a construção de dispositivos fonônicos. Nanocones de carbono também tem sido propostos como uma opção mais barata e mais fácil de produzir do que os nanotubos de carbono em aplicações para dispositivos de armazenamento de gases [34] e como cápsulas para transporte de medicamentos [35].

Um outro tipo de estrutura cônica que tem atraído atenção, mais recentemente, são os cones duplos, ou seja dois cones unidos pelo vértice. Estudos teóricos [36] indicam que esse tipo de estrutura tem propriedades interessantes, como a alta dependência dos seus estados eletrônicos com o momento angular dos elétrons, tanto no caso clássico como no caso quântico não relativístico. Classicamente, o vértice dos cones atua como uma espécie de "filtro", permitindo que apenas partículas com momento angular nulo passem de um cone para outro, seguindo uma linha reta. Consequentemente, qualquer pequena perturbação que afete o momento angular nulo de alguma partícula causa uma mudança drástica na sua trajetória, tornando o movimento linear instável. Traços dessa instabilidade também são notados no regime quântico.

Na referência [37], cálculos computacionais por primeiros princípios são realizados para o cone duplo de carbono. Os resultados mostram que eles têm baixa energia de formação e, portanto, é esperado que eles possam ser obtidos experimentalmente. Motivados pelas propriedades interessantes que essa estrutura apresenta e pela possibilidade de

obtenção experimental desse tipo de estrutura, investigamos mais a fundo suas propriedades. Inicialmente, avaliamos a dinâmica de uma partícula nessa superfície no domínio relativístico [38], ou seja, resolvemos a equação de Dirac tanto para o problema da partícula livre como para o caso de uma partícula carregada sob influência de um campo magnético azimutal. Posteriormente, estendemos os resultados para o caso de um nanocone duplo de carbono [39]. Neste caso, investigamos as suas propriedades eletrônicas e mostramos que para algumas combinações de defeitos na estrutura, a densidade local de estado na energia de Fermi não se anula, levando a uma característica condutiva para a estrutura. Calculamos também o espectro de energia para os níveis de Landau nos nanocones duplos de carbono. A curvatura singular da superfície introduz níveis de energia chamados níveis de ápice, relacionados às órbitas circulares que envolvem o vértice dos cones em uma abordagem semiclássica. O campo magnético no cone duplo introduz uma quebra de simetria no cone duplo separando a classe de nível de Landau em cada cone.

Para que possamos trabalhar com a equação de Dirac na geometria de espaço curvos, como a superfície de cones duplos, um formalismo muito utilizado é a chamado formalismo das tetradas [40, 41]. Nesse formalismo definimos os parâmetros que intermedeiam a transformação de coordenadas locais para coordenadas gerais e com isso definimos a forma dos parâmetros presentes na equação de Dirac. No caso da estrutura hexagonal de carbono que compõem o grafeno e suas variações curvas como nanocones e nanotubos de carbono, um modelo efetivo descrito por uma equação de Dirac para férmions sem massa é desenvolvido para descrever as suas propriedades eletrônicas. Nos casos onde lidamos com geometrias curvas, os efeitos dessa geometria são incorporados à equação de Dirac efetiva na forma de campos de gauge não–abelianos, em um processo similar à transformação do potencial de gauge eletromagnético usado para compensar a fase na função de onda no efeito Aharonov–Bohm [42].

Além de investigar a dinâmica de partículas quânticas em superfícies de cones duplos, também exploramos os aspectos geométricos do manto de invisibilidade e desenvolvemos uma estratégia para detecção desse manto. A ideia de construir um material capaz de camuflar perfeitamente um objeto não é nova e é tema recorrente na ficção científica [43]. A ideia básica para camuflar perfeitamente um objeto é teoricamente simples. Nós conseguimos enxergar as coisas a nossa volta graças a fenômenos como a dispersão, reflexão e refração da luz no objeto. Alguns animais na natureza, tem uma pele tão lisa e com índice de refração semelhante ao do ar que minimiza esses efeitos, sendo praticamente transparentes. Podemos então camuflar um objeto se conseguirmos manipular apropriadamente as propriedades óticas do material.

Obviamente, não somos capazes de manipular o índice de refração dos corpos e objetos de acordo com a nossa vontade. Portanto, não podemos camuflar os objetos desta forma. Uma segunda alternativa seria, então, projetar um material que faça esse trabalho

por nós. Neste caso, deveríamos projetar um material que fosse capaz de desviar toda a onda que incide sobre um material, de forma que ela não tivesse acesso ao objeto, e ao mesmo tempo fazer com que a onda retorne ao meio seguindo a mesma trajetória original. Desta forma um observador externo não conseguiria identificar a camuflagem. Para construir um manto de invisibilidade como esse precisamos, então, ter um elevado grau de controle sobre o índice de refração do material, ou em outras palavras, precisamos ter controle sobre os parâmetros do material em questão, mais especificamente, a permissividade elétrica (ϵ) e a permeabilidade magnética μ, parâmetros estes que definem o índice de refração. No entanto, os materiais encontrados na natureza apresentam valores limitados desses parâmetros, o que acaba inviabilizando a construção desse manto.

Durante as últimas duas décadas vem se desenvolvendo uma nova classe de materiais projetados com o objetivo de trasnpor as limitações nos parâmetros ϵ e μ, nos materiais que encontramos na natureza, que ficaram conhecidos como metamateriais [44, 45, 46, 47]. Vários tipos de metamateriais já foram propostos e construídos experimentalmente, como os materiais com índice de refração negativo [48, 49], os metamateriais hiperbólicos [50, 51, 52], e os qhirais [53].

Uma ferramenta muito poderosa no desenvolvimento dos metamateriais é conhecida como ótica de transformação [54, 55]. Essa teoria é baseada na covariância entre as equações de Maxwell em um espaço livre com geometria arbitrária e as equações correspondentes em um meio material com geometria plana. Um mapeamento entre esse dois espaços é feito, tornando possível relacionar a geometria que descreve uma desejada trajetória para as ondas eletromagnéticas e os parâmetros ϵ e μ em um material que reproduz esse mesmo comportamento.

O desenvolvimento da ótica de transformação trouxe atenção para os metamateriais como um laboratório de testes para modelos em diversas áreas como cosmologia e gravitação. Através da ótica de transformação é possível simularmos uma geometria qualquer em um metamaterial no laboratório. Buracos negros [56, 57, 58], cordas cósmicas [59, 60], transição de assinatura kleiniana [61], análogo da força gravitacional [62], dentre várias outras geometrias [63, 64] já foram propostas como modelos análogos em metamateriais.

A possibilidade de projetar esses novos materiais nos permite desenvolver maior controle sobre a propagação de ondas nos materiais [46], tornando assim possível projetarmos um manto de invisibilidade [65, 55]. Diversas formas foram propostas tanto para o manto de ondas eletromagnéticas [66] como para ondas de matéria [67, 68, 69]. Diversas geometrias também foram propostas para o manto de invisibilidade como planos [70] cilindros [66], discos[55] e até triangulares [71, 72, 73], camuflagem conhecida como manto carpete.

Juntamente com o surgimento de novas propostas para o manto de invisibilidade também começaram a surgir propostas para a sua detecção. A forma mais obvia de se detec-

tar um manto de invisibilidade tem a ver com o comprimento de onda de funcionamento do material. Na prática, um metamaterial é projetado considerando o limite da célula unitária menor que o comprimento de onda. Sendo assim, existe um metamaterial especificamente projetado para funcionar como um manto de invisibilidade para um determinado intervalo de comprimentos de onda. Desta forma, se iluminarmos o manto com uma onda fora desse intervalo conseguiríamos detectá-lo.

Com o avanço da tecnologia e crescente miniaturização dos materiais é possível considerarmos que a falha no intervalo de comprimentos de onda de atuação de um metamaterial possa ser minimizada com o tempo. Mesmo no cenário de um manto de invisibilidade que não tenha esse problema é possível estabelecer algumas estratégias para a sua detecção. Já foram propostas formas de detecção usando ondas de propagação contrária [74], avaliando o atraso temporal entre uma onda que passe pelo manto e outra onda teste [75, 76], explorando materiais com resposta não linear [77], usando ondas de partículas carregadas [78], bem como uma metamaterial auxiliar chamado de anti manto [79, 80].

Partindo do manto de invisibilidade com formato circular em duas dimensões desenvolvemos uma estratégia de detecção baseada na geometria do manto. Assim como o campo magnético confinado ao interior de um solenóide pode ser identificado por meio da fase na função de onda no efeito Aharonov–Bohm [42], a curvatura gaussiana presente em uma superfície também pode ser identificada por meio da fase [81, 82]. Sendo assim, demonstramos que a geometria do manto de invisibilidade comporta uma curvatura gaussiana singular concentrada na borda do manto. Calculamos, então, a fase geométrica resultante e mostramos como essa fase depende das dimensões do manto. Esta é, então, uma estratégia de detecção simples e prática, pois não é preciso a construção de materiais auxiliares ou da preparação de partículas. Basta, então, observarmos a diferença de fase na polarização de onda que contorne o manto para identificarmos a sua presença e termos informações sobre suas dimensões.

A organização dessa tese é como segue. No capítulo 2, discutimos como a equação de Dirac pode ser obtida incorporando o spin ao análogo relativístico da energia cinética, demonstramos algumas das suas principais propriedades e acoplamentos. Discutimos também algumas características do grafeno, e mostramos como é possível modelar suas propriedade eletrônicas no limite de baixas energias através de uma equação de Dirac efetiva para férmions sem massa. No capítulo 3, apresentamos a dinâmica de uma partícula na superfície de um cone duplo e para isso apresentamos inicialmente o sistema de coordenadas apropriado para essa superfície e como se dá a sua dinâmica nos regimes clássico e quântico, resolvendo as equações de Hamilton e Schrödinger [36]. Posteriormente, obtemos a solução da equação de Dirac para os casos de uma partícula livre e de uma partícula carregada sob influência de um campo magnético azimutal [38].

A dinâmica de uma partícula na superfície de um nanocone duplo de carbono é apresentada no capítulo 4. Calculamos, inicialmente, os campos de gauge relativos à geometria do cone duplo e resolvemos de forma analítica a equação de Dirac efetiva para o caso de uma partícula livre. Calculamos, então, a densidade local de estados próximo do vértice dos cones para uma combinação de possíveis defeitos pentagonais e heptagonais na rede do grafeno. Mostramos também o espectro de energia para a caso de uma superfície finita, bem como calculamos os níveis de Landau resultantes desse modelo. Discutimos os possíveis níveis para diversas combinações dos parâmetros quânticos.

O capítulo 5 apresenta uma breve introdução às principais características dos metamateriais. Mostramos as principais classes, suas propriedades e como como modelá-lo através de um modelo efetivo. Desenvolvemos também o conceito de ótica de transformação apresentando a relação entre a geometria de um espaço livre com os parâmetros de um meio material. O manto de invisibilidade é o tema principal do capítulo 6. Neste capítulo, demonstramos as transformações de coordenadas necessárias para a construção de um manto de invisibilidade circular em duas dimensões, mostramos a curvatura gaussiana resultante dessa geometria e obtemos a fase geometria resultante dessa curvatura.

2 A EQUAÇÃO DE DIRAC E O GRAFENO

A equação de Dirac tem uma grande importância histórica por ter revelado a existência das antipartículas, antes mesmo da sua confirmação experimental. Esta equação trata da dinâmica quântica relativística de partículas de spin $\frac{1}{2}$ e além disso, vem sendo utilizada como modelo efetivo para descrever os portadores de carga em certos materiais como o grafeno e os isolantes topológicos. Neste capítulo, demonstramos como a equação de Dirac pode ser obtida a partir do acoplamento do spin ao análogo relativístico da energia cinética. Ilustramos os conceitos básicos da resolução desta equação, a partir da solução do problema de uma partícula livre em um espaço plano e mostramos algumas formas de simplificar a equação em problemas bidimensionais. Uma forma alternativa de resolver a equação de Dirac é utilizar a sua forma quadrática. Este método será muito útil no desenvolvimento dos próximos capítulos e é discutido aqui. Para lidar com problemas que envolvem espaços curvos e a presença de campos é demonstrado como escrever a equação de Dirac através do formalismo das tetradas.

Um dos materiais que tem suas propriedades eletrônicas modeladas por uma equação de Dirac efetiva é o grafeno. Discutimos as características desse material e demonstramos como podemos descrever sua estrutura eletrônica através de um modelo de ligação forte.

2.1 A equação de Dirac

A equação de Dirac ganhou notoriedade por ser capaz de fornecer a dinâmica quântica de uma partícula de spin $\frac{1}{2}$, tendo o spin como uma consequência natural da sua estrutura matemática e sendo consistente com a teoria da relatividade especial. A equação de Schrödinger, que descreve o comportamento quântico das partículas, não é covariante sob transformações de Lorentz, sendo, portanto, inconsistente com a teoria da relatividade especial. Muitos se esforçaram no intuito de encontrar a equação que fosse capaz de descrever o comportamento quântico–relativístico das partículas. Em 1926, Oskar Klein e Walter Gordon propuseram a conhecida equação de Klein–Gordon. Esta equação teve sucesso em conciliar as duas teorias, mas pelo fato de ser uma equação de segunda ordem, admite soluções com energia negativa e densidades de probabilidade negativas. Esta aparente anomalia na equação de Klein–Gordon levou muitos a desacreditar o seu valor.

Poucos anos depois, em 1928, Paul A. M. Dirac propôs a sua famosa equação unificando a teoria quântica com a relatividade especial. Diferentemente das equações de Schrödinger e de Klein–Gordon, a equação de Dirac é uma equação diferencial, matricial, de primeira ordem, onde a função de onda é uma matriz de 4 componentes, contendo em si o grau de liberdade de spin e trazendo em sua solução a revelação de uma partícula

com mesma massa da partícula em questão, mas com carga oposta, a qual foi chamada de antipartícula. Essa categoria de partículas foi descoberta poucos anos depois, o que deu muito peso para a equação de Dirac.

Uma outra vantagem da equação de Dirac é incorporar o spin $\frac{1}{2}$ do elétron de forma natural. Na mecânica quântica não relativística a interação do momento magnético de spin do elétron com o campo magnético é introduzido adicionando o termo $\frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}\cdot\vec{B}$ ao hamiltoniano da partícula, onde $\vec{\sigma}$ tem como componentes as matrizes de Pauli e $\vec{B}$ é o campo magnético [83]. Existe, no entanto, uma forma mais natural de incorporar esse termo ao hamiltoniano da partícula. A energia cinética de uma partícula de spin $\frac{1}{2}$, na ausência de potenciais pode ser escrita em termos do vetor $\vec{\sigma}$ como

$$H = \frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})}{2m}, \tag{2.1}$$

onde $\vec{p}$ é o vetor momento e m é a massa da partícula. Esta expressão é uma forma alternativa totalmente equivalente à forma original do hamiltoniano $H = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}$. No caso de termos a presença de um potencial vetor $\vec{A}$, fazemos a substituição $\vec{p} \to \vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c}$ e encontramos

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m}\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c}\right)\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c}\right) \\ &= \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c}\right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}\cdot\vec{B}. \end{aligned} \tag{2.2}$$

O termo de interação do momento magnético de spin com o campo magnético, agora surge naturalmente no hamiltoniano. Além de incorporar o spin de forma natural, Dirac buscou compatibilizar a mecânica quântica com a relatividade especial. Isso é feito incorporando o spin ao análogo relativístico da energia cinética, ou seja

$$\left(\frac{E}{c} - \vec{\sigma}\cdot\vec{p}\right)\left(\frac{E}{c} + \vec{\sigma}\cdot\vec{p}\right) = (mc)^2. \tag{2.3}$$

Escrevendo em termos dos operadores $\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ e $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$, temos

$$\left(\frac{i\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t} + i\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla}\right)\left(\frac{i\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t} - i\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla}\right)\Phi = (mc)^2\Phi. \tag{2.4}$$

onde Φ é a função de onda, que agora tem duas componentes. É conveniente fazermos a transformação $\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} \to \frac{\partial}{\partial x_0}$, com o objetivo de unificar posteriormente as coordenadas

espaciais e a coordenada temporal em um único operador. Para obtermos uma equação linear em $\frac{\partial}{\partial t}$ definimos duas funções, cada uma com duas componentes,

$$\Phi^R = \frac{1}{mc}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0} + i\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla}\right)\Phi, \qquad \Phi^L = \Phi, \tag{2.5}$$

que resulta nas duas equações de primeira ordem acopladas

$$\left(i\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla} - i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0}\right)\Phi^L = -mc\Phi^R, \tag{2.6}$$

$$\left(-i\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla} - i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0}\right)\Phi^R = -mc\Phi^L. \tag{2.7}$$

Podemos escrever essas equações de uma forma mais simples, fazendo

$$-i\hbar(\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla})(\Phi^R - \Phi^L) - i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0}(\Phi^L - \Phi^R) = -mc(\Phi^L - \Phi^R), \tag{2.8}$$

$$i\hbar(\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla})(\Phi^L - \Phi^R) + i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0}(\Phi^R - \Phi^L) = -mc(\Phi^R - \Phi^L), \tag{2.9}$$

ou em forma matricial

$$\begin{pmatrix} -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0} & -i\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla} \\ i\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla} & i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = -mc\begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}, \tag{2.10}$$

onde definimos a função de onda de quatro componentes

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Phi^R + \Phi^L \\ \Phi^R - \Phi^L \end{pmatrix}. \tag{2.11}$$

Simplificando a notação podemos escrever ainda na forma

$$\left[-i\hbar c\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla} + \beta mc^2\right]\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi, \tag{2.12}$$

onde definimos as matrizes

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \tag{2.13}$$

com I sendo a matriz identidade e as matrizes de Pauli sendo dadas por

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2.14}$$

Para alguns problemas será útil termos a equação de Dirac escrita diretamente em termos dos operadores momento e energia na forma

$$\left[c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2\right] \psi = E\psi, \tag{2.15}$$

Uma outra maneira de escrever a equação de Dirac de forma ainda mais compacta, conhecida como forma covariante, pode ser obtida multiplicando a expressão (2.12) por β à esquerda, o que nos fornece

$$\left(-i\hbar c\gamma^{\mu}\partial_{\mu} + mc^2\right)\Psi = 0, \tag{2.16}$$

onde definimos as matrizes $\gamma^{\mu} = (\gamma^0, \gamma^k)$, conhecidas como matrizes de Dirac, como

$$\gamma^0 = \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \tag{2.17}$$

$$\gamma^{\kappa} = \beta\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_{\kappa} \\ \sigma_{\kappa} & 0 \end{pmatrix}, \quad \textit{para } \kappa = 1, 2 \textit{ e } 3, \tag{2.18}$$

e o operador diferencial ∂_{μ} vem do tensor de energia–momento $p_{\mu} = -i\hbar\partial_{\mu} = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x^0}, \vec{\nabla}\right) = \left(-\frac{E}{c}, \vec{p}\right)$, sendo $-i\hbar\partial_{\mu}$ o operador energia momento. Lembrando que estamos utilizando a assinatura $\eta_{\mu,\nu} = (-,+,+,+)$ para o tensor métrico do espaço.

A equação de Dirac é composta de quatro equações diferenciais que acoplam as quatro componentes do espinor de Dirac Ψ , representado por uma matriz coluna 4×4. Por ser uma equação linear em $\frac{\partial}{\partial t}$, a equação de Dirac evita o problema com a densidade de probabilidade negativa. No entanto, a equação de Dirac ainda apresenta soluções com energias positiva e negativa. As soluções com energia negativa foram interpretadas por Dirac como soluções para antipartículas. A posterior descoberta experimental das antipartículas acabou por consolidar de vez a sua teoria.

Vejamos, então, algumas das características da equação de Dirac exemplificadas na solução para a partícula livre.

2.2 Solução para a partícula livre

O problema da partícula livre em um espaço plano é especialmente interessante para apresentar algumas características importantes da equação de Dirac e ilustrar alguns métodos de resoluções e simplificações que serão úteis posteriormente. A equação de Dirac para este problema é escrita em sua forma covariante como

$$ihc\left[\gamma^0\frac{\partial}{\partial x^0}+\gamma^\kappa\frac{\partial}{\partial x^\kappa}+mc^2\right]\Psi=0. \tag{2.19}$$

Para resolver essa equação, multiplicamos por γ^0 à esquerda e escrevemos a função de onda em termos da solução de onda plana como $\Psi(t,\vec{x})=e^{\frac{i\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}}e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\psi_p$, onde E é a energia da partícula e $\psi_p=(\psi_A,\psi_B)^T$. Usando esses resultados e usando a representação das matrizes γ, a equação (2.19) pode ser escrita na forma

$$\begin{pmatrix} mc^2 & c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} \\ c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} & -mc^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_A\\ \psi_B\end{pmatrix}=E\begin{pmatrix}\psi_A\\ \psi_B\end{pmatrix}. \tag{2.20}$$

que se reduz ao seguinte sistema de equações diferenciais acopladas

$$\begin{cases} c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\psi_B+mc^2\psi_A=E\psi_A \\ c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\psi_A-mc^2\psi_B=E\psi_B \end{cases}, \tag{2.21}$$

Resolvemos esse sistema desacoplando as equações diferenciais. Como resultado obtemos as relações

$$\psi_A=\frac{c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{(E-mc^2)}\psi_B, \qquad \psi_B=\frac{c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{(E+mc^2)}\psi_A. \tag{2.22}$$

Que nos levam a

$$E^2\psi_A=(p^2c^2+m^2c^4)\psi_A \tag{2.23}$$

$$E^2\psi_B=(p^2c^2+m^2c^4)\psi_B. \tag{2.24}$$

Encontramos, então, a relação de dispersão, que neste caso será dada por

$$E=\pm\sqrt{p^2c^2+m^2c^4}. \tag{2.25}$$

Vemos, então, que a equação de Dirac comporta soluções com energias positiva e negativa, correspondendo às soluções para partículas e antipartículas. Percebemos também que as energias permitidas se encontram no intervalo $E < -mc^2$ e $E > mc^2$, tendo uma região proibida para a energia entre $-mc^2$ e mc^2, como pode ser visto na Figura 1.

Figura 1 – Energias permitidas para uma partícula livre em um espaço plano.

Nos resta, ainda, saber qual das duas funções, ψ_A ou ψ_B, representa a solução para partículas e qual representa a solução para antipartícula. A resposta é facilmente encontrada quando olhamos para o problema da partícula livre em repouso, ou seja $\vec{p} = 0$. De acordo com (2.25), a energia neste caso será $E = \pm mc^2$. Usando este resultado na equação (2.15), encontramos a seguinte condição

$$\gamma^0 \psi = \pm \psi. \tag{2.26}$$

Esta relação nos permite avaliar o que cada componente do espinor ψ representa fisicamente. Operando as matrizes em (2.26), encontramos

$$\begin{pmatrix} \psi_A \\ -\psi_B \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}. \tag{2.27}$$

Concluímos, então, que a componente superior, ψ_A, corresponde a solução das partículas, tendo energia positiva, enquanto a componente inferior, ψ_B corresponde a solução para as antipartículas, caso onde as energias são negativas. Cada uma dessas componentes é composta de outras duas soluções que nos dão o grau de liberdade de spin. Identificamos a primeira solução como spin up e a segunda como spin down.

Retornando, agora, para o problema da partícula livre com momento $\vec{p}$, sabendo o que cada componente do espinor representa, podemos encontrar as soluções apropriadas para cada caso. Iniciamos com o caso das partículas, ou seja, energia positiva, caso simbolizado pelo índice +. As soluções para este caso são

$$\psi_p^{+,\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp_z}{(E+mc^2)} \\ \frac{c(p_x+ip_y)}{(E+mc^2)} \end{pmatrix}, \quad ou \quad \psi_p^{+,\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{c(p_x-ip_y)}{(E+mc^2)} \\ -\frac{cp_z}{(E+mc^2)} \end{pmatrix}, \tag{2.28}$$

sendo $\psi_p^{\uparrow}$, a solução para spin up ($\uparrow$) e $\psi_p^{\downarrow}$ para spin down ($\downarrow$). Utilizamos o resultado (2.22) e levamos em conta que

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{p} = \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix}. \tag{2.29}$$

Para o caso das antipartículas, ou seja, energia negativa, simbolizada pela índice $-$, temos como soluções

$$\psi_p^{-,\uparrow} = \begin{pmatrix} -\frac{cp_z}{(|E|+mc^2)} \\ -\frac{c(p_x+ip_y)}{(|E|+mc^2)} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad ou \quad \psi_p^{-,\downarrow} = \begin{pmatrix} -\frac{c(p_x-ip_y)}{(|E|+mc^2)} \\ \frac{cp_z}{(|E|+mc^2)} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{2.30}$$

Em duas dimensões podemos simplificar o problema percebendo que o resultado da operação $\vec{\sigma} \cdot \vec{p}\, \psi_A$ ou $\vec{\sigma} \cdot \vec{p}\, \psi_B$ em (2.22) tem apenas dois resultados possíveis

$$\begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ p_x + ip_y \end{pmatrix}, \tag{2.31}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_x - ip_y \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{2.32}$$

sendo $p_x + ip_y$ para spin up e $p_x - ip_y$ para spin down. Podemos, então, simplificar os nossos cálculos se considerarmos desde o início, em (2.15), $\beta \to \sigma^3$ e $\vec{\alpha} \to (\sigma^1, s\sigma^2)$, onde $s = \pm 1$, sendo +1 para spin up e -1 para spin down. O problema que originalmente envolvia um espinor de quatro componentes é reduzido para um problema com um espinor de apenas duas componentes, tendo o grau de liberdade de spin carregado pelo parâmetro s.

2.3 Acoplamentos

Nas seções anteriores obtivemos a equação de Dirac para uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ livre da influência de campos e em um espaço plano. Ao utilizarmos a equação de Dirac no

estudo de sistemas físicos reais, bem como em sua versão efetiva no estudo das propriedades eletrônicas de materiais, estaremos rotineiramente interessados em espaços curvos, como as superfícies cônicas, assim como estaremos interessados em avaliar a influência de campos sobre o sistema. Portanto, precisamos construir a equação de Dirac para essas situações.

Em geral, quando tentamos construir uma relação em um espaço curvo vinda de um espaço plano precisamos substituir qualquer magnitude que se transforme como um tensor no espaço plano pelo seu correspondente que também se transformam como um tensor sob transformações gerais de coordenadas no espaço curvo. No caso dos espinores, essa transformação é complicada pois não existe representação de espinores no grupo de transformações gerais. É necessário, então, um formalismo alternativo que nos permita fazer essa transformação [41]. Utilizaremos, então, o formalismo das tetradas. Neste formalismo, introduzimos em cada ponto X descrito em coordenadas locais, um conjunto de coordenas arbitrárias ξ^a_X e um campo $e^a_\mu(x)$, que é um conjunto de vetores ortonormais fixando a transformação entre as coordenadas locais (índices latinos) e as coordenadas gerais (índices gregos) seguindo a relação

$$e^a_\mu(X) = \left.\frac{\partial \xi^a_X}{\partial x^\mu}\right|_{x=X}. \tag{2.33}$$

O campo e^a_μ nos dá a relação entre os sistemas de coordenadas local e geral. Em termos dos tensores métricos, podemos escrever

$$g_{\mu\nu}(x) = e^a_\mu(x) e^b_\nu(x) \eta_{ab}. \tag{2.34}$$

onde $g_{\mu\nu}$ é o tensor métrico do espaço curvo, enquanto η_{ab} é o tensor ordinário do plano, que consideraremos como $\eta_{ab} = diag(-1, +1, +1, +1)$, seguindo a assinatura conhecida como convenção da costa leste. A partir dessa relação é possível obtermos o campo e^a_μ e, a partir deles, determinar as quantidades

$$\hat{\theta}^a = e^a_\mu(x) dx^\mu, \tag{2.35}$$

conhecidas como tetradas. Os efeitos da curvatura do espaço são incorporados na equação de Dirac através do acoplamento $\partial_\mu \to \partial_\mu + \Omega_\mu$, onde o termo Ω_μ é conhecido como conexão espinorial e é definido como

$$\Omega_\mu = \frac{i}{4} \omega_{\mu ab} \Sigma^{ab}, \tag{2.36}$$

onde

$$\Sigma^{ab} = \frac{i}{2}\left[\gamma^a, \gamma^b\right], \tag{2.37}$$

e $\omega_{\mu ab}$ é a chamada conexão de spin que está relacionada às tetradas pela relação conhecida como equação de estrutura de Cartan,

$$d\hat{\theta}^a + \omega^a_b \wedge \hat{\theta}^b = T^A. \tag{2.38}$$

A equação de estrutura de Cartan define a relação das tetradas com a torsão T^A do espaço. No nosso caso, nos limitaremos a espaços com torção nula. Outra quantidade que exige atenção na equação de Dirac em espaços curvos são as matrizes γ, ou matrizes de Dirac. O elemento e^a_μ nos dá a transformação de coordenadas entre as coordenadas locais e as coordenadas no espaço curvo. Portanto, as matrizes de Dirac no espaço curvo são definidas como

$$\gamma^\mu(x) = e^a_\mu(x)\gamma^a. \tag{2.39}$$

Unificando esses resultados, encontramos a equação de Dirac de forma mais geral como

$$\left[-i\hbar c\gamma^\mu\left(\partial_\mu + \Omega_\mu\right) + mc^2\right]\psi = 0. \tag{2.40}$$

Se o problema que está sendo estudado tem a presença de campos elétricos e/ou magnéticos, seus potenciais aparecem no hamiltoniano de Dirac na forma do acoplamento

$$p_\mu \to p_\mu - \frac{e}{c}A_\mu, \tag{2.41}$$

onde $A_\mu = \left(-\frac{\Phi}{c}, \vec{A}\right)$ é o quadripotencial, sendo ϕ o potencial elétrico e $\vec{A}$ o potencial vetor magnético, e é a carga elétrica da partícula e c é a velocidade da luz. No nosso trabalho estaremos interessados, apenas, em problemas com campo magnético. Neste caso, ficaremos com a equação

$$\left[-i\hbar c\gamma^\mu\left(\partial_\mu + \Omega_\mu\right) - e\gamma^\mu A_\mu + mc^2\right]\Psi = 0. \tag{2.42}$$

Solucionar esse tipo de equação desacoplando as equações diferenciais pode ser bastante trabalhoso em determinadas situações. Uma forma de simplificar os cálculos em algumas situações é trabalharmos com a equação de Dirac em sua forma quadrática. Demonstramos como fazer isso na próxima seção.

2.4 Forma Quadrática

Uma das principais características da equação de Dirac, que a diferencia da equação de Schrödinger e da equação de Klein Gordon, é o fato de ela ser uma equação diferencial de primeira ordem, ao contrário destas equações citadas, que são de segunda ordem. Como estamos acostumados a lidar com a equação de Schrödinger e já conhecemos diversos resultados matemáticos desenvolvidos para a solução de alguns problemas, é útil encontrar uma forma quadrática para a equação de Dirac onde podemos utilizar esses resultados conhecidos. Para fazer isso, partimos da equação (2.42) escrita em termos do tensor energia–momento

$$\left[\sigma^i p_i - i\hbar\sigma^i\Omega_i - \frac{e}{c}\sigma^i A_i + \sigma^3 mc - \frac{E}{c}\right]\Psi = 0. \tag{2.43}$$

Multiplicamos, então, pelo operador

$$\left[\sigma^j p_j - i\hbar\sigma^j\Omega_j - \frac{e}{c}\sigma^j A_j + \sigma^3 mc + \frac{E}{c}\right], \tag{2.44}$$

e obtemos

$$\begin{aligned} p_i p_i\psi - 2i\hbar\Omega_i p_i\psi + 2i\hbar\frac{e}{c}A_i\Omega_i\psi - 2\frac{e}{c}A_i p_i\psi - \hbar^2\Omega_i\Omega_i\psi + \frac{e^2}{c^2}A_i A_i\psi \\ -is\frac{e}{c}p_i A_j\epsilon_{ijk}\sigma^k\psi + \left(m^2c^2 - \frac{E^2}{c^2}\right)\psi = 0. \end{aligned} \tag{2.45}$$

Lembrando que $p_i = -i\hbar\vec{\nabla}$ e consequentemente $p_i p_i = -\hbar^2\nabla^2$, teremos

$$\begin{aligned} -\hbar^2\nabla^2\psi - 2i\hbar\Omega_i p_i\psi + 2i\hbar\frac{e}{c}A_i\Omega_i\psi - 2\frac{e}{c}A_i p_i\psi - \hbar^2\Omega_i\Omega_i\psi + \frac{e^2}{c^2}A_i A_i\psi \\ -is\frac{e}{c}p_i A_j\epsilon_{ijk}\sigma^k\psi + \left(m^2c^2 - \frac{E^2}{c^2}\right)\psi = 0. \end{aligned} \tag{2.46}$$

onde ∇^2 é o operador de Laplace–Beltrami.

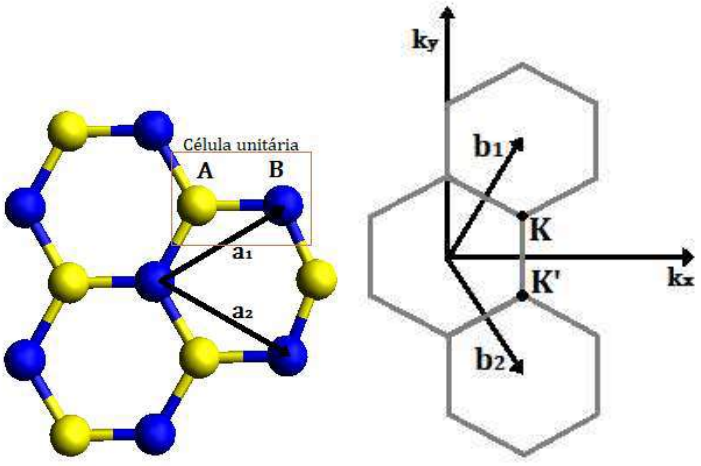
Esta forma quadrática da equação de Dirac pode ser muito útil para simplificar os cálculos em alguns problemas. Se conhecermos o operador de Laplace–Beltrami para o problema em questão, evitamos os cálculos de desacoplamento dos sistemas de equações diferenciais acopladas inerentes à equação de Dirac em sua forma padrão. Esse desacoplamento pode ser bastante trabalhoso especialmente quando este envolve espaços curvos e a presença de campos externos.

Uma outra vantagem da forma quadrática da equação de Dirac (2.46) é que ela é escrita em termos dos operadores, o que nos ajuda a identificar com maior clareza o que cada termo da solução representa.

Na próxima seção discutiremos as principais características do grafeno, material que tem suas propriedades eletrônicas modeladas por uma equação de Dirac efetiva.

2.5 Grafeno

O grafeno é uma estrutura de átomos de carbono arranjados em uma rede hexagonal com a espessura de um único átomo. O átomo de carbono tem seis elétrons, dois deles formam um orbital $1s^2$ e os outros quatro se configuram em orbitais do tipo $2s^2$ e $2p^2$, no seu estado fundamental [84]. A primeira vista, pode parecer que o carbono será um átomo bivalente, uma vez que terá dois elétrons $2p$ disponíveis para ligações, enquanto os elétrons $2s$ são quimicamente inertes. No entanto, observa-se que o carbono é um átomo tetravalente. Isso ocorre porque o carbono forma estados hibridizados *sp*. Quando os átomos formam moléculas ou sólidos, a energia total diminui devido à sobreposição das funções de onda e a formação dos orbitais moleculares nas moléculas e das bandas de energia nos sólidos. É esse ganho de energia que promove elétrons $2s$ para estados $2p$ nos átomos de carbono, permitindo assim que o carbono faça quatro ligações.



(a) (b)

Figura 2 – Em (a) vemos a estrutura hexagonal do grafeno construída com duas subredes A e B. Os vetores da rede são $\vec{a_1}$ e $\vec{a_2}$, dados em (2.47). A Figura (b) apresenta a zona de Brillouin correspondente, com os vetores da rede recíproca $\vec{b_1}$ e $\vec{b_2}$ no espaço recíproco. Os pontos de Dirac são localizados por K e $K^{'}$.

Uma primeira opção de hibridização que ocorre no carbono acontece quando orbitais s e p se combinam para formar quatro orbitais *sp* que permitem quatro ligações químicas simples, equivalentes, do tipo σ. Este tipo de hibridização é conhecida com sp^3, já que um

orbital s se combina com três orbitais p. Uma outra opção de hibridização acontece quando três elétrons sp formam ligações covalentes hibridas, do tipo σ, deixando um elétron p que formará uma ligação π. As órbitas correspondentes se acomodam no plano, separadas por um ângulo de 120°. São ligações desse tipo que ocorrem no grafite e na folha de grafeno.

Os átomos de carbono no grafeno se organizam em uma rede cristalina hexagonal semelhante a um favo de mel (figure 2a). A rede de Bravais é triangular e tem vetores de rede dados por

$$\vec{a_1} = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}), \qquad \vec{a_2} = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}), \tag{2.47}$$

onde $a \approx 1,42$Å é a distância entre os vizinhos mais próximos. A rede do grafeno contem dois átomos por célula unitária e duas subredes, chamadas A e B. Cada átomo da subrede A é cercado por três átomos da subrede B e cada átomo da subrede B é cercado por três átomos da subrede A, formando, assim, uma rede bipartida. A zona de Brillouin é apresentada na Figura 2b. Sua rede recíproca também é triangular e tem vetores de rede dados por

$$\vec{b_1} = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}), \qquad \vec{b_2} = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}). \tag{2.48}$$

Dois pontos especiais de alta simetria estão representados na rede recíproca como K e $K^{'}$. Esses pontos são conhecidos como pontos de Dirac. Os estados hibridizados sp^2 (σ estados) formam bandas de valência e condução com um grande gap, já os estados π formam uma banda simples, onde as bandas de valência e condução se cruzam nos pontos K e $K^{'}$ formando um cone conhecido como cone de Dirac. Este ponto cônico é uma característica do grafeno que dá origem às suas propriedade eletrônicas peculiares.

A estrutura eletrônica do grafeno é descrita pelo modelo de ligação forte (tight–binding), obtido primeiramente por Wallace, em 1947 [85]. Na aproximação de vizinhos mais próximos, a interação entre as subredes é desprezada, ficando apenas as interações entre os primeiros e segundos vizinhos. O hamiltoniano é, então, descrito pela matriz 2×2

$$\hat{H}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} 0 & tS(\vec{k}) \\ tS^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix}, \tag{2.49}$$

onde $\vec{k}$ é o vetor de onda, t é a energia para o átomo saltar para o átomo vizinho mais próximo. No carbono esse parâmetro vale aproximadamente $t \approx 2,8eV$ e

$$S(\vec{k}) = \sum_{\vec{\delta}} e^{i\vec{k}\vec{\delta}} = 2e^{\frac{ik_x a}{2}} cos\left(\frac{k_y a\sqrt{3}}{2}\right) + e^{-ik_x a}. \tag{2.50}$$

A energia é dada pela relação

$$E(\vec{k}) = \pm t \left| S(\vec{k}) \right| = \pm t\sqrt{3 + f(\vec{k})} + t^{'} f(\vec{k}), \tag{2.51}$$

onde $t^{'}$ é a energia para o átomo saltar para o segundo vizinho mais próximo e

$$f(\vec{k}) = 2cos(\sqrt{3}k_y a) + 4cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right). \tag{2.52}$$

O sinal de $\pm$ na expressão (2.51) indica a banda de condução e a banda de valência, respectivamente. O espectro de energia resultante apresenta simetria em torno dos pontos de cruzamento entre as bandas. Perceba que quanto menor o valor de $t^{'}$, a simetria elétron buraco se torna maior, alcançando não somente as vizinhanças do cruzamento das bandas, mas também toda a zona de Brillouin. Na Figura (2), podemos ver a estrutura de bandas do grafeno mostrando a simetria elétron buraco. Esses pontos de alta simetria são

$$\vec{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right), \qquad \vec{K}^{'} = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right), \tag{2.53}$$

e satisfazem a relação $S(\vec{K}) = S(\vec{K}^{'}) = 0$. O comportamento da banda de energia próxima desses pontos pode ser encontrado expandindo o hamiltoniano, da seguinte forma

$$\hat{H}_{K,K^{'}}(\vec{q}) = \hbar v_f \begin{pmatrix} 0 & (q_x \mp i q_y) \\ (q_x \pm i q_y)) & 0 \end{pmatrix}, \tag{2.54}$$

onde $\vec{q} = \vec{k} - \vec{K}$ ou $\vec{k} - \vec{K}^{'}$, $v_f = \frac{3a|t|}{2}$ é a velocidade do elétron no ponto de Dirac. Para o grafeno não dopado, essa velocidade coincide com a velocidade de Fermi ($v_f = 1 \cdot 10^6 m/s$). O espectro de energia, considerando $\vec{k} = \vec{K} + \vec{q}$, com $|\vec{q}| << |\vec{K}|$, é

$$E_{\pm}(\vec{q}) \approx \pm v_f |\vec{q}| + O\left[\left(\frac{q}{K}\right)^2\right]. \tag{2.55}$$

Essa relação de dispersão é uma característica do grafeno que o diferencia de outros materiais. Usualmente, a relação entre a energia e o momento é quadrática, com energia de Fermi dependendo diretamente do momento. No grafeno, a velocidade de Fermi é constante e a relação de dispersão é linear. Esta relação de dispersão é a mesma que obtemos como solução da equação de Dirac para a partícula livre (2.25) se considerarmos uma partícula de massa nula e com velocidade v_f. Portanto, os portadores de carga no grafeno para

grandes comprimentos de onda (ou baixas energias) não são descritas pela equação de Schrodinger, mas por uma equação de Dirac efetiva em (2+1) dimensões, com massa nula.

Para obter esse modelo efetivo precisamos fazer as correspondências

$$q_x \to -i\frac{\partial}{\partial x}, \qquad q_y \to -i\frac{\partial}{\partial y}, \tag{2.56}$$

que equivale a aproximação de massa efetiva, ou teoria de pertubação $\vec{k}\cdot\vec{p}$ [86] . Como resultado dessa correspondência, o hamiltoniano (2.54) pode ser escrito agora como

$$\vec{H}_K = -i\hbar v_f \vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla}, \tag{2.57}$$

$$\vec{H}_K^{'} = \vec{H}_K^T. \tag{2.58}$$

O hamiltoniano completo consiste de matrizes 4×4 que levam em consideração as duas subredes e os dois pontos de Dirac. Utilizando a função de onda

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_A^K \\ \psi_B^K \\ \psi_A^{K^{'}} \\ \psi_B^{K^{'}} \end{pmatrix}, \tag{2.59}$$

podemos escrever o hamiltoniano como

$$\vec{H} = -i\hbar v_f \tau_0 \otimes \vec{\sigma}\vec{\nabla}, \tag{2.60}$$

onde τ_0 é a matriz unitária. A equação de Dirac efetiva apresenta dois pseudospins. Um deles é representado pelas matrizes $\vec{\sigma}$ e está relacionado as subredes A e B, o segundo pseudospin identifica o grau de liberdade relacionando aos pontos de Dirac K e $K^{'}$, que representamos pela notação $\vec{\tau}$.

No próximo capítulo utilizamos os resultados desenvolvidos para a equação de Dirac e sua versão efetiva no grafeno para investigar a dinâmica de uma partícula na superfície de um cone duplo.

3 DINÂMICA DE UMA PARTÍCULA NA SUPERFÍCIE DE UM CONE DUPLO

Neste capítulo investigamos a dinâmica de uma partícula em superfícies cônicas. Esse tipo de superfície apresenta especial interesse devido a sua curvatura singular. Eles são alvo de estudo como defeitos topológicos em meios contínuos, cordas cósmicas e buracos negros. Eles também são estudados no contexto da física de materiais como o grafeno e os isolantes topológicos, onde aparecem na forma de defeitos topológicos na estrutura do material, como as declinações.

Apesar de haver interesse no estudo de superfícies cônicas, a grande maioria dos estudos se limita a cones simples. Superfícies de cones duplos, isto é, dois cones ligados pelo vértice são pouco estudados. Pesquisas recentes tem demonstrado que esse tipo de superfície tem propriedades interessantes ligadas ao momento angular da partícula [36]. Classicamente, o vértice dos cones funciona como uma espécie de filtro permitindo que apenas partículas como momento angular nulo passem de um cone para outro. Já no regime quântico, a dependência com o momento angular aparece na forma de instabilidade na função de onda, em torno de $j = 0$, onde j é o número quântico de momento angular.

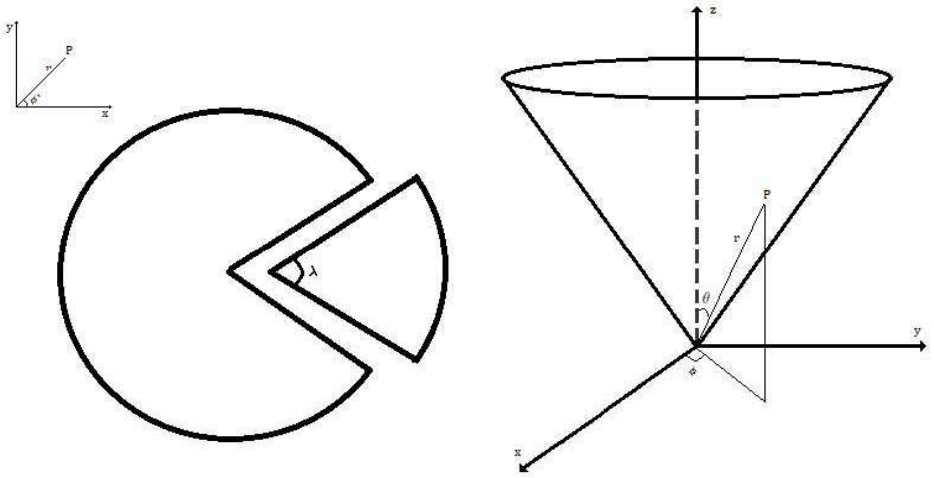
Inspirados por esses resultados, decidimos ampliar os estudos para o regime quântico–relativístico. Para isso escrevemos o sistema de coordenadas para o cone duplo de forma a unificar os dois cones em um único tensor métrico, estendendo o domínio da coordenada radial para todo o conjunto dos número reais. Isso nos permite desenvolver o formalismo das tetradas para essa superfície e, desta forma, resolver a equação de Dirac para os casos de uma partícula livre, bem como para uma partícula carregada na presença de um campo magnético azimutal.

3.1 Sistema de coordenadas

Uma superfície cônica pode ser construída, teoricamente, a partir de um defeito inserido no plano, através de um processo teórico de corte de uma região do plano e colagem das arestas resultantes, processo conhecido como modelo de Volterra. Na Figura 3 vemos uma demonstração desse método para uma superfície cônica simples. Uma fatia de ângulo λ é retirada do plano e as arestas restantes são coladas de forma a gerar um cone. O espaço plano da Figura 3a é mapeado através do tensor métrico em coordenadas polares

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\phi'^2. \tag{3.1}$$

No sistema de coordenadas polares, a coordenada radial r tem domínio $[0, \infty)$, já que é uma medida da distância da origem até o ponto. Ao colarmos as arestas para formar



(a) (b)

Figura 3 – Método de Volterra para a formação de uma superfície cônica. Em (a), uma fatia com ângulo λ é retirada de uma superfície plana e as arestas restantes são unidas formando uma superfície cônica (b). Esta superfície pode ser mapeada em coordenadas esféricas considerando θ constante.

a superfície cônica, a coordenada radial permanece com o mesmo domínio, mas agora é medida na superfície do cone. Por outro lado, a coordenada angular $\phi^{'}$, que originalmente tem domínio $(0, 2\pi)$, acaba ficando restrita a $(0, 2\pi - \lambda)$ quando retiramos uma fatia de ângulo λ. É conveniente, então, redefinirmos a coordenada angular para o cone de forma a recuperarmos o domínio original. Fazemos isso através da mudança de coordenadas

$$\phi^{'} = \phi\left(1 \pm \frac{\lambda}{2\pi}\right), \tag{3.2}$$

onde o sinal + ou − equivale à inserção ou retirada de uma fatia, respectivamente. Com esta mudança de coordenadas, o tensor métrico se torna

$$ds^2 = dr^2 + \alpha^2 r^2 d\phi^2, \tag{3.3}$$

onde $\alpha = 1 \pm \frac{\lambda}{2\pi} = \text{sen}(\theta)$ e a coordenada angular ϕ recupera o domínio original $[0, 2\pi)$, uma vez que $\phi = 0$ para $\phi^{'} = 0$ e $\phi = 2\pi$ para $\phi^{'} = 2\pi - \lambda$. O tensor métrico resultante é equivalente ao tensor métrico euclidiano em coordenadas esféricas com a coordenada θ tomada constante, como era de se esperar.

Este sistema de coordenadas mapeia perfeitamente bem a superfície de um cone simples. No entanto, algumas dificuldades surgem quando consideramos a superfície de um cone duplo, que consideraremos como sendo duas superfícies cônicas simples unidas pelo vértice. Neste caso, o sistema não pode mais ser visto do ponto de vista das coordenadas esféricas com θ constante, uma vez que teremos dois valores diferentes para θ, um para

cada cone. Seguindo esse ponto de vista, deveríamos olhar para o problema tratando um cone de cada vez, o que equivale a resolvermos duas vezes o problema do cone simples.

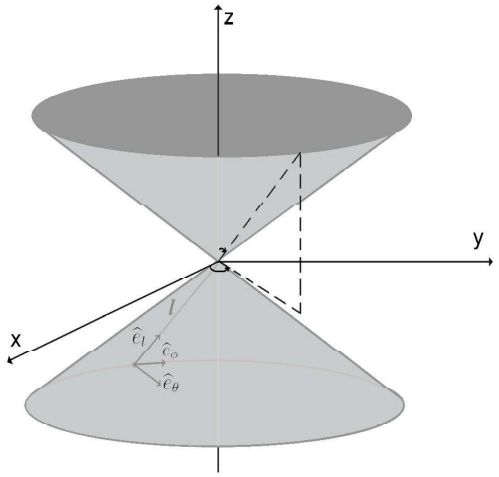


Figura 4 – Sistema de coordenadas para a superfície de um cone duplo.

Simplificamos bastante o problema do cone duplo se notarmos que é possível mapear essa superfície simplesmente estendendo o domínio da coordenada radial para todo o conjunto dos números reais, como mostra a Figura 4. A diferença básica é que agora o versor radial, que chamaremos de l, terá projeção no eixo z sempre apontando no sentido positivo desse eixo. Como o ângulo θ é tomado como o ângulo entre o versor $\hat{e}_l$ e o versor $\hat{e}_z$ ele será uma constante neste novo sistema de coordenadas. Perceba que, todos os três versores no cone inferior apontam na direção oposta aos seus equivalentes no sistema de coordenadas esférico. Devemos ficar atentos a esse fato quando determinarmos posteriormente expressões para quantidades físicas, como o campo magnético.

Este novo sistema de coordenadas nos permite lidar com dois cones de forma integrada. Como o módulo da distância entre dois pontos neste espaço é sempre um número positivo, devemos ter

$$d\vec{r} = dl\ \hat{e}_l + \alpha\,|l|\,d\phi\ \hat{e}_\phi. \tag{3.4}$$

O quadrado do elemento de linha nos dá o tensor métrico deste espaço como sendo

$$ds^2 = d\vec{r}.d\vec{r} = dl^2 + \alpha^2\,|l|^2\,d\phi^2. \tag{3.5}$$

Com esses resultados somos capazes de modelar e investigar um sistema físico em uma superfície de um cone duplo. Iniciaremos nossos estudos apresentando os resultados para o caso clássico de uma partícula livre do ponto de vista das equações de Hamilton.

3.2 Equação de Movimento Clássica

O primeiro sistema que investigaremos é o caso de uma partícula livre na superfície de um cone duplo do ponto de vista do formalismo clássico de Hamilton-Lagrange [36], que nos darão uma visão do comportamento clássico de uma partícula nesta superfície. Considere, então, uma partícula livre, de massa m, se movendo livremente na superfície de um cone duplo, livre da influência de potenciais. A lagrangeana desta partícula é

$$L = \frac{m\dot{l}^2}{2} + \frac{m\alpha^2 l^2 \dot{\phi}^2}{2}. \tag{3.6}$$

Como o sistema está livre da influência de potenciais, os dois termos no lado direito da equação (3.6) se referem à energia cinética da partícula. O primeiro termo nos dá a energia cinética linear, na direção de l. Enquanto o segundo termo, representa a energia cinética de rotação, na direção de ϕ.

A partir dessa lagrangeana, obtemos a expressão para o hamiltoniano do sistema

$$H = \sum_i p_i q_i - L, \tag{3.7}$$

que é dado por

$$H = \frac{p_l^2}{2m} + \frac{p_\phi^2}{2m\alpha^2 l^2}, \tag{3.8}$$

onde $p_l = \frac{\partial L}{\partial \dot{l}} = m\dot{l}$ é o momento linear e $p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = m\alpha^2 l^2 \dot{\phi}$ é o momento angular. As equação de Hamilton serão, portanto

$$\dot{l} = \frac{\partial H}{\partial p_l} = \frac{p_l}{m}, \tag{3.9}$$

$$\dot{\phi} = \frac{\partial H}{\partial p_\phi} = \frac{p_\phi}{m\alpha^2 l^2}. \tag{3.10}$$

Um comportamento interessante surge quando olhamos para o caso onde o momento angular é conservado, ou seja $p_\phi = j = const.$ Considere, inicialmente, $j = 0$. Neste caso, a equação de movimento, dada por (3.9), resulta na seguinte relação

$$\frac{dl}{dt} = \frac{p_l}{m}, \tag{3.11}$$

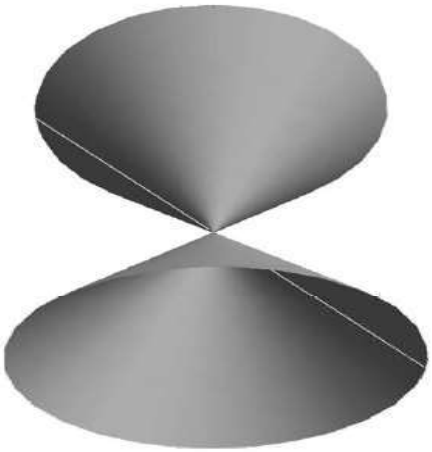


Figura 5 – Trajetória de uma partícula livre clássica na superfície de um cone duplo considerando momento angular j nula. Fonte: referência (36).

que tem como solução

$$l = l_0 + \frac{p_l}{m}t, \tag{3.12}$$

onde l_0 é o valor da coordenada radial l, no instante $t = 0$. De acordo com essa solução, no caso do momento angular nulo, o movimento da partícula descreverá uma trajetória retilínea, passando de um cone para outro. Já no caso de termos momento angular não nulo, mas constante, a equação de movimento é encontrada a partir da expressão para a energia do sistema

$$E = \frac{m\dot{l}^2}{2} + \frac{j}{2m\alpha^2 l^2}, \tag{3.13}$$

que pode ser escrita como

$$l = \pm\sqrt{\frac{2E}{m}(t + C)^2 + \frac{j}{2m\alpha E}}, \tag{3.14}$$

onde o sinal + ou − se refere ao cone superior e inferior, respectivamente, e C é uma constante de integração determinada pelas condições de contorno. Um fato interessante que surge nesta solução é o surgimento de uma solução para cada cone. A trajetória da partícula fica então confinada ao cone de onde ela iniciou seu movimento, não sendo possível para ela acessar o outro cone (Figura 6).

Percebemos, então, um comportamento inusitado nas trajétorias clássicas. O vértice da superfície cônica age como uma espécie de filtro, permitindo que apenas partículas com

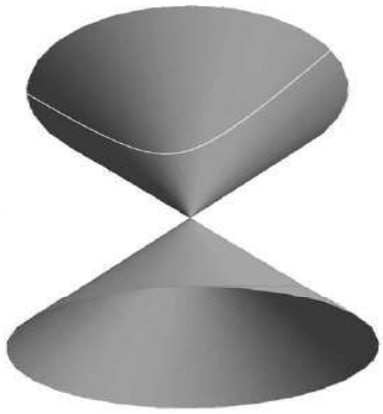


Figura 6 – Trajetória de uma partícula livre clássica na superfície de um cone duplo considerando momento angular j não nulo e constante. Fonte: referência (36).

momento angular nulo passem de um cone para o outro, seguindo uma linha reta. Uma pequena pertubação arbitrária no valor do momento angular modifica completamente o comportamento da partícula na superfície, levando a trajetórias curvas confinadas em um dos cones. Tal comportamento é apontado na referência [36] como sendo uma solução instável de Lyapunov, ou seja uma modificação abrupta de comportamento gerado por uma mudança mínima em um dos parâmetros, neste caso, o momento angular.

Diferentemente do caso clássico, sabemos que os valores permitidos do momento angular de uma partícula livre no caso quântico, deve ser quantizado. Vejamos então como o momento angular influenciará as soluções aceitáveis para o problema quântico resolvendo a equação de Schrödinger para este sistema.

3.3 Equação de Schrödinger para a partícula livre

Considere, agora, o mesmo sistema de uma partícula se movendo livremente, na ausência de potenciais, em uma superfície de um cone duplo e analisemos a solução da equação de Schrödinger para este sistema. O hamiltoniano (3.8) escrito em termos dos operadores momento linear $\hat{p}_l$ e momento angular $\hat{j}$, nos levam à relação

$$\left(\frac{\hat{p}_l{}^2}{2m} + \frac{\hat{j}^2}{2m\alpha^2 l^2}\right)\Psi(l,\phi) = E\Psi(l,\phi). \tag{3.15}$$

Conforme apontando por Kowalski e Rembielisnky [36], a análise da extensão auto adjunta para o caso do cone duplo leva a um definição dos operadores quânticos de momentos linear e angular da seguinte forma:

$$\hat{p}_l\Psi = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial l} + \frac{1}{2l}\right)\Psi, \tag{3.16}$$

$$\hat{j}\Psi = -i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial\phi}. \tag{3.17}$$

Ficamos, então, com a equação diferencial

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial l}+\frac{1}{2l}\right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m\alpha^2 l^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)\Psi = E\Psi, \tag{3.18}$$

$$-\frac{\partial^2\Psi}{\partial l^2} - \frac{1}{l}\frac{\partial\Psi}{\partial l} + \frac{\Psi}{4l^2} - \frac{1}{l^2\alpha^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2} = \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi. \tag{3.19}$$

Resolvemos esta equação diferencial utilizando o método de separação de variáveis. Consideramos, então, a função de onda $\Psi(l,\phi)$ como sendo o produto de duas funções que dependem de cada uma das coordenadas, ou seja $\Psi(l,\phi) = f(\phi)\psi_j(l)$. A solução da parte angular é facilmente encontrada resolvendo a equação diferencial (3.17), de onde obtemos a relação

$$f(\phi) = e^{ij\phi}, \tag{3.20}$$

com número quântico de momento angular j sendo um número inteiro mais um meio. A função de onda Ψ é autofunção do momento angular com autovalor $j\hbar$. Nos resta então encontrar a solução para a parte radial da função de onda. Fazemos isso substituindo a solução separável na equação diferencial (3.19). Encontramos o seguinte resultado

$$\frac{\partial^2}{\partial l^2}\psi_j(l) + \frac{1}{l}\frac{\partial}{\partial l}\psi_j(l) + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{\frac{1}{4}+\frac{j^2}{\alpha^2}}{l^2}\right)\psi_j(l) = 0. \tag{3.21}$$

Essa equação é conhecida como equação de Bessel e tem como solução

$$\psi_j(l) = C_1 J_{\sqrt{\frac{1}{4}+\frac{j^2}{\alpha^2}}}\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}l\right), \tag{3.22}$$

onde J é a função de Bessel de primeiro tipo e C_1 é uma constante de normalização. Evitamos soluções do segundo tipo pois elas divergem na origem do sistema de coordenadas.

Como vimos na seção anterior, a solução para as equações de movimento no caso clássico apresenta uma solução instável em torno de $j = 0$, tendo como resultado, um movimento confinado em um dos cone para uma partícula com momento angular não nulo,

e exigindo momento angular nulo para que uma partícula transite de um cone para outro. É interessante avaliarmos agora como se comporta a solução do caso quântico, uma vez que o momento angular agora assume valores quantizados. Vejamos inicialmente como se comporta a função de onda no vértice dos cones. A função de Bessel em $l = 0$ pode assumir os seguintes valores:

$$\begin{aligned} J_\nu(0) &= 0, \qquad \nu > 0 \quad e \quad \nu(\in \mathbb{Z}) < 0 \\ J_\nu(0) &= 1, \qquad \nu = 0 \\ J_\nu(0) &\to \infty, \qquad \nu(\notin \mathbb{Z}) < 0 \end{aligned} \tag{3.23}$$

onde ν é o índice da função de Bessel, que no nosso caso vale $\nu = \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{j^2}{\alpha^2}}$. Como j é composto por valores inteiros mais um meio, ν sempre será maior do que zero, o que implica que a função de onda será nula na origem. Portanto, a probabilidade de encontrarmos a partícula na origem é nula. Apesar disso, o momento angular ainda apresenta uma grande influência sob o comportamento da função de onda. A equação diferencial (3.21) para $j = 0$ tem a seguinte forma

$$\frac{\partial^2}{\partial l^2}\psi_0(l) + \frac{1}{l}\frac{\partial}{\partial l}\psi_0(l) + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{1}{4l^2}\right)\psi_0(l) = 0. \tag{3.24}$$

A solução dessa equação diferencial é

$$\psi_{0,E}(l) = \frac{1}{\sqrt{l}}\left[Asen\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}l\right) + Bcos\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}l\right)\right]. \tag{3.25}$$

onde A e B são constantes de integração e levamos em consideração que tanto $J_{\frac{1}{2}}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}}sen(z)$ como $J_{-\frac{1}{2}}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}}cos(z)$ são soluções da equação (3.24). A solução para $j \neq 0$ foi encontrada em (3.22). A função de Bessel com índice negativo também é solução da equação de diferencial (3.21), no entanto, para o caso de $j \neq 0$, o índice da função de Bessel é menor do que $\frac{-1}{2}$, o que leva a estados não normalizáveis, O que não pode representar a solução de um problema em mecânica quântica. Considerando, então, a solução para $j \neq 0$ e tomando o limite de $j \to 0$, teremos como resultado

$$\lim_{j\to 0}\psi_{j,E}(l) = \frac{1}{\sqrt{l}}Asen\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}l\right). \tag{3.26}$$

Assim como no caso clássico, a solução da função de onda no problema quântico apresenta um comportamento instável em torno de $j = 0$. Para $j = 0$ a solução é dada

como uma combinação de senos e cossenos. Mudando o valor do momento angular para um valor próximo de 0, a influência do cosseno na função de onda desaparece, restando uma solução dominada pela função seno.

Esses resultados interessantes para os casos clássico e quântico nos motivou a investigar o comportamento de uma partícula em um cone duplo para o caso relativístico, resolvendo a equação de Dirac. Apresentamos esses resultados na próxima seção.

3.4 Equação de Dirac para a partícula livre

A dinâmica quântico–relativística de uma partícula livre, de spin $\frac{1}{2}$, na superfície de um cone duplo, é dada pela equação de Dirac (2.40), onde devemos escrever as matrizes γ^μ no espaço curvo de acordo com a relação (2.39), bem como levar em consideração a conexão espinorial (3.31), conforme explicado na seção 2.3. Precisamos, então, desenvolver a teoria das tetradas para o sistema de coordenadas do cone duplo.

O tensor métrico da superfície de um cone duplo em (2+1) dimensões, é dado por

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha^2 l^2 \end{pmatrix}. \tag{3.27}$$

Para escrever a equação de Dirac em um espaço curvo utilizamos os elementos $e^a_\mu(x)$, que intermeiam a relação entre a equação no espaço plano para o espaço curvo. Eles são encontrados a partir da relação (2.34), considerando que a métrica do espaço plano como $\eta_{ab} = diag(-1, 1, 1)$. No nosso problema, temos os valores não nulos

$$e^0_t = 1, \qquad e^1_l = 1, \qquad e^2_\phi = \alpha\,|l|\,. \tag{3.28}$$

De posse desses elementos, determinamos o campo de tetradas

$$\hat{\theta}^0 = dt, \qquad \hat{\theta}^1 = dl, \qquad \hat{\theta}^2 = \alpha\,|l|\,d\phi. \tag{3.29}$$

Para encontrar a conexão espinorial, precisamos determinar os valores não nulos da conexão de spin $\omega_{\mu ab}$ a partir da equação de estrutura de Cartan (2.38). Encontramos no nosso caso

$$\omega_{\phi 21} = -\omega_{\phi 21} = \alpha. \tag{3.30}$$

Isso nos leva à conexão de spin

$$\Omega_\phi = -\frac{i}{2}\alpha\sigma^3. \tag{3.31}$$

As matrizes γ^μ no espaço curvo são escritas em termos das matrizes γ^a, definidas no plano, por meio da relação (2.39). Utilizando (3.28), temos

$$\gamma^0 = \gamma^0, \qquad \gamma^l = \gamma^1, \qquad \gamma^\phi = \frac{\gamma^2}{\alpha\,|l|}. \tag{3.32}$$

Determinadas essas quantidades, somos capazes de escrever e resolver analiticamente a equação de Dirac. Escrevemos a equação (2.40), com a conexão espinorial encontrada em (3.31) e as matrizes de Dirac definidas em (3.32). Escolhemos proceder os cálculos utilizando a equação de Dirac em sua forma quadrática (2.46), na ausência de potenciais, ou seja

$$-\hbar^2\nabla^2\psi - 2i\hbar\Omega_i p_i\psi - \hbar^2\Omega_i\Omega_i\psi + \left(m^2c^2 - \frac{E^2}{c^2}\right)\psi = 0. \tag{3.33}$$

Como comentado na seção 2.2, podemos simplificar os cálculos em casos bidimensionais definindo o grau de liberdade de spin através do parâmetro s. Seguimos, então, a transformação

$$\gamma^0 \to \sigma^3, \qquad \gamma^0\gamma^1 = \sigma^1, \qquad \gamma^0\gamma^2 = s\sigma^2. \tag{3.34}$$

Nesta representação, a conexão de spin será redefinida como

$$\Omega_\phi = -\frac{i}{2}\alpha s\sigma^3. \tag{3.35}$$

Para procedermos com os cálculos precisamos confirmar qual é a forma do operador de Laplace–Beltrami para as coordenadas do cone duplo. Esse operador é definido como

$$\nabla^2 = \frac{1}{\sqrt{|g|}}\frac{\partial}{\partial x^i}\left(\sqrt{|g|}g^{ij}\frac{\partial}{\partial x^j}\right). \tag{3.36}$$

com $g = det(g_{ij})$. O laplaciano no nosso caso será, então,

$$\begin{aligned}\nabla^2 &= \frac{1}{|l|\,\alpha}\frac{\partial}{\partial l}\left(|l|\,\alpha\frac{\partial}{\partial l}\right)+\frac{1}{|l|\,\alpha}\frac{\partial}{\partial\phi}\left(|l|\,\alpha\frac{1}{l^2\alpha^2}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\\ &= \frac{\partial^2}{\partial l^2}+\frac{1}{l}\frac{\partial}{\partial l}+\frac{1}{l^2\alpha^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2},\end{aligned} \tag{3.37}$$

onde usamos o resultado $\frac{\partial}{\partial l}|l| = \frac{|l|}{l}$. Aplicando o operador (3.37) em (3.33), encontramos

$$-\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial l^2}+\frac{1}{l}\frac{\partial}{\partial l}+\frac{1}{l^2\alpha^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\Psi+i\hbar^2\frac{s\sigma^3}{\alpha l^2}\frac{\partial}{\partial\phi}\Psi+\frac{\hbar^2}{4l^2}\Psi+\left(m^2c^2-\frac{E^2}{c^2}\right)\Psi=0. \tag{3.38}$$

A invariância rotacional da equação de Dirac no cone duplo nos permite escolher soluções com energia positiva que são autofunções do momento angular com autovalor $j\hbar$. Sendo assim, escolhemos o *ansatz*

$$\Psi(t,l,\phi) = e^{ij\phi}\psi_j(l). \tag{3.39}$$

Substituindo esse *ansatz* na expressão (3.38) e após algumas manipulações algébricas, chegamos a

$$\frac{\partial^2}{\partial l^2}\psi+\frac{1}{l}\frac{\partial}{\partial l}\psi-\frac{1}{l^2}\left[\frac{j^2}{\alpha^2}-\frac{js}{\alpha}\sigma^3+\frac{1}{4}\right]\psi+K^2\psi=0, \tag{3.40}$$

onde

$$K^2 = \frac{1}{\hbar^2c^2}(E^2-m^2c^4). \tag{3.41}$$

Como as únicas matrizes atuando são σ^3 e a matriz indentidade, e ambas comutam, podemos diagonaliza-las simutaneamente. Portanto levando em conta que $\sigma^3\psi = \lambda\psi$, onde $\lambda = \pm 1$ são os autovalores de σ^3 correspondentes as componetes ψ_A e ψ_B do espinor, respectivamente. Teremos

$$\frac{\partial^2}{\partial l^2}\psi+\frac{1}{l}\frac{\partial}{\partial l}\psi-\frac{\nu^2}{l^2}\psi+K^2\psi=0, \tag{3.42}$$

onde

$$\nu = \left(\frac{j}{\alpha}-\frac{s\lambda}{2}\right). \tag{3.43}$$

A equação (3.42) é uma equação de Bessel que tem como solução regular na origem

$$\psi(Kl) = C_2 J_\nu(Kl), \tag{3.44}$$

onde C_2 é uma constante de normalização.

A função de onda é do mesmo tipo da obtida na solução da equação de Schrödinger. A mesma análise que fizemos em relação ao comportamento da função próximo de j é válida aqui. No regime clássico, a solução é instável em torno de $j = 0$. Para demonstrar a validade dos resultados obtidos é interessante encontrar a função de onda no limite não relativístico. A energia não–relativística, que chamaremos de ϵ é definida como $\epsilon = E - mc^2$, quando $E \approx mc^2$. Neste limite, a componente superior da função de onda, isto é ψ_A é muito maior do que a componente inferior ψ_B (podemos confirmar esse resultado observando as expressões em (2.22)). Portanto, desconsideramos a componente ψ_B e reescrevemos a solução para a componente ψ_A, isto é, reescrevemos a equação (3.42) com $\lambda = +1$ como

$$\frac{c^2}{(E+mc^2)}\left[\frac{\partial^2}{\partial l^2}\psi_A + \frac{1}{l}\frac{\partial}{\partial l}\psi_A - \frac{1}{l^2}\left(\frac{j}{\alpha} - \frac{s}{2}\right)^2 \psi_A\right] = -\frac{\epsilon}{\hbar^2}\psi_A. \tag{3.45}$$

O termo de energia fora dos colchetes pode ser reescrito como

$$\frac{c^2}{(E+mc^2)} = \frac{1}{2m}\left(\frac{2mc^2}{\epsilon + 2mc^2}\right) = \frac{1}{2m}\left(\frac{1}{1+\frac{\epsilon}{2mc^2}}\right). \tag{3.46}$$

No limite não relativístico esse termo pode ser expandido em séries de potencias resultando

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{1}{1+\frac{\epsilon}{2mc^2}}\right) \approx \frac{1}{2m}\left(1 - \frac{\epsilon}{2mc^2} + \left(\frac{\epsilon}{2mc^2}\right)^2 + ...\right). \tag{3.47}$$

Considerando apenas o primeiro termo, ficamos com a seguinte equação para a função de onda no limite não relativístico

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial l^2}\psi_A + \frac{1}{l}\frac{\partial}{\partial l}\psi_A - \frac{1}{l^2}\left(\frac{j^2}{\alpha^2} - \frac{sj}{2\alpha} + \frac{1}{4}\right)\psi_A\right] + \frac{2m\epsilon}{\hbar^2}\psi_A = 0. \tag{3.48}$$

Esta é essencialmente a mesma equação que obtivemos na resolução da equação de Schrödinger a menos do termo $\frac{sj}{2\alpha}$. A equação de Schrödinger, calculada conforme a referência [36], teve o seu operador de momento linear modificado com o objetivo de

se tornar auto–adjunto. Nós não utilizamos esse operador modificado aqui, pois toda a informação da geometria já está incorporada à equação de Dirac por meio da métrica e da conexão espinorial. Não sendo necessário então modificar o operador para torná-lo auto–adjunto.

A solução da equação de Dirac para o caso da partícula livre no cone duplo apresenta simetria em relação aos cones. Apesar de identificarmos um comportamento instável em torno de $j = 0$, não conseguimos identificar nenhuma grande diferença na dinâmica da partícula em cada cone. E isso era de se esperar, uma vez que a dinâmica de uma partícula livre em uma superfície é independente da orientação da superfície no espaço. No entanto, quando consideramos a presença de campos no problema, a orientação da superfície em relação ao campo passa a ser importante. Com isso em mente, vamos analisar na próxima seção o problema de uma partícula carregada sob a influência de uma campo magnético.

3.5 Níveis de Landau

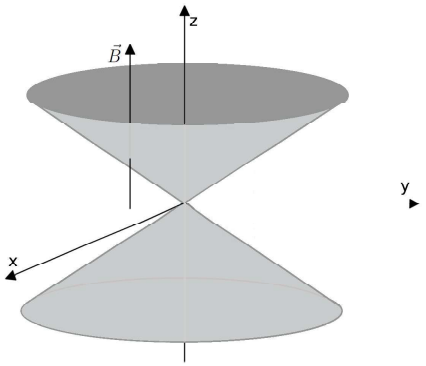


Figura 7 – Superfície de um cone duplo sob influência de um campo magnético azimutal uniforme na direção do eixo z.

Nesta seção, estudaremos os efeitos de um campo magnético azimutal, $\vec{B} = B_0\hat{e}_z$, experimentado por uma partícula carregada na superfície de um cone duplo (Figura 7). Como vimos na seção 2.3, o campo magnético é adicionado à equação de Dirac na forma do acoplamento do potencial vetor A_μ, de acordo com a equação (2.42). Precisamos então determinar o potencial vetor na geometria do cone duplo. O valor do potencial vetor é escolhido de forma a satisfazer a relação $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$. De acordo com o elemento de linha (3.4), podemos escrever o rotacional de $\vec{A}$ como

$$\vec{\nabla} \times \vec{A} = \frac{1}{\alpha\,|l|} \begin{vmatrix} \hat{e}_l & \alpha\,|l|\,\hat{e}_\phi & \hat{e}_z \\ \frac{\partial}{\partial l} & \frac{\partial}{\partial \phi} & \frac{\partial}{\partial z} \\ A_l & \alpha\,|l|\,A_\phi & A_z \end{vmatrix}. \tag{3.49}$$

Para um campo magnético azimutal, nos resta

$$\vec{\nabla} \times \vec{A} = B_0 \hat{e}_z = \frac{1}{\alpha |l|} \frac{\partial}{\partial l} (\alpha |l| A_\phi) \hat{e}_z, \tag{3.50}$$

que implica em

$$A_\phi = \frac{B_0 l}{2} \hat{e}_\phi. \tag{3.51}$$

De posse do potencial vetor magnético, podemos partir para a resolução da equação de Dirac. Partimos da forma quadrática

$$\begin{aligned} -\hbar^2 \nabla^2 \Psi - 2i\hbar \Omega_i p_i \Psi + 2i\hbar \frac{e}{c} A_i \Omega_i \Psi - 2\frac{e}{c} A_i p_i \Psi - \hbar^2 \Omega_i \Omega_i \Psi + \frac{e^2}{c^2} A_i A_i \Psi \\ -is\frac{e}{c} p_i A_j \epsilon_{ijk} \sigma^k \Psi + \left(m^2 c^2 - \frac{E^2}{c^2} \right) \Psi = 0. \end{aligned} \tag{3.52}$$

Substituindo a expressão para ∇^2 dada pela equação (3.37), juntmente com as quantidades Ω_ϕ em (3.31) e A_ϕ em (3.51), e levando em consideração também que as quantidades que aparecem na expressão (3.52) com índices latinos são definidas no espaço local, encontramos

$$\begin{aligned} - & \hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial l^2} + \frac{1}{l} \frac{\partial}{\partial l} + \frac{1}{l^2 \alpha^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \Psi - 2i\hbar \left(-\frac{i}{2} \alpha s \frac{\sigma^3}{\alpha |l|} \right) \left(-i\hbar \frac{1}{\alpha |l|} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \Psi \\ + & 2i\hbar \frac{eQ}{c} \left(\frac{B_0 l}{2} \right) \left(-\frac{i}{2} \alpha s \frac{\sigma^3}{\alpha |l|} \right) - \hbar^2 \left(-\frac{i}{2} \alpha s \frac{\sigma^3}{\alpha |l|} \right)^2 \Psi - 2\frac{eQ}{c} \left(\frac{B_0 l}{2} \right) \left(-i\hbar \frac{1}{\alpha |l|} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \Psi \\ + & \frac{e^2}{c^2} \left(\frac{B_0 l}{2} \right)^2 \Psi - \frac{iseQ}{c} \vec{\sigma}. \left(-i\hbar \vec{\nabla} \times \vec{A} \right) \Psi + \left(m^2 c^2 - \frac{E^2}{c^2} \right) \Psi = 0. \end{aligned} \tag{3.53}$$

Aqui, destacamos o sinal da carga da partícula na forma do parâmetro Q. Esse parâmetro vale -1(+1) para partícula(antipartícula). Com isso, e agora é o valor absoluto da carga elétrica da partícula. A partir da equação diferencial acima, já conseguimos perceber como o sistema de coordenadas do cone duplo, com o domínio da coordenada radial estendido. Vemos a presença tanto da coordenada l como do seu valor absoluto $|l|$. Sendo assim, não podemos mais simplesmente cancelar a divisão desses valores. Uma boa estratégia para lidar com essas divisões é definirmos o novo parâmetro

$$\eta = \frac{l}{|l|} = \begin{cases} +1, & \textit{para o cone superior} \\ -1, & \textit{para o cone inferior} \end{cases}. \tag{3.54}$$

Além de facilitar os cálculos, a presença desse parâmetro mostra de que forma o campo quebra a simetria entre os cones. Utilizando, então, esse novo parâmetro e novamente considerando os autovalores de σ^3 como λ, ficamos com

$$-\frac{\partial^2}{\partial l^2}\Psi - \frac{1}{l}\frac{\partial}{\partial l}\Psi - \frac{1}{l^2\alpha^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Psi + is\frac{\lambda}{\alpha l^2}\frac{\partial}{\partial\phi}\Psi + \frac{s\lambda eQ\eta B_0}{2\hbar c}\Psi - \left(-\frac{i}{2}\alpha s\frac{\lambda}{\alpha\,|l|}\right)^2\Psi$$
$$+i\frac{eQ\eta B_0}{\alpha\hbar c}\frac{\partial}{\partial\phi}\Psi + \frac{e^2}{\hbar^2c^2}\left(\frac{B_0 l}{2}\right)^2\Psi - \frac{seQ}{\hbar c}\lambda B_0\Psi + \left(\frac{m^2c^4 - E^2}{\hbar^2c^2}\right)\Psi = 0. \quad (3.55)$$

Utilizando o *ansatz* $\Psi(t, l, \phi) = e^{ij\phi}\psi_j(l)$, chegamos a

$$\frac{d^2}{dl^2}\psi + \frac{1}{l}\frac{d}{dl}\psi - \frac{M_1^2}{l^2}\psi + K_1\psi - \left(\frac{eB_0}{2\hbar c}\right)^2 l^2\psi = 0. \quad (3.56)$$

onde

$$M_1^2 = \left(\frac{j}{\alpha} - \frac{s\lambda}{2}\right)^2, \qquad K_1 = \frac{eQ\eta B_0}{\hbar c}N_1 + \left(\frac{E^2 - m^2c^4}{\hbar^2c^2}\right), \qquad N_1 = \left(\frac{j}{\alpha} + \frac{s\lambda}{2}\right). \quad (3.57)$$

Simplificamos essa expressão fazendo a mudança de variável $\zeta = \left(\frac{e|B_0|}{2\hbar c}\right)l^2$ e escrevemos na forma

$$\frac{d^2}{d\zeta^2}\psi + \frac{1}{\zeta}\frac{d}{d\zeta}\psi - \frac{M_1^2}{\zeta^2}\psi + \frac{K_1'}{\zeta}\psi - \frac{1}{4}\psi = 0. \quad (3.58)$$

onde redefinimos o parâmetro K_1 como

$$K_1' = \frac{\hbar v_f}{2e|B_0|}K_1. \quad (3.59)$$

Uma estratégia comum para resolver esse tipo de equação é propor uma solução baseada no seu comportamento nos limites assintóticos. Baseado no comportamento da equação (3.58) nos limites $\zeta \to \pm\infty$ e $\zeta \to 0$, propomos a solução

$$\psi = e^{-\frac{1}{2}\zeta}\zeta^{\frac{|M_1|}{2}}F(\zeta). \quad (3.60)$$

Substituindo em (3.58), chegamos a

$$\zeta\frac{d^2}{d\zeta^2}F(\zeta) + (|M_1| + 1 - \zeta)\frac{d}{d\zeta}F(\zeta) + \left(K_1' - \frac{|M_1 + 1}{2}\right)F(\zeta) = 0. \quad (3.61)$$

Tabela 1 – Estado quântico com respeito às energias das partículas no cone duplo, sob influência de um campo magnético externo. Consideramos $Q = -1$ e $b = +1$.

η	$\frac{j}{\alpha}$	$s.\lambda$	$\frac{E^2}{2e\lvert B_0\rvert\hbar c}$
$+1$	$\geq -\frac{1}{2}$	$+1$	n
$+1$	$< -\frac{1}{2}$	$+1$	$n + \frac{1}{2} + \frac{\lvert j\rvert}{\alpha}$
$+1$	$\geq +\frac{1}{2}$	-1	$n + 1$
$+1$	$< +\frac{1}{2}$	-1	$n + \frac{1}{2} + \frac{\lvert j\rvert}{\alpha}$
-1	$\geq -\frac{1}{2}$	$+1$	$n + \frac{1}{2} + \frac{j}{\alpha}$
-1	$< -\frac{1}{2}$	$+1$	$n + 1$
-1	$\geq +\frac{1}{2}$	-1	$n + \frac{1}{2} + \frac{j}{\alpha}$
-1	$< +\frac{1}{2}$	-1	n

Esta equação é conhecida como equação hipergeométrica confluente e $F(\zeta)$ é a função hipergeométrica confluente que pode ser expressa na forma $F\left(\frac{|M_1|+1}{2} - K_1', |M_1| + 1; \zeta\right)$. O espectro de energia é obtido exigindo-se que soluções físicamente aceitáveis precisam ser normalizadas, o que resulta na necessidade de truncarmos a série hipergeométrica. Esta condição nos leva a impor a relação

$$n = K_1' - \frac{|M_1| + 1}{2}, \tag{3.62}$$

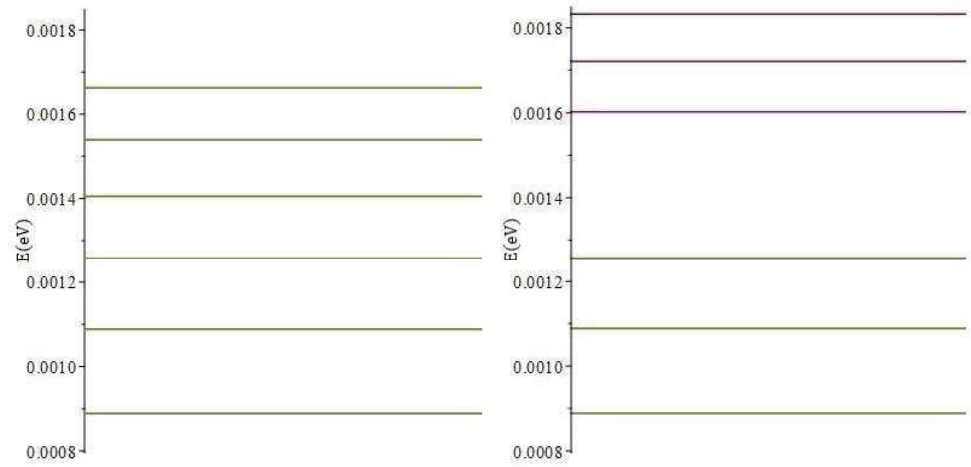
onde n é um número natural. A partir dessa condição, substituímos os valores K_1' e M_1, encontrados em (3.59) e (3.57), respectivamente e encontramos o espectro de energia

$$E^2 = 2e\hbar c|B_0| \left\{ n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\left|\frac{j}{\alpha} - \frac{s\lambda}{2}\right| + \frac{Q\eta b}{2}\left[\frac{j}{\alpha} + \frac{s\lambda}{2}\right]\right\} + m^2c^4. \tag{3.63}$$

Um novo parâmetro, b, foi incluído para expressar o sentido do campo magnético em relação ao eixo z, sendo $+1(-1)$ para um campo magnético paralelo (antiparalelo) ao eixo z. Como esperado do problema clássico de uma partícula carregada em presença de um campo magnético, uma inversão simultânea do sinal da carga da partícula (Q) e do sentido do campo magnético (b) leva aos mesmos níveis de energia.

Muitos parâmetros influenciam o comportamento do espectro de energia. Para uma melhor análise desses parâmetros, nós listamos na tabela 1 alguns resultados da combinação dos parâmetros η, $\frac{j}{\alpha}$ e $s.\lambda$. Podemos classificar os níveis de energia em dois grupos. O primeiro grupo é composto dos níveis que não dependem do número quântico de momento angular e do parâmetro α, esses níveis aparecem nas formas n e $n + 1$. Esses dois estados são infinitamente degenerados e representam os mesmos níveis de Landau, exceto o estado $n = 0$ que apresenta metade da degenerescência e permite estados com modo zero, correspondentes a energia de repouso, $E = mc^2$. Os estados deste primeiro grupo são os mesmos que aparecem no caso de uma superfície plana, sem defeitos. No caso

do cone duplo, esses estados estarão relacionados a órbitas clássicas que não englobam o vértice em uma abordagem semiclássica, que são chamados níveis de corpo. Os demais estados, que aparecem na forma $n + \frac{1}{2} + \frac{|j|}{\alpha}$ ocorrem para energias diferentes do primeiro grupo e estão relacionados a órbitas clássicas que englobam o vértice dos cones. Eles são chamados níveis de ápice.



(a) (b)

Figura 8 – Níveis de energia para um valor fixo do campo magnético $|B_0| = 1$. Novamente consideramos $\hbar = 6,582 \cdot 10^{-16} eV \cdot s$, $c = 3 \cdot 10^8 m/s$ e $m = 9,11 \cdot 10^{-31} Kg$ com os parâmetros $Q = -1$, $b = s = \lambda = +1$ e $j = -\frac{5}{2}$. Níveis de corpo são representados na cor verde, enquanto os níveis de ápice estão representados em roxo. Temos em (a) o caso plano, ou seja $\alpha = 1$, onde todos os estados são níveis de corpo. Em (b), temos o cone duplo com $\alpha = 0,5$, neste caso, níveis de ápice aparecem para o cone superior ($\eta = +1$).

A introdução do parâmetro η em (3.54) nos trouxe a vantagem de simplificar os os cálculos e, além disso, nos permite agora avaliar a influência do campo magnético em cada cone. No caso da partícula livre, a orientação espacial dos cones não influencia a dinâmica da partícula. Quando introduzimos o campo magnético, percebemos que ele acaba quebrando a essa simetria entre os cones, o que leva a diferentes níveis de energia para cada cone. Esse fato é traduzido pelo parâmetro η. Olhando com mais atenção para o parâmetro η na tabela 1, percebemos que os níveis no cone duplo aparecem alternadamente como níveis de corpo e de ápice. Ou seja, se um dos cone apresenta níveis de corpo para uma determinada combinação de parâmetros, o outro cone terá necessariamente níveis de ápice para a mesma combinação de parâmetros (Figura 8).

Os níveis de ápice dependem do parâmetro α. Este parâmetro nos dá uma medida do ângulo de abertura da superfície cônica e assume valores no intervalo $0 < \alpha < 1$. Neste intervalo, percebemos que os níveis de energia se tornam mais largos quando comparados ao caso plano. Percebemos também que existe uma simetria de "inversão" para uma inversão simultânea de todos os parâmetros, conforme a tabela 1.

Uma vez que já conhecemos a solução da equação de Dirac para a geometria de um cone duplo tanto no caso da partícula livre como no caso dos níveis de Landau, vamos dar um passo adiante e investigar a dinâmica de um férmion sem massa em um nanocone duplo de carbono. Esse será o tópico principal do próximo capítulo.

4 DINÂMICA DE UMA PARTÍCULA NA SUPERFÍCIE DE UM NANOCONE DUPLO DE CARBONO

Neste capítulo aplicamos o modelo efetivo desenvolvido na seção 2.5, para o estudo das propriedades eletrônicas de nanocones duplos de carbono. Estudos recentes com simulações computacionais indicaram que a obtenção experimental desse tipo de estrutura é possível, uma vez que sua energia de formação é um pouco menor do que o caso do cone simples [37].

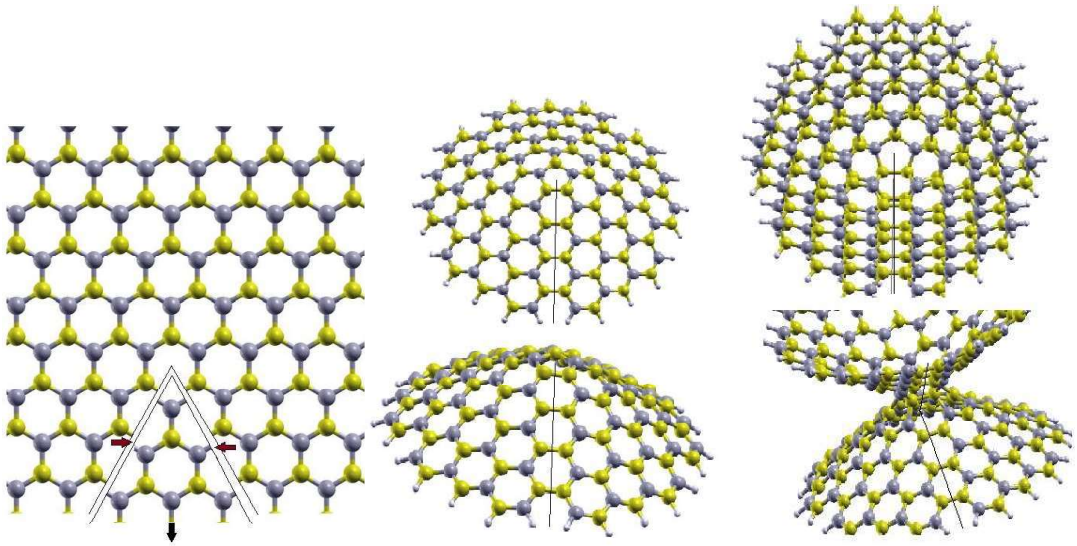
Inicialmente, utilizamos a geometria do cone para determinar todas as quantidades exigidas pelo modelo efetivo, utilizando o formalismo das tetradas. Em seguida, aplicamos esse modelo para o problema de uma partícula livre. Encontramos a densidade de estados local, próximo ao vértice dos cones e mostramos que para algumas combinações dos tipos de defeitos na superfície, a estrutura apresenta características metálicas. Resolvemos, também, o problema de uma partícula carregada sob influência de um campo magnético azimutal e obtemos os níveis de Landau correspondentes. Neste caso, separamos os níveis em duas classes e mostramos como o campo magnético acaba selecionando a classe que aparecerá em cada cone.

4.1 Acoplamentos para o nanocone duplo de carbono

Para obtermos uma superfície cônica de carbono, pensando no método de Volterra, precisamos retirar fatias angulares que sejam múltiplos de $\frac{\pi}{3}$ (veja a Figura 9). Neste processo, o hexágono na origem se torna um pentágono e átomos de mesma subrede são conectados entre si. Podemos, também, adicionar uma fatia angular à superfície formando o que chamamos de anticone. Neste caso, a origem será composta de um heptágono. Estamos considerando a inserção ou retirada de apenas uma fatia, uma vez que estruturas cônicas com curvaturas maiores do que essas são raramente observadas experimentalmente devido à sua alta energia de formação.

Na descrição contínua, os pentágonos e heptágonos na rede cristalina são tratados na forma de campo de gauge fictícios. Já calculamos um desses campos na seção 3.4, onde obtivemos a expressão para a conexão espinorial Ω_μ para a geometria do cone duplo. Um segundo campo de gauge que devemos levar em consideração é o campo $\vec{a}$, encontrado a partir da relação

$$\oint \vec{a} \cdot d\vec{r} = \frac{\pi}{2}\tau^2. \tag{4.1}$$



(a) (b) (c)

Figura 9 – Processo de Volterra para o nanocone duplo de carbono. em (a partimos de uma folha de grafeno e retiramos uma fatia de ângulo $\frac{\pi}{3}$. As ligações quebradas são refeitas de forma a obtermos um cone simples em (b). Neste processo de colagem átomos da mesma subrede são conectados entre si. Em (c) dois cones são ligados pelo vértice para formar um cone duplo.

Quando o espinor é transportado por um ângulo de 2π na superfície do cone, ele é forçado a dar um salto na mesma subrede. Em analogia ao efeito Aharonov–Bohm, essa descontinuidade é traduzida na forma do campo de gauge $\vec{a}$. Precisamos, então, calcular qual o valor de $\vec{a}$ para a geometria do cone duplo. Vamos, inicialmente, lembrar do parâmetro α que nos dá uma medida do ângulo de abertura do cone. Esse parâmetro é definido como

$$\alpha = 1 + \frac{\lambda}{2\pi}, \tag{4.2}$$

onde $\lambda = \pm N\frac{\pi}{3}$ é o ângulo da fatia inserida $(+)$ ou retirada $(-)$, sendo N a quantidade de fatias inseridas ou retiradas para formar o cone duplo. Considerando a retirada ou inserção de apenas uma fatia, podemos escrever a relação

$$1 = \pm 6\,(\alpha - 1)\,. \tag{4.3}$$

Esse valor unitário pode ser introduzido na equação (4.1), sem perda de generalidade, resultando em

$$\oint_{\gamma} \vec{a}.\,d\vec{r} = \left[\pm 6\,(\alpha - 1)\right]\frac{\pi}{2}\tau^2 = \pm 3\pi\,(\alpha - 1)\,\tau^2. \tag{4.4}$$

A solução dessa integral é dada por

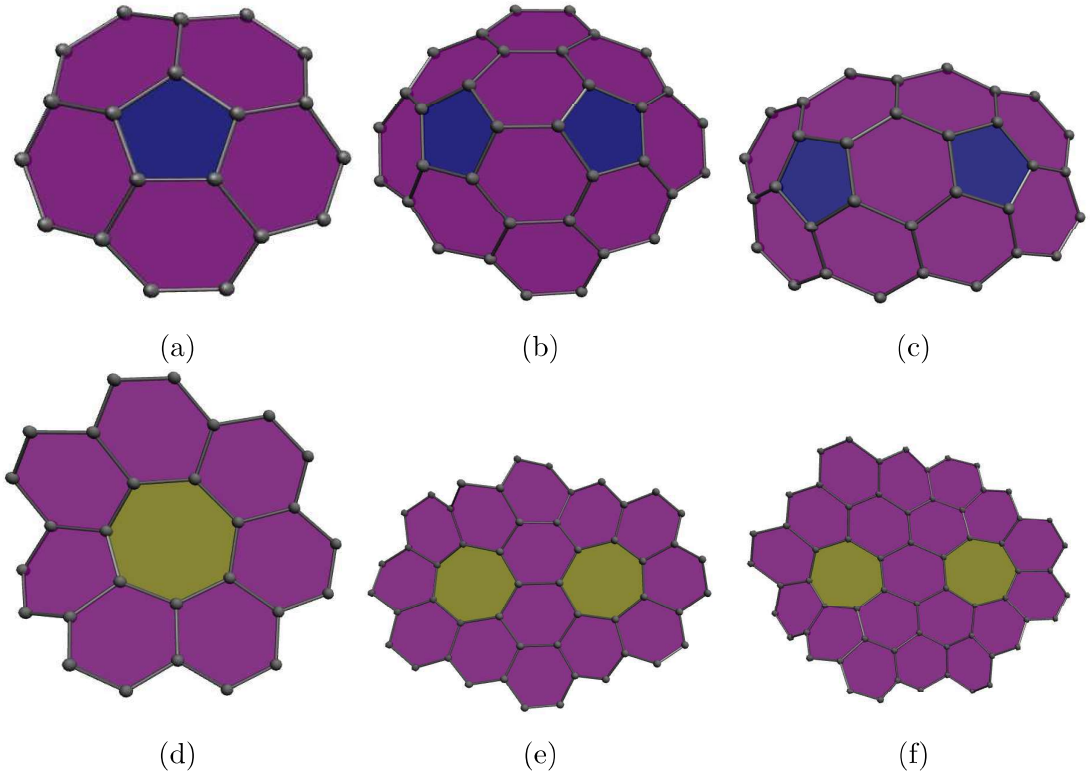


Figura 10 – Nanocones de carbono. (a), (b) e (c) são compostos de vértices pentagonais, sendo que (b) tem coordenadas paramétricas (1,1) e (c) (2,0). As superfícies (d), (e) e (f) são compostos de vértices heptagonais, sendo que (e) têm coordenadas paramétricas (1,1) e (f) (2,0).

$$\vec{a} = \frac{\pm 3\pi\,(\alpha - 1)}{S}\tau^2 \hat{e}_\phi, \tag{4.5}$$

e

$$S = \int d\vec{r} = \int (dl\hat{e}_l + |l|\,\alpha d\phi \hat{e_\phi})_l = 2\pi|l|\alpha. \tag{4.6}$$

onde S é um comprimento de circunferência tomado na superfície do cone para um determinado valor de l. Ficamos, então, com o seguinte campo de gauge

$$a_\phi = \pm\frac{3}{2}\frac{(\alpha - 1)}{\alpha|l|}\tau^2. \tag{4.7}$$

Podemos, ainda, considerar um cone contendo dois pentágonos ou dois heptágonos no seu vértice (veja Figuras 10 e 11). Nestes casos o campo de gauge será dado através da relação

$$\oint_\gamma \vec{a}.\,d\vec{r} = \pi\left[1 - \frac{2}{3}\,(n - m)\right]\tau^3. \tag{4.8}$$

Como agora precisamos retirar ou inserir duas fatias para a formação do defeito, encontramos, a partir da equação 4.2, a relação unitária

$$1 = \pm 3\,(\alpha - 1)\,. \tag{4.9}$$

Esse valor unítario é, então, inserido na expressão (4.1) e encontramos o valor do campo de gauge para a situação de dois defeitos como sendo

$$a_\phi = \pm\frac{3}{2}\frac{(\alpha-1)}{\alpha|l|}\left[1 - \frac{2}{3}\,(n-m)\right]\tau^3. \tag{4.10}$$

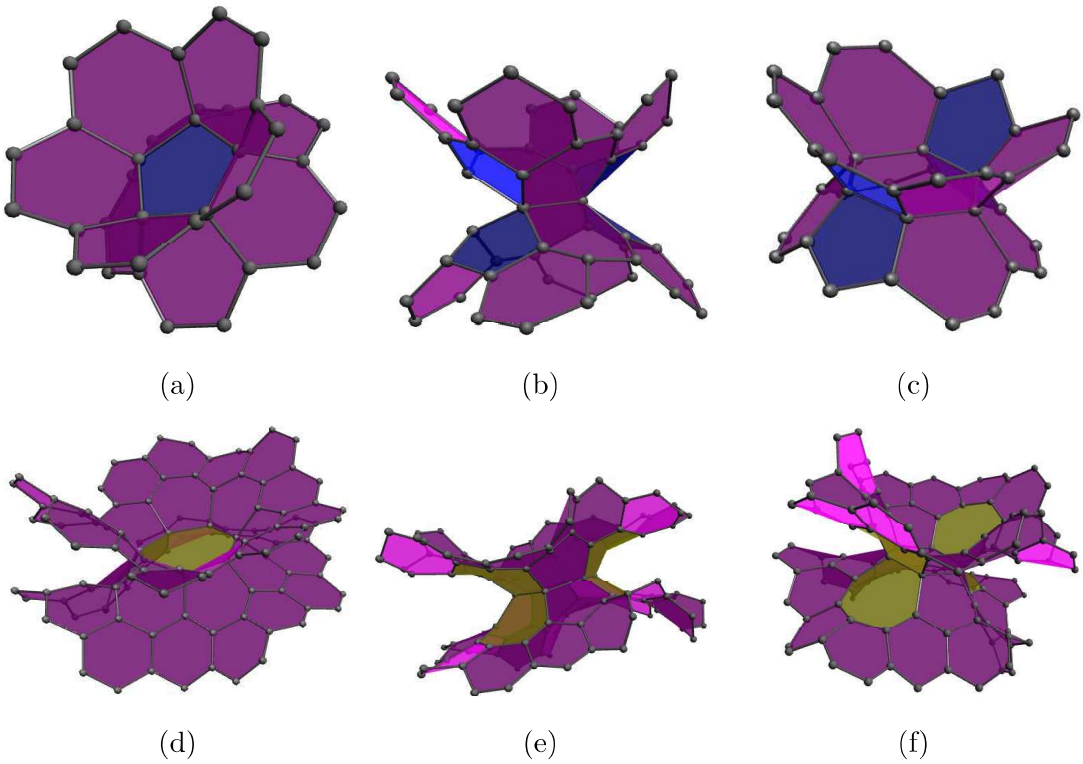


Figura 11 – Nanocones duplos de cabono construídos pela justaposição das superfícies na Figura (10).

Os parâmetros (n, m) são as coordenadas paramétricas dos centros dos defeitos na rede do grafeno. É um fato conhecido que os efeitos dos defeitos topológicos na superfície do grafeno são dependentes da posição relativa entre os defeitos. Esta sensibilidade pode ser classificada por uma regra de combinação em $(n-m)$, conforme demonstrado na referência [30]. Duas classes de defeitos são diferenciadas a depender de $n-m$ ser um múltiplo de três ou não. Escolhemos um exemplo para cada uma dessas classes. Para a classe $n \not\equiv m(mod3)$, escolhemos a estrutura (1,1) e para a classe $n \equiv m(mod3)$, escolhemos a estrutura (2,0). Investigaremos, então, seis diferentes estruturas, três com defeitos pentagonais e três com defeitos heptagonais, conforme podemos ver nas Figuras 11. A título de comparação também analisaremos o caso do cone simples, conforme vemos na Figura 10.

4.2 Partícula livre na superfície de um nanocone duplo de carbono

Agora, podemos escrever a equação de Dirac efetiva para o caso da partícula livre na superfície de um nanocone duplo de carbono como

$$\left[\sigma^i p_i - i\hbar\sigma^i\Omega_i - \hbar\sigma^i a_i - \frac{E}{v_f}\right]\Psi = 0. \tag{4.11}$$

Para encontrarmos a forma quadrática desta equação, a multiplicamos pelo operador

$$\left[\sigma^j p_j - i\hbar\sigma^j\Omega_j - \hbar\sigma^j a_j + \frac{E}{v_f}\right]. \tag{4.12}$$

e após alguns cálculos encontramos

$$p_i p_i\Psi - 2i\hbar\Omega_i p_i\Psi - 2\hbar a_i p_i\psi - \hbar^2\Omega_i\Omega_i\Psi + 2i\hbar^2\Omega_i a_i\Psi + \hbar^2 a_i a_i\Psi - \frac{E^2}{v_f^2}\Psi = 0. \tag{4.13}$$

Usando as matrizes γ^μ em (3.32), a conexão espinorial (3.31) e levando em conta que os campos de gauge (4.10) e (4.8) têm apenas componentes em ϕ, teremos

$$\begin{aligned} - & \frac{\partial^2}{\partial l^2}\Psi - \frac{1}{l}\frac{\partial}{\partial l}\Psi - \frac{1}{l^2\alpha^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Psi + i\frac{\sigma^3}{\alpha l^2}\frac{\partial}{\partial\phi}\Psi + \frac{2ia_\phi}{\alpha\,|l|}\frac{\partial}{\partial\phi}\Psi \\ - & \frac{1}{4l^2}\Psi + \frac{a_\phi\sigma^3}{|l|}\Psi + {a_\phi}^2\Psi - k^2\Psi = 0, \end{aligned} \tag{4.14}$$

onde definimos

$$k^2 = \left(\frac{E}{\hbar v_f}\right)^2. \tag{4.15}$$

Escolhemos novamente trabalhar no *ansatz*

$$\Psi(l,\phi) = e^{ij\phi}\psi_j(l), \tag{4.16}$$

Podemos, agora, diagonalizar a equação (4.14) levando em conta que os únicos operadores agindo no k spin são τ^2 e τ^3 que vem do campos de gauge (4.10) e (4.8), respectivamente. Portanto podemos substituir o seu autovalor $\tau = \pm 1$, que vale $+1(-1)$

para o k spin $K(K^{'})$. De forma análoga, a matriz σ^3 que age no pseudspin é substituido pelo seu autovalor $\sigma = \pm 1$, onde o sinal +1(-1) está relacionado à sub rede A(B). Aplicando esses resultados, encontramos

$$\begin{aligned} - & \frac{\partial^2}{\partial l^2}\psi_j - \frac{1}{l}\frac{\partial}{\partial l}\psi_j + \frac{j^2}{l^2\alpha^2}\psi_j - \frac{j\sigma}{\alpha l^2}\psi_j - \frac{2j\tau a_{\phi}^{'}}{\alpha l^2}\psi_j \\ + & \frac{1}{4l^2}\psi_j + \frac{a_{\phi}^{'}\sigma\tau}{l^2}\psi_j + \frac{a_{\phi}^{'\,2}}{l^2}\psi_j - k^2\psi_j = 0, \end{aligned} \tag{4.17}$$

onde definimos

$$a_{\phi}^{'} = -\frac{3}{2}\frac{(\alpha-1)}{\alpha}, \quad \text{para um defeito,} \tag{4.18}$$

e

$$a_{\phi}^{'} = -\frac{3}{2}\frac{(\alpha-1)}{\alpha}\left[1 - \frac{2}{3}(n-m)\right], \quad \text{para dois defeitos,} \tag{4.19}$$

com o objetivo de tornar explícita a dependência da coordenada radial (l) com os campos de gauge. Reorganizamos, então, os termos da equação (4.17) e a reescrevemos na forma

$$\frac{\partial^2}{\partial l^2}\psi_j + \frac{1}{l}\frac{\partial}{\partial l}\psi_j - \frac{\nu^2}{l^2}\psi_j + k^2\psi_j = 0, \tag{4.20}$$

onde

$$\nu^2 = \left(\frac{j}{\alpha} - \tau a_{\phi}^{'} - \frac{\sigma}{2}\right)^2. \tag{4.21}$$

A equação (4.20) é claramente uma equação de Bessel , cuja solução regular na origem é dada por

$$\psi_j(l) = C_3 J_\nu(kl), \tag{4.22}$$

onde C_3 é uma constante de normalização. É importante notar que o resultado obtido aqui reproduz os resultados conhecidos para o grafeno plano e para o nanocone simples de carbono [30, 87, 88]. Se considerarmos $\alpha = 1$, os campos de gauge (4.10) and (4.8) se anulam e levam a uma função de Bessel com índice $j - \frac{1}{2}$, como esperado para o caso plano.

O sistema de coordenadas unificado do cone duplo nos possibilita lidar com diferentes cones na mesma estrutura e, desta forma, combinar suas propriedades. Na próxima seção exploramos as propriedades eletrônicas para algumas dessas combinações.

4.3 Densidade de estados local

Uma quantidade importante que caracteriza as propriedades eletrônicas e de transporte é a densidade de estados (DE). Ela nos dá informação sobre o número de estados disponíveis para serem ocupados por intervalo de energia em cada nível de energia. Desta forma, a DE revela as características de condução do material, se ele é metálico, isolante ou semicondutor.

Como estamos focando nossa atenção em superfícies cônicas, que, no limite contínuo, apresenta curvatura singular, vamos olhar mais atentamente para a densidade local de estados (DLE) próxima do vértice dos cones. Como apontado na referência [30], a DLE na teoria do contínuo pode ser escrita, por análise dimensional, para uma estrutura cônica como

Tabela 2 – Valores de α e $a'_{\phi,i}$ para diferentes estruturas com defeitos pentagonais e heptagonais, como ilustrado na Figura 11. Também listamos os valores correspondentes de ν_0.

Tipo de defeito	α	a'_{ϕ}	ν_0
1 pentágono	5/6	3/10	$-1/5$
2 pentágonos (1,1) ($n \not\equiv m(mod3)$)	2/3	1/4	0
2 pentágonos (2,0) ($n \equiv m(mod3)$)	2/3	3/4	$-1/2$
1 heptágono	7/6	$-3/4$	$-2/7$
2 heptágonos (1,1) ($n \not\equiv m(mod3)$)	4/3	$-1/8$	$-1/4$
2 heptágonos (2,0) ($n \equiv m(mod3)$)	4/3	$-3/8$	$-1/2$

$$\left.\frac{dn}{dE}\right|_l = \frac{f_2(|k|\,l)}{\pi\hbar v_f l}, \tag{4.23}$$

onde $f_2(|k|\,l)$ é a função de escala

$$f_2(|k|\,l) = \frac{kl}{2\alpha}\frac{|kl|^{2\nu_0}}{2^{2\nu_0}\Gamma(\nu_0+1)^2}. \tag{4.24}$$

Como k é proporcional a energia E (veja a equação 4.15), a DLE será proporcional a $|E|^{2\nu_0+1}$, onde ν_0 é o valor do índice ν da função de Bessel que minimiza $2\nu+1$ em uma dada classe. Para uma dada classe, os valores permitidos de ν (4.21) dependerão dos parâmetros j, τ e σ. A combinação desses valores que minimiza ν, define ν_0. Os valores de ν_0 para todos os cones considerados aqui são listados na tabela 3.

A DLE em termos da energia é mostrada na Figura 12. Consideramos estruturas com defeitos pentagonais e heptagonais, sendo tanto superfícies com um único cone como cones duplos, combinando diferentes tipos de defeitos. É importante mencionar que, para todos os cones considerados aqui, o valor do número quântico de momento angular j que

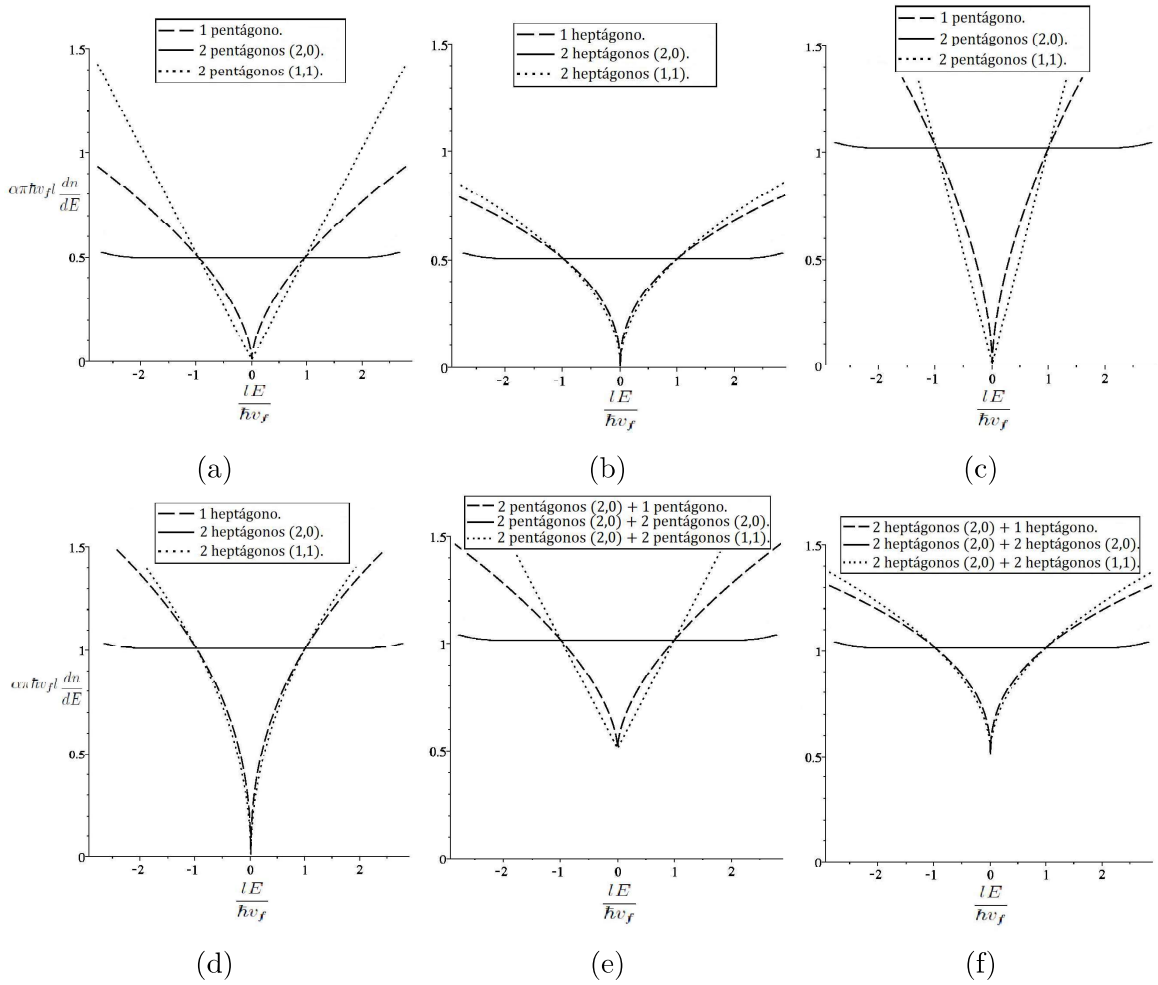


Figura 12 – Diagrama esquemático da densidade de estados próximo do vértice do cone de acordo com as equações (4.23) e (4.24). Plotamos a DLE para cones com defeitos pentagonais em (a), (c) and (e), onde (a) são superfícies de cones simples, (c) são superfícies de cones duplos idênticos e (e) contem combinações de diferentes cones com um cone do tipo (2,0). A mesma sequência é seguida para estruturas heptagonais em (b), (d) and (f).

minimiza $2\nu_0 + 1$ é sempre $\pm\frac{1}{2}$, que são estados com momento orbital angular zero. Isto se deve ao fato de que estamos olhando par a DLE próximo ao vértice do cone, e esses estados são mais concentrados nesta região.

As DLE para cones simples com defeitos pentagonais e heptagonais são mostradas nas Figuras 12a e 12b, respectivamente. Como podemos ver, a DLE mostra uma dependência direta com o tipo de defeito na superfície. A Figura 12a reproduz os resultados obtidos na referência [30], neste caso o cone com 2 pentágonos do tipo (1,1) tem a mesma DLE linear do grafeno plano, enquanto a estrutura (2,0) apresenta DLE plana e não nula na energia de Fermi. Conforme vemos na Figura 12b, para o caso de defeitos heptagonais, a DLE plano próximo da energia de Fermi também ocorre para a estrutura (2,0), no entanto a DLE linear não é reproduzida em nenhum dos casos. O ganho na DLE observado nas estruturas (2,0) ocorre devido a função de onda se tornar mais fortemente concentrada no

vértice ao passo que $2\nu + 1$ decresce. A classe que apresenta o valor mínimo de $2\nu + 1$, quando comparamos ν_0 para todas as classes, é a classe $n \equiv m(mod3)$. Como a estrutura (2,0) é o nosso exemplo desta classe, ela apresentará o mínimo de $2\nu + 1$. Mais especificamente, para esta estrutura teremos $\alpha = 2/3$ e $a_\phi^{'} = 3/4$, isso leva a $\nu_0 = -1/2$, e consequentemente $2\nu_0 + 1 = 0$. O mesmo acontece com a estrutura (2,0) com dois defeitos heptagonais, onde $\alpha = 4/3$ e $a_\phi^{'} = -3/8$. Nestes casos, o defeito topológico mantem a característica condutiva do material (*i.e.* semimetálica) da estrutura.

A DLE dos cones duplos são mostradas nas Figuras 12c - 12f. Nas Figuras 12c e 12d consideramos com o mesmo tipo de defeito topológico em cada um dos cones. A DLE nesses casos não muda seu comportamento, e o resultado é simplismente o dobro do resultado obtido para os cones simples, como esperado. Um resultado mais interessante surge quando combinamos diferentes defeitos na estrutura, como ilustrado nas Figuras 12e e 12f. Nesses casos, a DLE é o resultado da combinação do comportamento dos dois diferentes cones. Escolhemos como exemplo as combinações onde um dos cones é do tipo (2,0). Como resultado, a estrutura (2,0) leva a DLE não nulas próximo da energia de Fermi, e portanto traz um comportamento metálico para a estrutura.

4.4 Espectro de energia para nanocones finitos

Se consideramos cones finitos de geratriz $l = L$, a função de onda para $l > L$ deve ser nula. Sendo assim, a condição de contorno para as bordas do cones deve ser

$$\psi_j(L) = CJ_\nu(kL) = 0. \tag{4.25}$$

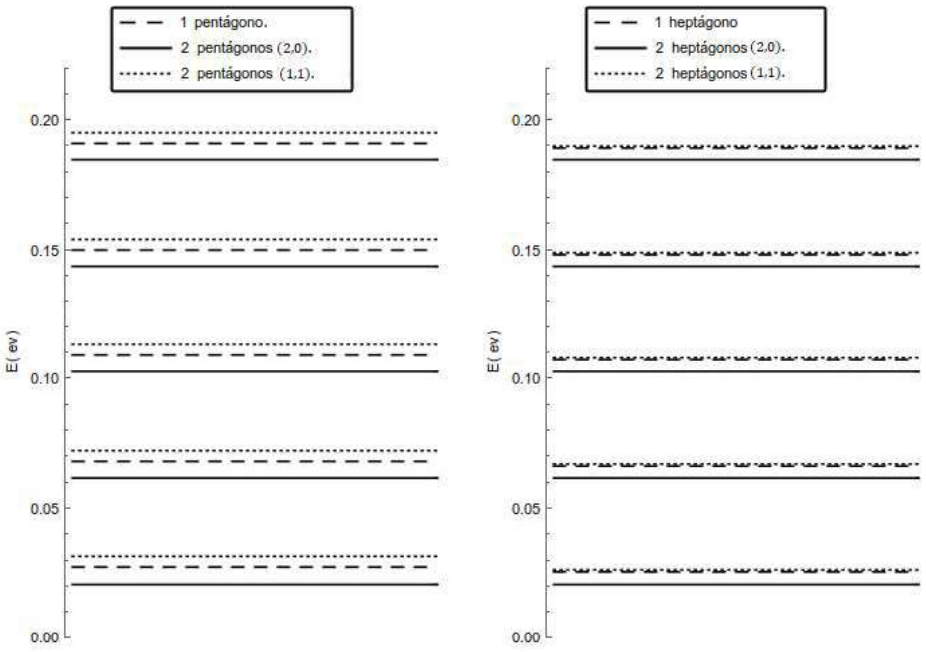
Para que essa relação seja válida, o argumento da função de Bessel, kL, deve ser um zero do função de Bessel. Isso nos leva a um espectro de energia discreto dado por

$$E_{n,j} = j_{\nu,n}\frac{\hbar v_F}{L}, \tag{4.26}$$

onde $j_{\nu,n}$ é o n–ézimo zero da função de Bessel de ordem ν.

Na Figura 13 mostramos o espectro de energia para o caso de cones finitos. Consideramos o espectro ao valor mais baixo de j, que dá uma função de onda que é mais concentrada no vértice do cone. Neste caso, $\nu = \nu_0$. É possível ver que o espectro de energia do cone depende do defeito topológico presente na superfície, apesar de cones diferentes poderem ter o mesmo espectro de energia, como é o caso de dois pentágonos (2,0) e dois heptágonos (2,0). Pontuamos que a geratriz do cone, L, pode ser usada para controlar o intervalo entre os valores de energia subsequentes.

Para o caso do cone duplo temos dois valores de L, um para cada cone. Como o espectro de energia depende de L e do tipo de defeito topológico na superfície, existem



(a) (b)

Figura 13 – Espectro de energia para superfícies de cônicas. Em todos os casos, consideramos $L = 50$ nm, $v_F = 10^6$ m/s and $\nu = \nu_0$.

muitas possibilidades de combinações de cones com os mais variados espectros de energia. Portanto, podemos escolher dois cones específicos em um cone duplo e desta forma controlar o transporte eletrônico entre eles. Do ponto de vista clássico, dois cones são conectados por estados com momento angular zero. No regime quântico, o estado de momento angular mais baixo é mais concentrado no vértice dos cones, sendo assim, são esses estados que apresentarão uma maior probabilidade de transporte entre os cones.

Vimos na seção 3.5 que o campo magnético introduz uma quebra de simetria entre os cones nos trazendo outras possibilidade para o espectro de energia. Investigamos os níveis de energia com a presença de um campo magnético azimutal na próxima seção.

4.5 Níveis de Landau para o nanocone duplo de carbono

Nesta seção estudamos os efeitos de um campo magnético azimutal, $\vec{B} = B_0\vec{e}_z$, aplicado à superfície de um nanocone duplo de carbono e como a curvatura da superfície afeta os níveis de Landau. Iniciamos escrevendo a equação de Dirac efetiva para o problema

$$\left[\sigma^i p_i - i\hbar\sigma^i\Omega_i - \hbar\sigma^i a_i + \frac{eQ}{v_f}\sigma^i A_i - \frac{E}{v_f}\right]\Psi = 0, \tag{4.27}$$

onde e é o valor absoluto da carga do elétron e $Q = \pm 1$ de acordo com tipo de partícula, sendo $+1$ para buracos e -1 para elétrons. Para obter a forma quadrática da equação de Dirac (4.27), aplicamos o operador

$$\left[\sigma^j p_j - i\hbar\sigma^j\Omega_j - \hbar\sigma^j a_j + \frac{eQ}{v_f}\sigma^j A_j + \frac{E}{v_f}\right] \tag{4.28}$$

e encontramos

$$\begin{aligned} p_i p_i\Psi \quad & -2i\hbar\Omega_i p_i\Psi - 2\hbar a_i p_i\Psi + 2\frac{eQ}{v_f}A_i p_i\Psi - \hbar^2\Omega_i\Omega_i\Psi + 2i\hbar^2\Omega_i a_i\Psi \\ -2i\hbar \quad & \frac{eQ}{v_f}A_i\Omega_i\Psi + \hbar^2 a_i a_i\Psi - 2\hbar\frac{eQ}{v_f}a_i A_i\Psi + \frac{e^2}{v_f^2}A_i A_i\Psi \\ +is\tfrac{eQ}{v_f} \quad & p_i A_j\epsilon_{ijk}\sigma^k\Psi - \frac{E^2}{v_f^2}\Psi = 0. \end{aligned} \tag{4.29}$$

Para solucionar essa equação usamos as matrizes γ^μ em (3.32), a conexão espinorial (3.31), também levamos em conta que os campos de gauge (4.10) e (4.8) tem apenas componentes em ϕ. O potencial vetor será, como vimos na seção 3.5

$$\vec{A} = \frac{B_0 l}{2}\hat{\phi}. \tag{4.30}$$

Como feito na seção 4.2, diagonalizamos a equação 4.29 considerando que os únicos operador agindo no K–spin são τ^μ nos campos de gauge (4.10) e (4.8), que tem autovalor $\tau = +1(-1)$, relacionados ao pseudospin $K(K')$. De forma similar, a matriz σ^3 que age no pseuspin é escrita em termos dos seus autovalores $\sigma = \pm 1$, onde o sinal $+(-)$ está relacionado a subrede $A(B)$. Como resultado encontramos

$$\begin{aligned} - \quad & \frac{\partial^2}{\partial l^2}\Psi - \frac{1}{l}\frac{\partial}{\partial l}\Psi - \frac{1}{l^2\alpha^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Psi + i\frac{\sigma^3}{\alpha l^2}\frac{\partial}{\partial\phi}\Psi + \frac{2i\tau a_\phi^{'}}{\alpha l^2}\frac{\partial}{\partial\phi}\Psi - i\frac{eQ\eta B_0}{\alpha\hbar v_f}\frac{\partial}{\partial\phi}\Psi \\ - \quad & \left(-\frac{i}{2}\alpha\frac{\sigma^3}{\alpha\,|l|}\right)^2\Psi + \frac{\tau a_\phi^{'}\sigma^3}{l^2}\Psi - \frac{eQ\eta B_0\sigma^3}{2\hbar v_f}\Psi + \frac{a_\phi^{'\,2}}{l^2}\Psi - \frac{e\tau\eta Q a_\phi^{'} B_0}{\hbar c}\Psi \\ + \quad & \frac{e^2}{\hbar^2 v_f^2}\left(\frac{B_0 l}{2}\right)^2\Psi + \frac{eQ}{\hbar v_f}\sigma^3 B_0\Psi - k^2\Psi = 0, \end{aligned} \tag{4.31}$$

onde $k = \frac{E}{\hbar v_f}$, $a_\phi^{'}$ são definidos em (4.18) e (4.19) e o parâmetro η é definido como

$$\eta = \frac{l}{|l|} = \begin{cases} +1, & \textit{para o cone superior} \\ -1, & \textit{para o cone inferior} \end{cases}. \tag{4.32}$$

Para resolvermos a equação (4.31), utilizamos a solução separável $\Psi(l,\phi) = e^{ij\phi}\psi_j(l)$ e após alguns cálculos chegamos a

$$\frac{\partial^2}{\partial l^2}\psi_j + \frac{1}{l}\frac{\partial}{\partial l}\psi_j - \frac{1}{l^2}M_2^2\psi_j + K_2\psi_j - \left(\frac{eB_0}{2\hbar v_f}\right)^2 l^2\psi_j = 0, \tag{4.33}$$

onde

$$M_2^2 = \left[\frac{j}{\alpha} - \tau a_\phi^{'} - \frac{\sigma}{2}\right]^2, \tag{4.34}$$

$$N_2 = \left[\frac{j}{\alpha} - \tau a_\phi^{'} + \frac{\sigma}{2}\right], \tag{4.35}$$

e

$$K_2 = \frac{eQ\eta B_0}{\hbar v_f}N_2 + \frac{E^2}{\hbar^2 v_f^2}. \tag{4.36}$$

Simplificamos a equação (4.33) fazendo a mudança de variável $\zeta = \left(\frac{e|B_0|}{2\hbar c}\right) l^2$ e escrevendo a equação na forma

$$\frac{d^2}{d\zeta^2}\psi_j + \frac{1}{\zeta}\frac{d}{d\zeta}\psi_j - \frac{M_2^2}{4\zeta^2}\psi_j + \frac{K_2^{'}}{\zeta}\psi_j - \frac{1}{4}\psi_j = 0, \tag{4.37}$$

onde redefinimos o parâmetro K_2 como

$$K_2^{'} = \frac{\hbar v_f}{2e\,|B_0|}K_2. \tag{4.38}$$

Assim como fizemos para obter os níveis de Landau no caso relativístico, vamos propor uma solução baseada no comportamento da equação (4.37) nos limites assintóticos $l \to \pm\infty$ e $l \to 0$. Usando essa estratégia, propomos a solução

$$\psi_j = e^{-\frac{\zeta}{2}}\zeta^{\frac{|M_2|}{2}}F(\zeta). \tag{4.39}$$

Aplicando esta solução em (4.37), encontramos

$$\zeta\frac{d^2}{d\zeta^2}F(\zeta) + (|M_2| + 1 - \zeta)\frac{d}{d\zeta}F(\zeta) + \left(K_2^{'} - \frac{|M_2|+1}{2}\right)F(\zeta) = 0. \tag{4.40}$$

Esta equação é conhecida como equação hipergeométrica confluente e $F(\zeta)$ é a função hipergeométrica confluente que pode ser expressa na forma $F\left(\frac{|M_2|+1}{2} - K_2^{'}, |M_2| + 1; \zeta\right)$.

Tabela 3 – Estados quânticos com suas respectivas energias para uma partícula carregada em um nanocone duplo de carbono sob influência de uma campo magnético azimutal. Consideramos $Q = -1$ and $b = +1$.

σ	$\frac{j}{\alpha}$	τ	η	$E^2/2(e\left\|B_0\right\|\hbar v_f)$
$+1$	$\geq a_\phi^{'} + \frac{1}{2}$	$+1$	$+1$	n
$+1$	$\geq a_\phi^{'} + \frac{1}{2}$	$+1$	-1	$n + \frac{1}{2} + \frac{j}{\alpha} - a_\phi^{'}$
-1	$\geq a_\phi^{'} - \frac{1}{2}$	$+1$	$+1$	$n + 1$
-1	$\geq a_\phi^{'} - \frac{1}{2}$	$+1$	-1	$n + \frac{1}{2} + \frac{j}{\alpha} - a_\phi^{'}$
$+1$	$< -a_\phi^{'} + \frac{1}{2}$	-1	$+1$	$n + \frac{1}{2} + \frac{\|j\|}{\alpha} - a_\phi^{'}$
$+1$	$< -a_\phi^{'} + \frac{1}{2}$	-1	-1	$n + 1$
-1	$< -a_\phi^{'} - \frac{1}{2}$	-1	$+1$	$n + \frac{1}{2} + \frac{\|j\|}{\alpha} - a_\phi^{'}$
-1	$< -a_\phi^{'} - \frac{1}{2}$	-1	-1	n

O espectro de energia é obtido se relembrarmos que soluções físicamente aceitáveis precisam ser normalizadas, o que resulta na necessidade de truncarmos a série hipergeométrica. Esta condição nos leva a impor a relação

$$n = K_2^{'} - \frac{|M_2| + 1}{2}, \tag{4.41}$$

onde n é um número natural. A partir dessa condição, substituímos os valores $K_2^{'}$ e M_2, encontrados em (4.38) e (5.3), respectivamente, e encontramos o espectro de energia

$$E^2 = 2e\hbar v_f \left|B_0\right| \left\{ n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\left|\frac{j}{\alpha} - \tau a_\phi^{'} - \frac{\sigma}{2}\right| + \frac{Q\eta b}{2}\left[\frac{j}{\alpha} - \tau a_\phi^{'} + \frac{\sigma}{2}\right]\right\}. \tag{4.42}$$

Quando comparamos esse espectro de energia com o espectro (3.63) do caso relativístico, vemos que, agora, temos a presença do campo de gauge $a_\phi^{'}$ e não temos mais o termo de massa, já que no modelo efetivo tratamos de férmions de Dirac sem massa. Como esperado do problema clássico, existe uma simetria de "inversão"nos parâmetro Q e b. Ou seja, se invertermos simultaneamente o sentido do campo magnético e o sinal da carga da partícula preservamos o mesmo espectro de energia.

É esperado que um bom modelo que ele reproduza os resultados conhecidos para situações mais simples. No nosso caso, esperamos que o modelo utilizado reproduza os resultado para uma folha plana de grafeno e para o caso do cone simples. Uma folha plana de grafeno é representada aqui com $\alpha = 1$, neste caso, o campo de gauge $a_\phi^{'}$ se anula e reproduzimos os níveis de landau para o grafeno [89]. A correspondência entre o cone simple e o cone duplo é codificada por meio do parâmetro η. O caso do cone simples é reproduzido quando consideramos $\eta = +1$ [87], ou seja, quando olhamos somente para o cone superior no cone duplo. No cone inferior ($\eta = -1$), o campo magnético aponta em direção ao vértice do cone, o que é análogo ao caso do cone simples considerando o campo

magnético com sentido oposto a $\hat{e}_z$. Portanto, o termo negativo introduzido por η no cone inferior expressa a diferença de direção do campo magnético em relação à orientação do cone.

Como discutimos na seção 3.5, os níveis de energia podem ser classificados em dois grupos. O primeiro grupo são os chamados níveis de corpo e estão relacionados a orbitas clássicas que não envolvem o vértice do cone, são esses níveis que aparecem no caso do grafeno plano e são do tipo n e $n+1$. O segundo grupo é conhecido como níveis de ápice. Eles estão relacionados a órbitas clássicas que englobam o vértice. A influência do defeito topológico na estrutura fica evidente na sua dependência com os campos de gauge a'_ϕ.

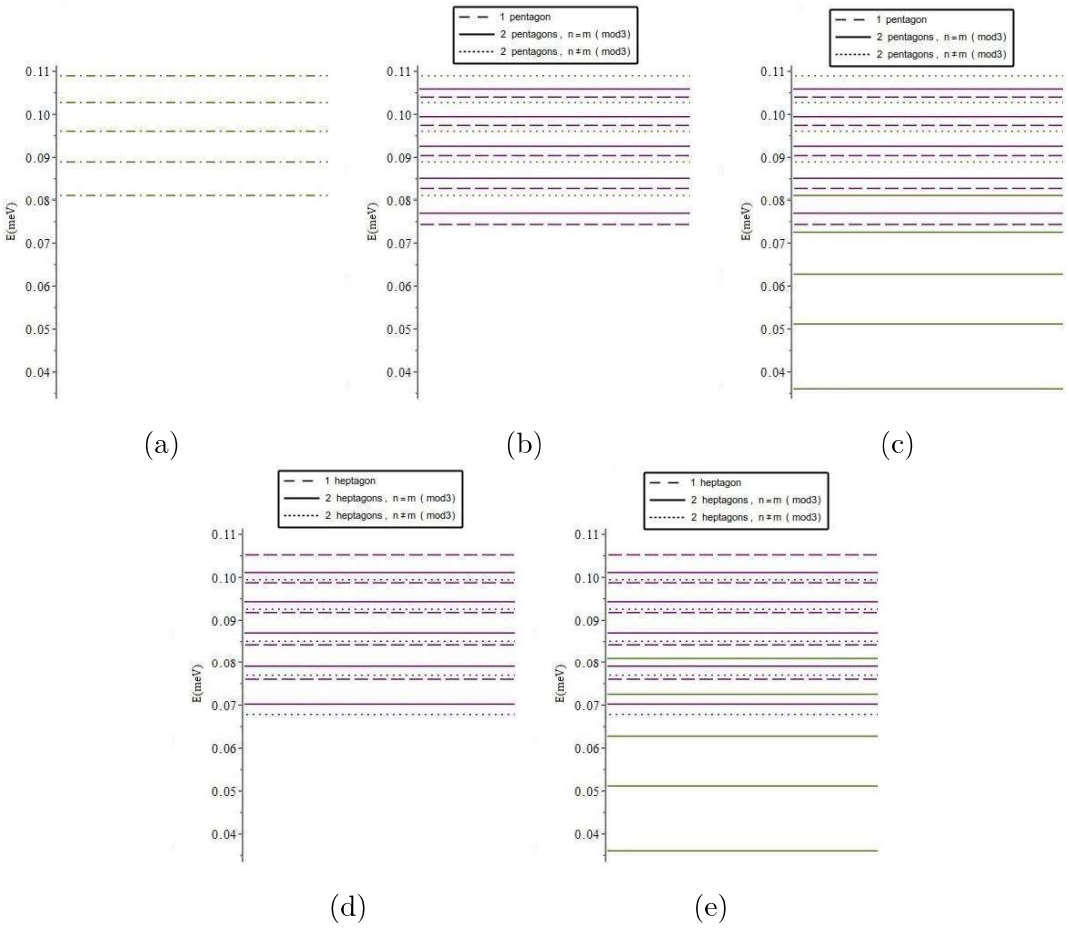


Figura 14 – Níveis de Landau para superfícies cônicas com $\sigma = Q = \tau = -1$ e $|B_0| = b = +1$. Níveis de corpo são representados na cor verde e níveis de ápice na cor roxa. Plotamos os níveis de energia para valores de $n = 1, 2, 3, 4, 5$, com $j = -\frac{5}{2}$. Em (a), temos os níveis de corpo para o caso do grafeno plano. Superfícies cônicas com defeitos pentágonais são plotadas em (b) and (c), sendo (b) para cones simples e (c) para cones duplos. Defeitos heptagonais são plotados em (14d) e (14e), sendo (14d) para cones simples e (14e) para cones duplos. Consideramos $\hbar = 6,582 \cdot 10^{-16} eV \cdot s$, $v_f = 10^6 m/s$.

A tabela 3 lista alguns estados quânticos e seus níveis de energia correspondentes. Note que os níveis de ápice dependem do parâmetro α. Esse parâmetro nos dá uma medida da abertura do cone. Para cones pentagonais ele possui valores no intervalo $0 < \alpha < 1$ e

para cone heptagonais $\alpha > 1$. No nosso caso dos níveis de Landau no problema relativístico, esse parâmetro age tornando os estados mais largos quando comparados ao caso plano ($\alpha = 1$). No caso de férmions de Dirac sem massa para um nanocone duplo de carbono, a presença do campo de gauge $a_{\phi}^{'}$ introduz uma nova dependência em α. Como resultado, os níveis de energia se tornam mais largos para $j > \frac{\tau\alpha a_{\phi}^{'}}{1-\alpha}$, ou menores para $j < \frac{\tau\alpha a_{\phi}^{'}}{1-\alpha}$ quando comparados ou correspondente plano. Na Figura 14, plotamos os níveis de Landau para valores de j no intervalo $j < \frac{\tau\alpha a_{\phi}^{'}}{1-\alpha}$. Podemos perceber como os níveis de ápice que surgem nas superfícies cônicas são menores do que seu correspondentes no plano.

A introdução do parâmetro η em (4.32) nos trouxe a vantagem de simplificar os cálculos e permitir avaliar a influência do campo magnético em cada cone. Percebemos que o campo magnético introduz uma quebra de "simetria"entre os cones. Os níveis de Landau para o cone duplo aparecem de forma alternada com níveis de corpo e de ápice para cada cone separadamente, considerando os mesmos parâmetros. Na Figura 14 plotamos alguns níveis de corpo para o caso da folha plana de grafeno. Quando introduzimos curvatura na estrutura, no caso dos cones simples, níveis de ápice surgem. Se considerarmos um cone duplo, o segundo cone introduzira outros níveis de corpo ao espectro, uma vez que o primeiro cone apresentou níveis de ápice. A situação oposta acontece se tivermos níveis de corpo no primeiro cones (escolhendo $\frac{j}{\alpha} \geq a_{\phi}^{'} - \frac{1}{2}$, por exemplo). Neste caso, níveis de ápice surgiriam no cone inferior.

5 ÓTICA DE TRANSFORMAÇÃO NO ESTUDO DE METAMATERIAIS

Avanços recentes no desenvolvimento da física de materiais tem possibilitado a obtenção em laboratório de materiais não encontrados na natureza, com propriedades desenhadas de acordo com as necessidades praticas e desejos dos seus projetistas. Esse desenvolvimento foi impulsionado graças a chamada teoria da ótica de transformação que se baseia nas propriedades de invariância das equações de Maxwell. Neste capítulo, discutimos as características básicas de um metamaterial, como é possível manipular as propriedades de um material em laboratório e demonstramos os conceitos básicos por trás da ótica de transformação.

5.1 Introdução aos metamateriais

O termo metamaterial é normalmente creditado a Rodger M. Walser da universidade do Texas, que definiu esses materiais em 1999 [90]. O prefixo meta nos passa a ideia de algo que se transforma, que transcende a sua forma original, como na palavra metamorfose. Assim com uma larva que amplia suas possibilidades ao passar por uma metamorfose e se transformar em uma borboleta, a ideia dos metamateriais é transpor alguns limitações nos materiais que encontramos na natureza. Walser definiu um metamaterial como "um composto macroscópico de arquitetura celular sintética, tridimensional e periódica projetado para produzir uma combinação otimizada, não disponível na natureza, de duas ou mais respostas a uma excitação específica".

Figura 15 – O copo de Lycurgus. (Créditos: Tesouros do museu britânico.)

A definição mais atual para metamateriais nos diz que eles são compostos macroscópicos, periódicos ou não, cujas propriedades se devem tanto a sua composição química

quanto a sua arquitetura celular. De fato, a ideia de manipular a arquitetura celular de um material não é nova. Os romanos talvez tenham sido os primeiros a inventar um metamaterial ótico cujas características se devem a sua arquitetura celular, o vidro rubi. Na composição desse vidro existem gotículas minusculas de ouro que conferem ao material propriedades óticas extraordinárias. O copo de Lycurgus (Figura 15) é um exemplo desse tipo de material. Quando iluminado por fora o copo é verde, mas quando iluminado por dentro ele brilha na cor rubi. O tamanho e a forma das nanopartículas de ouro determinam a cor do material.

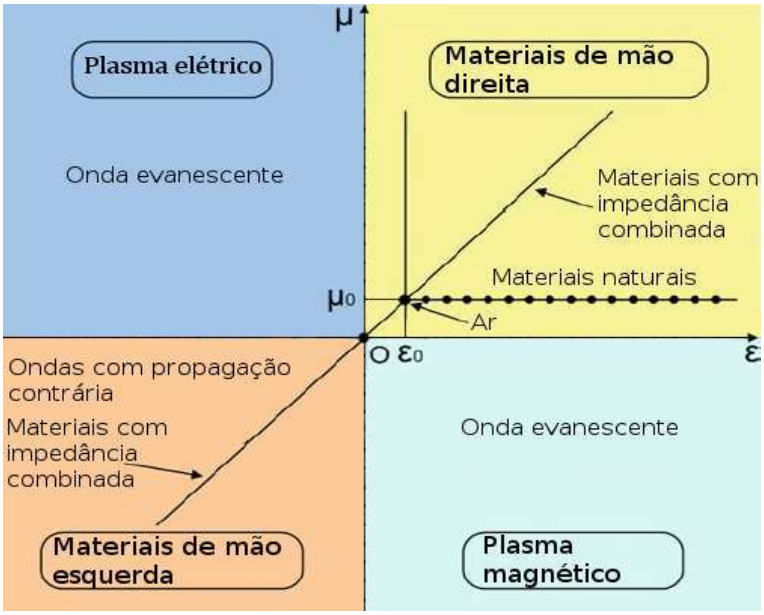


Figura 16 – Gráfico ϵ vs μ. No gráfico são apresentadas as classes de metamateriais de acordo com o quadrante correspondente. Fonte: referência (47).

Quando projetamos um metamaterial, usualmente impomos a condição de que o tamanho da célula unitária seja menor ou igual ao comprimento de onda de operação do metamaterial. Nesta condição, as propriedades do metamaterial podem ser descritas usando a teoria de meio efetivo.

A manipulação das características químicas de um material nos permite ter um amplo controle sobre as propriedades de um material. No entanto, acabamos limitados às características dos elementos químicos encontrados na natureza. Quando falamos das propriedades óticas, normalmente caracterizamos as propriedades de um material através da permissividade elétrica (ϵ) e da permeabilidade magnética (μ). Um exemplo de propriedade ótica definida por esses parâmetros é o índice de refração, que é definido como

$$n^2 = \epsilon_r \mu_r, \tag{5.1}$$

onde $\epsilon_r = \frac{\epsilon}{\epsilon_0}$ e $\mu_r = \frac{\mu}{\mu_0}$ são a permissividade e permeabilidade relativas do material definidas em termos de ϵ_0 e μ_0 que são os valores de permissividade e permeabilidade do

espaço livre. Na natureza, a permeabilidade dos materiais em sua vasta maioria é igual a do espaço livre, ou seja $\mu = \mu_0$, enquanto a permissividade normalmente é maior do que ϵ_0. Ficamos então limitados a uma pequena linha no espaço de valores possíveis de ϵ e μ. Os metamateriais ampliam esses possíveis valores, como mostra a Figura 16. Podemos classificar os metamateriais de acordo com o quadrante em que se encontra nesse gráfico. No primeiro quadrante ($\epsilon > 0$ e $\mu > 0$), estão localizados os chamados materiais de mão direita. Neste caso, o campo elétrico $\vec{E}$, o campo magnético $\vec{B}$ e o vetor de onda $\vec{k}$ formam um sistema de mão direita. O segundo quadrante ($\epsilon < 0$ e $\mu > 0$) é chamado de plasma elétrico, este quadrante suporta ondas evanescentes, assim como o quarto quadrante ($\epsilon > 0$ e $\mu < 0$), que é chamado de plasma magnético. O terceiro quadrante ($\epsilon < 0$ e $\mu < 0$) abriga os metamateriais chamados materiais de mão esquerda. Neste quadrante $\vec{E}$, $\vec{B}$ e $\vec{k}$ formam um sistema de mão esquerda. Neste caso o vetor de onda aponta na direção oposta à direção de propagação do fluxo de energia médio e por isso dizemos que eles suportam ondas com propagação contrária.

A classe dos metamateriais de mão esquerda é a mais conhecida. Alguns chegam a confundir os materiais de mão esquerda com a própria definição de metamateriais. Apresentamos as propriedades dessa classe de metamateriais na próxima seção.

5.2 Materiais de mão esquerda

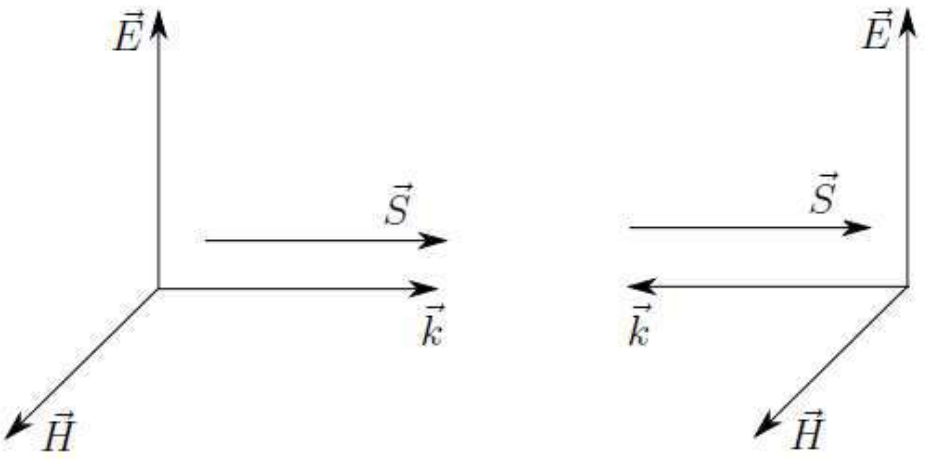
Os materiais de mão esquerda foram propostos em 1968 por Veselago [91] que analisou o comportamento teórico de ondas eletromagnéticas em materiais com permissividade e permeabilidade negativos. Ele foi capaz de demonstrar que um material desse tipo apresentaria índice de refração negativo e propagação contrária, bem como um efeito Doppler reverso e radiação Cerenkov contrária.

À primeira vista pode parecer que a inversão de sinal em ϵ e em μ não afetará a propagação da onda eletromagnética já que a multiplicação desses dois parâmetros no índice de refração (5.1) permanece inalterada. No entanto, basta olharmos com mais calma para as equações de Maxwell para uma onda eletromagnética em um meio dielétrico para termos uma melhor compreensão das propriedades óticas desse tipo de material. As equações em questão são

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\mu \frac{\partial}{\partial t} \vec{H}, \tag{5.2}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \epsilon \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}. \tag{5.3}$$

Considerando uma onda plana do tipo $\vec{E} = \vec{E_0}\ exp(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)$ e $\vec{H} = \vec{H_0}\ exp(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)$, onde $\vec{k}$ é o vetor de onda e ω é a frequência angular, podemos escrever as equações (5.2) e



(a) (b)

Figura 17 – Sistema ortogonal formado pelos vetores $\vec{E}$, $\vec{H}$ e $\vec{k}$. Em (a), temos um sistema de mão direita, onde o vetor de Poynting $\vec{S}$ tem a mesma direção e sentido do vetor de onda $\vec{k}$ e em (b), temos um sistema de mão esquerda onde $\vec{S}$ e $\vec{k}$ tem a mesma direção, porém com sentidos opostos. Fonte: referência (49).

(5.3) como

$$\vec{k} \times \vec{E} = -\mu\omega\vec{H} \tag{5.4}$$

$$\vec{k} \times \vec{H} = \epsilon\omega\vec{E}.\vec{S}. \tag{5.5}$$

Note que, no caso usual de ϵ e μ positivos, o trio $\vec{E}$, $\vec{H}$ e $\vec{k}$ formam um sistema ortogonal de mão direita (Figura 17a). No entanto quando consideramos ϵ e μ negativos o resultado é um sistema ortogonal de mão esquerda (17b). Apesar da direção do vetor de onda ter mudando em relação aos campos $\vec{E}$ e $\vec{H}$, a densidade direcional do fluxo de energia dada pela parte real do vetor de Poynting permanece inalterada. Uma vez que o vetor de Poynting é definido como

$$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H}, \tag{5.6}$$

a direção de propagação do fluxo de energia não é modificada pela inversão de sinal de ϵ e μ. É por esse motivo que os materiais de mão esquerda também são conhecido como materiais com propagação contrária, uma vez que a densidade de energia e o vetor de onda têm sentidos opostos.

Uma outra consequência da inversão de sinal simultânea de ϵ e μ nos materiais de mão esquerda surge quando analisamos a refração do ponto de vista da lei de snell. A condição de contorno na interface entre dois meios exige que a componente tangencial do vetor de onda seja contínua. Para dois materiais de mão direita a condição é

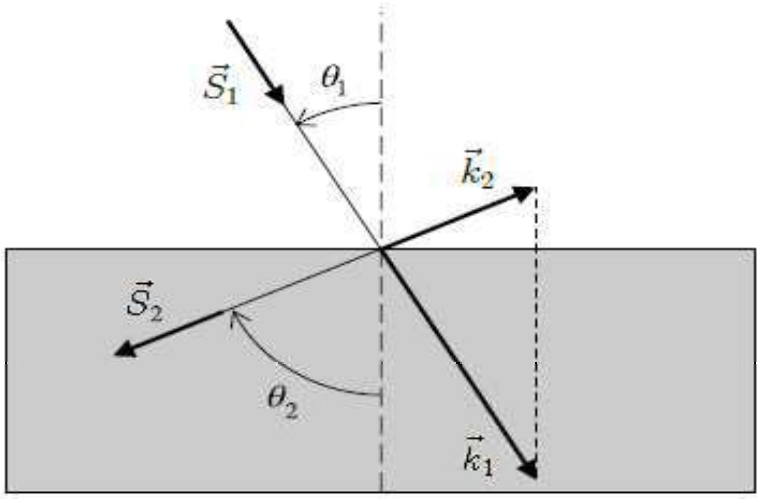


Figura 18 – Refração entre um material de mão direita (índice 1) e um material de mão esquerda (índice 2). Temos representadas a direções dos vetores de Poynting ($\vec{S}$) e dos vetores de onda ($\vec{k}$). Fonte: referência (49).

$$sen(\theta_i)|\vec{k_1}| = sen(\theta_r)|\vec{k_2}|. \tag{5.7}$$

Considere agora o caso de uma interface entre um material de mão direita e outro de mão esquerda (Figura 18). Neste caso, devemos levar em consideração que o material de mão esquerda terá um vetor de onda oposto, ou seja

$$sen(\theta_i)|\vec{k_1}| = -sen(\theta_r)|\vec{k_2}|. \tag{5.8}$$

Como os ângulos de incidência e refração estão limitados ao intervalo $\left(0, \frac{\pi}{2}\right)$, eles devem ter sinais opostos. A Figura 18 mostra uma representação das direções de propagação de uma onda neste problema. Como a propagação da onda segue o mesmo sentido do fluxo de energia, o resultado é uma refração no quadrante oposto ao que teríamos usualmente em um material de mão direita. Escrevendo a relação (5.8) em termos dos índices de refração, temos

$$\frac{sen(\theta_i)}{sen(\theta_r)} = -\frac{|\vec{k_2}|}{|\vec{k_1}|} = \frac{n_2}{n_1} < 0. \tag{5.9}$$

Como o indice de refração do meio de mão direita (n_1) é positivo, devemos ter o índice de refração do meio de mão esquerda como sendo um número negativo. Podemos então reescrever a relação (5.1) na forma

$$n = \pm c\sqrt{\epsilon\mu}, \tag{5.10}$$

onde $c = \frac{1}{\epsilon_0\mu_0}$, é a velocidade da luz no espaço livre e o sinal $+(-)$ se aplica a um material de mão direita (esquerda). É por esse motivo que os materiais de mão esquerda são muitas vezes chamados de materiais com índice de refração negativo.

A possibilidade de obtermos um material com índice de refração negativo abre muitas possibilidades de manipulação de ondas eletromagnéticas. A relação (5.10) nos mostra como o índice de refração (n) de um meio está diretamente relacionado com sua permissividade (ϵ) e permeabilidade (μ). Se formos capazes de construir um material onde temos o controle sob os parâmetros ϵ e μ poderemos ampliar muito nosso controle sob a propagação de ondas em um meio. Para conseguir esse objetivo precisamos desenvolver a arquitetura celular de tal forma a ter controle sobre o comportamento efetivo desses parâmetros. Discutimos sobre o design de metamateriais na próxima seção

5.3 Design de metamateriais

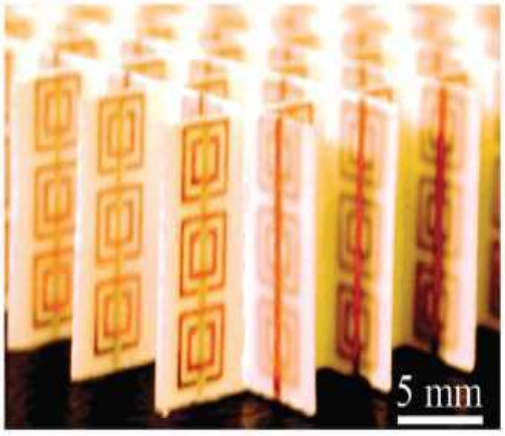


Figura 19 – Realização experimental de um metamaterials de mão esquerda. A amostra é composta de anéis ressonantes quadrados e veretas de cobre na placa de circuito de fibra de vidro. Fonte: referência (96).

Para obtermos controle sobre o design de metamateriais com parâmetros negativos, os materiais de mão esquerda precisamos desenvolver um modelo onde possamos controlar o comportamento efetivo desses parâmetros. A ideia é desenvolvermos um meio discreto feito da combinação de células unitárias de dimensões menores do que os comprimentos de onda de interesse. Como os detalhes experimentais da obtenção de um metamaterial não é o objetivo dessa tese, apresentaremos um breve histórico dos principais trabalhos que fundamentaram o design de metamateriais em laboratório.

O procedimento padrão para a construção de metamateriais com parâmetros negativos na faixa de micro-ondas foi desenvolvido especialmente após os trabalhos de John Pendry [92, 93], Walter Rotman [94] e David Smith [95]. No inicio da década de 60, Walter Rotman estudou um modelo de plasma diluído usando varetas e chapas metálicas, com frequência de plasma na faixa de micro-ondas [94]. Nesse trabalho é demonstrado que a permissividade efetiva pode ser negativa abaixo da frequência do plasma. Posteriormente, John Pendry postulou que a permissividade dielétrica negativa também poderia ser obtida por um modelo efetivo com varetas e chapas metálicas [92]. Logo após, Pendry sugeriu que a permeabilidade negativa poderia ser obtida por estruturas em formato de anéis ressonantes divididos [93].

A realização experimental da proposta de Pendry foi feita apenas alguns anos após a publicação dos seus trabalhos originais. Um grupo da Universidade de San Diego [96, 97] conseguiu produzir uma combinação de varetas metálicas e anéis ressonantes (Figura 19). Posteriormente, outros grupos também conseguiram reproduzir o índice de refração negativo em laboratório [98, 99].

Na próxima seção discutiremos como a ótica de transformação fundamenta a relação entre geometria e parâmetros de um metamaterial nos dando, assim, uma poderosa ferramenta para o estudo dos metamateriais.

5.4 Ótica de transformação

Até o momento fundamentamos os metamateriais em termos da permissividade elétrica e permeabilidade magnética destes. Tais parâmetros são desenhados de forma a conferir uma determinada propriedade ao material. Precisamos, então, saber exatamente quais serão as características de ϵ e μ para que a propriedade desejada seja obtida. Nesse contexto, é útil relacionarmos a geometria que descreve a propagação da onda desejada com esses parâmetros. Essa é a ideia básica por trás da ótica de transformação. O objetivo é fundamentar de forma matemática como a geometria se relaciona com o meio material. Em outras palavras, queremos relacionar o tensor métrico que descreve a trajetória desejada para a onda com os correspondentes parâmetros ϵ e μ que reproduz a trajetória desejada em um meio material.

A ótica de transformação é possível graças a covariância entre as equações de Maxwell no vácuo e em um meio material. Considere as equações de Maxwell no vácuo em coordenadas espaciais arbitrárias

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}\cdot\vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad , \qquad & \vec{\nabla}\cdot\vec{H} = 0, \\ \vec{\nabla}\times\vec{E} = -\mu_0\frac{\partial\vec{H}}{\partial t} \quad , \qquad & \vec{\nabla}\times\vec{H} = \vec{j} + \epsilon_0\frac{\partial\vec{E}}{\partial t}. \end{aligned} \tag{5.11}$$

Para deixar explícito a relação das equações de Maxwell com o tensor métrico do espaço podemos escrever os operações divergente e rotacional em termos do tensor métrico g_{ij}, usando a notação de soma de Einstein como

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\sqrt{g}E^i\right) = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad , \qquad \frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\sqrt{g}H^i\right) = 0, \\ \epsilon^{ijk}\frac{\partial E_k}{\partial x_j} = -\mu_0\frac{\partial H^i}{\partial t} \quad , \qquad \epsilon^{ijk}\frac{\partial H_k}{\partial x_j} = j^i + \epsilon_0\frac{\partial E^i}{\partial t}. \end{aligned} \tag{5.12}$$

onde g é o determinantes do tensor métrico g_{ij}. Podemos ainda reescrever as equações de Maxwell em termos do simbolo de permutação $[ijk]$ e usando o tensor métrico para escrever os campos com índices covariantes como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\sqrt{g}g^{ij}E_j\right) = \sqrt{g}\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad , \qquad \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\sqrt{g}g^{ij}H_j\right) = 0, \\ [ijk]\,\frac{\partial E_k}{\partial x_j} = -\mu_0\frac{\partial\left(\pm\sqrt{g}g^{ij}H_j\right)}{\partial t} \quad , \qquad [ijk]\,\frac{\partial H_k}{\partial x_j} = \pm\sqrt{g}j^i + \epsilon_0\frac{\partial\left(\pm\sqrt{g}g^{ij}E_i\right)}{\partial t}. \end{aligned} \tag{5.13}$$

Essas são as equações de Maxwell no espaço vazio com geometria curva. Considere agora as equações de Maxwell para um meio dielétrico escrito na forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\sqrt{g}g^{ij}D_j\right) = \sqrt{g}\varrho \quad , \qquad \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\sqrt{g}g^{ij}B_j\right) = 0, \\ [ijk]\,\frac{\partial E_k}{\partial x_j} = -\frac{\partial\left(\pm\sqrt{g}g^{ij}B_j\right)}{\partial t} \quad , \qquad [ijk]\,\frac{\partial H_k}{\partial x_j} = \pm\sqrt{g}J^i + \frac{\partial\left(\pm\sqrt{g}g^{ij}D_i\right)}{\partial t}. \end{aligned} \tag{5.14}$$

Podemos, então, relacionar as equações de Maxwell para o espaço livre com geometria curva (5.13) com as equações para um meio dielétrico (5.14) se fizermos as relações

$$\varrho = \pm\sqrt{g}\rho, \quad J^i = \pm\sqrt{g}j^i, \tag{5.15}$$

e considerarmos as relações constitutivas

$$D^i = \epsilon_0\epsilon^{ij}E_j, \quad B^i = \mu_0\mu^{ij}H_j, \tag{5.16}$$

onde

$$\epsilon^{ij} = \mu^{ij} = \pm\sqrt{g}g^{ij}. \tag{5.17}$$

Essa expressão nos dá a relação entre a permissividade elétrica (ϵ) e a permeabilidade magnética (μ) do meio físico com a geometria que descreve a trajetória desejada para a onda. Os parâmetros ϵ e μ agora são matrizes reais e simétricas, uma vez que são dadas em termos do tensor métrico g^{ij}. Como ϵ^{ij} é uma matriz, o deslocamento dielétrico dado por $\epsilon_0\epsilon^{ij}\vec{E}$ não terá necessariamente a mesma direção da intensidade do campo elétrico $\vec{E}$. O mesmo pode se dizer para a indução magnética $\vec{B}$ e a intensidade do campo magnético $\vec{H}$. Desta forma, esse meio é um meio anisotrópico. Além disso, devemos satisfazer a condição $\epsilon^{ij} = \mu^{ij}$. Esta relação é conhecida como condição de impedância combinada (impedance matched, em inglês). A impedância é definida como

$$Z = \sqrt{\frac{\mu_0\mu}{\epsilon_0\epsilon}}. \tag{5.18}$$

Sendo assim, a impedância do meio material será a mesma do espaço livre curvo original. Dizemos então que esse é um meio anisotrópico com impedância combinada.

Essa relação existente entre as equações de Maxwell no espaço livre com geometria curva e as equações correspondentes a um meio dielétrico nos permite modelar inicialmente a geometria desejada para a trajetória das ondas em questão em um espaço livre e então obter diretamente as condições dos parâmetros ϵ e μ que reproduzem o comportamento desejado em um meio dielétrico.

A teoria da ótica de transformação nos dá um poderoso ferramental teórico tanto para manipulação da propagação de ondas em materiais com o objetivo de aplicações práticas como abre a possibilidade de usar os metamateriais como um laboratório de testes de modelos em áreas como cosmologia e gravitação. Através dessa teoria é possível mapear a geometria de objetos como buracos negros, cordas cósmicas, entre outros em termos dos parâmetros de um material dielétrico. Desta forma, os metamateriais se tornam uma especie de "laboratório de testes", para o estudo de modelos cosmológicos e gravitacionais.

Para fazer esse mapeamento, normalmente partimos de um espaço virtual com coordenadas arbitrárias e fazemos uma mudança de coordenadas para obter a geometria que descreve o comportamento desejado e a partir daí fazemos a comparação com o meio material, chamado de espaço físico. Sendo assim, a forma mais geral da expressão (5.17) deve incluir a geometria desse primeiro espaço antes da transformação, que nem sempre é tomado em coordenadas cartesiana. Considerando que o tensor métrico antes da transformação é dado por γ_{ij}, a relação (5.17) generalizada é

$$\epsilon^{ij} = \mu^{ij} = \pm\frac{\sqrt{g}}{\sqrt{\gamma}}g^{ij}. \tag{5.19}$$

No próximo capítulo demonstramos como a ótica de transformação torna possível

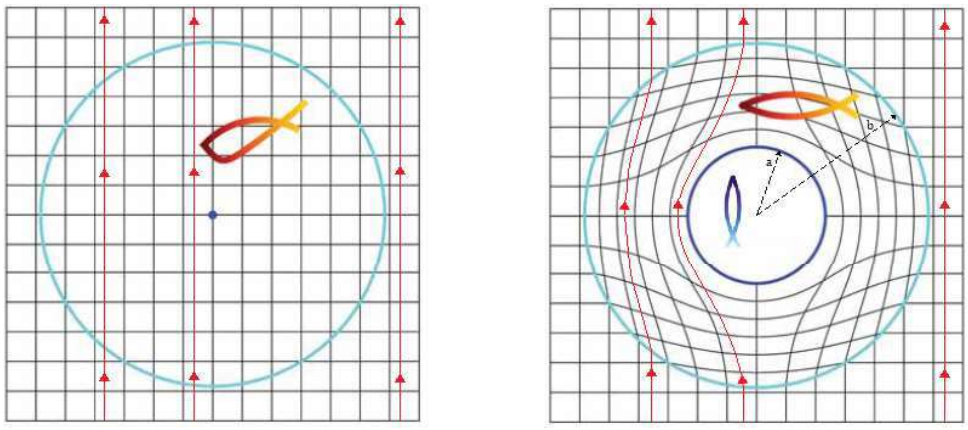
a construção de um manto de invisibilidade capaz de camuflar um objeto posto em seu interior e como é possível detectá-lo.

6 O MANTO DE INVISIBILIDADE E SUA DETECÇÃO

A teoria da ótica de transformação, apresentada na seção 5.4, abre a possibilidade de imaginarmos uma geometria desejada para a trajetória de uma onda eletromagnética e encontrarmos diretamente as características de um material que simule esse comportamento. No entanto, saber os parâmetros de um material que simule determinado comportamento para uma onda eletromagnética não garante que sejamos capazes de obter esse material em laboratório. Até alguns anos atrás estávamos limitados aos parâmetros ϵ e μ em materiais existentes na natureza, que como vimos na figura 16 é bastante limitado. É exatamente por isso que aplicações como o manto de invisibilidade se limitavam apenas à ficção científica. Apenas após o desenvolvimento dos metamateriais se tornou possível colocarmos em prática aplicações como a construção de materiais de mão esquerda, como discutido na seção 5.2 e assim a construção de mantos de invisibilidade se tornou possível.

Neste capítulo mostramos o desenvolvimento da teoria da ótica de transformação para um manto de invisibilidade circular em duas dimensões, bem como apresentamos uma estratégia de detecção desse manto explorando a própria geometria desenvolvida para construí-lo.

6.1 O Manto de Invisibilidade



(a) (b)

Figura 20 – Transformação de coordenadas no espaço virtual. Em (a), temos um espaço livre em grid cartesiano. Como o espaço é livre, uma onda eletromagnética, representada pelas linhas vermelhas, segue linhas retas. Em (b), é aplicado uma transformação de coordenadas que mapeia o ponto na origem em um disco de raio a, comprimindo o espaço entre o buraco de raio a e a borda do manto com raio b. A região interno ao buraco é excluída do espaço, portanto um objeto, representado pelo peixe, colocado nesta região não sofrerá interferência da onda eletromagnética. A onda seguirá o menor caminho ótico, que agora serão trajetórias curvas dentro do manto evitando a região do buraco. Fonte referência (55).

Para modelar a geometria de uma manto de invisibilidade, partimos de um espaço livre bidimensional e plano (Figura 20a). Como estamos em um espaço livre, devemos ter $\epsilon = \epsilon_0$ e $\mu = \mu_0$. O sistema de coordenadas que utilizamos para mapear esse espaço é o sistema polar, com tensor métrico dado por

$$\gamma_{i'j'} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & r'^2 \end{pmatrix}. \tag{6.1}$$

Como esse espaço é livre e plano, uma onda eletromagnética terá trajetórias retas neste espaço. Um objeto qualquer neste espaço irá interagir com a onda eletromagnética produzindo absorção, reflexão, refração, dentre outros fenômenos. Como resultado dessa interação, um observador é capaz de enxergar o objeto perfeitamente bem.

Para podermos camuflar um objeto precisamos então evitar que as ondas eletromagnéticas interajam com o mesmo. Ao mesmo tempo o observador não deve ser capaz de observar nenhuma distorção resultante do processo de camuflagem. Obtemos esse resultado considerando um espaço virtual onde uma região do espaço é proibida. Sendo assim, a onda eletromagnética não poderá entrar nessa região, já que ela não faz parte do espaço, e portanto, a onda não poderá interagir com o objeto posto nesta região. Porém, não podemos dizer que temos um manto de invisibilidade apenas excluindo uma região do espaço em um grid cartesiano. Isso seria equivalente a encobrir o objeto com um manto comum, o observador não seria capaz de ver o objeto, mas poderia ver o manto e saberia que o objeto está ali. Precisamos então modificar o grid de coordenadas para que as ondas sejam desviadas em torno do objeto, de forma a não interagir com ele, e sejam direcionadas ao observador como se nada tivesse acontecido.

A Figura 20b representa como podemos construir um manto de invisibilidade no espaço virtual. As ondas eletromagnéticas entram no manto de invisibilidade, representado pelo anel azul claro de raio b e são desviadas de forma a não terem acesso a uma região proibida, representada pelo anel azul escuro de raio b. As ondas saem do mando exatamente com a mesma direção que entraram. Desta forma, um observador externo não será capaz de ver o objeto e nem saber que alguma camuflagem foi feita ali. Na percepção do observador as ondas sempre estiveram em trajetórias retas, no grid cartesiano.

Para obter a geometria do espaço virtual da figura 20b, fazemos uma transformação de coordenadas do tipo

$$r = a + r' \frac{(b-a)}{b}. \tag{6.2}$$

Perceba que $r = a$ corresponde a $r' = 0$. Isso significa que a superfície de raio a na figura 20b corresponde a um único ponto na figura 20a. Ou seja, qualquer coisa colocada

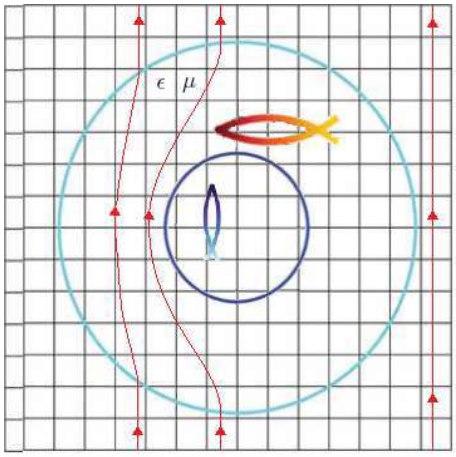


Figura 21 – Espaço virtual com valores de ϵ e μ dados em termos da relação (6.6). A geometria segue o mesmo grid plano do espaço virtual original. Porém, como os valores de ϵ e μ definem um índice de refração que simula a geometria do espaço virtual transformado a onda segue uma trajetória curva evitando a região em azul escuro. Fonte referência (55).

dentro do disco de raio a deve ser excluída do campo eletromagnético, se torna assim invisível. O tensor métrico para o espaço virtual após a transformação de coordenadas pode ser calculado como

$$g_{ij} = \gamma_{i'j'} \Lambda_i^{i'} \Lambda_j^{j'}, \tag{6.3}$$

onde $\Lambda_i^{i'}$ é a matriz de transformação

$$\Lambda_i^{i'} = \frac{\partial x^i}{\partial x^{i'}}. \tag{6.4}$$

Aplicando então a matriz de transformação calculada a partir da relação (6.2), encontramos

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} c^2 & 0 \\ 0 & c^2(r-a)^2 \end{pmatrix}, \tag{6.5}$$

onde $c = \frac{b}{b-a}$. Esse tensor métrico nos indica qual deve ser a geometria apropriada para obtermos o efeito de invisibilidade. Uma vez que conhecemos a geometria do espaço virtual, podemos encontrar os parâmetros do material dielétrico que simulam esse mesmo comportamento através da relação (5.19). O meio material que simula a geometria do espaço virtual é conhecido como espaço físico. Esse espaço é novamente plano, assim como o espaço virtual originalmente. A modificação na geometria do espaço é agora traduzida em termos dos parâmetros

$$\epsilon^{ij} = \mu^{ij} = \pm\frac{\sqrt{g}}{\sqrt{\gamma}}g^{ij} = \frac{(r-a)}{rc}\begin{pmatrix} c^2 & 0 \\ 0 & (r-a)^{-}2 \end{pmatrix}. \tag{6.6}$$

Esses parâmetros definem um gradiente de índice de refração que tem o efeito de refratar a luz em cada elemento diferencial de área, no manto, desviando a trajetória da luz e assim reproduzindo o comportamento no espaço virtual.

Essa forma de construção do manto de invisibilidade vem de uma transformação de coordenadas a partir de um plano cartesiano. Desta forma o material não estabelece em si uma geometria curva, uma vez que é localmente plana. A transformação apenas muda a noção de distância nesse espaço, mas não altera os ângulos, ou seja é uma transformação conforme. Na próxima seção discutimos algumas estratégias para detecção do manto de invisibilidade circular.

6.2 Estratégia para detecção do manto de invisibilidade

Uma vez que as ondas eletromagnéticas são desviadas para não interagir com o objeto camuflado e ao mesmo tempo direcionadas de forma a manter sua trajetória original fora do manto, um observador externo não é capaz de saber se algo esta sendo camuflado, apenas olhando para ele. É necessário então elaborar alguma estratégia para que seja possível detectar o manto de invisibilidade de forma indireta.

A forma mais óbvia de se detectar o manto de invisibilidade tem a ver com uma limitação na sua construção. Usualmente, um manto construído a partir de um metamaterial funcionará apenas para um intervalo de frequência especifico. Sendo assim, basta iluminar o ambiente com um feixe de ondas fora do intervalo de operação desse manto para que se possa detectá-lo facilmente. Vamos considerar, então, que seja possível construir um manto de invisibilidade "perfeito", que funcione para todos os comprimentos de onda. Neste caso, essa estratégia não funcionará.

Para encontrar uma forma de detectar a presença do manto vamos explorar algumas das características geométricas intrínsecas à sua construção. Como comentamos na seção anterior, a transformação de coordenadas utilizada para a construção do manto não torna o espaço curvo. A curvatura local permanece nula. No entanto, a noção de distância é alterada no espaço dentro do manto (ou seja, na região entre a e b). Isso implica que na borda do manto (anel de raio b) a medida de distância muda bruscamente, passando do espaço transformado dentro do manto para o espaço cartesiano usual fora do manto. Transições abruptas entre tensores métricos em um espaço costumam se traduzir em

termos de curvaturas singulares. Vejamos então em mais detalhes o que acontece nesta região.

Como nosso objetivo é investigar a região $r = b$, o tensor métrico pode ser escrito em cada região como

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\theta^2, \qquad r \geq b, \tag{6.7}$$

$$ds^2 = c^2 dr^2 + c^2 (r-a)^2 d\theta^2, \qquad a \geq r \leq b, \tag{6.8}$$

onde

$$c = \frac{b}{b-a}. \tag{6.9}$$

Podemos escrever os tensores métricos de forma unificada utilizando a função de Heaviside definida como

$$\Theta(r-b) = \begin{cases} 0, & \text{for } r < b \\ 1/2, & \text{for } r = b \\ 1, & \text{for } r > b \end{cases}. \tag{6.10}$$

Aplicando essa função escrevemos

$$ds^2 = \Big(c^2\Theta(b-r) + \Theta(r-b)\Big)\, dr^2 + \Big(c^2(r-a)^2\Theta(b-r) + r^2\Theta(r-b)\Big)\, d\theta^2. \tag{6.11}$$

Nosso objetivo é investigar se existe uma curvatura singular na região de transição $r = b$. De posse do valor da curvatura poderemos explorar a mudança de fase gerada por essa curvatura como uma estratégia para a detecção. Tomamos, então, o tensor métrica na forma (6.11) e calculamos inicialmente as componentes não nulas do simbolo de Christoffel, encontrando como resultado

$$\begin{aligned}
\Gamma^r_{rr} &= \left(\frac{2c^2-1}{2}\right)\delta(r-b) - \frac{c^2}{2}\delta(b-r), \\
\Gamma^r_{\theta\theta} &= -\frac{c^2(a-r)^2}{2}\delta(b-r) - c^2(a-r)\Theta(b-r) + \frac{r\left(r\delta(r-b) + 2\theta(r-b)\right)}{2}, \\
\Gamma^\theta_{r\theta} &= \Gamma^\theta_{\theta r} = -\frac{((c^2-1)r^2 - 2arc^2 + c^2a^2)}{2}\delta(r-b) \\
&- c^2(a-r)\Theta(b-r) - r\Theta(r-b).
\end{aligned} \tag{6.12}$$

A partir dos valores para os simbolos de Christoffel, podemos calcular diretamente o tensor de curvatura de Riemann desse resultado encontramos um tensor de curvatura singular atraves da relação

$$R^{\rho}_{\sigma\mu\nu} = \partial_{\mu}\Gamma^{\rho}_{\nu\sigma} - \partial_{\nu}\Gamma^{\rho}_{\mu\sigma} + \Gamma^{\rho}_{\mu\nu}\Gamma^{\lambda}_{\nu\sigma} - \Gamma^{\rho}_{\nu\lambda}\Gamma^{\lambda}_{\mu\sigma}. \tag{6.13}$$

Apos alguns cálculos, encontramos os seguintes resultados

$$\begin{aligned} R^{r}_{\theta\theta r} = -R^{r}_{\theta r\theta} &= \frac{(c-1)(2c+1)ab}{2(b-a)c^3}\delta(r-b), \\ R^{\theta}_{r\theta r} = -R^{\theta}_{rr\theta} &= \frac{(c-1)^3(b-a)}{abc}\delta(r-b). \end{aligned} \tag{6.14}$$

Contraindo o tensor de Riemann obtemos o tensor de Ricci

$$R_{rr} = \frac{(c-1)^3(b-a)}{abc}\delta(r-b), \qquad R_{\theta\theta} = -\frac{(c-1)(2c+1)ab}{2(b-a)c^3}\delta(r-b). \tag{6.15}$$

O traço do tensor de Riemann é conhecido como escalar de curvatura, ou escalar de Ricci. No nosso caso, o escalar de curvatura é dado por

$$\begin{aligned} R = &\left(\frac{\Theta(b-r)}{c^2} + \Theta(r-b)\right)\left(\frac{(c-1)^3(b-a)}{abc}\delta(r-b)\right) + \\ &+ \left(\frac{\Theta(b-r)}{c^2(r-a)^2} + \frac{\Theta(r-b)}{r^2}\right)\left(-\frac{(c-1)(2c+1)ab}{2(b-a)c^3}\delta(r-b)\right). \end{aligned} \tag{6.16}$$

A função delta somente é não nula quando $r = b$, portanto

$$R = \kappa\delta(r-b), \tag{6.17}$$

onde

$$\kappa = \left[\left(\frac{1}{2c^2} + \frac{1}{2}\right)\left(\frac{(c-1)^3(b-a)}{abc}\right) - \left(\frac{1}{2c^2(b-a)^2} + \frac{1}{2b^2}\right)\left(\frac{(c-1)(2c+1)ab}{2(b-a)c^3}\right)\right]. \tag{6.18}$$

Uma vez que estamos trabalhando em duas dimensões, o escalar de curvatura (R) está relacionado com a curvatura gaussiana (K) pela expressão $K = R/2$. Sendo assim

$$K = \frac{\kappa}{2}\delta(r-b). \tag{6.19}$$

A curvatura gaussiana é, portanto, nula em todo o espaço exceto na região $r = b$, onde ela é infinita, dizemos então que o espaço apresenta uma curvatura singular. Curvatura gaussiana singular também aparecem em defeitos topológicos como as superfícies cônicas que estudamos no inicio dessa tese. No caso das superfícies cônicas também podemos dizer que excluímos uma região do espaço através de uma transformação de coordenadas, mas naquele caso retiramos uma fatia angular.

Assim, com um campo magnético confinado em um solenoide é percebido na forma de uma fase dependente do potencial vetor, no efeito Aharonov–Bohm, uma curvatura gaussiana singular também pode ser percebida na forma de um fator de fase, conhecido como fase geométrica. Sendo assim, se formos capazes de identificar uma diferença de fase relacionada à curvatura gaussiana (6.19) poderemos ter alguma informação da presença do manto de invisibilidade. Como a curvatura depende das proporções do manto, ou seja depende dos valores de a e b, essa fase geométrica nos dará informação sobre a existência e as dimensões do manto de invisibilidade. A diferença de fase que surge no efeito Aharonov–Bohm é dada em termos do potencial vetor ($\vec{A}$) como

$$\chi^{AB} = \frac{ie}{\hbar c}\oint \vec{A}\cdot d\vec{l}. \tag{6.20}$$

Se escrevermos o potencial vetor como o rotacional do campo magnético e aplicarmos o teorema de Stokes perceberemos que a integral do potencial vetor nada mais é do que o fluxo do campo magnético. De forma análoga, a diferença de fase em um circuito circular ao redor do manto de invisibilidade será dada como um fluxo de curvatura como

$$\chi = \int K dA. \tag{6.21}$$

O elemento de área dA para o espaço definido pelo tensor métrico (6.11) é calculado usando o formalismo das tetradas. Inicialmente definimos as quantidades θ^a em (2.35) usando (2.34), e encontramos

$$\hat{\theta}^1 = c\Theta(b-r) + \Theta(r-b)dr, \qquad \hat{\theta}^2 = c(r-a)\Theta(b-r) + r\Theta(r-b). \tag{6.22}$$

O elemento de área é dado através do produto entre os elementos $\hat{\theta}^1$ e $\hat{\theta}^2$. Ou seja

$$dA = \hat{\theta}^1 \wedge \hat{\theta}^2 = [c\Theta(b-r) + \Theta(r-b)]\, dr \wedge [c(r-a)\Theta(b-r) + r\Theta(r-b)]\, d\theta, \quad (6.23)$$

$$\begin{aligned} dA = \big[&c^2(r-a)\Theta(b-r)\Theta(b-r) + c(r-a)\Theta(b-r)\Theta(r-b) + \\ &+cr\Theta(b-r)\Theta(r-b) + r\Theta(r-b)\Theta(r-b)]\, dr d\theta. \end{aligned} \quad (6.24)$$

Utilizando, então, esse elemento de área e a curvatura gaussiana definida em (6.19) podemos calcular qual será a diferença de fase observada no problema do manto de invisibilidade

$$\chi = \int K dA = \left(\frac{1}{4}(b-a)(c^2+c) + \frac{1}{4}b(1+c)\right)\frac{\kappa}{2}\int \delta(r-b) dr d\theta, \quad (6.25)$$

$$\chi = \kappa\pi\left(\frac{1}{4}(b-a)(c^2+c) + \frac{1}{4}b(1+c)\right). \quad (6.26)$$

Como discutimos anteriormente, o manto de invisibilidade é construído de forma a evitar a interação do objeto a ser camuflado com a onda eletromagnética e ao mesmo tempo guiar a trajetória dessa onda dentro do manto de forma que ela sai com a mesma trajetória que tinha ao entrar no manto, fazendo assim com que o observador externo seja incapaz de identificar a presença do manto. No entanto, para que seja possível o desvio do campo eletromagnético dentro do manto os parâmetros η e μ do metamaterial são projetados em um espaço virtual onde a geometria é plana, porém com uma noção de distância alterada. Isso acaba gerando uma região de transição na borda do manto ($r = b$) onde reside curvatura gaussiana singular. Portanto, apesar do observador não ser capaz de detectar visualmente a existência do manto, ele pode identificar a sua presença usando uma onda de teste e observado a diferença de fase resultante. Uma região livre do manto não apresentará qualquer diferença de fase, enquanto a presença do manto provoca uma diferença de fase do tipo (6.26). Desta forma é possível acusar a existência de um manto de invisibilidade em uma determinada região e inclusive obter informação sobre as suas dimensões, uma vez que a sua fase depende diretamente dos parâmetros a e b.

7 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Nesta tese investigamos a dinâmica de uma partícula na geometria de superfícies cônicas, mais especificamente, superfícies de cones duplos, ou seja dois cones ligados pelos vértices. Exploramos também a geometria de um manto de invisibilidade bidimensional circular estabelecendo uma estratégia para a sua detecção baseada na fase geométrica associada à curvatura gaussiana singular presente na borda do manto.

No intuito de avaliarmos a dinâmica quântico–relativística de uma partícula na superfície de um cone duplo, desenvolvemos toda a abordagem geométrica, definindo um sistema de coordenadas apropriado para a superfície e calculando todos os parâmetros necessários para a aplicação do formalismo das tetradas. Definimos, assim, a conexão espinorial e as matrizes de Dirac apropriadas para o modelo. De posse desses dados resolvemos a equação de Dirac para os casos de uma partícula livre e de uma partícula carregada sob a influência de um campo magnético.

A dinâmica clássica de uma partícula livre na superfície de um cone duplo apresenta uma solução instável em torno do momento angular nulo. A condição de momento angular nulo é a única solução que permite que a partícula transite de um cone para outro seguindo uma linha reta, no caso clássico. Qualquer pertubação no valor do momento angular resulta em uma dinâmica completamente diferente para a partícula, confinando-a a um dos cones. No caso quântico, dado pela equação de Schrödinger, a solução da função de onda também apresenta instabilidade em torno do número quântico de momento angular nulo. A solução muda drasticamente seu comportamento para uma pequena pertubação em torno desse valor. Percebemos que o mesmo comportamento se repete na solução da equação de Dirac, apresentado um comportamento instável em torno do número quântico de momento angular nulo. A solução também apresenta simetria em relação a cada cone individualmente. Não conseguimos notar nenhuma grande diferença na dinâmica da partícula em cada um dos cones. De fato, era de se esperar esse comportamento uma vez que a orientação espacial da superfície não deve interferir na dinâmica de uma partícula livre.

Na presença de um campo magnético, a orientação espacial da superfície passa a ser relevante. Podemos perceber esse fato facilmente com a abordagem das tetradas que utilizamos aqui. Neste formalismo, a geometria do cone duplo é traduzida na equação de Dirac em termos de uma conexão de spin que tem a direção do versor $\hat{e}_\phi$. No sistema de coordenadas que utilizamos, esse versor terá direções diferentes para cada cone da superfície. Assim, a presença de um campo magnético azimutal evidenciará essa diferença na conexão espinorial em cada cone. Resolvemos, então, de forma analítica a equação de Dirac para esse problema e, como previsto, encontramos os níveis de Landau que evidenciam as diferenças entre cada um dos cones na superfície na forma de um parâmetro, que chamamos de η. Esse parâmetro vale ± 1 a depender do cone onde a partícula se

encontra.

Os níveis de Landau para superfícies cônicas podem ser classificadas em dois grupos. O primeiro grupo contém os chamados níveis de corpo. Esses são os mesmos níveis do grafeno plano. O segundo grupo é chamado de níveis de ápice e evidencia a dependência dos níveis de Landau com o ângulo de abertura (α) da superfície. No caso do cone duplo, a presença do parâmetro η acaba levando a níveis de classes diferentes para cada um dos cones. Quando um dos cones apresentar níveis de corpo para uma determinada combinação de parâmetros, o outro cone necessariamente apresentará níveis de ápice para essa mesma combinação de parâmetros.

O passo seguinte foi avaliar o comportamento dos portadores de carga em nanocones duplos de carbono. Para isso introduzimos um novo campo de gauge que compensa a descontinuidade nas subredes geradas na formação do defeito na superfície. Resolvemos então a equação de Dirac efetiva para o caso da partícula e plotamos as densidade locais de estado próximas do vértice dos cones. Consideramos defeitos pentagonais e heptagonais, tanto com apenas um defeito como com dois defeitos na rede. plotamos então as DLE para várias combinações desses defeitos na superfície e notamos que em alguns casos a DLE não se anula na energia de Fermi, conferindo características de condução ao material. Mostramos também o espectro de energia para nanocones finitos. Neste caso, evidenciamos uma dependência tanto com o tipo de defeito na estrutura quanto com a dimensão da sua geratriz, o que possibilita uma grande combinação de energias possíveis, podemos então escolher dois cones específicos de forma a controlar o transporte eletrônico entre eles.

Os níveis de Landau para os nanocones duplos de carbono também foram calculados. Novamente encontramos os níveis de corpo e de ápice se alternando em cada um dos cones. Mas agora os níveis de ápice apresentam uma dependência com o ângulo de abertura do cone de forma diferenciada devido à presença do campo de gauge que introduz uma nova dependência em α.

A aplicação da geometria no estudo das propriedades dos materiais é um tema muito importante também no estudo dos metamateriais. Demonstramos aqui como é possível projetar a geometria para um manto de invisibilidade utilizando a ótica de transformação. Através de uma transformação de coordenadas que exclui uma região do espaço em um espaço virtual mapeamos as características dos parâmetros η e μ que reproduzem as trajetórias de uma onda eletromagnética no espaço virtual em um metamaterial. Definindo desta forma os parâmetros para a construção de um manto de invisibilidade.

O processo de construção do manto de invisibilidade através do mapeamento da geometria por uma transformação de coordenadas implica na junção de dois espaços com noções de distâncias diferentes. Isso resulta em uma curvatura gaussiana singular na borda da manta. Calculamos então o valor dessa curvatura gaussiana para o problema do manto de invisibilidade circular em duas dimensões.

Inspirados pelo efeito Aharonov-Bohm onde um campo magnético confinado ao interior de um solenoide pode ser percebido na forma de uma fase na função de onda de um feixe que circula o solenoide e na sua versão geométrica, onde a curvatura singular em defeitos topológicos também produz uma fase, desenvolvemos uma estratégia de detecção do manto de invisibilidade calculando a mudança de fase resultante da curvatura gaussiana singular calculada para o manto.

Uma vez que a fase geométrica depende diretamente dos parâmetros a e b que definem o raio interno e externo do manto, respectivamente, podemos identificar a presença de um manto de invisibilidade ao detectar a fase geométrica e assim conseguimos tanto identificar a sua presença como obter informação sobre as suas dimensões.

Nesta tese exploramos os efeitos da geometria em materiais que são alvo de intensos estudos devido as suas enormes possibilidade de aplicações, os nanocones de carbono e os metamateriais. Acreditamos que os resultados apresentados aqui contribuem para ampliar o conhecimento sobre o tema e desenvolver esses materiais.

REFERÊNCIAS

1 ASHCROFT, N.; MERMIN, N. **Solid State Physics**. Philadelphia: Saunders College, 1976.

2 BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHRIEFFER, J. R. Theory of superconductivity. **Physical Review**, APS, v. 108, n. 5, p. 1175, 1957.

3 NOVOSELOV, K. S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. **science**, American Association for the Advancement of Science, v. 306, n. 5696, p. 666–669, 2004.

4 QI, X.-L.; ZHANG, S.-C. The quantum spin hall effect and topological insulators. **Physics Today**, v. 63, n. 1, p. 33–38, 2010.

5 JENSEN, B.; DANDOLOFF, R. Remarks on quantum mechanics on surfaces. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 375, n. 3, p. 448–451, 2011.

6 COSTA, R. D. Quantum mechanics of a constrained particle. **Physical Review A**, APS, v. 23, n. 4, p. 1982, 1981.

7 FILGUEIRAS, C.; MORAES, F. On the quantum dynamics of a point particle in conical space. **Annals of Physics**, Elsevier, v. 323, n. 12, p. 3150–3157, 2008.

8 FURTADO, C.; MORAES, F. Landau levels in the presence of a screw dislocation. **EPL (Europhysics Letters)**, IOP Publishing, v. 45, n. 3, p. 279, 1999.

9 FURTADO, C. et al. Landau levels in the presence of disclinations. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 195, n. 1, p. 90–94, 1994.

10 BAKKE, K.; FURTADO, C. Bound states for neutral particles in a rotating frame in the cosmic string spacetime. **Physical Review D**, APS, v. 82, n. 8, p. 084025, 2010.

11 FURTADO, C.; MORAES, F. Electrostatic self-force in-dimensional cosmological gravity. **Classical and Quantum Gravity**, IOP Publishing, v. 14, n. 12, p. 3425, 1997.

12 BEZERRA, V. Gravitational analogs of the aharonov–bohm effect. **Journal of mathematical physics**, AIP, v. 30, n. 12, p. 2895–2899, 1989.

13 TAGMATARCHIS, N. **Advances in Carbon Nanomaterials**. [S.l.]: New York: Pan Stanford, 2012. ISBN 9789814267878.

14 KROTO, H. et al. C-60 - buckminsterfullerene. **Nature**, MACMILLAN MAGAZINES LTD, v. 318, n. 6042, p. 162–163, 1985.

15 IIJIMA, S. Helical microtubules of graphitic carbon. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 354, p. 56, 1991.

16 GE, M.; SATTLER, K. Observation of fullerene cones. **Chemical Physics Letters**, v. 220, n. 3, p. 192 – 196, 1994. ISSN 0009-2614. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0009261494001677>.

17 XIE, X. et al. Controlled fabrication of high-quality carbon nanoscrolls from monolayer graphene. **Nano Letters**, v. 9, n. 7, p. 2565–2570, 2009.

18 UGARTE, D. Curling and closure of graphitic networks under electron-beam irradiation. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 359, p. 707, 1992.

19 LIU, J. et al. Fullerene crop circles. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 385, p. 780, 1997.

20 IIJIMA, S.; ICHIHASHI, T.; ANDO, Y. Pentagons, heptagons and negative curvature in graphite microtubule growth. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 356, p. 776, 1992.

21 IIJIMA, S.; ICHIHASHI, T. Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 363, p. 603, 1993.

22 GE, M.; SATTLER, K. Bundles of carbon nanotubes generated by vapor-phase growth. **Applied Physics Letters**, v. 64, n. 6, p. 710–711, 1994.

23 KRISHNAN, A. et al. Fullerene crop circles. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 388, p. 451, 1997.

24 CARROLL, D. L. et al. Electronic structure and localized states at carbon nanotube tips. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 78, p. 2811–2814, Apr 1997. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.78.2811>.

25 KOBAYASHI, K. Superstructure induced by a topological defect in graphitic cones. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 61, p. 8496–8500, Mar 2000. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.61.8496>.

26 CHARLIER, J.-C.; RIGNANESE, G.-M. Electronic structure of carbon nanocones. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 86, p. 5970–5973, Jun 2001. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.86.5970>.

27 TAMURA, R.; TSUKADA, M. Disclinations of monolayer graphite and their electronic states. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 49, p. 7697–7708, Mar 1994. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.49.7697>.

28 TAMURA, R.; TSUKADA, M. Electronic states of the cap structure in the carbon nanotube. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 52, p. 6015–6026, Aug 1995. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.52.6015>.

29 MEUNIER, V. et al. Structural and electronic properties of carbon nanotube tapers. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 64, p. 195419, Oct 2001. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.64.195419>.

30 LAMMERT, P. E.; CRESPI, V. H. Graphene cones: Classification by fictitious flux and electronic properties. **Physical Review B**, APS, v. 69, n. 3, p. 035406, 2004.

31 SHENDEROVA, O. A. et al. Predicted structure and electronic properties of individual carbon nanocones and nanostructures assembled from nanocones. **Nanotechnology**, v. 12, n. 3, p. 191, 2001. Disponível em: <http://stacks.iop.org/0957-4484/12/i=3/a=302>.

32 MING, C. et al. Electronic rectification devices from carbon nanocones. **Applied Physics Letters**, v. 100, n. 6, p. 063119, 2012.

33 YANG, N.; ZHANG, G.; LI, B. Carbon nanocone: A promising thermal rectifier. **Applied Physics Letters**, v. 93, n. 24, p. 243111, 2008.

34 ADISA, O. O.; COX, B. J.; HILL, J. M. Open carbon nanocones as candidates for gas storage. **The Journal of Physical Chemistry C**, v. 115, n. 50, p. 24528–24533, 2011.

35 AJIMA, K. et al. Enhancement of in vivo anticancer effects of cisplatin by incorporation inside single-wall carbon nanohorns. **ACS Nano**, v. 2, n. 10, p. 2057–2064, 2008.

36 KOWALSKI, K.; REMBIELIŃSKI, J. On the dynamics of a particle on a cone. **Annals of Physics**, Elsevier, v. 329, p. 146–157, 2013.

37 LOPES, M. D. et al. Theoretical study of carbon double cones. **The European Physical Journal B**, Springer, v. 88, n. 1, p. 1–6, 2015.

38 GOMES, F. et al. Relativistic quantum dynamics on a double cone. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, IOP Publishing, v. 50, n. 6, p. 065302, 2017.

39 GOMES, F. et al. Electronic properties of single and double napped carbon nanocones. **arXiv preprint arXiv:1806.01324**, 2018.

40 BIRRELL, N.; DAVIES, P. **Quantum Fields in Curved Space**. Cambridge University Press, 1984. (Cambridge Monographs on Mathematical Physics). ISBN 9780521278584. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=SEnaUnrqzrUC>.

41 VOZMEDIANO, M. A.; KATSNELSON, M.; GUINEA, F. Gauge fields in graphene. **Physics Reports**, Elsevier, v. 496, n. 4, p. 109–148, 2010.

42 AHARONOV, Y.; BOHM, D. Further considerations on electromagnetic potentials in the quantum theory. **Physical Review**, APS, v. 123, n. 4, p. 1511, 1961.

43 WELLS, H. G. **The Invisible Man**. [S.l.]: C. Arthur Pearson, 1897.

44 LIU, Y.; ZHANG, X. Metamaterials: a new frontier of science and technology. **Chemical Society Reviews**, Royal Society of Chemistry, v. 40, n. 5, p. 2494–2507, 2011.

45 WANG, Z.-Y. New physics of metamaterials. **Physica B: Condensed Matter**, Elsevier, v. 443, p. 114–119, 2014.

46 ZENG, J. et al. Manipulating complex light with metamaterials. **Scientific reports**, Nature Publishing Group, v. 3, p. 2826, 2013.

47 CUI, T.; SMITH, D.; LIU, R. **Metamaterials: Theory, Design, and Applications**. Springer US, 2009. ISBN 9781441905734. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=rX7qBqsZWtoC>.

48 SMITH, D. R.; PENDRY, J. B.; WILTSHIRE, M. C. Metamaterials and negative refractive index. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 305, n. 5685, p. 788–792, 2004.

49 MARQUES, R.; MARTIN, F.; SOROLLA, M. **Metamaterials with Negative Parameters: Theory, Design, and Microwave Applications**. Wiley, 2011. (Wiley Series in Microwave and Optical Engineering). ISBN 9781118211564. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=LItxc5Oenr4C>.

50 PODDUBNY, A. et al. Hyperbolic metamaterials. **Nature Photonics**, Nature Publishing Group, v. 7, n. 12, p. 948, 2013.

51 DRACHEV, V. P.; PODOLSKIY, V. A.; KILDISHEV, A. V. Hyperbolic metamaterials: new physics behind a classical problem. **Optics express**, Optical Society of America, v. 21, n. 12, p. 15048–15064, 2013.

52 SHEKHAR, P.; ATKINSON, J.; JACOB, Z. Hyperbolic metamaterials: fundamentals and applications. **Nano convergence**, Springer, v. 1, n. 1, p. 14, 2014.

53 MACKAY, T. G.; LAKHTAKIA, A. Negatively refracting chiral metamaterials: a review. **SPIE Reviews**, International Society for Optics and Photonics, v. 1, n. 1, p. 018003, 2010.

54 CHEN, H.; CHAN, C. T.; SHENG, P. Transformation optics and metamaterials. **Nature materials**, Nature Publishing Group, v. 9, n. 5, p. 387, 2010.

55 LEONHARDT, U.; PHILBIN, T. **Geometry and Light: The Science of Invisibility**. Dover Publications, 2012. (Dover Books on Physics). ISBN 9780486134901. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=ho6KkVyZgV0C>.

56 FERNÁNDEZ-NÚÑEZ, I.; BULASHENKO, O. Anisotropic metamaterial as an analogue of a black hole. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 380, n. 1-2, p. 1–8, 2016.

57 NARIMANOV, E. E.; KILDISHEV, A. V. Optical black hole: Broadband omnidirectional light absorber. **Applied Physics Letters**, AIP, v. 95, n. 4, p. 041106, 2009.

58 CHENG, Q. et al. An electromagnetic black hole made of metamaterials. **arXiv preprint arXiv:0910.2159**, 2009.

59 MACKAY, T. G.; LAKHTAKIA, A. Towards a metamaterial simulation of a spinning cosmic string. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 374, n. 23, p. 2305–2308, 2010.

60 ANDERSON, T. H.; MACKAY, T. G.; LAKHTAKIA, A. Ray trajectories for a spinning cosmic string and a manifestation of self-cloaking. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 374, n. 46, p. 4637–4641, 2010.

61 FIGUEIREDO, D. et al. Modeling kleinian cosmology with electronic metamaterials. **Physical Review D**, APS, v. 94, n. 4, p. 044039, 2016.

62 SMOLYANINOV, I. I. Analog of gravitational force in hyperbolic metamaterials. **Physical Review A**, APS, v. 88, n. 3, p. 033843, 2013.

63 SMOLYANINOV, I.; SMOLYANINOV, A. Metamaterial models of exotic spacetimes. In: OPTICAL SOCIETY OF AMERICA. **Quantum Electronics and Laser Science Conference**. [S.l.], 2011. p. QTuM3.

64 SMOLYANINOV, I. I. Modeling of causality with metamaterials. **Journal of Optics**, IOP Publishing, v. 15, n. 2, p. 025101, 2013.

65 PENDRY, J. B.; SCHURIG, D.; SMITH, D. R. Controlling electromagnetic fields. **science**, American Association for the Advancement of Science, v. 312, n. 5781, p. 1780–1782, 2006.

66 CAI, W. et al. Optical cloaking with metamaterials. **Nature photonics**, Nature Publishing Group, v. 1, n. 4, p. 224, 2007.

67 ZHANG, S. et al. Cloaking of matter waves. **Physical review letters**, APS, v. 100, n. 12, p. 123002, 2008.

68 LIN, D.-H. Cloaking spin-1 2 matter waves. **Physical Review A**, APS, v. 81, n. 6, p. 063640, 2010.

69 LIN, D.-H.; LUAN, P.-G. Cloaking of matter waves under the global aharonov-bohm effect. **Physical Review A**, APS, v. 79, n. 5, p. 051605, 2009.

70 YU, G. X.; JIANG, W. X.; CUI, T. J. Invisible slab cloaks via embedded optical transformation. **Applied Physics Letters**, AIP, v. 94, n. 4, p. 041904, 2009.

71 VALENTINE, J. et al. An optical cloak made of dielectrics. **Nature materials**, Nature Publishing Group, v. 8, n. 7, p. 568, 2009.

72 ZHANG, B. et al. Macroscopic invisibility cloak for visible light. **Physical Review Letters**, APS, v. 106, n. 3, p. 033901, 2011.

73 ERGIN, T. et al. Three-dimensional invisibility cloak at optical wavelengths. **Science**, American Association for the Advancement of Science, p. 1186351, 2010.

74 SALEM, M. A.; BAĞCI, H. Detecting electromagnetic cloaks using backward-propagating waves. **Proceedings of the XXXth URSI General Assembly (IEEE, 2011)**, p. 1–3, 2011.

75 CHEN, S.-L.; CHAO, C.-S.; CHEN, Y.-N. Detecting the existence of an invisibility cloak using temporal steering. **Scientific reports**, Nature Publishing Group, v. 5, p. 15571, 2015.

76 YU-HUAN, S. et al. Detection of perfect cloak in time domain. **Chinese Physics Letters**, IOP Publishing, v. 27, n. 9, p. 094102, 2010.

77 SHI, J. et al. Electromagnetic detection of a perfect cloak based on the material nonlinear response. **Applied Physics B**, Springer, v. 105, n. 2, p. 225, 2011.

78 ZHANG, B.; WU, B.-I. Electromagnetic detection of a perfect invisibility cloak. **Physical review letters**, APS, v. 103, n. 24, p. 243901, 2009.

79 CHEN, H. et al. The anti-cloak. **Optics express**, Optical Society of America, v. 16, n. 19, p. 14603–14608, 2008.

80 SHI, X. et al. Electromagnetic detection of a perfect carpet cloak. **Scientific reports**, Nature Publishing Group, v. 5, p. 10401, 2015.

81 CARVALHO, A. M. d. M. et al. Holonomy transformations and application in the curved structure of graphene. **The European Physical Journal Plus**, Springer, v. 128, n. 6, p. 60, 2013.

82 CARVALHO, A. d. M.; SÁTIRO, C.; MORAES, F. Aharonov-bohm–like effect for light propagating in nematics with disclinations. **EPL (Europhysics Letters)**, IOP Publishing, v. 80, n. 4, p. 46002, 2007.

83 SAKURAI, J. **Advanced Quantum Mechanics–Another Issue**. Addison-Wesley Publishing Company, 1967. (Addison-Wesley series in advance physics). Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=ZXEsAAAAYAAJ>.

84 KATSNELSON, M.; KATSNELSON, M. **Graphene: Carbon in Two Dimensions**. Cambridge University Press, 2012. ISBN 9780521195409. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=FgwW3aVRBT0C>.

85 WALLACE, P. R. The band theory of graphite. **Physical Review**, APS, v. 71, n. 9, p. 622, 1947.

86 VONSOVSKY, S.; KATSNELSON, M. **Quantum Solid-State Physics**. Springer Berlin Heidelberg, 2012. (Springer Series in Solid-State Sciences). ISBN 9783642501661. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=vdEDoQEACAAJ>.

87 LAMMERT, P. E.; CRESPI, V. H. Topological phases in graphitic cones. **Physical review letters**, APS, v. 85, n. 24, p. 5190, 2000.

88 BUENO, M.; FURTADO, C.; CARVALHO, A. de M. Landau levels in graphene layers with topological defects. **The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems**, Springer, v. 85, n. 2, p. 1–5, 2012.

89 NETO, A. C. et al. The electronic properties of graphene. **Reviews of modern physics**, APS, v. 81, n. 1, p. 109, 2009.

90 WEIGLHOFER, W. S.; LAKHTAKIA, A. **Introduction to complex mediums for optics and electromagnetics**. [S.l.]: SPIE press Bellingham, WA, 2003. v. 123.

91 VESELAGO, V. G. The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of and μ. **Soviet physics uspekhi**, IOP Publishing, v. 10, n. 4, p. 509, 1968.

92 PENDRY, J. B. et al. Extremely low frequency plasmons in metallic mesostructures. **Physical review letters**, APS, v. 76, n. 25, p. 4773, 1996.

93 PENDRY, J. B. et al. Magnetism from conductors and enhanced nonlinear phenomena. **IEEE transactions on microwave theory and techniques**, IEEE, v. 47, n. 11, p. 2075–2084, 1999.

94 ROTMAN, W. Plasma simulation by artificial dielectrics and parallel-plate media. **IRE Transactions on Antennas and Propagation**, IEEE, v. 10, n. 1, p. 82–95, 1962.

95 SMITH, D. R. et al. Composite medium with simultaneously negative permeability and permittivity. **Physical review letters**, APS, v. 84, n. 18, p. 4184, 2000.

96 SHELBY, R. A.; SMITH, D. R.; SCHULTZ, S. Experimental verification of a negative index of refraction. **science**, American Association for the Advancement of Science, v. 292, n. 5514, p. 77–79, 2001.

97 SMITH, D. R. et al. Direct calculation of permeability and permittivity for a left-handed metamaterial. **Applied Physics Letters**, AIP, v. 77, n. 14, p. 2246–2248, 2000.

98 RAN, L. et al. Microwave solid-state left-handed material with a broad bandwidth and an ultralow loss. **Physical Review B**, APS, v. 70, n. 7, p. 073102, 2004.

99 PARIMI, P. et al. Negative refraction and left-handed electromagnetism in microwave photonic crystals. **Physical review letters**, APS, v. 92, n. 12, p. 127401, 2004.