



**UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA**  
**DEPARTAMENTO DE FÍSICA**

**MÁRCIO DE MOURA CUNHA**

**INFLUÊNCIA DE CAMPO MAGNÉTICO E ROTAÇÃO NO**  
**ESPECTRO ENERGÉTICO DE NANOTUBOS DE CARBONO**

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

**JOÃO PESSOA, PB**  
**JULHO, 2013**

MÁRCIO DE MOURA CUNHA

**INFLUÊNCIA DE CAMPO MAGNÉTICO E ROTAÇÃO NO  
ESPECTRO ENERGÉTICO DE NANOTUBOS DE CARBONO**

*Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física do Centro de Ciências Exatas da Universidade Federal da Paraíba, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.*

Orientador:

*Prof. Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes*

JOÃO PESSOA, PB

JULHO, 2013

C972i Cunha, Márcio de Moura.  
Influência de campo magnético e rotação no espectro energético de nanotubos de carbono / Márcio de Moura Cunha.- João Pessoa, 2013.  
65f. : il.  
Orientador: Fernando Jorge Sampaio Moraes  
Dissertação (Mestrado) – UFPB/CCEN  
1. Física. 2. Grafeno. 3. Nanotubos de carbono. 4. Campo magnético. 5. Rotação.

UFPB/BC

CDU: 53(043)

MÁRCIO DE MOURA CUNHA

**INFLUÊNCIA DE CAMPO MAGNÉTICO E ROTAÇÃO NO  
ESPECTRO ENERGÉTICO DE NANOTUBOS DE CARBONO**

*Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física do Centro de Ciências Exatas da Universidade Federal da Paraíba, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.*

Data de aprovação: \_\_\_ / \_\_\_ / \_\_\_\_

**BANCA EXAMINADORA**

---

*Prof. Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes*

UFPB

---

*Prof. Dr. Itamar Vidal Silva de Lima*

UFPB

---

*Prof. Dr. Fernando Roberto de Luna Parísio Filho*

UFPE

*Aos meus pais.*

# Agradecimentos

Inicialmente, agradeço à Deus.

Agradeço à minha família pelo incentivo ao longo desses anos: Meu pai e minha mãe, Cunha e Dení, respectivamente, à minha irmã Leilane, aos meus avós, primos e tios; À Wanessa, pelo companheirismo, carinho e compreensão.

Ao Prof. Fernando Moraes, pela orientação, entusiasmo e dedicação aos estudantes;

Ao Prof. Sérgio Azevedo por dicas de livros e artigos, ao Prof. Alexandre Carvalho (UFAL), pelas discussões sobre efeito Aharonov-Bohm;

Aos meus amigos Julio, Elias, Jilvan, Lilika, Bruno, Thiago, etc e aos colegas de grupo pelo ambiente de discussão e cooperação;

Ao CNPq pelo apoio financeiro.



## Resumo

Atualmente, o estudo de propriedades físicas de nanomateriais têm sido um vasto campo de estudo em Física da Matéria Condensada e em Ciência e Engenharia de Materiais. Tais objetos possuem diversas aplicações, como a fabricação de dispositivos eletrônicos menores e mais eficientes, por exemplo. Nanotubos de Carbono constituem uma classe interessante neste contexto, devido à sua síntese experimental e descrição teórica bem estabelecida na literatura. Um nanotubo de carbono pode ser visto como uma folha de Grafeno enrolada. Em 2002, Kral e Sadeghpoura investigaram a rotação de nanotubos pela aplicação de lasers. Motivados por tal realização, neste trabalho nos preocupamos com a descrição da dinâmica dos portadores de carga num nanotubo girante, mas desta vez considerando também um campo magnético. Para tal, partiremos de um hamiltoniano efetivo de Dirac para férmions sem massa, tal como feito para o caso do Grafeno, mas neste caso com o uso de coordenadas  $z$  e  $\phi$ . Os potenciais vetores associados ao campo magnético e à rotação (campo de Coriolis) entram na equação de Dirac via acoplamento mínimo usual. O potencial vetor de Coriolis advém da ideia do efeito Aharonov-Carmi, um análogo rotacional do célebre efeito Aharonov-Bohm. Por fim, analisamos a influência da presença do campo magnético e da rotação no espectro de energia.

**Palavras-chave:** Grafeno- Nanotubos de Carbono-Campo Magnético- Rotação

# Abstract

Currently, the study of the physical properties of nanomaterials has been a vast field of study in Condensed Matter Physics and Materials Science and Engineering. Such objects have various applications like making electronic devices smaller and more efficient, for example. Carbon nanotubes are an interesting class in this regard due to their experimental synthesis and theoretical description well established in the literature. A carbon nanotube can be viewed as a rolled up graphene sheet. In 2002, Kral and Sadeghpoura investigated the rotation of nanotubes by applying lasers. Motivated by this achievement, in this work we focus the description of the dynamics of the charge carriers in a spinning nanotube, but this time also considering a magnetic field. For this, we begin with an effective Dirac Hamiltonian for massless fermions, as done for the case of graphene, but in this case using coordinates  $z$  and  $\phi$ . The vector potentials associated to the magnetic field and to rotation (Coriolis field) enter Dirac equation via the usual minimal coupling. The Coriolis vector potential comes from the idea of the Aharonov-Carmi, an "rotational" analog the celebrated Aharonov-Bohm effect. Finally, we analyze the influence of the presence of the field and the rotation in the energy spectrum.

**Keywords:** Graphene-Carbon nanotubes- Magnetic Field- Rotation

# Sumário

<b>Agradecimentos</b>	<b>ii</b>
<b>Resumo</b>	<b>iv</b>
<b>Abstract</b>	<b>v</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>viii</b>
<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>1 Mecânica Quântica, campo magnético e rotação</b>	<b>3</b>
1.1 Mecânica Quântica: uma breve revisão . . . . .	3
1.1.1 A equação de Dirac . . . . .	5
1.2 Interações eletromagnéticas . . . . .	6
1.2.1 Uma partícula na presença de um campo eletromagnético . . . . .	6
1.2.2 Efeito Aharonov-Bohm . . . . .	7
1.2.3 Efeito AB ligado . . . . .	9
1.3 Rotação . . . . .	11
1.3.1 Efeito Aharonov-Carmi . . . . .	12
<b>2 Método de ligação forte</b>	<b>16</b>
2.1 Cristais e o Teorema de Bloch . . . . .	16
2.2 Método de ligação forte e relação de dispersão . . . . .	17
2.2.1 Minimização da energia . . . . .	19
2.3 Abordagem alternativa . . . . .	20
2.3.1 Teorema de Bloch revisto . . . . .	23
2.4 Exemplo:Poliacetileno . . . . .	23
<b>3 Grafeno e nanotubos</b>	<b>26</b>
3.1 Grafeno . . . . .	26
3.2 Relação de dispersão do grafeno . . . . .	28
3.2.1 Subrede A . . . . .	29
3.2.2 Subrede B . . . . .	29
3.3 Expansão para $k$ pequeno . . . . .	30

3.4	Níveis de Landau no grafeno . . . . .	32
3.5	Nanotubos de Carbono . . . . .	34
<b>4</b>	<b>Resultados</b>	<b>38</b>
4.1	Nanotubos de Carbono na presença de campo magnético . . . . .	38
4.1.1	Discussão . . . . .	42
4.2	Campo perpendicular . . . . .	43
	<b>Conclusões e Perspectivas</b>	<b>44</b>
<b>5</b>	<b>Apêndice 1</b>	<b>46</b>
5.1	Um caminho para a equação de Dirac . . . . .	46
5.1.1	Solução para partícula livre . . . . .	48
5.1.2	Spin . . . . .	49
	<b>Referências</b>	<b>52</b>

# Lista de Figuras

2.1	Esboço de uma rede bidimensional quadrada . . . . .	16
2.2	Célula unitária de uma rede tridimensional conhecida com BCC. . . . .	17
2.3	Representação de uma cadeia atômica linear. . . . .	17
2.4	Dois casos de potencial periódico. . . . .	20
3.1	Folha de grafeno . . . . .	26
3.2	Subredes e vetores-base . . . . .	27
3.3	Relação de dispersão do grafeno. A energia está em função de $\vec{k} = (k_x, k_y)$ . . . . .	30
3.4	Energia em função de $k_x, K_y$ nas proximidades dos pontos K e K' . . . . .	32
3.5	Representação de um nanotubo de carbono . . . . .	35
3.6	Folha de grafeno e possíveis cortes para a formação de um nanotubo . . . . .	35
3.7	nanotubo zig-zag do tipo (9,0) . . . . .	36
3.8	nanotubo armchair (5,5) . . . . .	37
3.9	nanotubo quiral (10,9) . . . . .	37
4.1	Energia para $k_z$ fixo. . . . .	41
4.2	Energia em função do campo, para rotação fixa. . . . .	42
4.3	Energia em função da rotação . . . . .	42

# Introdução

No mundo atual, estamos cercados de tecnologia e também vivenciamos a era da informação. Tais avanços se devem, sobretudo à imensa gama de aplicações de teorias científicas bem estabelecidas. Neste sentido, a Física desempenha um papel fundamental na compreensão da natureza e na possível aplicação de resultados na fabricação de diversos utensílios, desde coisas comuns que fazem parte do nosso dia-a-dia, como coisas mais sofisticadas. O surgimento da eletrônica, por exemplo, moldou aspectos científicos e econômicos da nossa sociedade. Ela é responsável por hoje possuímos desde televisores até sistemas de comunicação avançados. Com certeza, isto não seria possível sem o advento da Mecânica Quântica. Esta teoria, desenvolvida no início do século passado por Schroedinger, Heisenberg, Pauli, Dirac, entre outros, é uma das mais bem testadas e aplicadas teorias da Física [1].

A teoria quântica descreve a dinâmica de partículas na escala subatômica, e seus conceitos e resultados são fundamentais para diversos ramos da Física atualmente, como Física da Matéria Condensada, Física Atômica e Molecular, Física das Partículas elementares, etc. O surgimento desta teoria foi uma das grandes revoluções na ciência moderna, o que influenciou bastante a nossa visão de mundo, não somente na Física, mas também em áreas que se beneficiaram diretamente das consequências da teoria. Um exemplo disso é o caráter atômico da matéria, essencial para o desenvolvimento da Química. No que diz respeito à Física, das diversas áreas que citamos acima, em particular, nosso campo de estudo é a Física da Matéria Condensada, uma área que usa como principal ferramenta a Mecânica Quântica para investigar diversas propriedades da matéria, seja em sólidos ou líquidos. Assim, esta área da Física tem um papel fundamental na descoberta e aprimoramento de materiais para a indústria e aplicações tecnológicas, bem como possui um caráter interdisciplinar, no sentido que possui uma forte relação com sistemas estudados também por químicos e biólogos. A Física da Matéria Condensada tem sido um amplo ramo de pesquisa em diversos países, justamente por guardar uma relação próxima com aplicações industriais, e conseqüentemente com o desenvolvimento científico e tecnológico [2]. Assim, diversos materiais são estudados e sintetizados a cada ano. Existem estudos tanto do ponto de vista teórico como experimental e aplicações. Nesse sentido, materiais alótropos do carbono tem sido bastante explorados, devido à grande diversidade de materiais possíveis de se obter com este elemento e também das aplicações.

Neste trabalho, nosso objeto de estudo será um material bastante conhecido e que tem recebido bastante atenção por parte dos pesquisadores de Matéria Condensada: os nanotubos de carbono. Este material foi sintetizado na década de 1990, por Iijima. Apesar dos muitos trabalhos relacionados à este tema, vários aspectos ainda podem ser explorados, tais como estudar efeitos inerciais neste material, por exemplo. Deste modo, neste trabalho, revisamos aspectos básicos da Física dos nanotubos de carbono e um material muito similar, o grafeno, bem como estudamos tais materiais na presença de campo magnético e rotação. Assim, dividimos o presente texto do seguinte modo: no capítulo 2, revisamos alguns aspectos básicos de Mecânica Quântica que serão utilizados ao longo do trabalho; No capítulo 3, estudamos o método de ligação-forte, bem como alguns exemplos simplificados; No capítulo 4, nos preocupamos com a Física do Grafeno e Nanotubos de Carbono, para então, no Capítulo 5 abordarmos nossos resultados.

# Mecânica Quântica, campo magnético e rotação

## 1.1 Mecânica Quântica: uma breve revisão

Neste capítulo, revisaremos alguns tópicos referentes à Mecânica Quântica, que iremos utilizar ao longo do trabalho. Também iremos estudar como podemos descrever interações eletromagnéticas e rotação neste contexto. Para começar, vamos ter em mente que a dinâmica de um elétron pode ser descrita pela famosa equação de Schrodinger [3]:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t}, \quad (1.1)$$

onde a função de onda  $\Psi$ , solução da equação, fornece os autoestados do elétron.

Para potenciais independentes do tempo, a função de onda pode ser escrita como a seguinte combinação linear de funções-base:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{i=1}^{\infty} c_n \Psi_n(\vec{r}) e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (1.2)$$

Uma outra maneira de expressar o estado quântico de uma partícula é escrever um vetor de estado, chamado de *ket*, dado por  $|\alpha\rangle$ .

Este estado arbitrário pode ser escrito como [4]

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle, \quad (1.3)$$

onde cada  $|a'\rangle$  na soma denota um vetor da base de autoestados.

A função de onda espacial se relaciona ao autoestado  $|\alpha\rangle$  por

$$\Psi(x) = \langle x | \alpha \rangle. \quad (1.4)$$

Se  $A$  é um operador que representa uma grandeza física (observável), então a aplicação de  $A$  em um autoestado  $a'$  nos dá

$$A |a'\rangle = a' |a'\rangle. \quad (1.5)$$

Isto é uma equação de autovalor para o operador  $A$ . O autovalor  $a'$  nos fornece o resultado da medida da grandeza  $A$  quando o sistema está no estado  $|a'\rangle$ .

Cada *ket* é representado por um vetor coluna, e possui um dual, o *bra*, dado por um vetor linha, e escrito como  $\langle \alpha |$ . O produto entre eles, de modo geral, é escrito como

$$\langle a'' | | a' \rangle = \delta_{a'' a'} \quad (1.6)$$

numa base ortonormalizada. Outra relação importante é

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| \alpha \rangle, \quad (1.7)$$

onde

$$\sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| = \mathbb{1} \quad (1.8)$$

é chamada de relação de completeza. Do lado direito da expressão, temos o operador identidade.

Uma grande vantagem deste formalismo é que nos permite estudar problemas de Mecânica Quântica numa representação matricial, muito útil em diversos casos. Dado um operador  $X$ , podemos escrever que

$$X = \mathbb{1} X \mathbb{1} = \sum_{a''} \sum_{a'} |a''\rangle \langle a'' | X | a' \rangle \langle a'|. \quad (1.9)$$

O termo  $\langle a'' | X | a' \rangle$  corresponde a um elemento de matriz, de modo que

$$X \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | X | a^{(1)} \rangle & \langle a^{(1)} | X | a^{(2)} \rangle & \dots \\ \langle a^{(2)} | X | a^{(1)} \rangle & \langle a^{(2)} | X | a^{(2)} \rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.10)$$

Dito isto, sabemos que também podemos escrever uma equação matricial para o hamiltoniano de um sistema físico. Para potenciais que não dependem do tempo, temos

$$H\Psi = E\Psi; \quad (1.11)$$

Como um exemplo, vamos considerar um sistema de dois níveis, isto é, um sistema onde só existem duas energias possíveis, denotadas por  $E_1$  e  $E_2$ , respectivamente.

Estas energias correspondem a autoestados ortogonais entre si, dados por  $|1\rangle$  e  $|2\rangle$ , de modo que

$$H|1\rangle = E_1|1\rangle; \quad H|2\rangle = E_2|2\rangle. \quad (1.12)$$

Assim, podemos escrever que

$$H = E_1|1\rangle\langle 1| + E_2|2\rangle\langle 2|. \quad (1.13)$$

Na notação matricial,

$$H \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | H | a^{(1)} \rangle & \langle a^{(1)} | H | a^{(2)} \rangle \\ \langle a^{(2)} | H | a^{(1)} \rangle & \langle a^{(2)} | H | a^{(2)} \rangle \end{pmatrix}, \quad (1.14)$$

ou ainda

$$H \doteq \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}. \quad (1.15)$$

Como  $H\Psi = E\Psi$  representa uma equação de autovalores,  $E_1$  e  $E_2$  são os autovalores do operador hamiltoniano. Assim, sempre que tivermos um hamiltoniano diagonal, já podemos ver os autovalores de energia diretamente na matriz que representa  $H$ . Existem casos onde o hamiltoniano pode ser não-diagonal, e isto pode representar algum tipo de correlação. No próximo capítulo, veremos isto com mais detalhes. Outro aspecto importante é que a dimensão da matriz que representa o hamiltoniano depende do número de autoestados possíveis para o sistema. No nosso exemplo, como haviam 2 estados possíveis, e matriz  $H$  era de dimensão 2. Assim, a dimensionalidade está relacionada apenas com a quantidade de vetores-base, e não guarda uma relação direta com a dimensão espacial do sistema estudado.

Outro aspecto importante, é olharmos para dois estados que são relacionados por uma fase. Seja

$$|\alpha'\rangle = e^{i\theta} |\alpha\rangle. \quad (1.16)$$

Vamos calcular os elementos de matriz de do operador  $H$  na base  $|\alpha'\rangle$ .

$$\langle \alpha' | H | \alpha' \rangle = (e^{-i\theta} \langle \alpha |) H (e^{i\theta} |\alpha\rangle) = \langle \alpha | H | \alpha \rangle. \quad (1.17)$$

Logo, dois estados que diferem por uma fase descrevem de forma equivalente o comportamento de um sistema.

### 1.1.1 A equação de Dirac

Apesar do grande sucesso da equação de Schroedinger para a descrição de sistemas quânticos, esta não acomoda o spin do elétron de forma natural, a também não é invariante sob transformações de Lorentz. Em busca de uma equação de onda relativística, que contornasse tais dificuldades, Paul Dirac propôs a seguinte equação [5]:

$$[-i\hbar\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla} + \beta mc^2]\Psi = i\hbar(\partial\Psi/\partial t), \quad (1.18)$$

com

$$\beta = \gamma_4 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad \alpha_k = i\gamma_4\gamma_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.19)$$

Os  $\sigma$ 's na expressão acima são as matrizes de Pauli, dadas por

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.20)$$

É possível mostrar<sup>1</sup> que existe um operador de spin dado por

$$\Sigma_3 = \frac{1}{2i}(\gamma_1\gamma_2 - \gamma_2\gamma_1) = \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix}, \quad (1.21)$$

que aplicado na função de onda, fornece a equação de autovalores

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ -\Psi_2 \\ \Psi_3 \\ -\Psi_4 \end{pmatrix}. \quad (1.22)$$

Esta equação representa o seguinte fato: A função de onda composta por quatro componentes, descreve a dinâmica de elétrons (dados por  $\Psi_1$  e  $\Psi_2$ ) e pósitrons (dados por  $\Psi_3$  e  $\Psi_4$ ), com duas possibilidades autovalores de spin, dados pelos sinais  $+1$  e  $-1$  na equação. Isto será importante para uma analogia que faremos na discussão dos portadores de carga no grafeno, no capítulo 4.

Com isto, encerramos esta seção sobre aspectos básicos e nos preocuparemos a seguir com a presença de interações eletromagnéticas e rotação.

## 1.2 Interações eletromagnéticas

### 1.2.1 Uma partícula na presença de um campo eletromagnético

Consideremos uma partícula de carga  $e$  se movendo numa região na presença de um campo eletromagnético [6]. A partícula está submetida à força de Lorentz, dada [7], [8] por

$$\vec{F} = e[\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}], \quad (1.23)$$

onde  $\vec{E}$  e  $\vec{B}$  são os campos elétrico e magnético, respectivamente e  $\vec{v}$  é a velocidade da partícula. Esses campos podem ser escritos em termos dos potenciais escalar  $\phi$  e vetor  $\vec{A}$  da seguinte maneira:

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}; \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}. \quad (1.24)$$

---

<sup>1</sup>Para mais detalhes, consultar o Apendice 1

Então, podemos escrever a força como

$$\vec{F} = e \left[ -\vec{\nabla}\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \vec{v} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \right]. \quad (1.25)$$

Isto nos permite obter a função potencial dada por

$$U = e\phi - e\vec{v} \cdot \vec{A}. \quad (1.26)$$

A partir da definição de lagrangeano, temos que

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}_i^2 - e\phi + e\vec{v} \cdot \vec{A}. \quad (1.27)$$

Usando o fato de que  $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m\dot{x}_i + eA_i = k$  e que

$$H = p_i \dot{x}_i - L, \quad (1.28)$$

chegamos a

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - e\vec{A})^2 + e\phi. \quad (1.29)$$

Assim, obtemos o hamiltoniano para uma partícula carregada na presença de um campo eletromagnético, e vemos que este se assemelha ao de uma partícula livre. De fato, podemos partir do caso de partícula livre e fazer a substituição

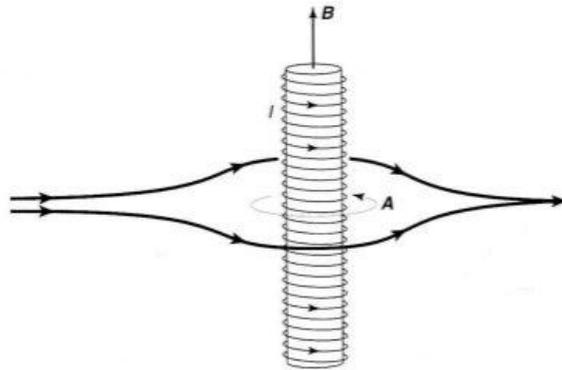
$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A} \quad (1.30)$$

para obter o hamiltoniano desejado. Este processo é conhecido como acoplamento mínimo.

## 1.2.2 Efeito Aharonov-Bohm

Em 1959, Yakir Aharonov e David Bohm estudaram o significado físico do potencial vetor, e propuseram um experimento de interferência com a presença de um solenóide [9]. Consideremos o seguinte arranjo: um solenóide, por onde passa uma corrente elétrica produz um campo magnético, confinado na sua região interna. Fora, o campo é nulo. Um feixe de elétrons (ou fótons), é emitido, e interfere numa região onde há uma fenda dupla. Devido à diferença de caminho, o feixe se desvia e depois de recombina. O solenóide fica localizado na região atrás das fendas. Classicamente, não era de se esperar nenhuma influência na trajetória do feixe devido à presença do solenóide, pois o campo magnético fora é zero, e portanto não há força líquida atuante nesta região.

Do ponto de vista quântico, os dois feixes interferem, e isto dá origem à um padrão de interferência, cuja posição depende do fluxo de campo magnético no solenóide. O hamiltoniano para este problema é dado por



$$\left[ \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar \vec{\nabla}}{i} - e\vec{A} \right)^2 + V \right] \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (1.31)$$

Na configuração mostrada na figura, o potencial vetor é dado por

$$\vec{A} = (2NI\pi a^2/cr)\hat{\phi}, \quad (1.32)$$

onde  $N$  é o número de espiras,  $I$  é a corrente elétrica, e  $a$  o raio do solenóide.

A função de onda é dada por

$$\Psi = e^{ig}\Psi', \quad (1.33)$$

onde

$$g = \frac{e}{\hbar} \int \vec{A} \cdot d\vec{r}' \quad (1.34)$$

é a fase adquirida pela função de onda após a passagem dos elétrons pela região do solenóide.  $\Psi'$  corresponde a função de onda para o caso de uma partícula livre. Mostraremos a seguir que a forma proposta para  $\Psi$  implica que  $\Psi'$  obedecerá à equação de uma partícula livre.

Usaremos o fato de que

$$\vec{\nabla}\Psi = \frac{i}{\hbar} e\vec{A}\Psi + e^{ig}\vec{\nabla}\Psi'; \quad \vec{\nabla}g = \frac{e}{\hbar}\vec{A}. \quad (1.35)$$

e

$$\left( \frac{\hbar \vec{\nabla}}{i} - e\vec{A} \right) \Psi = \frac{\hbar}{i} e^{ig} \vec{\nabla} \Psi'; \quad (1.36)$$

para calcular a expressão

$$\left( \frac{\hbar \vec{\nabla}}{i} - e\vec{A} \right)^2 \Psi. \quad (1.37)$$

Podemos então escrever

$$\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - e\vec{A}\right)^2 \Psi = \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - e\vec{A}\right) \left[ \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - e\vec{A}\right) \Psi \right]; \quad (1.38)$$

Após algumas manipulações, é possível escrevermos

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - e\vec{A}\right)^2 \Psi &= -\hbar^2 e^{ig} \nabla^2 \Psi' + i\hbar e (\vec{A} \cdot \vec{\nabla} \Psi') e^{ig} - i\hbar^2 (\vec{\nabla} \Psi' \frac{e}{\hbar} \vec{A}) e^{ig} \\ &= -\hbar^2 e^{ig} \nabla^2 \Psi' + i\hbar e (\vec{A} \cdot \vec{\nabla} \Psi') e^{ig} - i\hbar (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) e^{ig}; \end{aligned}$$

Assim, finalmente temos

$$\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - e\vec{A}\right)^2 \Psi = -\hbar^2 e^{ig} \nabla^2 \Psi'. \quad (1.39)$$

Então,

$$\left[ \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - e\vec{A}\right)^2 + V \right] \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (1.40)$$

se torna

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi' + V \Psi' = i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t}. \quad (1.41)$$

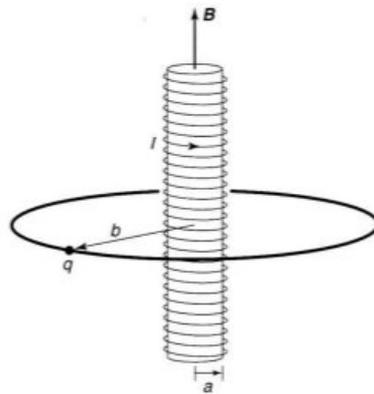
Vale ainda ressaltar que o efeito AB tem sido estudado como um cenário para dar um significado físico ao potencial vetor, considerado na eletrodinâmica clássica como uma ferramenta matemática. Mais que isso, é preciso observar que o fato de associarmos um fluxo à integral de linha deste potencial é o ponto-chave: a presença do fluxo está associada ao surgimento de uma fase, neste caso, o que pode servir para rotular estados quânticos. Além disso, este fluxo pode também interferir na dinâmica de uma partícula, o caso que veremos na seção seguinte.

### 1.2.3 Efeito AB ligado

Frequentemente, a maior parte dos livros-texto e artigos que tratam do efeito Aharonov-Bohm se referem apenas ao estudo deste efeito numa situação de espalhamento, discutida na seção anterior. No entanto, existe uma versão para estados ligados[10] e que não tem recebido tanta atenção. Neste caso, o efeito se dá sobre a dinâmica da partícula, como veremos a seguir. Consideremos a seguinte situação: Um solenóide, com um campo magnético confinado, e com um anel em volta, onde encontra-se uma partícula. Iremos resolver a equação de Schroedinger para este caso, revisando o exposto em [3].

Novamente, o hamiltoniano é escrito como

$$H = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - e\vec{A}\right)^2 + V, \quad (1.42)$$



onde

$$\vec{A} = \frac{\Phi}{2\pi b} \vec{\phi} \quad \Phi = \pi a^2 B. \quad (1.43)$$

$\vec{A}$  é a o potencial vetor e  $\Phi$  é o fluxo magnético que passa no interior do anel;  $a$  é o raio do solenóide, e  $b$  corresponde ao raio do anel.

Usando a equação (1.7), chegamos a

$$\left( \frac{\hbar}{i} - q\vec{A} \right)^2 \Psi = -\hbar^2 \nabla^2 \Psi + 2i\hbar q \vec{A} \cdot (\vec{\nabla} \Psi) + q^2 A^2 \Psi. \quad (1.44)$$

Substituindo o potencial vetor, e escrevendo a equação de Schroedinger em coordenadas polares, temos

$$\frac{1}{2m} \left[ -\hbar^2 \left( \frac{1}{b^2} \frac{d^2}{d\phi^2} \right) + e^2 \left( \frac{\Phi}{2\pi b} \right)^2 + i\hbar e \frac{\Phi}{\pi b^2} \frac{d}{d\phi} \right] \Psi(\phi) = E \Psi(\phi); \quad (1.45)$$

ou ainda

$$\left[ -\frac{d^2}{d\phi^2} + \left( \frac{q\Phi}{2\pi\hbar} \right)^2 + i \left( \frac{q\Phi}{\pi\hbar} \right) \frac{d}{d\phi} \right] \Psi = 2mE \frac{b^2}{\hbar^2} \Psi. \quad (1.46)$$

Fazendo

$$\beta \equiv \left( \frac{q\Phi}{2\pi\hbar} \right) \quad (1.47)$$

e

$$\varepsilon \equiv 2mE \frac{b^2}{\hbar^2} - \beta^2, \quad (1.48)$$

chegamos a

$$\frac{d^2 \Psi}{d\phi^2} - 2i\beta \frac{d\Psi}{d\phi} + \varepsilon \Psi = 0. \quad (1.49)$$

Vamos propor a solução do tipo onda plana:

$$\Psi = e^{i\lambda\phi}, \quad (1.50)$$

que nos fornece a equação característica

$$\lambda^2 - (2\beta)\lambda - \varepsilon = 0. \quad (1.51)$$

Assim,

$$\lambda = \beta \pm \sqrt{\beta^2 + \varepsilon} = \beta \pm \frac{b}{\hbar} \sqrt{2mE}. \quad (1.52)$$

A função de onda deve obedecer à condição de periodicidade:

$$\Psi(\phi) = \Psi(\phi + 2\pi).$$

Isto nos fornece

$$e^{i\lambda\phi} = e^{i\lambda(\phi+2\pi)}, \quad (1.53)$$

ou

$$\cos[\lambda(2\pi)] + i\operatorname{sen}[\lambda(2\pi)] = 1 \Rightarrow \lambda = n. \quad (1.54)$$

Então,

$$\beta \pm \frac{b}{\hbar} \sqrt{2mE} = n; \quad (1.55)$$

Isto nos leva a

$$E = \frac{1}{2m} \frac{\hbar^2}{b^2} \left( n - \frac{q\Phi}{2\pi\hbar} \right)^2. \quad (1.56)$$

Isto ilustra mais um aspecto signicativo do potencial vetor: um fluxo relacionado com a integral de linha de  $\vec{A}$  altera o espectro energético de uma partícula. Isto é um contraste com a ideia clássca, pois em tal contexto, nenhum efeito deveria ser notado, uma vez que não há campo magnético (e portanto força) fora do solenóide. Por fim, para fechar nossa discussão sobre o efeito Aharonov-Bohm, vale ressaltar que existem diversos experimentos análogos, a saber, efeito AB elétrico, efeito AB gravitacional, etc. Sobre estes assuntos recomendamos [20], [21],[22], [23]. Na próxima seção revisaremos tópicos referentes à rotação, incluindo um análogo do efeito AB, conhecido como efeito Aharonov-Carmi.

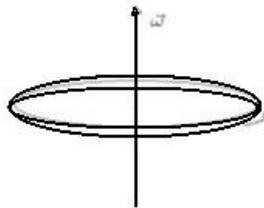
### 1.3 Rotação

Em referenciais não-inerciais, podem surgir situações interessantes devido à presença de forças experimentadas somente em tais referenciais. Tais forças são chamadas de forças de inércia [17]. Um exemplo de força inercial é a força sentida por um passageiro de um carro que faz uma curva, que tende a jogá-lo para fora. Tal força é percebida apenas por observadores no veículo (referencial não-inercial) e não é notada por um pedestre na calçada, por exemplo.

Esta força é chamada de força centrífuga. Estudar sistemas girantes pode ser interessante para se perceber a influência de tais forças, tanto do ponto de vista clássico, como também para sistemas quânticos. Do ponto de vista quântico, é possível incluir termos no hamiltoniano que nos dão informação acerca da inclusão de rotação, por exemplo. Assim, estudaremos uma maneira de incluir rotação na descrição de um sistema quântico de uma maneira similar à inclusão do campo magnético. Para isso, vamos discutir a seguir um efeito chamado de Aharonov-Carmi. Existem vários trabalhos mostrando uma semelhança entre campos magnéticos e rotação tais como [11],[12],[13],[14][15],[16].

### 1.3.1 Efeito Aharonov-Carmi

Na década de 1970, Aharonov e Carmi pensaram num análogo rotacional do efeito AB [18]. Nesta seção, revisaremos as ideias-chave discutidas por eles, seguindo a descrição dada em [19]. Eles imaginaram a seguinte situação: Um anel girante, com velocidade linear  $\vec{v}$  como mostra a figura abaixo:



Sobre o anel, uma partícula teste estará sujeita às forças centrífuga e de Coriolis:

$$\vec{F} = \vec{F}_{cen} + \vec{F}_{cor}; \quad (1.57)$$

$$\vec{F}_{cen} = -m\vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}); \quad (1.58)$$

$$\vec{F}_{cor} = 2m(\vec{v} \times \vec{\omega}). \quad (1.59)$$

Para obtermos o Hamiltoniano, vamos considerar  $\vec{\omega}$  como um campo constante, tal que

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\omega} = 0. \quad (1.60)$$

Assim, podemos dizer que

$$\vec{\omega} = \vec{\nabla} \times \vec{a}. \quad (1.61)$$

Dessa maneira, o campo  $\vec{\omega}$  e vetor  $\vec{a}$  são análogos ao campo magnético e ao potencial vetor para o caso de uma partícula sujeita à interação com um campo eletromagnético. Além disso, como a força centrífuga é conservativa, podemos escrevê-la em termos de um potencial escalar:

$$\vec{F}_{cor} = -m\vec{\nabla}V. \quad (1.62)$$

Deste modo, a força total pode ser escrita como

$$\vec{F} = m[-\vec{\nabla}V + 2\vec{v} \times (\vec{\nabla} \times \vec{a})] \quad (1.63)$$

É importante notarmos a semelhança desta equação com a equação 1.3. Deste modo, podemos verificar uma correspondência entre o potencial elétrico e o potencial centrífugo, e também entre o campo magnético e o campo de rotação, ambos escritos em termos de um potencial vetor.

Explicitamente, o hamiltoniano será

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - 2m\vec{a})^2 + mV \quad (1.64)$$

Para esta partícula, pode-se anular a força líquida, aplicando uma força de Lorentz adequada, que cancele as forças centrífuga e de Coriolis, tal que

$$\vec{F}_{\text{lorentz}} + \vec{F}_{\text{cent}} + \vec{F}_{\text{cor}} = 0; \quad (1.65)$$

Isto é feito com o intuito de estudarmos o problema com a presença somente de um fluxo, mas sem força atuante, tal qual o caso do efeito AB, onde existe fluxo magnético, mas não força.

Reescrevendo a expressão acima, temos

$$e\vec{E} + e/c(\vec{v} \times \vec{B}) - m\vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}) + 2m(\vec{v} \times \vec{\omega}) = 0. \quad (1.66)$$

Comentamos anteriormente sobre a semelhança entre os potenciais e campos. Claramente, isto deve valer para as respectivas forças. Assim, a força elétrica se assemelha com a força centrífuga, e a força magnética se assemelha à força de Coriolis. Assim, vamos considerar que estas forças se cancelam aos pares, isto é

$$\vec{F}_{\text{elet}} = -\vec{F}_{\text{cent}}; \quad \vec{F}_{\text{magn}} = -\vec{F}_{\text{cor}}. \quad (1.67)$$

Deste modo, encontramos que os campos aplicados devem ser

$$\vec{E} = m/e\vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}) \quad (1.68)$$

e

$$\vec{B} = -2mc/e\vec{\omega}. \quad (1.69)$$

Com isso, podemos estudar o problema de um anel girante na presença de um fluxo de rotação, numa analogia com o fluxo magnético do efeito AB.

Podemos mostrar que este fluxo  $\Phi$  é diferente de zero: Sabemos que

$$\Phi = \int \vec{a} \cdot d\vec{l}. \quad (1.70)$$

Usando o elemento de linha de coordenadas cilíndricas, temos

$$\int \vec{a} \cdot d\vec{l} = \int \left[ \left( \frac{\omega r}{2} \right) \vec{e}_\phi \right] \cdot \left[ \vec{e}_\rho d\rho + \vec{e}_\phi r d\phi + \vec{e}_z dz \right], \quad (1.71)$$

o que nos leva a

$$\int \vec{a} \cdot d\vec{l} = \int \frac{\omega r^2}{2} d\phi = \pi \omega r^2. \quad (1.72)$$

Portanto, fica clara a analogia entre os efeitos AC e AB. Entretanto, devemos ter em mente que ao estudarmos a dinâmica de um elétron num material girante, o mais correto seria dizer que estamos numa versão de estados ligados para o efeito Aharonov-Carmi, similar ao caso do efeito Aharonov-Bohm ligado. Vamos agora analisar o significado de  $\vec{a}$  no caso de um campo constante  $\vec{\omega}$ . Vamos calcular a quantidade  $\vec{\nabla} \times (\vec{\omega} \times \vec{r})$ .

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}) = \vec{\omega}(\vec{\nabla} \cdot \vec{r}) - \vec{r}(\vec{\nabla} \cdot \vec{\omega}) + (\vec{r} \cdot \vec{\nabla})\vec{\omega} - (\vec{\omega} \cdot \vec{\nabla})\vec{r}. \quad (1.73)$$

Vamos calcular cada termo desta equação. Para isto, vamos usar as seguintes expressões:

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_\rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \vec{e}_\phi \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z}; \quad (1.74)$$

$$\vec{r} = \rho \vec{e}_\rho + z \vec{e}_z, \quad (1.75)$$

e

$$\vec{\omega} = \omega \vec{e}_z. \quad (1.76)$$

O divergente de um vetor qualquer  $\vec{u} = (u_\rho, u_\phi, u_z)$  em coordenadas cilíndricas é

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho u_\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} u_\phi + \frac{\partial u_z}{\partial z}. \quad (1.77)$$

Assim,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{r} = 3 \Rightarrow \vec{\omega}(\vec{\nabla} \cdot \vec{r}) = 3\vec{\omega}. \quad (1.78)$$

Como  $\vec{\omega}$  é um campo constante,

$$\vec{r}(\vec{\nabla} \cdot \vec{\omega}) = (\vec{r} \cdot \vec{\nabla})\vec{\omega} = 0. \quad (1.79)$$

Finalmente,

$$(\vec{\omega} \cdot \vec{\nabla})\vec{r} = \vec{\omega}. \quad (1.80)$$

Deste modo, temos que

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}) = 2\vec{\omega}. \quad (1.81)$$

Se escolhermos  $\vec{a}$  tal que

$$2\vec{\omega} = \vec{\nabla} \times \vec{a}, \quad (1.82)$$

então

$$\vec{a} = \vec{\omega} \times \vec{r} = (\omega\rho)\vec{e}_\phi = v\vec{e}_\phi, \quad (1.83)$$

onde  $v$  é a velocidade linear de um ponto sobre o anel.

Dessa maneira, vimos que é possível inserir rotação num hamiltoniano a partir de um argumento de semelhança entre as forças devido às interações eletromagnéticas e as forças inerciais. Sabemos que é possível descrever um sistema em rotação a partir do uso de um sistema de coordenadas apropriado. Poderíamos escrever a equação de Schroedinger ou a equação de Dirac, por exemplo, para um sistema em que a coordenada azimutal varie com o tempo. No entanto, a abordagem sugerida por Aharonov-Carmi se mostra bastante interessante, sobretudo por conta da analogia com o bem conhecido efeito Aharonov-Bohm. No capítulo 4 usaremos estas ideias para a descrição do nosso problema em particular. A seguir, estudaremos um método utilizado em Física da Matéria Condensada para estudar propriedades de materiais.

## Método de ligação forte

Quando estudamos Mecânica Quântica, geralmente, estamos interessados na dinâmica de um elétron na presença de algum potencial. Estudamos também o caso do átomo de Hidrogênio, que possui apenas um elétron. No entanto, para sistemas investigados pela Física da Matéria Condensada, temos que analisar materiais compostos por um número muito grande de átomos ( e elétrons). Conseqüentemente, teremos que lidar com problemas de muitos corpos, que não possuem solução analítica. Para contornar esta dificuldade, são utilizados diversos métodos aproximativos, que, a partir de hipóteses de caráter fenomenológico, e devida comprovação experimental, são amplamente empregados na investigação das propriedades físicas de materiais. Estes métodos podem ser implementados computacionalmente, e em alguns casos, também permitem um estudo analítico. Para uma descrição detalhada dos diversos métodos empregados, recomendamos [24]. Nosso interesse em particular é o método das ligações fortes, conhecido também como *tight-binding*, que discutiremos neste capítulo.

### 2.1 Cristais e o Teorema de Bloch

Cristais podem ser entendidos como estruturas compostas por elementos arranjados de forma organizada, com uma periodicidade espacial. A figura abaixo ilustra uma rede cristalina bidimensional [25], [26].

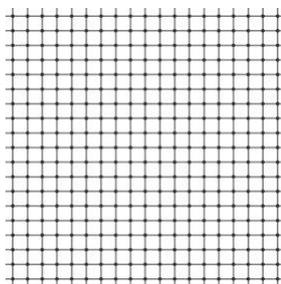


Figura 2.1: Esboço de uma rede bidimensional quadrada

Por conta desta periodicidade, geralmente no estudo de cristais, usamos a ideia de uma célula primitiva, que corresponde ao menor pedaço com o qual se pode reproduzir o sólido. Em tres dimensões, existem diversos arranjos possíveis. A figura abaixo mostra um arranjo de uma célula chamada de *BCC*, ou *Body Centered Cubic*, ou célula "cúbica de corpo centrado".

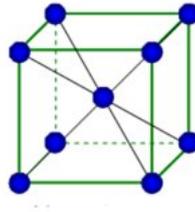


Figura 2.2: Célula unitária de uma rede tridimensional conhecida com BCC.

Agora, vamos analisar o que ocorre quando um elétron se move no interior de uma rede cristalina, formada por íons positivos, como mostra a figura a seguir. Por simplicidade, vamos considerar uma cadeia linear de átomos.



Figura 2.3: Representação de uma cadeia atômica linear.

Seja  $U(x)$  o potencial que atua sobre o elétron na posição  $x$ . Como existe uma simetria de translação,  $U(x+a) = U(x)$ . Ou seja, o potencial é periódico. Assim, a densidade de probabilidade em todos os sítios deve ser a mesma, isto é

$$\Psi^*(x+a)\Psi(x+a) = \Psi^*(x)\Psi(x). \quad (2.1)$$

Isto implica que

$$\Psi(\vec{r} + \vec{a}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}} \Psi(\vec{r}). \quad (2.2)$$

Ou seja, uma translação na rede resulta num ganho de um fator de fase global na função de onda. Assim, o valor de qualquer observável é invariante sob operações de translações discretas na rede, como era de se esperar por conta da periodicidade (simetria) da rede. Isto é conhecido como o Teorema de Bloch. A seguir, usando este resultado, estudaremos o método de ligação forte.

## 2.2 Método de ligação forte e relação de dispersão

O método de ligação forte faz uso da ideia de escrevermos um estado quântico qualquer como a combinação linear de vetores-base. Este método consiste em considerar que o estado de um elétron num cristal é escrito em termos dos orbitais atômicos que compõem o sólido. Como cada átomo isolado possui um estado bem definido, é razoável pensar que podemos usar

os estados dos sítios atômicos como uma base. Assim, vamos considerar apenas a interação do elétron com a rede, de modo que a interação elétron-elétron será desprezada. Como falamos anteriormente sobre o teorema de Bloch, sabemos que a periodicidade do cristal acarreta também uma periodicidade na função de onda do elétron. A seguir, usamos o texto [27] como guia. Deste modo, podemos escrever uma função de Bloch como

$$\Phi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \phi_j(\vec{r} - \vec{R}), \quad (2.3)$$

onde  $\vec{R}$  indica a posição do átomo,  $\phi_j$  a função de onda atômica no estado  $j$ , e  $r$  denota uma posição qualquer na rede. Esta função deve obedecer ao teorema de Bloch. Vamos verificar:

$$\begin{aligned} \Phi_j(\vec{k}, \vec{r} + \vec{a}) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \phi_j(\vec{r} + \vec{a} - \vec{R}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \phi_j\left(\vec{r} - (\vec{R} - \vec{a})\right) \\ &= e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R} - \vec{a}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{a})} \phi_j\left(\vec{r} - (\vec{R} - \vec{a})\right) \\ &= e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}} \Phi_j(\vec{k}, \vec{r}) \end{aligned} \quad (2.4)$$

Logo, a função respeita o teorema de Bloch. Agora, podemos escrever a função de onda no cristal, denotada por  $\Psi_j(\vec{k}, \vec{r})$  ( $j = 1, \dots, n$ ), onde  $n$  denota o número de funções-base (de Bloch). Assim,

$$\Psi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{j'=1}^n C_{jj'}(\vec{k}) \Phi_{j'}(\vec{k}, \vec{r}), \quad (2.5)$$

onde  $C_{jj'}(\vec{k})$  são os coeficientes da combinação linear. O  $j$ -ésimo autovalor de energia,  $E_j(\vec{k})$  é dado por

$$E_j(\vec{k}) = \frac{\langle \Psi_j | H | \Psi_j \rangle}{\langle \Psi_j | | \Psi_j \rangle} = \frac{\int \Psi_j^* H \Psi_j d\vec{r}}{\int \Psi_j^* \Psi_j d\vec{r}}. \quad (2.6)$$

A substituição de (2.5) nesta expressão nos fornece

$$E_i(\vec{k}) = \frac{\sum_{j,j'=1}^n C_{ij}^* C_{ij'} \langle \Phi_j | H | \Phi_{j'} \rangle}{\sum_{j,j'=1}^n C_{ij}^* C_{ij'} \langle \Phi_j | | \Phi_{j'} \rangle}, \quad (2.7)$$

onde trocamos o  $j \rightarrow i$ . Se fizermos

$$H_{jj'} = \langle \Phi_j | H | \Phi_{j'} \rangle, \quad S_{jj'} = \langle \Phi_j | | \Phi_{j'} \rangle \quad (j, j' = 1, \dots, n), \quad (2.8)$$

então

$$E_i(\vec{k}) = \frac{\sum_{j,j'=1}^n H_{jj'} C_{ij}^* C_{ij'}}{\sum_{j,j'=1}^n S_{jj'} C_{ij}^* C_{ij'}}. \quad (2.9)$$

O termo  $H_{jj'}$  é chamado de integral de transferência, ou *hopping*, e está relacionado à probabilidade de um elétron migrar para o sítio vizinho. Já o termo  $S_{jj'}$  é chamado de *overlap*, e diz respeito à sobreposição das funções de onda.

### 2.2.1 Minimização da energia

Sabemos que sistemas físicos tendem a buscar uma configuração de menor gasto energético, isto é, que minimize a energia em relação à algum parâmetro. Seguindo esta ideia, vamos exigir que  $E$  tenha um mínimo em relação à uma quantidade qualquer, tomando a derivada e igualando a zero.

$$\frac{\partial E_i(\vec{k})}{\partial C_{ij}^*} = \frac{\sum H_{jj'} C_{ij'}}{\sum S_{ij} C_{ij}^* C_{ij'}} + \sum H_{jj'} C_{ij}^* C_{ij'} \frac{\partial}{\partial C_{ij}^*} \left[ (\sum S_{ij'} C_{ij}^* C_{ij'})^{-1} \right] = 0; \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial E_i(\vec{k})}{\partial C_{ij}^*} = \frac{\sum H_{jj'} C_{ij'}}{\sum S_{ij} C_{ij}^* C_{ij'}} - \frac{H_{jj'} C_{ij}^* C_{ij'}}{(\sum S_{ij'} C_{ij}^* C_{ij'})^2} \sum S_{jj'} C_{ij'} = 0. \quad (2.11)$$

Vamos multiplicar esta expressão por  $\sum S_{jj'} C_{ij}^* C_{ij'}$ , para obtermos

$$\sum H_{jj'} C_{ij'} - \frac{(\sum H_{jj'} C_{ij}^* C_{ij'}) (\sum S_{ij'} C_{ij'})}{(\sum S_{ij'} C_{ij}^* C_{ij'})} = 0. \quad (2.12)$$

Lembrando a expressão para  $E_i(\vec{k})$ , temos

$$\sum H_{jj'} C_{ij'} - E_i(\vec{k}) (\sum S_{ij'} C_{ij'}) = 0, \quad (2.13)$$

ou

$$\sum_{j'=1}^N H_{jj'}(\vec{k}) C_{ij'} = E_i(\vec{k}) \sum_{j'=1}^N S_{ij'} C_{ij'} \quad (2.14)$$

Podemos definir um vetor coluna dado por

$$C_i \equiv \begin{pmatrix} C_{i1} \\ \vdots \\ C_{iN} \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Com isso, temos que

$$HC_i = E_i(\vec{k}) SC_i, \quad (2.16)$$

ou ainda

$$[H - E_i(\vec{k})S]C_i = 0. \quad (2.17)$$

Se esta matriz for inversível,

$$[H - E_i(\vec{k})S]^{-1}[H - E_i(\vec{k})S]C_i = 0 \Rightarrow \mathbb{1}C_i = 0. \quad (2.18)$$

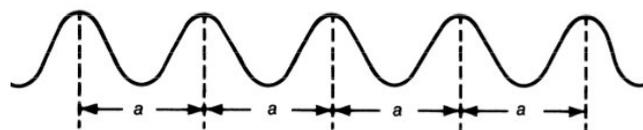
Assim, devemos exigir que a matriz seja não-inversível para que  $C_i$  seja diferente de zero. Para isto, a matrix deve satisfazer a condição

$$\det[H - E_i(\vec{k})S] = 0. \quad (2.19)$$

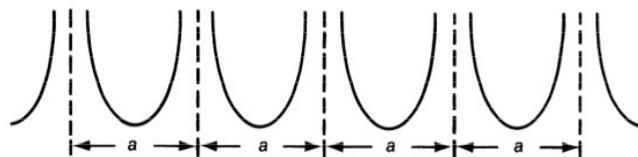
Esta expressão é uma equação de autovalores. Deste modo, vimos que a condição de minimização da energia em relação a algum parâmetro resulta numa equação de autovalores. Esta expressão nos fornece a relação de dispersão para a energia, isto é, nos diz a dependência de  $E$  com respeito a  $\vec{k}$ . Então, o objetivo do método de ligação-forte é montar esta equação de autovalores.

### 2.3 Abordagem alternativa

Agora, discutiremos o método numa linguagem um pouco diferente, em termos de autoestados da rede, revisando o exposto em [4]. Novamente, vamos considerar o movimento de um elétron numa cadeia linear de átomos. Vamos abordar dois casos interessantes, mostrados a seguir:



(a)



(b)

Figura 2.4: Dois casos de potencial periódico.

Em ambos os casos, o potencial é periódico:

$$V(x+a) = V(x). \quad (2.20)$$

Seja o operador de translação dado por  $T$ , tal que

$$T(a)|x\rangle = |x+a\rangle, \quad (2.21)$$

onde  $|x\rangle$  é um autoestado de posição. Como existe uma simetria no cristal, o hamiltoniano independe da posição. Assim, podemos dizer que

$$[H, T(a)] = 0. \quad (2.22)$$

Cada sítio na cadeia linear é caracterizado por um autoestado  $|n\rangle$ , onde

$$T(a)|n\rangle = |n+1\rangle. \quad (2.23)$$

Claramente,  $|n\rangle$  não é um autoestado do operador  $T(a)$ .

Agora, vamos olhar para os dois casos de potencial, Primeiro, vamos olhar para o caso onde existe uma barreira de potencial infinita entre dois sítios adjacentes, caso (b) da figura 2.4. Neste caso, a função de onda da partícula está completamente localizada num determinado sítio. Deste modo, para cada sítio, existe um autoestado de energia bem definido, tal que

$$H|n\rangle = E_0|n\rangle. \quad (2.24)$$

Assim,  $|n\rangle$  é autoestado de  $H$ , mas não é autoestado de  $T(a)$ . Então, vamos procurar um estado qualquer que seja autoestado simultâneo de  $H$  e  $T(a)$ . Vamos propor

$$|\theta\rangle \equiv \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta} |n\rangle \quad (2.25)$$

$H$  atuando em  $|\theta\rangle$  fornece:

$$H|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta} H|n\rangle = E_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta} |n\rangle; \quad (2.26)$$

ou ainda

$$H|\theta\rangle = E_0|\theta\rangle. \quad (2.27)$$

$T(a)$  atuando em  $|\theta\rangle$  fornece

$$\begin{aligned}
T(a) |\theta\rangle &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta} |n+1\rangle \\
&= \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i(n-1)\theta} |n\rangle \\
&= e^{-i\theta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta} |n\rangle = e^{-i\theta} |\theta\rangle .
\end{aligned}$$

Portanto,  $|\theta\rangle$  é autoestado de  $T$  e  $H$ .

Agora, vamos olhar para o caso (a), onde a barreira entre dois sítios adjacentes não é infinita. Neste caso, ainda valem as expressões que encontramos anteriormente. No entanto, há uma diferença crucial: dessa vez, a função de onda não está mais localizada, e então é possível um vazamento desta para sítios vizinhos. Desse modo, devem existir elementos não-diagonais no hamiltoniano. Os elementos diagonais de  $H$  continuam os mesmos, por conta da simetria, tal que

$$\langle n|H|n\rangle = E_0. \quad (2.28)$$

Para elementos fora da diagonal, vamos supor que apenas os vizinhos imediatos contribuem, de modo que

$$\langle n'|H|n\rangle \neq 0, \quad (2.29)$$

onde

$$n' = n \pm 1. \quad (2.30)$$

Vamos definir

$$\langle n'|H|n\rangle \equiv -\Delta \quad (2.31)$$

Assim,

$$H|n\rangle = E_0|n\rangle - \Delta|n+1\rangle - \Delta|n-1\rangle. \quad (2.32)$$

Podemos notar que  $|n\rangle$  não é mais um autoestado de  $H$ .

A equação (2.31) é a essência do método de ligação-forte: considerar elementos não-diagonais do hamiltoniano, para uma correção nos níveis de energia em relação ao caso onde temos um átomo isolado. Estes elementos não-diagonais estão relacionados com os termos de *hopping* e *overlap*, discutidos na seção anterior, e fornecem os termos necessários para o cálculo da equação de autovalores que nos fornece os autoestados de energia no sólido. Apesar desta

abordagem alternativa partir de uma linguagem diferente da que é apresentada em livros de estado sólido, podemos verificar uma equivalência entre ambas. Além disso, esta maneira alternativa nos mostra uma aplicação prática de algumas ferramentas básicas de Mecânica Quântica. Outro ponto interessante é olhar para o Teorema de Bloch a partir do estado  $|\theta\rangle$ , o que faremos a seguir.

### 2.3.1 Teorema de Bloch revisto

Sabemos que

$$\Psi(x) = \langle x | \alpha \rangle. \quad (2.33)$$

Vamos então olhar para a função de onda transladada,  $\Psi(x+a)$ .

Para isso, podemos considerar

$$\langle x | T(a) | \theta \rangle = \langle x | (T(a) | \theta \rangle) = (\langle x | T(a) \rangle | \theta \rangle). \quad (2.34)$$

Mas

$$\langle x | (T(a) | \theta \rangle) = e^{-i\theta} \langle x | \theta \rangle; \quad (\langle x | T(a) \rangle | \theta \rangle) = \langle x+a | \theta \rangle. \quad (2.35)$$

Assim,

$$e^{-i\theta} \langle x | \theta \rangle = \langle x+a | \theta \rangle, \quad (2.36)$$

ou

$$e^{i\theta} \Psi(x) = \Psi(x+a). \quad (2.37)$$

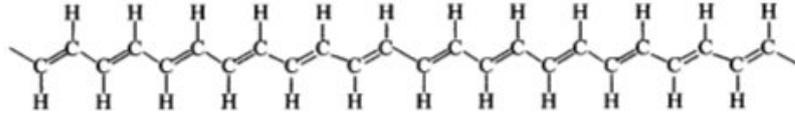
Fazendo  $\theta \equiv ka$ , temos

$$\Psi(x+a) = e^{ika} \Psi(x). \quad (2.38)$$

Com isso, fica claro o papel do parâmetro  $\theta$ : é o fator de fase adquirido pela função de onda depois de uma translação discreta.

## 2.4 Exemplo: Poliacetileno

O poliacetileno é um polímero orgânico formado por uma longa cadeia de átomos de carbono [28], ligados entre si e também ligados à átomos de hidrogênio, como mostra a figura abaixo.



Para usarmos o método de ligação forte, vamos olhar para um átomo e seus dois vizinhos mais próximos. Essencialmente, o poliacetileno é uma cadeia linear, e portanto, unidimensional. A distância entre um átomo de carbono e seus dois vizinhos imediatos na horizontal é  $d = \pm a$ . Montaremos o hamiltoniano. Os termos diagonais correspondem à energia do átomo isolado, que denotaremos por  $E_0$ .

Para os termos fora da diagonal, vamos calcular o termo de *hopping*.

$$H_{ij} = e^{ika} \langle \phi_i(0) | H | \phi_j(-a) \rangle + e^{-ika} \langle \phi_i(0) | H | \phi_j(+a) \rangle; \quad (2.39)$$

Por simplicidade, vamos definir que

$$t \equiv \langle \phi_i(r-R) | H | \phi_j(r-R \pm a) \rangle. \quad (2.40)$$

Podemos fazer isto por conta da simetria da rede: a probabilidade de "salto" de um elétron é a mesma, não dependendo do ponto de partida e chegada, mas apenas da distância entre os sítios.

Desse modo, podemos escrever que

$$H_{ij} = t f(\vec{k}), \quad (2.41)$$

onde

$$f(\vec{k}) = \sum_d e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}}, \quad (2.42)$$

onde  $d$  é a distância entre o átomo considerado como origem e seus vizinhos. Estas definições serão úteis também em outros casos. Aplicando-as ao poliacetileno, temos que

$$H_{12} = t f(k) = t(e^{ika} + e^{-ika}); \quad (2.43)$$

$$H_{21} = t f^*(k) = t f(k) = H_{12}. \quad (2.44)$$

$$H = \begin{pmatrix} E - E_0 & t f(k) \\ t f(k) & E - E_0 \end{pmatrix}. \quad (2.45)$$

Calculando o determinante e igualando a zero, temos

$$(E - E_0)^2 - t^2 [f(k)]^2 = 0 \Rightarrow E = E_0 \pm 2t \cos(ka). \quad (2.46)$$

Com isso, encerramos nosso capítulo sobre o método de ligação forte. Como podemos ver, tal método, da maneira que foi apresentado, é relativamente simples e pode ser uma ferramenta muito útil para a determinação da relação de dispersão de um material. Vale ressaltar que abordamos este tema de maneira simplificada, considerando apenas os vizinhos mais próximos. No entanto, podem ser acrescentados mais termos ao hamiltoniano, de acordo com o problema que se deseja trabalhar. No próximo capítulo, usaremos o método de ligação-forte no estudo do grafeno.

## Grafeno e nanotubos

Materiais bidimensionais são particularmente interessantes para o estudo de diversas propriedades físicas. Devido à baixa dimensionalidade, efeitos interessantes podem ocorrer. Um exemplo conhecido disto é o *Efeito Hall quântico*. Assim, materiais bidimensionais possuem um tipo de resposta a campos magnéticos que propicia à investigação de vários aspectos de uma amostra, tais como densidade de estados, propriedades de transporte e caracterização de materiais. Exemplos de materiais bidimensionais bem conhecidos e atualmente muito explorados são os materiais de carbono, que possuem um amplo leque de aplicações e uma Física bastante rica também do ponto de vista teórico. O grafeno, por exemplo, já era estudado de um ponto de vista puramente teórico desde a década de 50 do século passado. Neste capítulo iremos abordar alguns tópicos relacionados à matérias de Carbono, a saber, o grafeno e os nanotubos. Vamos fazer uma revisão focados sobretudo nas propriedades eletrônicas destes materiais, o que terá bastante utilidade no próximo capítulo.

### 3.1 Grafeno

O grafeno consiste numa única camada de átomos de carbono, arranjados de forma hexagonal [29], [31]. A figura abaixo [30] ilustra uma folha de Grafeno.

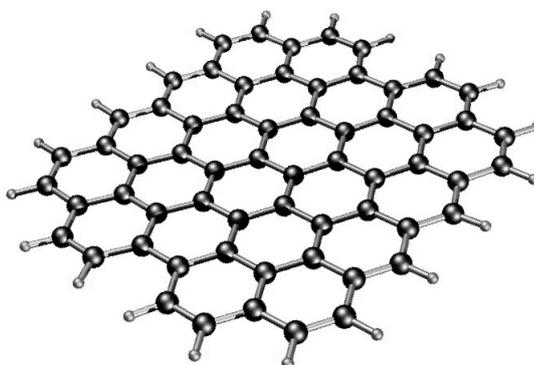


Figura 3.1: Folha de grafeno

Como já comentamos, o Grafeno era estudado há bastante tempo de um ponto de vista teórico. Em tais artigos, o o que hoje chamamos de grafeno era conhecido como grafite bidi-

mensional, refletindo o fato de que o grafeno pode ser visto como uma única camada de grafite. De fato, através de um processo conhecido como clivagem mecânica, é possível obter o grafeno a partir do grafite. Isto foi feito pela primeira vez em 2004 por Novoselov e Geim, e lhes rendeu o o prêmio Nobel de Física no ano de 2010.

No que diz respeito às ligações químicas, sabemos que o carbono deve fazer 4 ligações. No plano do grafeno, os átomos formam ligações do tipo  $\sigma$ , que formam ângulos de 120 graus entre si. Isto fornece o arranjo hexagonal da folha, e também hibridização  $sp^2$ .

Perpendicularmente ao plano, estão as ligações  $\pi$  (orbital  $2p_z$ ). Tais elétrons estão ligados de maneira mais fraca ao átomo, de modo que podem se mover ao longo da rede, bem como serem excitados. Assim, estes elétrons são os que mais contribuem para as propriedades de transporte do grafeno. É importante também notarmos que o grafeno é composto por duas subredes atômicas, denotadas por  $A$  e  $B$ . Abaixo, ilustramos isto numa figura, onde também aparecem os vetores-base correspondentes às duas subredes.

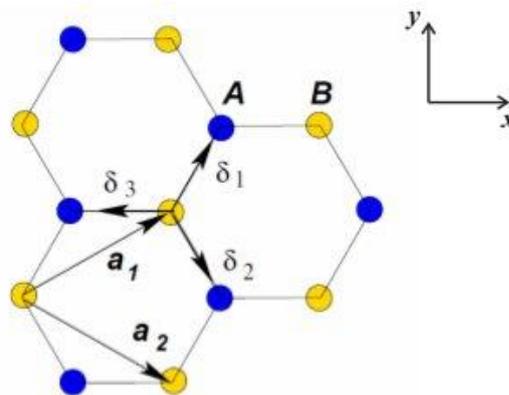


Figura 3.2: Subredes e vetores-base

Nesta figura,  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$  são vetores que usam a subrede  $B$  como base, enquanto  $\vec{\delta}_1$ ,  $\vec{\delta}_2$  e  $\vec{\delta}_3$  se referem à subrede  $A$ . Sabendo que cada ângulo interno de um hexágono vale 120 graus, podemos traçar retas ao longo dos eixos vertical e horizontal, para escrevermos explicitamente os vetores-base em termos das coordenadas cartesianas. Se considerarmos que os vetores  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$  da figura estão saindo da origem do sistema de coordenadas  $(x, y)$ , então com um pouco de geometria, somos capazes de obter que

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 1); \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, -1), \quad (3.1)$$

e

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

Nestas expressões,

$$a = |\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = d_{c-c} \sqrt{3} \quad (3.3)$$

é a constante da rede e vale  $2,46 \cdot 10^{-10} m$ . A quantidade  $d_{c-c}$  é a distância entre um átomo de carbono e seu vizinho imediato, e tem o valor de  $1,42 \cdot 10^{-10} m$ .

### 3.2 Relação de dispersão do grafeno

Podemos utilizar o método de ligação forte para encontrarmos a relação de dispersão no grafeno. A seguir, fazemos este cálculo, primeiramente usando a subrede A e depois a subrede B. Em ambos os casos, vamos usar as expressões para o termo de *hopping* e *overlap* vistas no capítulo anterior, para escrever que

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon_{2p} & tf(k) \\ tf^*(k) & \varepsilon_{2p} \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

$$S = \begin{pmatrix} 1 & sf(k) \\ sf^*(k) & 1 \end{pmatrix}; \quad (3.5)$$

para resolver a equação

$$\det(H - ES) = 0. \quad (3.6)$$

De maneira genérica, a solução desta equação será

$$E = \frac{\varepsilon_{2p} \pm tw(\vec{k})}{1 \pm sw(\vec{k})}, \quad (3.7)$$

onde

$$w(\vec{k}) \equiv \sqrt{|f(\vec{k})|^2}. \quad (3.8)$$

A seguir, calculamos  $w(\vec{k})$  usando as duas subredes.

### 3.2.1 Subrede A

Usando a subrede A como base,

$$f(\vec{k}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_2} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_3}, \quad (3.9)$$

tal que

$$f(\vec{k})f^*(\vec{k}) = 3 + (e^{ik_y d\sqrt{3}} + e^{-ik_y d\sqrt{3}}) + (e^{i3k_x d/2} + e^{-i3k_x d/2})(e^{ik_y\sqrt{3}d/2} + e^{-ik_y\sqrt{3}d/2}); \quad (3.10)$$

ou

$$f(\vec{k})f^*(\vec{k}) = 3 + 2\cos\left(k_y d\sqrt{3}\right) + 4\cos\left(\frac{3k_x d}{2}\right)\cos\left(\frac{k_y\sqrt{3}d}{2}\right); \quad (3.11)$$

Mas

$$d \equiv d_{c-c} = \frac{a}{\sqrt{3}}. \quad (3.12)$$

Assim,

$$f(\vec{k})f^*(\vec{k}) = 3 + 2\cos(k_y a) + 4\cos(k_x a\sqrt{3}/2)\cos(k_y a/2). \quad (3.13)$$

Podemos ainda escrever esta expressão de uma maneira diferente. Sabemos que  $\cos(A+B) = \cos A \cos B - \sin A \sin B$ , de modo que

$$\cos(k_y a) = \cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{k_y a}{2}\right) \quad (3.14)$$

Usando a relação  $\sin^2 x + \cos^2 x = 1$ , temos

$$\cos(k_y a/2) = 2\cos^2(k_y a/2) - 1; \quad (3.15)$$

Assim,

$$f(\vec{k})f^*(\vec{k}) = 1 + 4\cos\left(\frac{k_x a\sqrt{3}}{2}\right)\cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4\cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right). \quad (3.16)$$

Com isso, temos uma expressão explícita para  $E$ . A seguir, esboçamos um gráfico da relação de dispersão.

### 3.2.2 Subrede B

Usando a subrede B como base,

$$f(\vec{k}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} + 1, \quad (3.17)$$

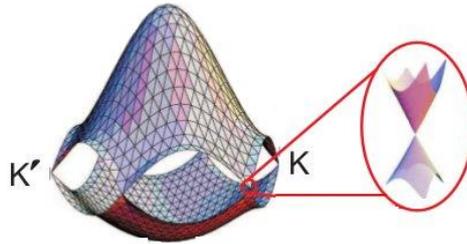


Figura 3.3: Relação de dispersão do grafeno. A energia está em função de  $\vec{k} = (k_x, k_y)$ .

e teremos

$$f(\vec{k})f^*(\vec{k}) = [1 + e^{i\vec{k} \cdot (\vec{a}_1 - \vec{a}_2)} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{i\vec{k} \cdot (\vec{a}_2 - \vec{a}_1)} + 1 + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} + 1] \quad (3.18)$$

Mas

$$\vec{k} \cdot \vec{a}_1 = \frac{k_x a \sqrt{3}}{2} + \frac{k_y a}{2}; \quad \vec{k} \cdot \vec{a}_2 = \frac{k_x a \sqrt{3}}{2} - \frac{k_y a}{2}; \quad \vec{k} \cdot (\vec{a}_1 - \vec{a}_2) = k_y a. \quad (3.19)$$

Então

$$f(\vec{k})f^*(\vec{k}) = 3 + (e^{ik_y a} + e^{-ik_y a}) + (e^{ik_x a \sqrt{3}/2} + e^{-ik_x a \sqrt{3}/2})(e^{ik_y a/2} + e^{-ik_y a/2}); \quad (3.20)$$

ou

$$f(\vec{k})f^*(\vec{k}) = 3 + 2\cos(k_y a) + 4\cos(k_x a \sqrt{3}/2)\cos(k_y a/2) \quad (3.21)$$

Desta maneira, podemos ver que de fato ambas as subredes podem ser usadas para o cálculo da relação de dispersão, e fornecem o mesmo resultado. isto pode ser visto comparando-se (3.21) e (3.13)

### 3.3 Expansão para $k$ pequeno

Nesta seção, vamos olhar para a relação de dispersão próximo aos pontos  $K$  e  $K'$ . Estes pontos conectam as bandas de valência e condução e nos permitem estudar a relação nas proximidades do nível de Fermi. Vamos fazer uma expansão em torno destes pontos para mostrar que em tais regiões, a relação de dispersão é linear. Isto é mostrado no *zoom* da figura 3.5. Vamos calcular  $f(\vec{k} - \delta\vec{k})$ .

$$f(\vec{k} - \delta\vec{k}) = 1 + e^{-i(\vec{k} - \delta\vec{k}) \cdot \vec{a}_1} + e^{-i(\vec{k} - \delta\vec{k}) \cdot \vec{a}_2}; \quad (3.22)$$

$$f(\vec{k} - \delta\vec{k}) = 1 + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} e^{i\delta\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} e^{i\delta\vec{k} \cdot \vec{a}_2}; \quad (3.23)$$

$$\vec{k} \cdot \vec{a}_1 = \pi/3; \quad \vec{k} \cdot \vec{a}_2 = -\pi/3. \quad (3.24)$$

Usando a relação  $e^{\pm i\theta} = \cos(\theta) \pm i\sin(\theta)$ , temos que

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} = \frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2}; \quad e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} = \frac{1}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2}. \quad (3.25)$$

Assim,

$$f(\vec{k} - \vec{\delta k}) = 1 + \left( \frac{-1}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \left( 1 + \vec{\delta k} \cdot \vec{a}_1 \right) + \left( \frac{-1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \left( 1 + \vec{\delta k} \cdot \vec{a}_2 \right); \quad (3.26)$$

$$f(\vec{k} - \vec{\delta k}) = -\frac{1}{2}\vec{\delta k} \cdot (\vec{a}_1 + \vec{a}_2) + i\frac{\sqrt{3}}{2}\vec{\delta k} \cdot (\vec{a}_2 - \vec{a}_1). \quad (3.27)$$

Mas

$$\vec{a}_1 + \vec{a}_2 = a\sqrt{3}\vec{i}; \quad \vec{a}_2 - \vec{a}_1 = -a\vec{j}. \quad (3.28)$$

Então, fazendo  $\vec{\delta k} \cdot \vec{i} = \delta k_x$  e  $\vec{\delta k} \cdot \vec{j} = \delta k_y$ , temos

$$f(\vec{k} - \vec{\delta k}) = -\frac{1}{2}a\sqrt{3}(\delta k_x + i\delta k_y) \quad (3.29)$$

lembrando do hamiltoniano do método *tight-binding* para um sistema bidimensional, temos que

$$H(\vec{k} - \vec{\delta k}) = \begin{pmatrix} 0 & t f(\vec{k} - \vec{\delta k}) \\ t f^*(\vec{k} - \vec{\delta k}) & 0 \end{pmatrix}; \quad (3.30)$$

chegamos a

$$H(\vec{k} - \vec{\delta k}) = -v_F \left[ \begin{pmatrix} 0 & \hbar\delta k_x \\ \hbar\delta k_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & i\hbar\delta k_y \\ -i\hbar\delta k_y & 0 \end{pmatrix} \right], \quad (3.31)$$

onde

$$v_F \equiv \frac{\sqrt{3}at}{2\hbar} \quad (3.32)$$

é a velocidade de Fermi.

Podemos ainda escrever

$$H(\vec{k} - \vec{\delta k}) = -v_F [\hbar\delta k_x \sigma_x + \hbar\delta k_y \sigma_y] \quad (3.33)$$

ou, de forma mais compacta,

$$H(\vec{k} - \vec{\delta k}) = -v_F (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}). \quad (3.34)$$

Portanto, vemos que para  $k$  pequeno, o hamiltoniano pode ser escrito como um hamiltoniano de Dirac. Isto é, nesta aproximação os portadores de carga podem ser descritos por uma equação de Dirac efetiva para férmions sem massa [33]. Existem diversos artigos que usam este fato para estudar propriedades eletrônicas do grafeno na presença de campos magnéticos, defeitos topológicos, etc, devido à conveniência de que a inclusão destes entes via equação de Dirac pode se tornar mais simples do que por métodos mais convencionais. Mesmo consistindo de uma aproximação, tal abordagem pode fornecer pistas acerca de diversos fenômenos no grafeno. Usaremos isto no próximo capítulo para estudar nanotubos. A seguir, esboçamos a relação de dispersão na região próxima ao nível de Fermi.

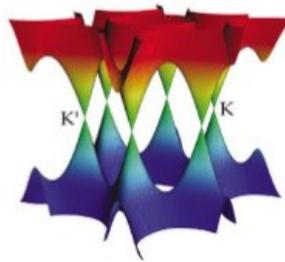


Figura 3.4: Energia em função de  $k_x, k_y$  nas proximidades dos pontos  $K$  e  $K'$

Os pontos  $K$  e  $K'$  são chamados de pontos de Dirac, e são os pontos que conectam as bandas de condução e valência.

Ainda sobre a analogia dos portadores de carga no grafeno com férmions de Dirac, vale dizer que este material apresenta uma banda de valência cheia e uma banda de condução vazia. Quando um elétron migra para a banda de condução, deixa um "buraco" na banda de valência. Este se comporta como uma carga positiva. Como a equação de Dirac descreve elétrons e pósitrons, a equação de Dirac efetiva descreverá elétrons e buracos. Quanto ao grau de liberdade do spin na equação de Dirac, este agora é representado pelo fato de o elétron poder estar em uma das duas subredes,  $A$  ou  $B$ .

### 3.4 Níveis de Landau no grafeno

Nesta seção, vamos estudar o grafeno na presença de um campo magnético perpendicular ao plano. Vamos partir de uma equação de Dirac efetiva para férmions sem massa, que descreve o comportamento dos portadores de carga próximo aos pontos de Dirac. Tal problema é abordado em [34]. No entanto, usaremos definições diferentes de alguns operadores, sem alterar o resultado final.

$$v_F [\vec{\sigma} \cdot \vec{p}] \Psi(x, y) = E \Psi(x, y) \quad (3.35)$$

Utilizaremos um acoplamento mínimo, tal que

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}; \quad \vec{A} = B(-y, 0). \quad (3.36)$$

Assim,

$$v_F[\sigma_x(p_x - Bey/c) + \sigma_y p_y]\Psi = E\Psi; \quad (3.37)$$

Ou ainda

$$v_F[\sigma_x(-i\hbar\partial_x - Bey/c) + \sigma_y(-i\hbar\partial_y)]\Psi = E\Psi. \quad (3.38)$$

Como a equação não depende explicitamente de  $x$ , vamos propor a solução

$$\Psi(x, y) = e^{i\kappa x}\phi(y). \quad (3.39)$$

Assim,

$$v_F[\sigma_x(-i\hbar(i\kappa) - Bey/c) + \sigma_y(-i\hbar\partial_y)]\phi(y) = E\phi(y). \quad (3.40)$$

$$v_F \left[ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} (\hbar\kappa - Bey/c) + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} (-\hbar\partial_y) \right] \phi(y) = E\phi(y); \quad (3.41)$$

Faremos uma mudança de variável, tal que

$$\xi = \frac{y}{\ell_B} - \ell_B\kappa; \quad \ell_B = \left( \frac{\hbar c}{eB} \right)^{1/2}; \quad (3.42)$$

$\xi$  é uma variável adimensional, e  $\ell_B$  é o comprimento magnético.

Então,

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \xi} = \frac{1}{\ell_B} \frac{\partial}{\partial \xi}. \quad (3.43)$$

Assim,

$$\begin{aligned} \kappa - \frac{Be}{\hbar c}y + \hbar\partial_y &= \kappa - \frac{1}{\ell_B^2}y + \hbar\frac{\partial}{\partial y} \\ &= \kappa - \frac{1}{\ell_B^2}(\ell_B\xi + \ell_B^2\kappa) + \frac{\hbar}{\ell_B}\frac{\partial}{\partial \xi} \\ &= \kappa - \frac{1}{\ell_B}\xi - \kappa + \frac{\hbar}{\ell_B}\frac{\partial}{\partial \xi} \\ &= -\frac{1}{\ell_B}\xi + \frac{\hbar}{\ell_B}\frac{\partial}{\partial \xi}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Deste modo, o hamiltoniano pode ser escrito como

$$-(v_F\hbar/\ell_B) \begin{pmatrix} 0 & \xi + \hbar\partial_\xi \\ \xi - \hbar\partial_\xi & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}. \quad (3.45)$$

Isto nos leva ao seguinte sistema de equações:

$$-\frac{v_F \hbar}{\ell_B} (\xi + \hbar \frac{\partial}{\partial \xi}) \phi_2 = E \phi_1, \quad (3.46)$$

$$-\frac{v_F \hbar}{\ell_B} (\xi - \hbar \frac{\partial}{\partial \xi}) \phi_1 = E \phi_2. \quad (3.47)$$

Resolvendo para  $\phi_1$ , temos

$$\left( \frac{v_F \hbar}{\ell_B} \right)^2 \left[ (\xi + \hbar \partial_\xi)(\xi - \hbar \partial_\xi) \right] \phi_1 = E^2 \phi_1; \quad (3.48)$$

$$\left( \frac{v_F \hbar}{\ell_B} \right)^2 [\xi^2 - \hbar^2] \phi_1 = E^2 \phi_1 \quad (3.49)$$

Podemos reescrever da seguinte maneira:

$$\left[ \left( \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\xi} \right)^2 + \xi^2 \right] \phi_1 = E^2 \left( \frac{\ell_B}{v_F \hbar} \right)^2 \phi_1. \quad (3.50)$$

Podemos mapear este problema no caso do oscilador harmônico. Vamos definir os seguintes operadores:

$$a_\pm \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\xi} \pm i\xi \quad (3.51)$$

Assim,

$$a_+ a_- = \left( \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\xi} + i\xi \right) \left( \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\xi} - i\xi \right) = \left( \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\xi} \right)^2 + \xi^2. \quad (3.52)$$

Como no caso do oscilador, temos o operador número dado por  $N \equiv a_+ a_-$ .

Assim,

$$N \phi_1 = E^2 \left( \frac{\ell_B}{v_F \hbar} \right)^2 \phi_1. \quad (3.53)$$

Mas  $\omega_c \equiv \frac{v_F}{\ell_B}$ . Finalmente,

$$E = \pm \hbar \omega_c \sqrt{N}. \quad (3.54)$$

### 3.5 Nanotubos de Carbono

Nanotubos de Carbono foram sintetizados pela primeira vez em 1991, por Ijima [32]. Inicialmente, foram obtidos nanotubos de paredes duplas. Dois anos mais tarde, foram sintetizados

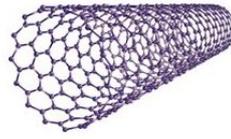


Figura 3.5: Representação de um nanotubo de carbono

nanotubos de paredes simples. Desde então, nanotubos tem chamado a atenção pelas propriedades eletrônicas, de transporte, etc. Tais materiais possuem flexibilidade, mas não quebram sob a ação de deformações mecânicas. A figura abaixo ilustra um nanotubo.

De um ponto de vista teórico, podemos imaginar a confecção de um nanotubo de Carbono a partir de uma folha de grafeno. Existem diversas maneiras de se enrolar uma folha de grafeno para formar um nanotubo. Abaixo, ilustramos uma folha com os vetores da rede que são utilizados para a classificação dos nanotubos.

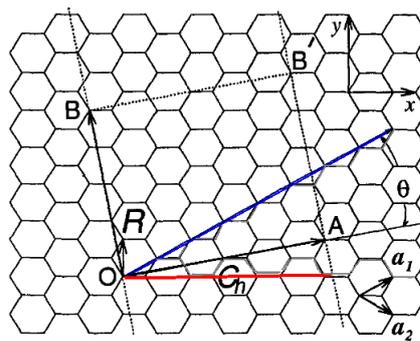


Figura 3.6: Folha de grafeno e possíveis cortes para a formação de um nanotubo

Um nanotubo pode ser construído juntando os pontos  $O$  e  $A$  e também  $B$  e  $B'$  da folha. Por conta da nova simetria na rede, isto é, após o grafeno ser enrolado para formar um nanotubo, é conveniente introduzirmos algumas quantidades úteis para localizar um ponto na rede e também para classificar os nanotubos.

O vetor quiral é definido como

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \equiv (n, m). \quad (3.55)$$

O diâmetro do nanotubo é dado por

$$d_t = \frac{L}{\pi}, \quad (3.56)$$

onde  $L = |\vec{C}_h|$  é o comprimento da circunferência do nanotubo.

Podemos calcular o valor de  $L$  a partir da relação

$$|\vec{C}_h| = \sqrt{\vec{C}_h \cdot \vec{C}_h}. \quad (3.57)$$

Mas

$$\vec{C}_h \cdot \vec{C}_h = n^2 \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_1 + m^2 \vec{a}_2 \cdot \vec{a}_2 + 2nm \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2. \quad (3.58)$$

Usando o fato de que

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_1 = \vec{a}_2 \cdot \vec{a}_2 = a^2; \quad \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 = \frac{a^2}{2}, \quad (3.59)$$

Temos

$$\vec{C}_h \cdot \vec{C}_h = a^2(n^2 + m^2 + nm). \quad (3.60)$$

Portanto,

$$L = a\sqrt{n^2 + m^2 + nm}. \quad (3.61)$$

Deste modo, o par  $(n, m)$  pode ser usado para caracterizar um nanotubo no que diz respeito ao seu diâmetro.

Quanto ao ângulo  $\theta$ , é chamado de quiral e é o ângulo entre os vetores  $\vec{C}_h$  e  $\vec{a}_1$ . Existem 3 maneiras básicas de se cortar uma folha de grafeno, de acordo com o valor do ângulo quiral. São elas:

- Para  $\theta = 0$ , o vetor quiral é paralelo ao vetor  $\vec{a}_1$ . Com este corte, é obtido um nanotubo do tipo *zig-zag*, por conta do formato da borda. Para este nanotubo,  $\vec{C}_h = (n, 0)$ .
- Quando  $\theta = 30$ , o corte é feito paralelamente ao eixo x. Esta situação é representada pelo vetor paralelo ao eixo x. Para este caso, temos um nanotubo do tipo *armchair*, e  $\vec{C}_h = (n, n)$ .
- Para uma situação intermediária, não há mais uma simetria. Neste caso, o nanotubo é do tipo *quiral*.

Voltando à questão da classificação dos nanotubos, nas figuras a seguir, mostramos exemplos de nanotubos do tipo *zig-zag*, *armchair* e quiral, respectivamente.

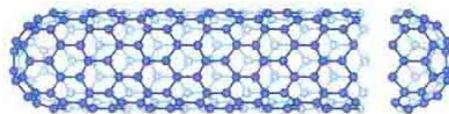


Figura 3.7: nanotubo zig-zag do tipo (9,0)

Com isso, encerramos nosso capítulo sobre grafeno e nanotubos de Carbono. Vale ressaltar que existe uma vasta literatura sobre este assunto. Quanto à classificação dos nanotubos,

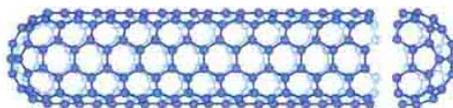


Figura 3.8: nanotubo armchair (5,5)

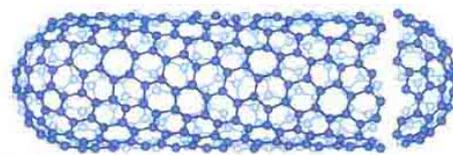


Figura 3.9: nanotubo quiral (10,9)

existem diversos parâmetros e simetrias que não foram discutidas aqui, mas que podem ser encontradas em [27]. A seguir, vamos estudar o comportamento dos portadores de carga em um nanotubo nos pontos próximos aos pontos de Dirac.

## Resultados

### 4.1 Nanotubos de Carbono na presença de campo magnético

Em 2002, Král e Sadeghpour[35] estudaram a rotação de nanotubos. Posteriormente, em 2005, Shen[36] estudou o efeito Aharonov-Carmi para o fulereno. Motivados por tais trabalhos, nos propomos a estudar o problema para um nanotubo que gira e está sujeito à um campo magnético. Vamos considerar um campo  $\vec{B}$  paralelo ao eixo do tubo.

Como já vimos no capítulo anterior, sabemos que próximo aos pontos de Dirac do Grafeno, podemos usar um hamiltoniano de Dirac efetivo para férmions sem massa. Motivados por este fato, e também por podermos considerar um nanotubo como um Grafeno enrolado, novamente vamos usar uma equação de Dirac efetiva, mas desta vez em coordenadas cilíndricas. Nosso interesse será investigar a influencia do campo magnético e da rotação no espectro energético de Nanotubos de Carbono.

O hamiltoniano de Dirac em coordenadas cilíndricas pode ser escrito como:

$$H_D = -i\hbar v_f (\sigma_z \partial_z + \sigma_y \partial_\phi / R).$$

Podemos considerar também um termo de acoplamento spin-rotação, dado por

$$H_{SR} = \vec{S} \cdot \vec{\omega} \quad (4.1)$$

Então,

$$H = \begin{bmatrix} -i\hbar v_z \partial_z + \frac{\hbar\omega}{2} & -i \left( -\frac{i\hbar\partial_\phi}{R} - \frac{e\Phi}{2\pi R} - 2m\omega R \right) \\ i \left( -\frac{i\hbar\partial_\phi}{R} - \frac{e\Phi}{2\pi R} - 2m\omega R \right) & i\hbar v_z \partial_z - \frac{\hbar\omega}{2} \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

Vamos resolver  $H\Psi = E\Psi$ , com

$$\Psi = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

Isto nos leva a

$$\begin{cases} [-i\hbar v_z \partial_z + \frac{\hbar\omega}{2}] u - iv_\phi \left[ -\frac{i\hbar\partial_\phi}{R} - \frac{e\Phi}{2\pi R} - 2m\omega R \right] v = Eu \\ iv_\phi \left[ -\frac{i\hbar\partial_\phi}{R} - \frac{e\Phi}{2\pi R} - 2m\omega R \right] u + [-i\hbar v_z (ik) - \frac{\hbar\omega}{2}] v = Ev \end{cases}$$

Vamos fazer

$$u = e^{ikz} \tilde{u} \text{ e } v = e^{ikz} \tilde{v}. \quad (4.4)$$

Com isso,

$$\begin{cases} [-i\hbar v_z (ik) + \frac{\hbar\omega}{2}] \tilde{u} - iv_\phi \left[ -\frac{i\hbar\partial_\phi}{R} - \frac{e\Phi}{2\pi R} - 2m\omega R \right] \tilde{v} = E\tilde{u} \\ iv_\phi \left[ \frac{i\hbar\partial_\phi}{R} - \frac{e\Phi}{2\pi R} - 2\omega R \right] \tilde{u} + [i\hbar(ik) - \frac{\hbar\omega}{2}] \tilde{v} = E\tilde{v} \end{cases}$$

Ou ainda

$$\begin{cases} [\hbar v_z k + \frac{\hbar\omega}{2} - E] \tilde{u} = iv_\phi \left[ -\frac{i\hbar\partial_\phi}{R} - \frac{e\Phi}{2\pi R} - 2m\omega R \right] \tilde{v} \\ [-\hbar v_z k - \frac{\hbar\omega}{2} - E] \tilde{v} = -iv_\phi \left[ \frac{i\hbar\partial_\phi}{R} - \frac{e\Phi}{2\pi R} - 2\omega R \right] \tilde{u} \end{cases} \quad (4.5)$$

Da segunda equação, podemos isolar  $\tilde{v}$ , de modo que

$$\tilde{v} = \frac{-iv_\phi \left[ \frac{i\hbar\partial_\phi}{R} - \frac{e\Phi}{2\pi R} - 2\omega R \right] \tilde{u}}{[-\hbar v_z k - \frac{\hbar\omega}{2} - E]} \quad (4.6)$$

Substituindo na primeira equação,

$$- \left[ \left( \hbar v_z k + \frac{\hbar\omega}{2} \right) - E \right] \left[ \left( \hbar v_z k + \frac{\hbar\omega}{2} \right) + E \right] \tilde{u} = v_\phi^2 \left[ \frac{i\hbar\partial_\phi}{R} - \frac{e\Phi}{2\pi R} - 2\omega R \right]^2 \tilde{u} \quad (4.7)$$

Ou

$$- \left[ \left( \hbar v_z k + \frac{\hbar\omega}{2} \right)^2 - E^2 \right] \tilde{u} - v_\phi^2 \left[ \frac{e\Phi}{2\pi R} - 2m\omega R \right]^2 \tilde{u} = v_\phi^2 \left[ \frac{\hbar^2 \partial_\phi^2}{R^2} - 2 \left( \frac{e\Phi}{2\pi R} + 2m\omega R \right) \left( \frac{i\hbar\partial_\phi}{R} \right) \right] \tilde{u} \quad (4.8)$$

$$- \frac{R^2}{\hbar^2 v_\phi^2} \left[ E^2 - \left( \hbar v_z k + \frac{\hbar\omega}{2} \right)^2 - v_\phi^2 \left( \frac{e\Phi}{2\pi R} + 2m\omega R \right)^2 \right] \tilde{u} = \left[ \partial_\phi^2 + 2 \frac{R}{\hbar} \left( \frac{e\Phi}{2\pi R} + 2m\omega R \right) i\partial_\phi \right] \tilde{u} \quad (4.9)$$

Podemos ainda escrever

$$\partial_\phi^2 \tilde{u} + 2if\partial_\phi \tilde{u} + g\tilde{u} = 0, \quad (4.10)$$

onde

$$f \equiv \frac{R}{\hbar} \left( \frac{e\Phi}{2\pi R} + 2m\omega R \right) \quad (4.11)$$

e

$$g \equiv \frac{R^2}{\hbar^2 v_\phi^2} \left[ E^2 - \left( \hbar v_z k - \frac{\hbar\omega}{2} \right)^2 \right] - f^2. \quad (4.12)$$

Vamos propor a solução

$$\tilde{u} = e^{i\lambda\phi}. \quad (4.13)$$

Com isso, obtemos a equação característica

$$(i\lambda)^2 + 2if(i\lambda) + g = 0, \quad (4.14)$$

ou

$$\lambda^2 + (2f)\lambda - g = 0. \quad (4.15)$$

Assim,

$$\lambda = -f \pm \sqrt{f^2 + g}. \quad (4.16)$$

A solução geral é dada por

$$\tilde{u} = \tilde{u}_1 + \tilde{u}_2 = C_1 e^{-if\phi} e^{i\sqrt{f^2+g}\phi} + C_2 e^{-if\phi} e^{-i\sqrt{f^2+g}\phi}. \quad (4.17)$$

Por conveniência, vamos fazer  $C_2 = 0$ , de modo que vamos olhar somente para a solução  $\tilde{u}_1$ .

Devemos exigir que

$$\tilde{u}(\phi) = \tilde{u}(\phi + 2\pi). \quad (4.18)$$

Assim,

$$\cos(f + \sqrt{f^2 + g}) = 1; \quad (4.19)$$

Então

$$f + \sqrt{f^2 + g} = 2l\pi, \quad (4.20)$$

onde  $l$  é um inteiro. Assim,

$$f^2 + \frac{R^2}{\hbar^2 v_\phi^2} \left[ E^2 - \left( \hbar v_z k + \frac{\hbar \omega}{2} \right)^2 \right] = (2\pi l - f)^2 \quad (4.21)$$

ou

$$\frac{R^2}{\hbar^2 v_\phi^2} E^2 = (2\pi l - f)^2 + \frac{R^2}{\hbar^2 v_\phi^2} \left( \hbar v_z k + \frac{\hbar \omega}{2} \right)^2 - f^2. \quad (4.22)$$

Isolando  $E^2$ ,

$$E^2 = \frac{\hbar^2 v_\phi^2}{R^2} (2\pi l - f)^2 + \left( \hbar v_z k + \frac{\hbar \omega}{2} \right)^2 - \frac{\hbar^2 v_\phi^2}{R^2} f^2. \quad (4.23)$$

Substituindo  $f$ ,

$$E = \pm \sqrt{\frac{\hbar^2 v_\phi^2}{R^2} \left[ 2\pi l - \frac{R}{\hbar} \left( \frac{e\Phi}{2\pi R} + 2m\omega R \right) \right]^2 + \left( \hbar v_z k + \frac{\hbar \omega}{2} \right)^2 - v_\phi^2 \left( \frac{e\Phi}{2\pi R} + 2m\omega R \right)^2} \quad (4.24)$$

Podemos perceber que a energia depende do número quântico  $l$  e também sofre influência do campo e rotação.

Para  $k_z$  fixo, plotamos o gráfico<sup>1</sup> de  $E(l)$  abaixo.

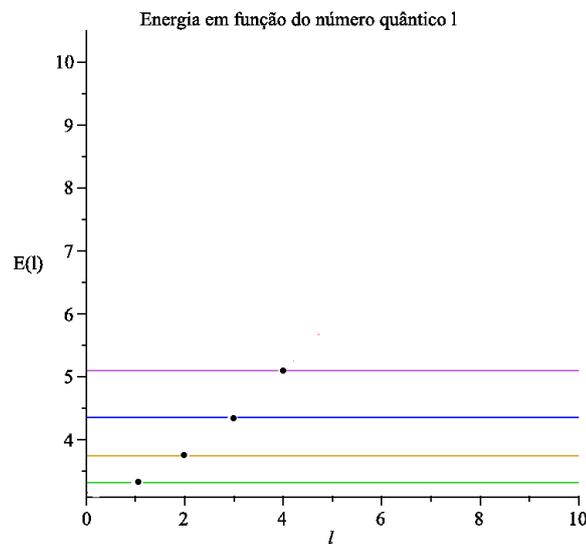


Figura 4.1: Energia para  $k_z$  fixo.

Neste gráfico, cada linha horizontal representa um estado de energia para  $l$  fixo. Os pontos representam a tendência de crescimento da energia em função do  $l$ . Tais pontos foram obtidos a partir de uma curva contínua  $E(l)$ , e então deixamos somente os pontos que estão relacionados aos estados discretos.

<sup>1</sup>Neste e nos demais gráficos, consideramos apenas a dependência da energia com respeito à  $l$  e à  $\omega$ . Todas as constantes foram tomadas como a unidade

Para rotação fixa, podemos fazer um gráfico da energia em função do campo:

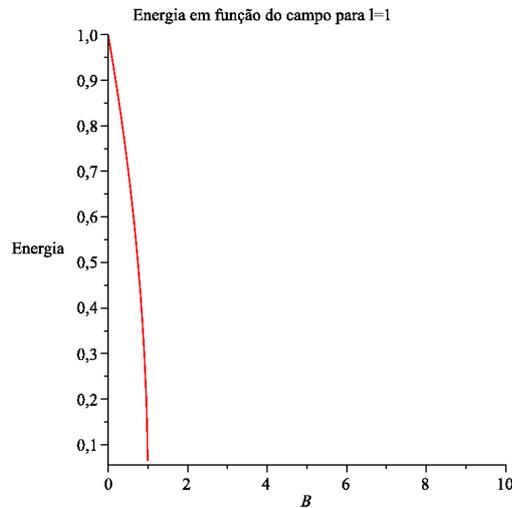


Figura 4.2: Energia em função do campo, para rotação fixa.

Para campo magnético fixo, o gráfico da energia em função da rotação é esboçado abaixo.

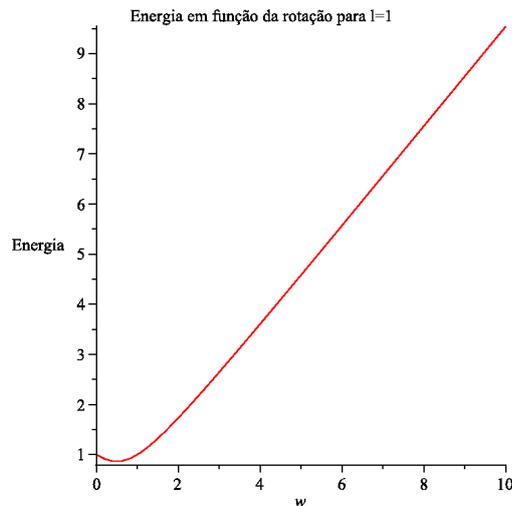


Figura 4.3: Energia em função da rotação

#### 4.1.1 Discussão

Os gráficos mostram que o campo magnético e a rotação influenciam de maneira bem diferente a relação de dispersão. Isto ocorre quando consideramos o acoplamento spin-rotação. Ao considerarmos este termo, fizemos a suposição de que o pseudo-spin, que representa as subredes, se acopla à rotação pelo fato de que as subredes estão na presença de rotação. Por outro lado, quando retiramos este termo, vemos que campo e rotação têm contribuições parecidas para  $E$ . De uma maneira geral, para campo e rotação paralelos, e sem o termo de spin-rotação há

uma simetria entre tais acoplamentos, o que era de se esperar devido à semelhança entre estes entes mostrada ao longo do trabalho. Se considerarmos somente campo, ou somente a rotação, o resultado obtido está de acordo com outros trabalhos já existentes na literatura.

## 4.2 Campo perpendicular

Nesta seção, escrevemos o hamiltoniano para o caso de um campo magnético aplicado perpendicularmente à superfície do nanotubo.

Para este caso, o acoplamento mínimo é feito com o potencial vetor  $\vec{A} = (BR\text{sen}\phi)\vec{z}$ .

$$H = v_z\sigma_z(-i\hbar\partial_z + eBR\text{sen}\phi) + v_\phi\sigma_y\frac{1}{R}\hbar\partial_\phi \quad (4.25)$$

Procedendo de maneira análoga ao caso do campo paralelo, chegamos a

$$\begin{cases} -\frac{i}{R}v_\phi\hbar\partial_\phi\tilde{v} = [E - v_z(\hbar k + eBR\text{sen}\phi)]\tilde{u}; \\ \frac{i}{R}v_\phi\hbar\partial_\phi\tilde{u} = [E + v_z(\hbar k + eBR\text{sen}\phi)]\tilde{v}. \end{cases} \quad (4.26)$$

Da segunda equação, temos que

$$\tilde{v} = \frac{iv_\phi\hbar\partial_\phi\tilde{u}}{R[E + v_z(\hbar k + eBR\text{sen}\phi)]} \quad (4.27)$$

Substituindo na primeira, temos

$$-\frac{i}{R}v_\phi\hbar\partial_\phi\frac{iv_\phi\hbar\partial_\phi\tilde{u}}{R[E + v_z(\hbar k + eBR\text{sen}\phi)]} = [E - v_z(\hbar k + eBR\text{sen}\phi)]\tilde{u}; \quad (4.28)$$

$$-\frac{i}{R^2}v_\phi\hbar^2\frac{iv_\phi\partial_\phi^2\tilde{u}}{E + v_z(\hbar k + eBR\text{sen}\phi)} - \frac{v_z eBR\cos\phi(iv_\phi\hbar\partial_\phi\tilde{u})}{[E + v_z(\hbar k + eBR\text{sen}\phi)]^2} = [E - v_z(\hbar k + eBR\text{sen}\phi)]\tilde{u} \quad (4.29)$$

Simplificando a equação, chegamos a

$$\partial_\phi^2\tilde{u} + \frac{v_z eBR\cos\phi}{[E + v_z(\hbar k + eBR\text{sen}\phi)]}\partial_\phi\tilde{u} - \frac{R^2}{\hbar^2 v_\phi^2}[E^2 - v_z^2(\hbar k + eBR\text{sen}\phi)^2]\tilde{u} = 0. \quad (4.30)$$

Como podemos ver, a equação apresenta uma dependência do ângulo  $\phi$  em vários termos. Temos como perspectiva a solução desta equação usando métodos computacionais.

## Conclusões

Neste trabalho, estudamos a influência de campo magnético e rotação no espectro de energia de nanotubos de carbono. Revisamos alguns aspectos básicos de Mecânica Quântica, que foram usados ao longo do trabalho, como por exemplo o fato de se escrever um estado qualquer em termos de uma base de autoestados ortogonais entre si.

Estudamos o método de ligação-forte, e verificamos que tal método pode fornecer uma maneira simples de se obter uma relação de dispersão. A partir da condição de minimização da energia em relação à algum parâmetro, este modelo nos fornece uma equação de autovalores para a energia em um sólido cristalino.

Vimos que usando este método para o grafeno, a partir da relação de dispersão obtida, é possível fazer uma expansão em torno dos pontos de Dirac, onde a o espectro obedece uma relação linear de  $E$  com respeito à  $k$ . Nesta região, podemos descrever o comportamento de elétrons e buracos através de uma equação de Dirac efetiva, que possui a mesma forma da equação de Dirac usual, mas onde ao invés de estarem presentes a velocidade da luz e o spin do elétron, na equação efetiva temos a velocidade de Fermi e as subredes atuando como estados de pseudospin. Deste modo, a partir desta equação, fomos motivados a escrevê-la em coordenadas adequadas para a descrição de um nanotubo de carbono, por saber que este pode ser considerado uma folha de grafeno enrolada.

A partir da ideia de acoplamento mínimo, e também da analogia entre a força de inércia e a força de Lorentz, e conseqüentemente da analogia entre os efeitos Aharonov-Bohm e Aharonov-Carmi, foi possível escrever um hamiltoniano para um nanotubo na presença de rotação e campo magnético. Estas quantidades, atuam de maneira similar ao que acontece no caso do efeito Aharonov-Bohm para estados ligados, modificando a energia.

Vimos também que a simetria cilíndrica do nanotubo, aliada à presença de um fluxo magnético e também de rotação é responsável pela diferença entre este caso e o do grafeno sob a ação de campo magnético. Para o grafeno, ocorrem níveis de Landau, mas o campo aparece como uma constante multiplicativa (na definição de frequência), e não se "acopla" ao número quântico como no caso do nanotubo. Assim, apesar de usarmos métodos simplificados, podemos perceber que a presença campo e a rotação é interessante do ponto de vista de propriedades eletrônicas. Poderíamos, a princípio, usar estes entes para ajustar o comportamento de materiais quanto à condução, por exemplo, alterando a energia de Fermi. Portanto, poderíamos usar

campo e rotação para tentar modificar *gaps* de amostras, por exemplo. Além disso, é possível ainda sintonizar campo e rotação, para que tenham seus efeitos se somando ou se cancelando. Como perspectivas, pretendemos otimizar nossos resultados, e também estender este estudo para outros tipos de materiais como isolantes topológicos, siliceno, entre outros. Pretendemos também explorar o caso onde o campo magnético aplicado é perpendicular à superfície do nanotubo por meio de simulações numéricas.

## Apêndice 1

### 5.1 Um caminho para a equação de Dirac

Nosso objetivo é obter uma equação de onda relativística para uma partícula de spin 1/2. Para isso, vamos partir da expressão clássica para a energia relativística

$$\frac{E^2}{c^2} - p^2 = (mc)^2 \quad (5.1)$$

Podemos escrever esta expressão em termos de operadores como:

$$\left( \frac{E}{c} - \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \right) \left( \frac{E}{c} + \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \right) = (mc)^2. \quad (5.2)$$

Isto pode ser justificado com o uso da identidade

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = \vec{A} \cdot \vec{B} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}). \quad (5.3)$$

Usamos também o fato de que

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = i\hbar c \frac{\partial}{\partial x_0}; \quad \vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}. \quad (5.4)$$

Isso permite escrever uma equação de segunda ordem,

$$\left( i\hbar c \frac{\partial}{\partial x_0} + \vec{\sigma} \cdot i\hbar \vec{\nabla} \right) \cdot \left( i\hbar c \frac{\partial}{\partial x_0} - \vec{\sigma} \cdot i\hbar \vec{\nabla} \right) \phi = (mc)^2 \phi, \quad (5.5)$$

para um elétron livre. Como introduzimos matrizes bidimensionais, dadas por  $\vec{\sigma}$ , então  $\phi$  deve ser uma função de onda de duas componentes. Mas, queremos obter uma equação de primeira ordem em relação à derivada temporal, assim como a equação de Schrödinger. Deste modo, a equação que procuramos deve ser linear também em  $\vec{\nabla}$ , pois, como estamos tratando de uma abordagem relativística, as coordenadas espaciais e temporal devem se comportar de maneira equivalente. Para isto, vamos definir duas funções de onda, dadas por

$$\phi_R = \frac{1}{mc} \left( i\hbar c \frac{\partial}{\partial x_0} - i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \right) \phi; \quad \phi_L = \phi. \quad (5.6)$$

É interessante notarmos que essas duas funções de onda também devem ter duas componentes. Com essa nova escrita, ao invés de trabalharmos com a equação de segunda ordem, podemos escrever duas equações de primeira ordem:

$$\begin{cases} \left[ i\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla} - i\hbar(\partial/\partial x_0) \right] \phi_L = -mc\phi_R \\ \left[ -i\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla} - i\hbar(\partial/\partial x_0) \right] \phi_R = -mc\phi_L \end{cases} \quad (5.7)$$

Como a dimensionalidade nas duas equações deve ser mantida, então, no total temos 4 componentes. Estas equações são acopladas, como podemos ver, e já correspondem a equação de Dirac, embora numa forma não muito familiar. Para deixá-la com um aspecto mais usual, e mais próximo do que Dirac originalmente propôs, tomemos a soma e a diferença destas duas equações, o que nos leva a

$$\begin{cases} -i\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla}(\phi_R - \phi_L - i\hbar(\partial/\partial x_0)(\phi_L + \phi_R)) = -mc(\phi_L + \phi_R) \\ i\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla}(\phi_L + \phi_R - i\hbar(\partial/\partial x_0)(\phi_R - \phi_L)) = -mc(\phi_R - \phi_L) \end{cases} \quad (5.8)$$

Ou, denotando a soma e a diferença de  $\phi_R$  e  $\phi_L$  por  $\Psi_A$  e  $\Psi_B$ , respectivamente, temos:

$$\begin{pmatrix} -i\hbar(\partial/\partial x_0) & -i\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla} \\ i\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla} & i\hbar(\partial/\partial x_0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} = -mc \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

Definindo uma função de onda por

$$\Psi \equiv \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_R + \phi_L \\ \phi_R - \phi_L \end{pmatrix}, \quad (5.10)$$

podemos reescrever a equação como

$$\left( \vec{\gamma}\cdot\vec{\nabla} + \gamma_4 \frac{\partial}{\partial(x_0)} \right) \Psi + \frac{mc}{\hbar} \Psi = 0, \quad (5.11)$$

ou ainda

$$\left( \gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} + \frac{mc}{\hbar} \right) \Psi = 0, \quad (5.12)$$

onde  $\gamma_\mu$ , com  $\mu = 1, 2, 3, 4$  são matrizes 4x4 dadas por:

$$\gamma_k = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_k \\ i\sigma_k & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}. \quad (5.13)$$

É importante deixarmos claro, que, na verdade, a equação de Dirac consiste em quatro equações diferenciais que acoplam as quatro componentes de  $\Psi$  representadas por uma matriz coluna

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}. \quad (5.14)$$

Um objeto de 4 componentes deste tipo é conhecido como um “bispinor”, ou mais comumente como um espinor de Dirac. Se houver alguma dificuldade em perceber o significado da equação de Dirac, pode-se escrever os índices explicitamente:

$$\sum_{\beta=1}^4 \left[ \sum_{\mu=1}^4 (\gamma_{\mu})_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} + \left( \frac{mc}{\hbar} \right) \delta_{\alpha\beta} \right] \Psi_{\beta} = 0. \quad (5.15)$$

O fato de  $\Psi$  ter 4 componentes não guarda nenhuma relação com a natureza quadridimensional do espaço-tempo.  $\Psi_{\beta}$  não se transforma como um quadrivetor sobre uma transformação de Lorentz. As matrizes  $\gamma_{\mu}$  são chamadas de “matrizes gama”, ou “matrizes de Dirac”. Elas satisfazem as seguintes relações:

$$[\gamma_{\mu}, \gamma_{\nu}] = \gamma_{\mu}\gamma_{\nu} + \gamma_{\nu}\gamma_{\mu} = 2\delta_{\mu\nu}, \quad \gamma_{\mu}^{\dagger} = \gamma_{\mu}. \quad (5.16)$$

É possível ainda escrever a equação de Dirac na forma hamiltoniana. Para isto, multiplicamos a equação original por  $\gamma_4$ , o que nos dá

$$[-i\hbar\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta mc^2]\Psi = i\hbar(\partial\Psi/\partial t), \quad (5.17)$$

com

$$\beta = \gamma_4 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad \alpha_k = i\gamma_4\gamma_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.18)$$

Os  $\sigma$ 's na expressão acima são as matrizes de Pauli, dadas por

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.19)$$

Estas matrizes são utilizadas na teoria não-relativística para escrever os operadores de spin, dados por  $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$ .

### 5.1.1 Solução para partícula livre

De modo análogo ao que acontece com a equação de Klein-Gordon, a solução para partícula livre também será do tipo onda plana. Vamos mostrar que uma solução da equação de Dirac

para partícula livre satisfaz a equação de Klein-Gordon. Multipliquemos a equação (5.12) por  $\gamma_\nu \frac{\partial}{\partial x_\nu}$ , à esquerda:

$$\gamma_\nu \frac{\partial}{\partial x_\mu} \left( \gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} + \frac{mc}{\hbar} \right) \Psi = 0 \quad (5.20)$$

$$\gamma_\nu \gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\nu} \frac{\partial}{\partial x_\mu} \Psi + \frac{mc}{\hbar} \gamma_\nu \frac{\partial}{\partial x_\nu} \Psi = 0. \quad (5.21)$$

Mas

$$\gamma_\nu \frac{\partial \Psi}{\partial x_\nu} = -\frac{mc}{\hbar} \Psi. \quad (5.22)$$

Então

$$\gamma_\nu \gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\nu} \frac{\partial}{\partial x_\mu} \Psi - \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \Psi = 0. \quad (5.23)$$

Procedendo de forma análoga, podemos também escrever

$$\gamma_\mu \gamma_\nu \frac{\partial}{\partial x_\mu} \frac{\partial}{\partial x_\nu} \Psi - \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \Psi = 0. \quad (5.24)$$

Somando estas duas expressões, temos

$$(\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu) \frac{\partial}{\partial x_\mu} \frac{\partial}{\partial x_\nu} \Psi - 2 \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \Psi = 0, \quad (5.25)$$

ou

$$2\delta_{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial x_\mu} \frac{\partial}{\partial x_\nu} \Psi - 2 \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \Psi = 0. \quad (5.26)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} \frac{\partial}{\partial x_\nu} \Psi - \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \Psi = 0. \quad (5.27)$$

Logo, uma solução da equação de Dirac neste caso também satisfaz a equação de Klein-Gordon, e portanto, também é do tipo onda plana.

### 5.1.2 Spin

Na seção anterior, vimos que a equação de Dirac admite uma solução para partícula livre, tal como a equação de Klein-Gordon. Agora, voltaremos nossa atenção à equação de Dirac novamente, mas desta vez com o objetivo de verificar como o spin é descrito na teoria de Dirac. Até o momento, comentamos que nesta teoria o spin do elétron é algo que sai de forma natural. Sabemos que no caso não-relativístico, este grau de liberdade do elétron é descrito por operadores que não podem ser escritos em termos das coordenadas, e que é assim descrito independentemente da parte espacial da função de onda. Vamos então escrever a solução da

equação para partícula livre e tentar obter alguma informação acerca do spin através da mesma. A solução é dada por:

$$\Psi \approx u(p) \exp[i(\vec{p} \cdot \vec{x} / \hbar - i(Et / \hbar)], \quad (5.28)$$

onde  $u(p)$  é a parte independente de  $x$  e  $t$ .

Para considerarmos somente o spin, devemos nos lembrar que o momento angular total de uma partícula tem uma contribuição do momento angular orbital e outra devido ao spin. Por isso, tomamos agora o caso para partículas em repouso, tal que  $\vec{p} = \vec{0}$ , ou seja  $E = mc^2$ , e teremos a seguinte equação a ser resolvida:

$$\gamma_4 \frac{\partial}{\partial(ict)} \Psi = -\frac{mc}{\hbar} \Psi. \quad (5.29)$$

A substituição da solução nos dá então

$$\frac{mc}{\hbar} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_A(0) \\ u_B(0) \end{pmatrix} = \frac{mc}{\hbar} \begin{pmatrix} u_A(0) \\ u_B(0) \end{pmatrix}. \quad (5.30)$$

A equação só é satisfeita se  $u_B(0) = 0$ .

Consideremos agora o caso para  $E = -mc^2$ . Teremos então

$$\frac{mc}{\hbar} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_A(0) \\ u_B(0) \end{pmatrix} = -\frac{mc}{\hbar} \begin{pmatrix} u_A(0) \\ u_B(0) \end{pmatrix}. \quad (5.31)$$

Desta vez, a equação só é satisfeita para  $u_A(0) = 0$ . Assim, os spinores que podem ser solução para uma partícula livre em repouso são

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.32)$$

Dito de uma forma mais clara,  $u_A$ , por exemplo, pode assumir as duas possibilidades acima. O mesmo acontece com  $u_B$ . Portanto, temos quatro soluções independentes, como era esperado, pois sabemos que de fato, a função de onda deve ter esta dimensão. No entanto, para facilitar a manipulação algébrica, usamos duas componentes,  $\Psi_A$  e  $\Psi_B$ , mas devemos sempre ter em mente que cada uma destas é um bispinor. Portanto, as quatro soluções independentes são

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-imc^2 t / \hbar}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-imc^2 t / \hbar}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{+imc^2 t / \hbar}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{+imc^2 t / \hbar}. \quad (5.33)$$

A partir destas, somos motivados a definir uma matriz  $4 \times 4$ , dada por

$$\Sigma_3 = \frac{1}{2i} (\gamma_1 \gamma_2 - \gamma_2 \gamma_1) = \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix}. \quad (5.34)$$

Se escrevermos  $\Sigma_3$  explicitamente e aplicarmos em uma função de onda, teremos

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ -\Psi_2 \\ \Psi_3 \\ -\Psi_4 \end{pmatrix}. \quad (5.35)$$

Esta expressão nos mostra que as soluções obtidas são autofunções deste operador, com os autovalores  $+1$  para a primeira e terceira e  $-1$  para a segunda e quarta. Estes autovalores podem ser interpretados como a componente  $z$  do spin, indicando spin *up* e *down*, respectivamente. De modo geral, podemos escrever

$$\Sigma_k = \frac{1}{2i}(\gamma_i\gamma_j - \gamma_j\gamma_i) \quad (5.36)$$

para o spin em uma determinada direção, com os índices  $i, j$  e  $k$  satisfazendo uma permutação cíclica.

## Referências Bibliográficas

- [1] OMNÈS, R. *Quantum Philosophy - Understanding and Interpreting Contemporary Science*, Princeton University Press, New Jersey, 1999.
- [2] OLIVEIRA, A. J. A, "*Pouco divulgada, muito aplicada*", disponível em <http://cienciahoje.uol.com.br/colunas/fisica-sem-misterio/pouco-divulgada-muito-aplicada>.
- [3] GRIFFITHS, D. J., *Introduction to quantum mechanics*, Prentice Hall, New Jersey,(1995).
- [4] SAKURAI, J. J. (Juan John). *Modern quantum mechanics*. Rev. ed. Reading Mass. : Addison-Wesley, c1994. x, 500 p. ISBN 0-201-53929-2 (enc.).
- [5] SAKURAI, J. J. (Juan John). *Advanced quantum mechanics*. Reading, Mass: Addison-Wesley, 1967. 336p (Addison-Wesley series in advanced physics ) ISBN 0-201-06710-2 (broch.)
- [6] GOLDSTEIN, Herbert, 1922-. *Classical mechanics*. 2 ed. Reading (Mass): Addison-Wesley, c1980. 672p. ((Addison-Wesley series in physics)) ISBN 0-201-02918-9 : (enc.).
- [7] JACKSON, J. D., *Classical Electrodynamics*, Wiley
- [8] K. D. MACHADO, *Teoria do Eletromagnetismo*, vol. II, editora UEPG, (2003).
- [9] Y. AHARONOV, and D. BOHM, *Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory*, The Physical Review, **115**, 485 (1959).
- [10] PESHKIN,M. *Aharonov-Bohm effect in bound states: Theoretical and experimental status*, Physical Review A, 23,1 (1981).
- [11] TSAI,CHIEN-HUA and NEILSON D., *New quantum interference effect in rotating systems*, Physical Review A **37**, 619 (1988).
- [12] B. L.JOHNSON, *Inertial forces and the Hall effect*, American Journal of Physics **68**, 649 (2000).
- [13] KONNO,KOCHKI and TAKAHASHI,ROHTA, *Spacetime rotation-induced Landau quantization*, Physical Review D, **85**, 061502 (2012).

- [14] B. J. AHMEDOV, M. JERMAMATOV, *Rotational analog of the Hall effect: Coriolis contribution to electric current*, Foundations of Physics Letters **15**, 305 (2002).
- [15] U. R. FISCHER, N. SCHOPHOL, *Hall state quantization in a rotating frame* Europhysics Letters **54**, 502 (2001).
- [16] G.DATOLLI, M.QUATTROMINI, *A note on Coriolis quantum states*, arxiv.org/pdf/1009.3788 (2010).
- [17] J. B. MARION, *Mechanics Classical - Dynamics of particles and systems*, Thomson Brooks/Cole, New York,(1995).
- [18] Y. AHARONOV and G.CARMI. *Quantum Related Reference Frames and the local Physical Significance of Potentials*, Foundations of Physics **4**, 75 (1974).
- [19] HARRIS, JONATHAN. and SEMON, MARK D., *A review of the Aharonov-Carmi thought experiment concerning the inertial and electromagnetic vector potentials*, Foundations of Physics **10**, 151 (1980).
- [20] BEZERRA, V. B. ; MARQUES, G. A. ; FERNANDES, S. G. . *Gravitational Aharonov-Bohm effect due to weak fields*. Journal of Mathematical Physics, **47**, p. 072504, 2006.
- [21] C. FURTADO and G. DUARTE. *Dual Aharonov-Bohm Effect*, Physica Scripta, **71**, 7, (2005).
- [22] WEDER, R. *The electric Aharonov-Bohm effect*, J. Math. Phys. **52**, 052109 (2011).
- [23] K. BAKKE e C. FURTADO *Relativistic Landau-Aharonov-Casher Quantization in Topological Defects Space-Time*, International Journal of Modern Physics D **19**, No. 1, 85 (2010).
- [24] VIANNA, JOSÉ DAVID M ; FAZZIO, A. ; CANUTO, S. *Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos - Simulação Computacional*. 1ª. ed. São Paulo, SP: Editora Livraria da Física, 2004. v. 1. 401p .
- [25] KITTEL, C., *Introduction to Solid State Physics*, John Willey & Sons, (1986).
- [26] REZENDE, SERGIO. , *Materiais e dispositivos eletrônicos*. 2. ed. xii, 547 p. ISBN 85883225276 (broch.).
- [27] SAITO, R. DRESSELHAUS, M.S , DRESSELHAUS G. *Physical properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press, 1998.

- [28] MUNIZ, C. R. ; COSTA FILHO, R. N. . *Electronic oscillations in paired polyacetylene chains*. Solid State Communications, v. 150, p. 1457-1459, 2010.
- [29] NOVOSELOV, K.S., *et al.*, *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbons Films*, Science v.306 666 (2004).
- [30] <http://cnx.org/content/m34667/latest/>.
- [31] KATSNELSON,MIKHAIL. , *Graphene: Carbons in two dimensions*, Materials Today, vol.10, No. 1-2 (2007).
- [32] IJIMA, SUMIO. *Helical microtubules of graphitic carbon*, Nature 354, 56-58 (1991).
- [33] KATSNELSON,MIKHAIL.; NOVOSELOV, K.S. , *Graphene: New Bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics*. Solid State Communications 143 (2007) 3-13.
- [34] CASTRO NETO, A. H. ; GUINEA, F. ; PERES, N. M. R. ; NOVOSELOV, K. ; GEIM, A. *The electronic properties of graphene*. Reviews of Modern Physics, v. 81 (2009).
- [35] KRÁL,P., SADEGHPOUR H. *Laser spinning of Nanotubes: a path to fast-microdevices*, Physical Review B 65 161401 (2002).
- [36] J. Q. SHEN, S. HE, F.ZHUANG, *Aharonov-Carmi effect and energy shift of valence electrons in rotating C60 molecules*, The European Physical Journal D **33**, 35 (2005).