

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



FELIPE AZEVEDO GOMES

**DINÂMICA QUÂNTICA DE UMA PARTÍCULA LIVRE NA
SUPERFÍCIE DE UM CONE DUPLO**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

JOÃO PESSOA – PB

JULHO, 2014

FELIPE AZEVEDO GOMES

**DINÂMICA QUÂNTICA DE UMA PARTÍCULA LIVRE NA
SUPERFÍCIE DE UM CONE DUPLO**

Dissertação submetida 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, 2014

G633d Gomes, Felipe Azevedo.

Dinâmica quântica de uma partícula livre na superfície de um cone duplo / Felipe Azevedo Gomes.- João Pessoa, 2014. 51f.

Orientador: Fernando Jorge Sampaio Moraes

Dissertação (Mestrado) - UFPB/CCEN

1. Física. 2. Cone duplo. 3. Equação de Dirac. 4. Instabilidade.

UFPB/BC

CDU: 53(043)

FELIPE AZEVEDO GOMES

DINÂMICA QUÂNTICA DE UMA PARTÍCULA LIVRE NA SUPERFÍCIE DE UM CONE DUPLO

Dissertação submetida 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. Cleverson Filgueiras

UFCG

Prof. Dr. Sérgio André Fontes Azevedo

UFPB

AGRADECIMENTOS

Agradeço em primeiro lugar a Jeová Deus, pelo dom da vida e por sempre me guiar. Agradeço também ao meu orientador prof. Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes, pela confiança demonstrada e conselhos oportunos.

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

Esse trabalho não seria o mesmo sem o apoio de colegas que me deram suporte durante todo o curso, dentre eles, gostaria de agradecer especialmente a Elias Brito, Marcio Moura, Júlio Brandão e Ranielison por me darem todo o suporte no período de mudança para João Pessoa. Agradeço também aos colegas Jonas Romero, Anderson Lima e Aliliane Almeida.

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

RESUMO

A física de superfícies tem atraído a atenção de muitos pesquisadores devido a descoberta de materiais que apresentam propriedades surpreendentes e que prometem diversas aplicações tecnológicas, como o grafeno e os isolantes topológicos. O estudo desses novos materiais tem sido feito considerando a equação de Dirac para modelos efetivos. Dentro desse contexto, muitos têm dispensado esforços no estudo de como a forma geométrica desses materiais influencia suas propriedades físicas. Uma das formas geométricas de interesse são as superfícies cônicas. Efeitos interessantes surgem quando partículas são confinadas a superfícies de cones duplos.

Neste trabalho, apresentamos uma breve revisão da equação de Dirac geral, bem como suas generalizações para espaços curvos e problemas com campos externos. Como estudos em grafeno foram uma forte motivação para o nosso trabalho e tendo em vista a possibilidade de extensão dos nossos resultados para tais problemas, apresentamos uma breve discussão a respeito da modelagem do grafeno utilizando a equação de Dirac. Em seguida, revisamos o comportamento clássico e quântico de uma partícula livre na superfície de um cone duplo [23]. Utilizando o formalismo de Hamilton mostramos que, classicamente, o movimento de uma partícula com momento angular diferente de zero é confinado a um dos cones, caracterizando instabilidade nas soluções com momento angular próximo de zero. Características de instabilidade semelhantes também são notadas no caso quântico.

Como resultados, apresentamos um estudo da dinâmica quântica-relativística de uma partícula livre, bem como de uma partícula em presença de campo magnético com simetria azimutal, ambos na superfície de um cone duplo. Avaliamos a existência de instabilidade para o caso de uma partícula livre e encontramos no problema com a presença de campo magnético, níveis de energia distintos para cada cone. Neste caso, os cones funcionam com sistemas independentes.

Palavras-Chave: Cone Duplo, Equação de Dirac, Instabilidade.

ABSTRACT

The surfaces physics has attracted the attention of many researchers due to the discovery of materials that exhibit amazing properties and promising technological applications, such as graphene and topological insulators. The study of these new materials has been done considering the Dirac equation for effective models. Within this context, many efforts has been done in the study of the influence the geometric shape of these materials in their physical properties. One of the geometric shapes of interest are the conical surfaces. Interesting effects arise when particles are confined to surfaces of double cones.

In this work, we present a brief review of the general Dirac equation and its generalizations to curved spaces and problems with external fields. As studies on graphene had a strong motivation for our work and considering the possibility of extending our results to these problems, we present a brief discussion of the modeling of graphene using the Dirac equation. Then, we review the classical and quantum behavior of a particle on the surface of a double cone [23]. Using the Hamilton formalism, we show that, classically, the movement of a particle with non-zero angular momentum is confined to one of the cones, characterized instability in the solutions with near zero angular momentum. Similar characteristics of instability are also noted in the quantum case.

As results, we present a study of quantum-relativistic dynamics of a free particle, and a particle in the presence of a magnetic field azimuthal symmetry, both on the surface of a double cone. We evaluate the existence of instability in case of a free particle and found, in the problem with presence of a magnetic field, distinct energy levels for each cone. In this case, the cones work like independent systems.

Keywords: Double Cone, Dirac Equation, instability.

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO	1
1 EQUAÇÃO DE DIRAC	5
1.1 Forma geral da equação de Dirac.....	5
1.2 Acoplamentos	8
1.2.1 <i>Espaços curvos</i>	9
1.2.2 <i>Equação de Dirac para o grafeno e problemas envolvendo campos magnéticos</i>	10
2 DINÂMICA DE UMA PARTÍCULA LIVRE NA SUPERFÍCIE DE UM CONE DUPLO	15
2.1 Sistema de Coordenadas	15
2.2 Partícula livre na superfície de um cone duplo - Caso Clássico	18
2.3 Partícula livre na superfície de um cone duplo - Caso Quântico	20
3 DINÂMICA QUÂNTICA DE UMA PARTÍCULA UTILIZANDO A EQUAÇÃO DE DIRAC	24
3.1 Partícula livre na superfície de um cone duplo - Caso relativístico.....	24
3.2 Partícula na superfície de um cone duplo sob a influência de um campo magnético.....	31
CONCLUSÕES	38
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	40

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Estrutura do grafeno mostrando as duas subredes.	11
Figura 2: Dispersão eletrônica do grafeno.Fonte: referência [40].	12
Figura 3: Construção de superfícies cônicas pelo processo de Volterra	12
Figura 4: Sistema de coordenadas para um cone simples.....	16
Figura 5: Medida no sistema de coordenadas do cone duplo	17
Figura 6: Trajetória de uma partícula livre na superfície de um cone duplo para $j = 0$. Fonte: referência [23].	19
Figura 7: Trajetória de uma partícula livre na superfície de um cone duplo para $j \neq 0$. Fonte: referência [23].	20
Figura 8: Superfície de um cone duplo sob a influência de um campo magnético.	31

INTRODUÇÃO

Uma das teorias de maior sucesso e alvo de investigação de muitos cientistas renomados no último século é a mecânica quântica. Grande parte do sucesso desta teoria vem da possibilidade de aplicações em uma infinidade de áreas do conhecimento. Atualmente, a mecânica quântica é parte fundamental de estudos em física de partículas, matéria condensada, física atômica, dentre muitas outras. Além disso, a mecânica quântica levou ao surgimento de novas áreas de pesquisa como a computação quântica.

A teoria quântica lida com o comportamento de partículas em escala atômica. A maioria de seus efeitos somente são percebidos nesta escala microscópica. No entanto, muitos efeitos macroscópicos também são explicados pela teoria quântica, como é o caso do efeito Hall [01] e da supercondutividade [02].

A base da mecânica quântica foi estabelecida na primeira metade do século XX, tendo a contribuição de grandes nomes, como Werner Heisenberg, Max Planck, Erwin Schrödinger, Paul Dirac e Albert Einstein. Até hoje vários aspectos fundamentais da teoria são investigados [03], levando a novas descobertas.

Além de contribuir para o desenvolvimento da mecânica quântica, Albert Einstein foi o maior responsável pelo desenvolvimento de outra área de estudo muito bem sucedida com a teoria da relatividade. Assim como a teoria quântica, a relatividade nos trouxe várias ideias novas, ideias fora do senso comum, como a contração do espaço, a dilatação do tempo e a invariância da velocidade da luz. Após um período de desconfiança, a relatividade foi confirmada por meio de experimentos e observações astronômicas. Hoje a teoria da relatividade é fundamental em diversas áreas do conhecimento.

Uma peculiaridade da teoria da relatividade é tratar o tempo como uma entidade geométrica, levando a ideia de um espaço-tempo que unifica coordenadas temporais e espaciais. Conceitos de geometria são bastante trabalhados a partir da teoria da relatividade, uma vez que o espaço-tempo consiste em uma variedade com quatro dimensões (três dimensões espaciais e uma temporal) a qual pertence uma métrica.

Por volta do ano de 1920, muitos cientistas buscavam a solução para o problema quântico de átomos com muitos elétrons, uma vez que o modelo de Bohr somente funcionava bem para o caso do átomo de hidrogênio. Em 1925, Erwin Schrödinger, propôs uma equação

que descreve a evolução temporal do estado quântico de um sistema. Esta equação foi muito bem sucedida e ficou conhecida como equação de Schrödinger. Apesar do sucesso da equação de Schrödinger, alguns aspectos da teoria ainda eram inconvenientes, como o fato desta equação não incorporar o spin de uma partícula de forma natural e não ser consistente com a teoria da relatividade. No intuito de demonstrar a existência do spin do elétron, Paul A. M. Dirac, em 1928, propôs uma equação que incorporava de forma natural o spin de uma partícula e se baseava nos fundamentos da relatividade especial. Esta equação ficou conhecida como equação de Dirac. Ela descreve todas as partículas com spin $1/2$ e com simetria de paridade, como os elétrons e os quarks.

Uma grande conquista para a consolidação da equação de Dirac foi a previsão da existência de uma nova forma de matéria, a antimatéria, que posteriormente foi confirmada experimentalmente. Uma grande vantagem da equação de Dirac em relação à equação de Schrödinger é o fato de a equação de Dirac lidar com uma função de onda de quatro componentes, ao invés de uma única função de onda, como é o caso da equação de Schrödinger. Este elemento de quatro componentes é conhecido como spinor de Dirac e tem a vantagem de incorporar em um mesmo elemento soluções para partículas, antipartículas e spin up e down.

Em anos recentes, a equação de Dirac vem sendo utilizada como ferramenta de estudo de modelos em diversas áreas. Em particular, no estudo da dinâmica quântica de partículas, existe o interesse nos efeitos provenientes da interação de partículas confinadas a superfícies em 2+1 dimensões com campos magnéticos [04, 05, 06]. Além da interação de partículas com campos externos, os efeitos relacionados à geometria de espaços curvos também são alvo de estudo [07, 08].

O interesse pelo uso da equação de Dirac em problemas com superfícies curvas em 2+1 dimensões se tornou maior após o surgimento de novos materiais com propriedades peculiares como o grafeno [09, 10, 11] e os isolantes topológicos [12, 13, 14]. O grafeno é uma rede composta de átomos de carbono ligados em uma estrutura hexagonal. A obtenção experimental desse novo material foi feita em 2004 por A. K. Geim e K. S. Novoselov [15]. Eles utilizaram uma técnica simples conhecida como clivagem micromecânica para extrair uma monocamada de carbono a partir de uma amostra de grafite.

Antes da descoberta do grafeno, acreditava-se que cristais bidimensionais não poderiam ser naturalmente estáveis. Pensava-se que flutuações térmicas levariam a

deslocamentos atômicos da ordem da distância interatômica gerando grande instabilidade no material. Foi demonstrado que o grafeno é um cristal bidimensional estável que apresenta uma leve deformação na terceira dimensão. De fato, cristais de grafeno suspensos existem livremente, sem a necessidade de um substrato. Estudos teóricos envolvendo grafeno são feitos utilizando-se a equação de Dirac sem massa. Isto é possível devido o grafeno apresentar uma relação de dispersão linear, que nas proximidades do ponto de Dirac, podem ser modeladas por um hamiltoniano de Dirac efetivo.

Outra classe de materiais que vem sendo alvo de muitas pesquisas e que apresenta propriedades interessantes são os isolantes topológicos [16-20]. Esta classe de materiais apresenta uma forte interação spin-órbita e quebra de simetria de reversão temporal, podendo existir em duas ou três dimensões. Devido a estas características, os isolantes topológicos apresentam um bulk isolante e estados metálicos em suas fronteiras. Isto significa que o interior de um isolante topológico é isolante, mas suas fronteiras são condutoras. Os estados de superfície em isolantes topológicos tridimensionais podem ser descritos por um hamiltoniano de Dirac efetivo, assim como acontece com o grafeno.

Neste trabalho, temos o objetivo de estudar a dinâmica quântica de partículas livres em superfícies cônicas e avaliar o efeito de campos magnéticos. Superfícies cônicas já foram alvo de vários estudos teóricos e experimentais. Superfícies desse tipo já foram utilizadas como modelo para o estudo de estados ligados provenientes de potenciais que aparecem devido à curvatura da superfície [21], bem como o estudo de estados ligados utilizando a abordagem de da Costa [22]. Grande parte desses trabalhos envolve o problema quântico não relativístico e trata da superfície de cones simples. Uma superfície cônica pouco estudada são os cones duplos, ou seja, dois cones ligados pelo vértice. Como demonstrado na referência [23], esse tipo de superfície tem a interessante propriedade de, classicamente, ter o vértice funcionando como uma espécie de filtro de estados, selecionando os estados que são acessíveis a cada cone de acordo com o momento angular. Tendo em vista que o grafeno pode apresentar-se naturalmente no formato de um cone e que estes podem ser modelados pela equação de Dirac, é interessante estudar como solucionar a equação de Dirac para problemas envolvendo cones duplos.

Nesta dissertação, fazemos inicialmente, no capítulo 1, uma revisão teórica da equação de Dirac, apresentando uma breve demonstração da forma geral desta equação. Posteriormente, mostramos como generalizar a forma padrão da equação de Dirac para os

casos envolvendo espaços curvos e campos magnéticos. Mostramos também como a equação de Dirac sem massa é utilizada para o tratamento de problema envolvendo o grafeno e analisamos como lidar com possíveis descontinuidades nas subredes do grafeno.

Iniciamos o capítulo 2 com a apresentação do sistema de coordenadas utilizado para o estudo da superfície de cones duplos e a métrica resultante. Com o plano de fundo estabelecido, avaliamos a dinâmica clássica de uma partícula livre na superfície de um cone duplo [23] utilizando o formalismo hamiltoniano. Mostramos que somente partículas com momento angular nulo podem se mover através dos dois cones. Caso a partícula não tenha momento angular nulo, ela ficará confinada a um dos cones. Posteriormente, avaliamos a dinâmica quântica de uma partícula livre na superfície de um cone duplo utilizando a equação de Schrödinger. Encontramos a solução da equação correspondente e avaliamos a instabilidade da solução [23].

No ultimo capítulo apresentamos os resultados encontrados para dois problemas envolvendo a superfície de cones duplos: partícula livre e partícula na presença de campo magnético. No primeiro problema, determinamos a conexão spinorial e as matrizes de Dirac de forma conveniente para podermos escrever a equação de Dirac resultante. Solucionamos a equação pelo método de separação de variáveis e avaliamos as energias permitidas para o caso de superfícies finitas e infinitas. Estudamos também a existência de soluções instáveis para alguns valores do numero quântico de momento angular j e do parâmetro geométrico α .

O ultimo problema que estudamos é o de uma partícula na superfície de um cone duplo sob a influência de um campo magnético uniforme com a mesma direção do eixo dos cones. Encontramos a equação de Dirac resultante e a solucionamos utilizando o método de separação de variáveis e a análise dos limites assintóticos. Encontramos os níveis de energia permitidos e discutimos a influência da geometria da superfície sobre os níveis de energia.

Vejamos então, no capítulo 1, a importância, a obtenção e como podemos montar a equação de Dirac para uma diversidade de problemas.

1 EQUAÇÃO DE DIRAC

Por volta da década de 1920, duas áreas da física teórica chamavam a atenção de muitos cientistas renomados. Uma delas foi teoria da relatividade especial, proposta por Albert Einstein em 1905. A outra foi a mecânica quântica, especialmente após formulação da equação de Schrödinger em 1925. Alguns físicos da época concentraram esforços no sentido de tornar a mecânica quântica consistente com a relatividade especial.

Em 1926, Oskar Klein e Walter Gordon propuseram a seguinte equação diferencial de 2ª ordem para descrever a dinâmica quântica de uma partícula relativística:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi - \nabla^2 \psi + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi = 0, \quad (1.1)$$

onde $\hbar$ é a constante de Planck a menos de um fator de 2π e c é a velocidade da luz.

Esta equação é conhecida como equação de Klein-Gordon. Devido a ela conter um termo de derivada de segunda ordem no tempo, ela admite soluções com energia negativa, o que leva a densidades de probabilidade negativas. Esta aparente anomalia na densidade de probabilidade levou à rejeição da equação de Klein-Gordon. Posteriormente, em 1934, a interpretação da densidade de probabilidade como uma densidade de carga, que pode ser negativa, deu nova vida a equação de Klein-Gordon.

No intuito de encontrar uma equação que evitasse densidades de probabilidades negativas, Paul. A. M. Dirac propôs uma equação para a dinâmica quântica de uma partícula relativística com dependência de primeira ordem na derivada temporal. Vamos fazer uma breve revisão desta importante equação.

1.1 Forma geral da equação de Dirac

Uma importante razão para a equação de Dirac ter sido bem sucedida é que ela incorpora o spin de uma partícula de forma mais natural que a equação de Schrödinger, tornando-a a equação ideal para o tratamento de partículas de spin 1/2. Vejamos como

podemos encontrar a equação de Dirac, inicialmente reescrevendo o operador de energia cinética na ausência de potencial vetor eletromagnético na forma:

$$H = \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})}{2m}, \quad (1.2)$$

onde $\vec{\sigma}$ é um vetor cujas componentes são as matrizes de Pauli. Esta forma alternativa é totalmente equivalente à forma original, $H = \frac{\vec{p}^2}{2m}$, quando não existe potencial vetor.

Na presença de potencial vetor fazemos a substituição $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}/c$, que nos leva a:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c} \right) \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c} \right) \\ H &= \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c} \right)^2 + \frac{i}{2m} \vec{\sigma} \cdot \left[\left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c} \right) \times \left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c} \right) \right] \\ H &= \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c} \right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Como queremos encontrar uma equação de onda relativística para uma partícula com spin 1/2, incorporamos o spin do elétron ao análogo relativístico da energia cinética.

$$\frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2 = (mc)^2, \quad (1.4)$$

$$\left(\frac{E}{c} - \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \right) \left(\frac{E}{c} + \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \right) = (mc)^2, \quad (1.5)$$

onde $E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ e $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$.

Podemos então escrever para uma partícula livre

$$\left(\frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \right) \left(\frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} - i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \right) \phi = (mc)^2 \phi, \quad (1.6)$$

onde ϕ é a função de onda que agora tem duas componentes.

Como comentamos anteriormente, uma peculiaridade da teoria da relatividade é tratar o tempo como uma coordenada espacial. Tendo em vista esta particularidade, devemos posteriormente unificar a coordenada de tempo ao laplaciano. Sendo assim, a partir daqui faremos a transformação $\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial}{\partial x_0}$. Esta simples mudança nos permitirá tratar o tempo junto às coordenadas de posição. É importante nos lembramos desta transformação quando aplicarmos o operador laplaciano unificado à função de onda em um problema envolvendo a equação de Dirac.

Para obtermos uma equação linear em $\partial/\partial t$, definimos duas funções de duas componentes na forma

$$\phi^R = \frac{1}{mc} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} + i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \right) \phi, \quad \phi^L = \phi. \quad (1.7)$$

Ficamos então com as seguintes duas equações de primeira ordem

$$\left(i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} - i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} \right) \phi^L = -mc \phi^R, \quad (1.8)$$

$$\left(-i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} - i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} \right) \phi^R = -mc \phi^L. \quad (1.9)$$

Podemos escrever as equações (1.8) e (1.9) da seguinte forma:

$$-i\hbar (\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}) (\phi^R - \phi^L) - i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} (\phi^L - \phi^R) = -mc (\phi^L - \phi^R), \quad (1.10)$$

$$i\hbar (\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}) (\phi^L - \phi^R) + i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} (\phi^R - \phi^L) = -mc (\phi^R - \phi^L), \quad (1.11)$$

$$\begin{pmatrix} -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} & -i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \\ i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} & i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = -mc \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}, \quad (1.12)$$

onde definimos a função de onda de quatro componentes

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi^R + \phi^L \\ \phi^R - \phi^L \end{pmatrix}. \quad (1.13)$$

A expressão (1.12) pode ser escrita de forma mais compacta como:

$$(i\hbar c\gamma^a\partial_a + mc^2)\psi = 0, \quad (1.14)$$

com $a = 0,1,2,3$ e γ^a sendo as matrizes de Dirac 4×4 :

$$\gamma^a = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}, k = 1,2,3, \quad \gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.15)$$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.16)$$

As matrizes de Dirac ou matrizes gama satisfazem as propriedades:

$$\{\gamma^a, \gamma^b\} = 2\delta^{ab}, \quad (1.17)$$

$$(\gamma^a)^\dagger = \gamma^a, \quad (1.18)$$

$$\text{tr}(\gamma^a) = 0, \quad (1.19)$$

A equação de Dirac (1.14) é composta de quatro equações diferenciais que acoplam as quatro componentes do spinor de Dirac ψ , que é representado por uma matriz coluna 4×1 . Por ser uma equação linear em $\partial/\partial t$, a equação de Dirac evita o problema com a densidade de probabilidade. No entanto, a equação de Dirac ainda apresenta soluções com energias positivas e negativas. Dirac interpretou energias positivas como sendo soluções para partículas e energias negativas como soluções para antipartículas. A posterior descoberta experimental das antipartículas foi um grande trunfo para a consolidação da equação de Dirac.

Encontramos, então, a equação para o tratamento quântico de uma partícula em conformidade com a teoria da relatividade. Até o momento conhecemos apenas a forma desta equação para o problema de partículas na ausência de campos e em espaços euclidianos. Estamos interessados em problemas de partículas confinadas a superfícies curvas na presença de campos. A generalização para estes casos é mostrada na próxima seção.

1.2 Acoplamentos

A equação de Dirac pode ser generalizada para problemas com espaços curvos e na presença de campos. Essa generalização é feita através do acoplamento de termos que dão

conta do elemento que queremos incorporar ao problema. Vejamos inicialmente como generalizamos a equação de Dirac para problemas com espaços curvos.

1.2.1 Espaços curvos

Para definir as relações entre as coordenadas no espaço plano e as coordenadas no espaço curvo, utilizamos um formalismo baseado nas tetradas [11, 25]. A relação entre as coordenadas locais (índices latinos) e as coordenadas no espaço curvo (índices gregos) é dada por um campo e_μ^a . Uma vez obtido o valor das componentes, $e_\mu^a(x)$, podemos definir as quantidades necessárias para obter a equação de Dirac em espaços curvos. O primeiro objeto que devemos levar em consideração é o tensor métrico para uma variedade curva, $g_{\mu\nu}(x)$, que está relacionado ao tensor métrico do espaço plano, η_{ab} , pela equação:

$$g_{\mu\nu}(x) = e_\mu^a(x)e_\nu^b(x)\eta_{ab}. \quad (1.20)$$

As matrizes gama, ou matrizes de Dirac, γ^μ , também são modificadas pela curvatura do espaço, estando relacionadas com as matrizes gama no espaço plano, γ^a , através da relação:

$$\gamma^\mu(x) = e_\mu^a(x)\gamma^a. \quad (1.21)$$

O terceiro objeto necessário para a generalização da equação de Dirac para espaços curvos é a chamada conexão spinorial,

$$\Omega_\mu = \frac{i}{4}\omega_{\mu ab}\Sigma^{ab}, \quad (1.22)$$

onde

$$\Sigma^{ab} = \frac{i}{2}[\gamma^a, \gamma^b], \quad (1.23)$$

e $\omega_{\mu ab}$ é a chamada conexão de spin, que pode ser obtida a partir da um-forma $\omega_b^a = \omega_{\mu b}^a dx^\mu$ encontrada na equação de estrutura de Cartan,

$$d\hat{\theta}^a + \omega_b^a \wedge \hat{\theta}^b = T^A. \quad (1.24)$$

A equação de estrutura de Cartan define a relação entre a componente $\hat{\theta}^a = e_\mu^a(x)dx^\mu$, a um-forma ω_b^a e o tensor torção T^A .

A conexão spinorial deve ser introduzida junto à derivada covariante do spinor da seguinte forma:

$$\partial_\mu \rightarrow \partial_\mu + \Omega_\mu \quad (1.25)$$

Com todos os elementos estabelecidos podemos construir a equação de Dirac para espaços curvos

$$[i\hbar c \gamma^\mu (\partial_\mu + \Omega_\mu) + mc^2] \psi = 0. \quad (1.26)$$

Perceba na equação de Dirac (1.26) que duas quantidades foram alteradas de forma direta pela geometria, as matrizes gama e a derivada covariante com a inserção da conexão spinorial. Estas modificações estão ligadas de forma indireta à métrica da variedade em questão, pois é a métrica quem define as quantidades $e_\mu^a(x)$, como vemos claramente na equação (1.20). Esta relação admite vários conjuntos de valores possíveis para $e_\mu^a(x)$, o que leva a diferentes configurações de γ^μ e Ω_μ que satisfazem a equação de Dirac (1.26). Sendo assim, podemos escolher o conjunto de valores para $e_\mu^a(x)$ mais conveniente para o problema que estivermos tratando.

Uma vez que conhecemos a equação de Dirac para espaços curvos, vejamos então como a equação de Dirac deve ser escrita para problemas envolvendo campos externos e como podemos modelar problemas envolvendo o grafeno através de uma equação de Dirac sem massa.

1.2.2 Equação de Dirac para o grafeno e problemas envolvendo campos magnéticos

O grafeno pode ser visto como uma monocamada composta de carbonos ligados em uma estrutura hexagonal por ligações sp^2 , conforme vemos na figura 1.

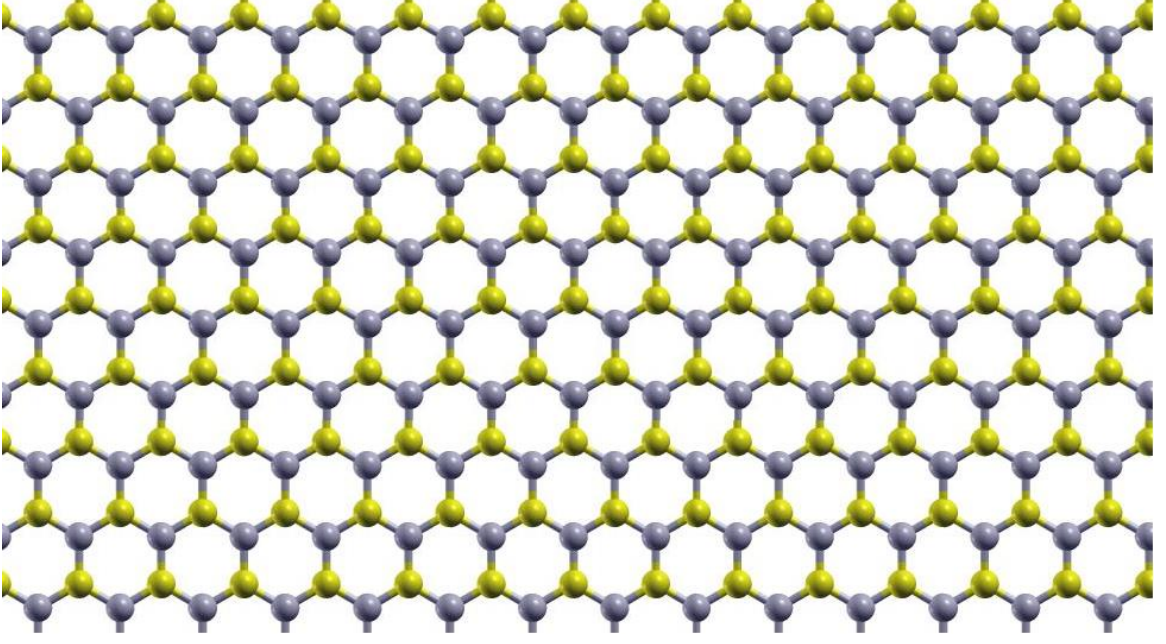


Figura 1: Estrutura de grafeno formada por carbonos ligados por ligações sp2 formando uma rede hexagonal. Os átomos estão identificados em duas subredes de acordo com a cor.

Através da aproximação de tight-binding em um modelo de massa efetiva para o grafeno é encontrado um espectro de energia sem gap com relação de dispersão linear, nas proximidades do nível de Fermi (figura 2). Esta relação de dispersão nos garante que podemos modelar problemas envolvendo o grafeno através de uma equação de Dirac sem massa em (2+1) dimensões. Neste modelo, os estados eletrônicos do grafeno são representados por uma função de onda de duas componentes $\psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}$, onde A e B representam as duas subredes do grafeno. Para cada função de onda, ψ_A e ψ_B , teremos duas subcomponentes relacionadas ao chamado K-spin: $\psi_A = \begin{pmatrix} \psi_A^{K_+} \\ \psi_A^{K_-} \end{pmatrix}$ e $\psi_B = \begin{pmatrix} \psi_B^{K_+} \\ \psi_B^{K_-} \end{pmatrix}$. A função ψ é então um elemento de quatro componentes semelhante ao spinor de Dirac na equação relativística (1.14). ψ agora será a solução da equação de Dirac sem massa,

$$i\hbar v_F \gamma^\mu \partial_\mu \psi = 0, \quad (1.27)$$

onde v_F é a velocidade de Fermi.

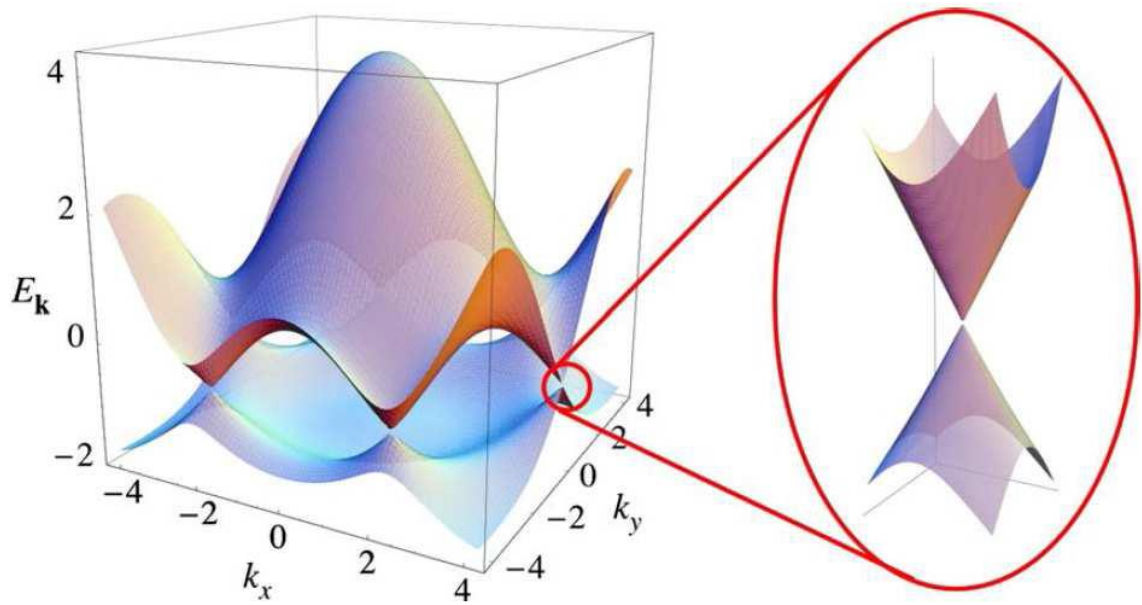


Figura 2: Dispersão eletrônica do grafeno. Em destaque vemos um zoom na banda de energia nas proximidades do nível de Fermi, mostrando uma relação de dispersão linear com gap nulo. Fonte: Referência [40].

Em problemas com superfícies curvas alguns cuidados devem ser levados em consideração, como possíveis descontinuidades nas subredes. Como estamos interessados na análise de superfícies cônicas, vejamos como lidar com essa descontinuidade.

Podemos imaginar a construção de uma superfície cônica através do processo de corte e colagem de Volterra (figura 3).

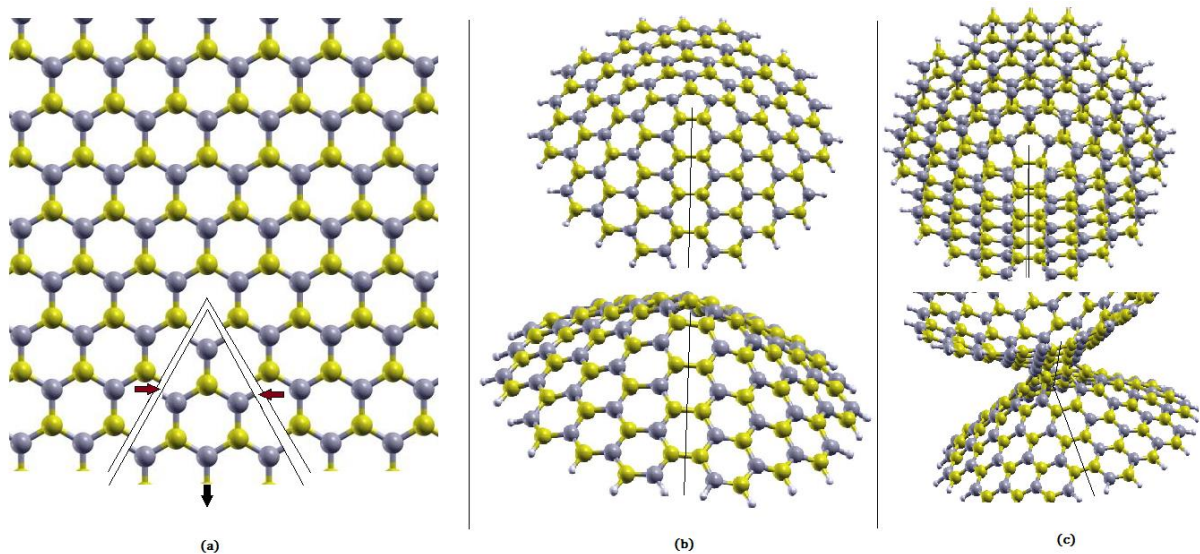


Figura 3: Processo de Volterra para o grafeno. Em (a) retiramos uma fatia de $\frac{\pi}{3}$. As ligações quebradas no corte são refeitas formando o cone simples em (b). Em (c) dois cones são ligados pelo pentágono no vértice. Após a junção das ligações quebradas vemos que átomos de mesma subrede são ligados em (a) e em (b).

Considerando a retirada de uma fatia com ângulo de $\pi/3$, vemos que a inserção de um pentágono nos força a conectar dois sítios na mesma subrede. Esta descontinuidade afeta o spinor que descreve a rede deformada. Quando o spinor é transportado ao redor do vértice por um ângulo de 2π , ele é forçado a mesma subrede. Em analogia ao efeito Aharonov-Bohm, damos conta dessa descontinuidade introduzindo um termo de potencial vetor não abeliano $\vec{A}$. A circulação de $\vec{A}$ em um circuito C, ao redor do vértice deve ser dada por [10]:

$$\oint \vec{A} \cdot d\vec{r} = \frac{\pi}{2} \tau^2, \quad (1.28)$$

onde τ^2 é a segunda matriz de Pauli agindo no K-spin.

Para o caso de superfícies cônicas, podemos escrever (1.28) como:

$$\oint \vec{A} \cdot d\vec{r} = [-6(\alpha - 1)] \frac{\pi}{2} \tau^2, \quad (1.29)$$

onde α é um parâmetro dependente do ângulo da fatia retirada para a construção da superfície cônica (figura 3).

Resolvendo a integral em (1.29) para o caso de um cone duplo, chegamos ao potencial:

$$A_\phi = -\frac{3}{2} \left(\frac{\alpha - 1}{\alpha l} \right) \tau^2, \quad (1.30)$$

onde l é uma coordenada medida na geratriz do cone duplo, conforme veremos na seção 2.1.

Portanto, em problemas envolvendo superfícies de cones duplos de grafeno, quando houver descontinuidade nas subredes, o potencial (1.30) deve ser introduzido à equação de Dirac. Devemos tomar o cuidado de atuar a matriz τ apenas nas componentes do spinor de Dirac correspondentes ao K-spin.

Além do interesse no tratamento de problemas envolvendo o grafeno utilizando a equação de Dirac, também estamos interessados na análise de problema envolvendo campos externos. Problemas envolvendo campos magnéticos são especialmente interessantes devido à aplicação experimental em diversas áreas, bem como pelos efeitos quânticos provenientes da

presença de campos magnéticos, como o efeito Hall. Campos magnéticos geralmente tem uma grande influência nos níveis de energia dos sistemas onde são aplicados. O tratamento da equação de Dirac para problemas envolvendo campos magnéticos é feito através de um acoplamento mínimo, que é escrito pela transformação:

$$i\hbar\partial_a \rightarrow i\hbar\partial_a - eA_a, \quad (1.31)$$

onde A_a é o potencial vetor associado a um campo magnético.

Quando temos espaço curvo e campo magnético, ficamos com a equação:

$$[i\hbar c\gamma^\mu(\partial_\mu + \Omega_\mu) - e\gamma^\mu A_\mu - mc^2]\psi = 0. \quad (1.32)$$

Nosso objetivo é solucionar a equação de Dirac para o problema de uma partícula livre na superfície de um cone duplo, bem como avaliar a influência de um campo magnético em um sistema desse tipo. Antes de partirmos para as soluções envolvendo a equação de Dirac, vamos fazer uma revisão do comportamento clássico e quântico de uma partícula livre em um cone duplo, utilizando para isso o formalismo hamiltoniano e a equação de Schrödinger.

2 DINÂMICA DE UMA PARTÍCULA LIVRE NA SUPERFÍCIE DE UM CONE DUPLO

A investigação de efeitos físicos em diferentes geometrias tem sido um importante campo de estudo em diversas áreas da física e tem despertado cada vez mais interesse da comunidade científica, especialmente após a descoberta de materiais como o grafeno e os isolantes topológicos.

Uma geometria bastante estudada é a geometria das superfícies cônicas. No entanto, boa parte dos estudos nessas superfícies é feito com cones simples. Nesta seção, investigaremos a dinâmica de uma partícula livre na superfície de um cone duplo, que corresponde a dois cones simples ligados pelo vértice. Encontraremos a equação de movimento clássica pelo formalismo de Hamilton e investigaremos a dinâmica quântica através da equação de Schrödinger. Alguns efeitos interessantes são investigados, como o fato do vértice dos cones servir como uma espécie de filtro, selecionando estados de momento angular que podem passar de um cone para outro e a instabilidade do movimento.

Antes de partirmos para a dinâmica propriamente dita, vamos definir o sistema de coordenadas para essa superfície e algumas quantidades que serão úteis posteriormente, como a métrica.

2.1 Sistema de Coordenadas

Um cone simples pode ser estudado a partir do sistema de coordenadas esférico. Neste caso, a coordenada r será uma geratriz do cone, o ângulo θ será uma constante e medirá a abertura do cone. E por fim, o ângulo, ϕ , será o ângulo entre a projeção de r no plano xy e o eixo x (figura 4).

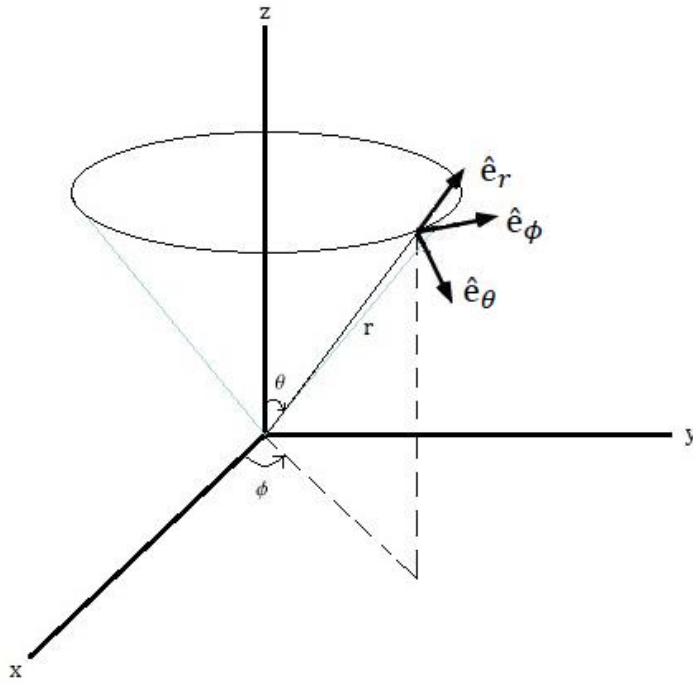


Figura 4: Sistema de coordenadas para um cone simples.

Os limites de atuação das coordenadas r , θ e ϕ , são:

$$\begin{aligned} r &\in (0, \infty), \\ \theta &\in \left[0, \frac{\pi}{2}\right), \\ \phi &\in [0, 2\pi). \end{aligned} \tag{2.1}$$

É importante notarmos como os ângulos ϕ e θ estão relacionados ao versor $\hat{e}_r$. No caso de θ , ele corresponde ao ângulo entre os versores $\hat{e}_z$ e $\hat{e}_r$, no sentido de $\hat{e}_z$ para $\hat{e}_r$. Já ϕ , é o ângulo entre o versor $\hat{e}_x$ e a projeção do versor $\hat{e}_r$, medido no plano xy no sentido anti-horário.

Devido à definição do ângulo θ , surgirá um inconveniente ao utilizarmos esse sistema de coordenadas para um cone duplo. Quando temos dois cones, cada cone terá um valor específico de θ . Se escolhermos, por exemplo, dois cones com abertura de 45° , o cone superior terá coordenada $\theta = 45^\circ$ e o cone inferior terá coordenada $\theta = 135^\circ$. Dois valores para θ será um inconveniente para a definição da métrica desta superfície. É conveniente então definirmos um novo sistema de coordenadas que preserve o mesmo valor de θ em qualquer ponto da superfície.

Como vimos, θ é o ângulo entre os versores $\hat{e}_z$ e $\hat{e}_r$. Se estendermos os limites de r para $r \in (-\infty, \infty)$, garantimos que o versor $\hat{e}_r$ permaneça sempre tendo projeção no eixo z apontada para a parte positiva do eixo z e consequentemente, que uma medida no cone inferior tenha mesma coordenada θ que o cone superior. Chamamos a coordenada na geratriz do cone de l , pois agora ela não é mais positiva definida. O limite de atuação das coordenadas l , θ e ϕ , agora serão:

$$\begin{aligned} l &\in (-\infty, \infty), \\ \theta &\in \left[0, \frac{\pi}{2}\right), \\ \phi &\in [0, 2\pi). \end{aligned} \tag{2.2}$$

Devemos sempre lembrar que com essa extensão, o versor $\hat{e}_l$ sempre terá projeção no eixo z apontando para a parte positiva do eixo z . Desta forma, todas as medidas de θ e ϕ devem ser tomadas tendo esse versor em mente. A figura 5 mostra o exemplo da medida de um ponto P no cone inferior.

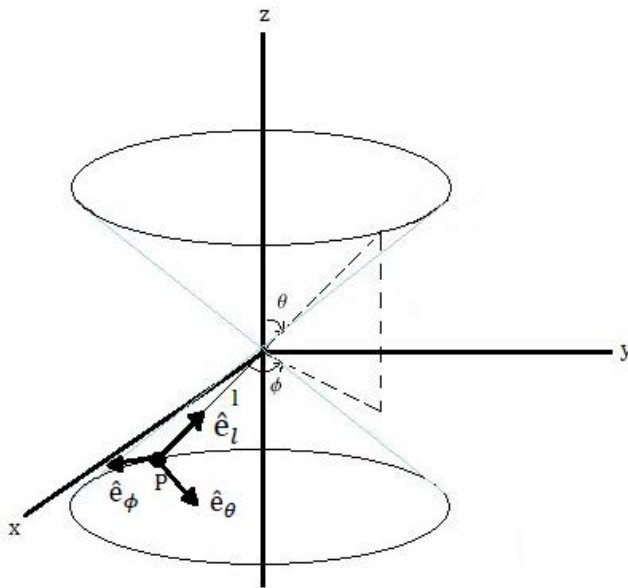


Figura 5: Medida das coordenadas l , θ e ϕ no sistema de coordenadas do cone duplo. l .

Resolvido o problema com a medida da abertura do cone duplo podemos definir a métrica para essa superfície. Da figura 5, podemos montar as relações:

$$\begin{aligned} x &= l \sin \theta \cos \phi, \\ y &= l \sin \theta \sin \phi, \\ z &= l \cos \theta. \end{aligned} \tag{2.3}$$

Lembrando que

$$dS^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2, \quad (2.4)$$

obtemos a métrica para a superfície do cone duplo como sendo:

$$dS^2 = dl^2 + l^2 \alpha^2 d\phi^2, \quad (2.5)$$

onde $\alpha = \text{sen}(\theta)$.

Estabelecido o pano de fundo onde vamos trabalhar, partimos para a investigação da dinâmica de uma partícula livre nessa superfície, começando pela análise clássica utilizando o formalismo de Hamilton.

2.2 Partícula livre na superfície de um cone duplo - Caso Clássico

Considere uma partícula livre, de massa m , na superfície de um cone duplo. O lagrangeano de uma partícula nesta superfície é dado por:

$$L = \frac{ml^2}{2} + \frac{m \text{sen}^2(\theta) l^2 \dot{\phi}^2}{2}. \quad (2.6)$$

Como a partícula é livre, o lagrangeano não deve ter nenhum termo de energia potencial. A energia cinética, por sua vez, pode ser dividida em dois termos. O primeiro termo do lado direito da equação (2.6) refere-se a energia cinética linear, na direção de l . Já o segundo termo representa a energia cinética de rotação, na direção de ϕ .

A partir do lagrangeano obtido, podemos encontrar o hamiltoniano, fazendo:

$$H = \sum_i p_i q_i - L, \quad (2.7)$$

$$H = \frac{p_l^2}{2m} + \frac{p_\phi^2}{2ml^2 \text{sen}^2(\theta)}. \quad (2.8)$$

As equações de movimento surgem naturalmente a partir das equações de Hamilton. Vamos analisar os casos com momento angular $p_\phi = j = 0$ e $j \neq 0$.

A equação de movimento para $j = 0$ é:

$$l = l_0 + \frac{p_l}{m} t. \quad (2.9)$$

Percebemos que, neste caso, a partícula descreverá uma trajetória retilínea ao longo de l com ϕ constante (figura 6).

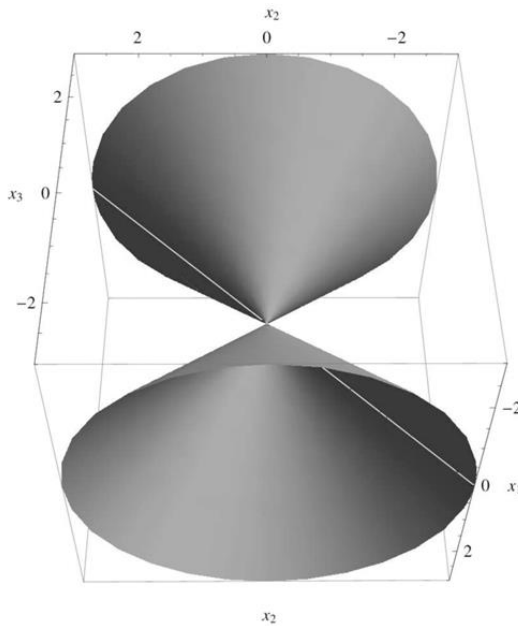


Figura 6: Trajetória de uma partícula livre na superfície de um cone duplo para $j = 0$. Fonte: referência [23].

Para o caso de $j \neq 0$, a equação de movimento será:

$$l = \pm \sqrt{\frac{2E}{m}(t + C)^2 + \frac{j^2}{2mE\alpha^2}}, \quad (2.10)$$

onde o sinal $+$ ($-$) se refere ao movimento no cone superior (inferior) e C é uma constante de integração determinada pelos dados iniciais. Neste caso, a trajetória de uma partícula livre estará confinada ao cone na qual ela iniciou seu movimento, não sendo possível para ela acessar o outro cone (figura 7).

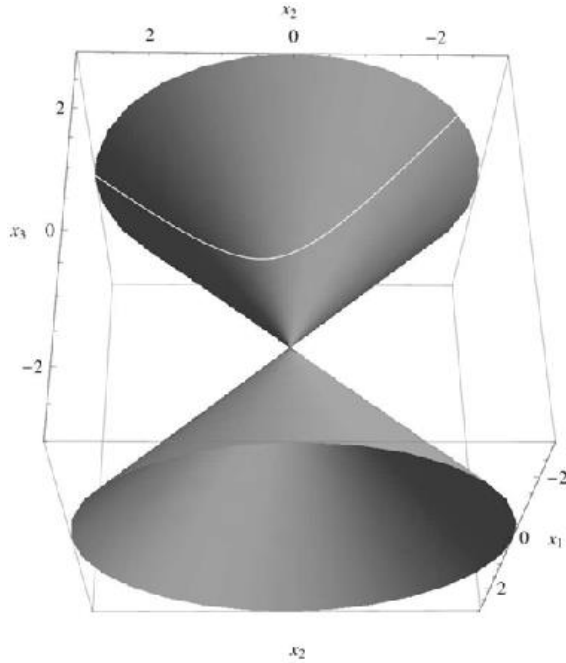


Figura 7: Trajetória de uma partícula livre na superfície de um cone duplo para $j \neq 0$. Fonte: referência [23].

No caso clássico, a solução para $j = 0$ é o que chamamos de solução instável de Lyapunov, ou seja, uma pequena perturbação arbitrária nas condições iniciais leva a um grande desvio no comportamento da partícula. Percebemos também que o cone duplo funciona como uma espécie de filtro, confinando partículas com momento angular diferente de zero a um dos cones, e permitindo a passagem entre os dois cones apenas de partículas com momento angular nulo.

Classicamente, o vértice dos cones seleciona estados de momento angular acessíveis a ambos os cones. Vejamos então como se comporta esse sistema no regime quântico não relativístico avaliando a solução da equação de Schrödinger para este sistema.

2.3 Partícula livre na superfície de um cone duplo - Caso Quântico

A dinâmica quântica de uma partícula livre na superfície de um cone duplo é governada pela equação de Schrödinger, com hamiltoniano definido por (2.8). Ou seja:

$$\left(\frac{\hat{p}_l^2}{2m} + \frac{j^2}{2ml^2\alpha^2} \right) \Psi(l, \phi, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(l, \phi, t)}{\partial t}, \quad (2.11)$$

onde $\hat{p}_l$ e $\hat{j}$ são os operadores, momento linear e momento angular, respectivamente. A análise da extensão auto adjunta para o caso do cone duplo nos leva a definição dos seguintes operadores [23]:

$$\begin{aligned}\hat{p}_l \Psi &= -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial l} + \frac{1}{2l} \right) \Psi, \\ \hat{j} \Psi &= -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \phi}.\end{aligned}\tag{2.12}$$

A função de onda, neste caso, depende apenas das coordenadas l e ϕ e do tempo, pois como vimos (Figura 5), a coordenada θ é uma constante para a superfície definida. Tendo isso em mente, vamos resolver a equação (2.11) pelo método de separação de variáveis.

A solução para as funções das coordenadas t e ϕ são facilmente obtidas, nos restando analisar a solução para a coordenada l .

$$\Psi(l, \phi, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} e^{ij\phi} \psi(l).\tag{2.13}$$

Substituindo (2.13) em (2.11) e utilizando (2.12), chegamos à equação diferencial que nos dá a solução da função $\psi(l)$.

$$\frac{d^2 \psi(l)}{dl^2} + \frac{1}{l} \frac{d\psi(l)}{dl} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{\frac{1}{4} + \frac{j^2}{\alpha^2}}{l^2} \right) \psi(l) = 0.\tag{2.14}$$

Esta equação tem como solução as funções de Bessel, $J_\nu(z)$. Ficamos, assim, com:

$$\psi_{j,E}(l) = CJ_{\sqrt{\frac{1}{4} + \frac{j^2}{\alpha^2}}} \left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} l \right),\tag{2.15}$$

onde $J_\nu(z)$ é a função de Bessel de primeiro tipo e C é uma constante de normalização. Com a solução para a coordenada l estabelecida, podemos avaliar o comportamento da partícula no vértice e buscar alguns traços de instabilidade.

A função de Bessel do primeiro tipo $J_\nu(0)$, na origem do sistema de coordenadas, tem o seguinte comportamento:

$$\begin{aligned}
J_\nu(0) &= 0 & , \text{ para } \nu > 0 \text{ real e } \nu < 0 \text{ inteiro.} \\
J_\nu(0) &= 1 & , \text{ para } \nu = 0. \\
J_\nu(0) &\rightarrow \infty & , \text{ para } \nu < 0 \text{ não inteiro.}
\end{aligned} \tag{2.16}$$

No nosso caso, $\nu = \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{j^2}{\alpha^2}}$, com $j \in \mathbb{Z}$, ou seja, ν será diferente de 0 para qualquer valor de j , implicando em uma função de onda nula no vértice dos cones. Com este fato em mente, vamos avaliar o comportamento da partícula nos casos $j = 0$ e $j \neq 0$.

Para $j = 0$, teremos para a coordenada l a equação diferencial:

$$l^2 \frac{d^2 \psi(l)}{dl^2} + l \frac{d\psi(l)}{dl} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} l^2 - \frac{1}{4} \right) \psi(l) = 0. \tag{2.17}$$

Cuja solução será:

$$\psi_{0,E}(l) = C' J_{\sqrt{\frac{1}{4}}} \left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} l \right). \tag{2.18}$$

onde usamos as identidades: $J_{\frac{1}{2}}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sin(z)$ e $J_{-\frac{1}{2}}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos(z)$.

Levando em conta que $J_\nu(z)$ e $J_{-\nu}(z)$ são ambas soluções da equação diferencial de Bessel, e que para ν não inteiro elas são linearmente independentes, a forma geral da solução será:

$$\psi_{0,E}(l) = \frac{1}{\sqrt{l}} \left[A \sin \left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} l \right) + B \cos \left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} l \right) \right], \tag{2.19}$$

Para o caso de $j \neq 0$, a solução da parte radial da equação de Dirac foi encontrada como sendo a equação (2.15). Vamos partir desta expressão e analisar o caso em que $j \rightarrow 0$. Utilizando o raciocínio de escrever a solução como uma combinação linear das soluções para ν e $-\nu$ temos:

$$\psi_{j,E}(l) = \lim_{j \rightarrow 0} \left[AJ \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{j^2}{\alpha^2}} \left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} l \right) + BJ_{-\sqrt{\frac{1}{4} + \frac{j^2}{\alpha^2}}} \left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} l \right) \right] \quad (2.20)$$

Note que para qualquer valor de $j \neq 0$, o índice no segundo termo será menor que $-1/2$. Soluções da função de Bessel com índice menor que $-1/2$ levam a estados não normalizáveis, logo não podem ser solução de um problema quântico. Ficamos então apenas com o primeiro termo da equação (2.20). Ou seja, no limite em que j tende a 0 teremos como solução:

$$\lim_{j \rightarrow 0} \psi_{j,E}(l) = \frac{1}{\sqrt{l}} A \text{sen} \left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} l \right). \quad (2.21)$$

Vemos então que o comportamento instável da solução nas proximidades de $j = 0$ ainda é percebido mesmo no regime quântico. Mudando o parâmetro j por uma quantidade infinitesimal (isto é, saindo de $j = 0$ para $j \rightarrow 0$), temos comportamentos bastante distintos. Tal comportamento é uma “cicatriz” de instabilidade quântica do movimento retilíneo clássico discutido anteriormente.

Sabemos, então, que classicamente o cone duplo permite que apenas partículas com momento angular nulo transitem entre os dois cones, tendo soluções estáveis nas proximidades de $j = 0$. No regime quântico essa instabilidade ainda é percebida. Vejamos, então, no próximo capítulo, como será o comportamento quântico relativístico de uma partícula livre na superfície de um cone duplo e que efeito o campo magnético pode causar neste sistema.

3 DINÂMICA QUÂNTICA DE UMA PARTÍCULA UTILIZANDO A EQUAÇÃO DE DIRAC

Motivados pelos resultados encontrados classicamente e quanticamente, conforme expressos no capítulo anterior, decidimos avaliar o comportamento quântico relativístico do problema. Neste capítulo, apresentamos os resultados encontrados para dois problemas envolvendo partículas na superfície de cones duplos. Na primeira seção, mostramos os resultados obtidos para uma partícula livre. Escrevemos a equação de Dirac para o problema, inicialmente determinando uma conexão spinorial conveniente e as matrizes de Dirac correspondentes. Solucionamos a equação através do método de separação de variáveis e encontramos soluções do tipo funções de Bessel esféricas para a coordenada radial l . Posteriormente, avaliamos a consistência da solução encontrada determinando as energias permitidas no caso de uma superfície finita e no caso de uma superfície infinita. Finalmente, analisamos possíveis traços de instabilidade.

Na última seção, adicionamos um campo magnético uniforme com direção $\hat{e}_z$. Encontramos um potencial vetor consistente com a métrica do espaço cônico e montamos a equação de Dirac resultante. Simplificamos a equação pelo método de separação de variáveis e avaliando os limites assintóticos. Chegamos então a funções do tipo hipergeométricas confluentes. Truncando a série hipergeométrica, obtemos soluções fisicamente aceitáveis. Esse truncamento nos leva aos níveis de energia permitidos. Neste problema, chegamos a espectros de energia distintos para cada cone.

3.1 Partícula livre na superfície de um cone duplo - Caso relativístico

Como vimos no capítulo 1, alguns elementos da equação de Dirac são modificados quando estamos em um espaço curvo. Vamos determinar esses elementos de uma forma conveniente para geometria do cone duplo.

Inicialmente vamos determinar a conexão spinorial para a geometria de um cone duplo. Vimos na seção 2.1 que a métrica da superfície de um cone duplo é dada pela equação (2.5). Como a equação de Dirac incorpora o tempo como uma coordenada, a métrica que desejamos para (2+1) dimensões é escrita como:

$$ds^2 = -c^2 dt^2 + dl^2 + l^2 \alpha^2 d\phi^2, \quad (3.1)$$

Desta expressão podemos extrair o tensor métrico na forma matricial como sendo:

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu, \quad (3.2)$$

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & l^2 \alpha^2 \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

A relação entre o tensor métrico no espaço plano e o tensor métrico no espaço curvo é intermediada pelos elementos $e_\mu^a(x)$, conforme a equação (1.20). Para satisfazer esta relação escolhemos:

$$\begin{aligned} e_t^0 &= 1, & e_t^1 &= e_t^2 = 0, \\ e_l^1 &= 1, & e_l^0 &= e_l^2 = 0, \\ e_\phi^2 &= l\alpha, & e_\phi^0 &= e_\phi^1 = 0. \end{aligned} \quad (3.4)$$

De posse dos elementos acima, podemos escolher uma tríade $\hat{\theta}^a$. Por conveniência escolhemos a tríade mais simples, isto é:

$$\begin{aligned} \hat{\theta}^0 &= dt, \\ \hat{\theta}^1 &= dl, \\ \hat{\theta}^2 &= l\alpha d\phi. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Podemos agora resolver a equação de estrutura de Cartan (1.24) e encontrar a conexão de spin. As componentes não nulas da conexão de spin são:

$$\omega_{\phi 12} = -\alpha, \quad \omega_{\phi 21} = \alpha. \quad (3.6)$$

A conexão spinorial é então obtida utilizando as expressões (1.22) e (1.23). A única componente não nula é

$$\Omega_\phi = -\frac{i}{2} \alpha \Sigma^3, \quad (3.7)$$

onde $\Sigma^3 = I_{4 \times 4} \sigma^3$.

Os próximos elementos da equação de Dirac que devemos analisar são as matrizes de Dirac. Encontramos as matrizes para o espaço curvo utilizando a expressão (1.21).

$$\begin{aligned}\gamma^t &= e_0^t \gamma^0 = \gamma^0, \\ \gamma^l &= e_1^l \gamma^1 = \gamma^1, \\ \gamma^\phi &= e_2^\phi \gamma^2 = \frac{\gamma^2}{\alpha l}.\end{aligned}\tag{3.8}$$

Temos então todos os elementos necessários para a construção da equação de Dirac para uma partícula livre na superfície de um cone duplo. Partindo da forma covariante da equação de Dirac, conforme exposto em (1.26), podemos escrever:

$$\left\{ i\hbar c \left[\frac{\gamma^t}{c} \partial_t + \gamma^l \partial_l + \gamma^\phi (\partial_\phi + \Omega_\phi) \right] - mc^2 \right\} \psi = 0.\tag{3.9}$$

Conforme a referência [23], a extensão auto adjunta para o operador momento leva a um acoplamento do tipo $\partial_l \rightarrow \partial_l + \frac{1}{2l}$. Assim, utilizando (3.7) e (3.8) ficamos com:

$$\left\{ i\hbar c \left[\frac{\gamma^0}{c} \partial_t + \gamma^1 \left(\partial_l + \frac{1}{2l} \right) + \frac{\gamma^2}{\alpha l} \left(\partial_\phi - \frac{i}{2} \alpha \Sigma^3 \right) \right] - mc^2 \right\} \psi = 0.\tag{3.10}$$

Sabendo que $\gamma^2 \Sigma^3 = i\gamma^1$, podemos escrever:

$$\left\{ i\hbar c \left[\frac{\gamma^0}{c} \partial_t + \gamma^1 \left(\partial_l + \frac{1}{l} \right) + \frac{\gamma^2}{\alpha l} \partial_\phi \right] - mc^2 \right\} \psi = 0.\tag{3.11}$$

A invariância rotacional da equação de Dirac no cone duplo nos possibilita escolher soluções com energia positiva que são autofunções do momento angular com autovalor $\left(j + \frac{1}{2}\right) \hbar$. Podemos, então, utilizar o *ansatz*:

$$\psi(t, l, \phi) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} e^{i\left(j+\frac{1}{2}\right)\phi} \psi_l.\tag{3.12}$$

Substituindo (3.12) em (3.11), ficaremos com:

$$\left[E\gamma^0 + i\hbar c \gamma^1 \left(\frac{d}{dl} + \frac{1}{l} \right) - \frac{\hbar c}{\alpha l} \gamma^2 \left(j + \frac{1}{2} \right) - mc^2 \right] \psi_l = 0.\tag{3.13}$$

Multiplicando à esquerda pela matriz $\beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$ e expressando a equação de Dirac em termos de matrizes 2×2 , chegamos, após algumas manipulações algébricas, a duas equações diferenciais acopladas,

$$\begin{cases} (E - mc^2)\psi_A = -i\hbar c \left(\frac{d}{dl} + \frac{1}{l} \right) \psi_B - \frac{i\hbar c}{\alpha l} \left(j + \frac{1}{2} \right) \psi_B \\ (E + mc^2)\psi_B = -i\hbar c \left(\frac{d}{dl} + \frac{1}{l} \right) \psi_A + \frac{i\hbar c}{\alpha l} \left(j + \frac{1}{2} \right) \psi_A \end{cases} \quad (3.14)$$

sendo ψ_A e ψ_B componentes dos spinor ψ_l .

Resolvendo o sistema em (3.14) chegamos às equações diferenciais:

$$\begin{aligned} l^2 \frac{d^2 \psi_A}{dl^2} + 2l \frac{d\psi_A}{dl} - \{(\nu - 1)[(\nu - 1) + 1]\} \psi_A + Kl^2 \psi_A &= 0, \\ l^2 \frac{d^2 \psi_B}{dl^2} + 2l \frac{d\psi_B}{dl} - [\nu(\nu + 1)] \psi_B + Kl^2 \psi_B &= 0, \end{aligned} \quad (3.15)$$

onde:

$$\nu = \left(\frac{j + \frac{1}{2}}{\alpha} \right), \quad K^2 = \left(\frac{E^2}{c^2} - m^2 c^2 \right). \quad (3.16)$$

As equações em (3.15) são do tipo Bessel esféricas, cuja solução é dada em termos da função de Bessel esférica de primeiro tipo ($j_\nu(z)$) como:

$$\psi_A = A_{\nu-1} j_{\nu-1}(Kl), \quad \psi_B = A_\nu j_\nu(Kl). \quad (3.17)$$

As funções de Bessel esféricas na origem do sistema de coordenadas tem o seguinte comportamento:

$$\begin{aligned} j_\nu(0) &= 0 && , \text{ para } \nu > 0. \\ j_\nu(0) &= 1 && , \text{ para } \nu = 0. \\ j_\nu(0) &\rightarrow \infty && , \text{ para } \nu < 0 \text{ inteiro.} \\ j_\nu(0) &= \text{indeterminado} && , \text{ para } \nu < 0 \text{ não inteiro.} \end{aligned} \quad (3.18)$$

Em nosso problema, $\nu = \left(\frac{j+1}{\alpha}\right)$, com $j \in \mathbb{Z}$, ou seja, ν será diferente de 0 para qualquer valor de j , implicando em uma função de onda nula no vértice dos cones. Com este fato em mente, vamos avaliar as energias permitidas para este caso.

Considerando um cone duplo de tamanho finito, com bordas em $l = l_b$ e $l = -l_b$, apenas teremos soluções fisicamente aceitáveis se as seguintes relações forem satisfeitas:

$$j_\nu(Kl_b) = 0, \quad j_\nu(-Kl_b) = 0. \quad (3.19)$$

Essas identidades são válidas quando o argumento da função esférica de Bessel, $\pm Kl_b$, é um dos chamados zeros da função, que chamaremos de z_ν . Sendo assim, a energia do sistema será dada por:

$$E = \pm \sqrt{\left(\frac{cz_\nu}{l_b}\right)^2 + m^2 c^4}. \quad (3.20)$$

No caso de termos um cone duplo com bordas no infinito o sistema não apresentará estados ligados. A função de Bessel no limite de $l \rightarrow \infty$ é naturalmente nula, não necessitando impor condições de contorno.

$$j_\nu(Kl) \xrightarrow{l \rightarrow \infty} \frac{1}{Kl} \sin\left(Kl - \frac{\nu\pi}{2}\right). \quad (3.21)$$

A partícula estará confinada a um espaço localmente plano e infinito e como é de se esperar a energia da partícula será:

$$E = \pm mc^2 \quad (3.22)$$

O sistema apresenta então níveis de energia bem definidos com um gap de $2mc^2$.

Vejamos então se encontramos algum traço de instabilidade nas soluções encontradas. Assim como fizemos na seção anterior, vamos expressar as soluções das equações diferenciais em (3.15) como uma combinação linear das funções de Bessel esféricas com índices negativos e positivos.

$$\begin{aligned}\psi_A &= A_1 j_{\left[\frac{j}{\alpha} + \frac{1}{2\alpha} - 1\right]}(Kl) + A_2 j_{-\left[\frac{j}{\alpha} + \frac{1}{2\alpha} - 1\right]}(Kl). \\ \psi_B &= B_1 j_{\left[\frac{j}{\alpha} + \frac{1}{2\alpha}\right]}(Kl) + B_2 j_{-\left[\frac{j}{\alpha} + \frac{1}{2\alpha}\right]}(Kl).\end{aligned}\tag{3.23}$$

O índices das funções de Bessel esféricas dependem agora de dois parâmetros, o número quântico relacionado ao momento angular, j , e a variável α , que está relacionada a geometria da superfície cônica. Para avaliarmos o domínio da variável α basta lembrarmos do processo de Volterra para a construção de uma superfície cônica, como na figura 2. A variável α é definida em termos do ângulo λ da fatia retirada como:

$$\alpha = 1 - \frac{\lambda}{2\pi}\tag{3.24}$$

Como o ângulo λ varia entre 0 e 2π . A variável α no nosso problema será limitada ao domínio $0 < \alpha < 1$.

Ao avaliarmos a solução de um problema quântico, devemos nos lembrar que apenas soluções de quadrado integráveis são fisicamente aceitáveis, por permitirem normalização. Assim, devemos excluir soluções que não possam ser normalizadas. No caso das funções de Bessel esféricas, a condição de normalização requer que soluções com índices $\nu < -1$ sejam excluídas.

No problema resolvido através da equação de Schrödinger, apenas soluções nas proximidades de $j = 0$ eram instáveis, pois o índice da função de Bessel dependia apenas de j . Resolvendo o mesmo problema utilizando a equação de Dirac, chegamos a soluções com índices dependentes de duas variáveis. Assim, teremos várias combinações de j e α que resultarão em instabilidade. Vejamos um exemplo que leva a soluções instáveis para a função ψ_A , e outro que leva a soluções instáveis para ψ_B .

Para $j = 0$ e $\alpha = 1/4$, teremos como solução para ψ_A :

$$\psi_A = A_1 j_1(Kl) + A_2 j_{-1}(Kl).\tag{3.25}$$

Já no limite de $j \rightarrow 0$ e $\alpha = 1/4$, a solução será:

$$\psi_A = \lim_{j \rightarrow 0} [A_1 j_{2j+1}(Kl) + A_2 j_{-2j-1}(Kl)]. \quad (3.26)$$

Qualquer valor infinitesimalmente maior que $j = 0$ leva a um índice menor que -1 no segundo termo da equação (3.26). Para um valor infinitesimalmente menor que $j = 0$, o primeiro termo adquire um valor menor do que -1 . Assim, nos dois casos, a solução (3.26) perderá um termo. Portanto, neste caso, uma mudança infinitesimal no parâmetro j leva a uma grande mudança na solução final. Este é um traço da instabilidade do movimento da partícula livre na superfície do cone duplo.

Vejamos ainda o caso de $j = -1$ e $\alpha = 1/2$. Neste caso, a solução para ψ_B será:

$$\psi_B = B_1 j_{-1}(Kl) + B_2 j_1(Kl). \quad (3.27)$$

No limite de $\alpha \rightarrow 1/2$, ficaremos com:

$$\psi_B = B_1 j_{[-\frac{1}{2\alpha}]}(Kl) + B_2 j_{[\frac{1}{2\alpha}]}(Kl). \quad (3.28)$$

O mesmo comportamento se apresenta neste caso. Valores infinitesimalmente próximos de $\alpha = 1/2$ pela direita, farão o primeiro termo ter índice menor que -1 , devendo ser removido, resultando assim numa solução instável.

Portanto, a análise do problema de uma partícula livre na superfície de um cone duplo nos leva a soluções instáveis em uma variedade de combinações das quantidades j e α . Vimos que mesmo não apresentando estados ligados, o sistema apresenta espectro de energia com um gap bem definido. Algo capaz de modificar o espectro de energia e criar estados ligados em um sistema com partícula livre é o campo magnético. Na próxima seção apresentamos um estudo sobre a influência de um campo magnético com mesma direção do eixo dos cones sobre uma partícula nesta superfície.

3.2 Partícula na superfície de um cone duplo sob a influência de um campo magnético

Considere agora o caso de uma partícula na superfície de um cone duplo submetida à influência de um campo magnético $\vec{B}$, uniforme e com a mesma direção do eixo z, conforme vemos na figura 8.

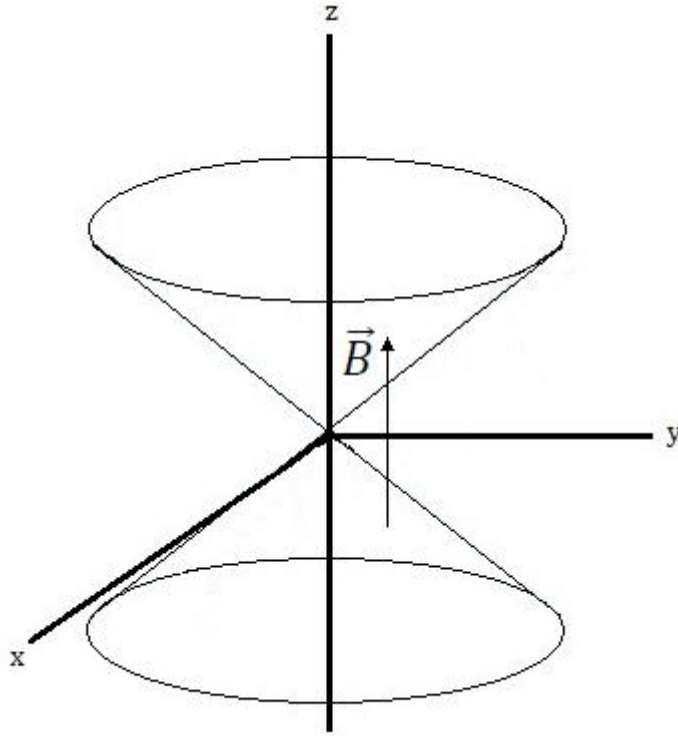


Figura 8: Superfície de um cone duplo sob a influência de um campo magnético com mesma direção do eixo dos cones.

Como vimos no capítulo 1, a equação de Dirac para problemas envolvendo campos magnéticos é dada pela expressão:

$$[i\hbar c\gamma^\mu(\partial_\mu + \Omega_\mu) - e\gamma^\mu A_\mu - mc^2]\psi = 0. \quad (3.29)$$

Já conhecemos os valores para a conexão spinorial (3.7), bem como das matrizes de Dirac na geometria do cone duplo (3.8). A quantidade que nos resta determinar para este caso é o potencial vetor A^μ , associado ao campo magnético $\vec{B}$.

O campo magnético proposto é uniforme e tem a direção do eixo z , ou seja, $\vec{B} = B_0 \hat{e}_z$. A escolha de um potencial vetor associado a este campo magnético deve levar em consideração a métrica da superfície, satisfazendo a relação:

$$(\vec{\nabla} \times \vec{A})^i = \sqrt{g} g^{ii} \epsilon^{ijk} \left[\frac{\partial}{\partial x^j} \left(\frac{A_k}{\sqrt{g^{kk}}} \right) - \frac{\partial}{\partial x^k} \left(\frac{A_j}{\sqrt{g^{jj}}} \right) \right]. \quad (3.30)$$

Levando em conta esta relação, podemos escrever o potencial vetor como:

$$\vec{A} = \frac{B_0 |\vec{l}|}{2} \hat{e}_\phi. \quad (3.31)$$

A equação de Dirac desejada poderá então ser escrita utilizando (3.7), (3.8) e (3.31) como:

$$\left\{ i\hbar c \left[\frac{\gamma^0}{c} \partial_t + \gamma^1 \left(\partial_l + \frac{1}{2l} \right) + \frac{\gamma^2}{\alpha l} \partial_\phi + \frac{\gamma^2}{\alpha l} \left(-\frac{i}{2} \alpha \Sigma^3 \right) \right] - \gamma^2 \frac{eB_0 |\vec{l}|}{2\alpha l} - mc^2 \right\} \psi = 0. \quad (3.32)$$

Lembrando que $\gamma^2 \Sigma^3 = i\gamma^1$, podemos escrever:

$$\left\{ i\hbar c \left[\frac{\gamma^0}{c} \partial_t + \gamma^1 \left(\frac{d}{dl} + \frac{1}{l} \right) + \frac{\gamma^2}{\alpha l} \partial_\phi \right] - \gamma^2 \frac{eB_0 |\vec{l}|}{2\alpha l} - mc^2 \right\} \psi = 0. \quad (3.33)$$

Vamos avaliar soluções com o mesmo *ansatz* usado na seção anterior, encontrado na expressão (3.12). Substituindo na expressão (3.33), ficamos com:

$$\left[E\gamma^0 - mc^2 + i\hbar c \gamma^1 \left(\frac{d}{dl} + \frac{1}{l} \right) - \frac{\hbar c}{\alpha l} \left(j + \frac{1}{2} \right) \gamma^2 - \frac{eB_0 |\vec{l}|}{2\alpha l} \gamma^2 \right] \psi_l = 0. \quad (3.34)$$

O fato de o potencial vetor depender do módulo da coordenada l nos leva a um termo do tipo $|\vec{l}|/l$. É importante avaliarmos este termo antes de prosseguirmos com os cálculos.

A variável l tem valor positivo no cone superior, negativo no cone inferior e nulo no vértice do cone. Desta forma, devemos ter:

$$\frac{|\vec{l}|}{l} = \begin{cases} +1, & \text{para } l \geq 0 \\ -1, & \text{para } l < 0 \end{cases} \quad (3.35)$$

Isto nos leva a duas equações distintas, uma equação para cada cone.

$$\begin{cases} \left[E\gamma^0 - mc^2 + i\hbar c\gamma^1 \left(\frac{d}{dl} + \frac{1}{l} \right) - \frac{\hbar c}{\alpha l} \left(j + \frac{1}{2} \right) \gamma^2 - \frac{eB_0}{2\alpha} \gamma^2 \right] \psi_l = 0, & \text{para } l \geq 0 \\ \left[E\gamma^0 - mc^2 + i\hbar c\gamma^1 \left(\frac{d}{dl} + \frac{1}{l} \right) - \frac{\hbar c}{\alpha l} \left(j + \frac{1}{2} \right) \gamma^2 + \frac{eB_0}{2\alpha} \gamma^2 \right] \psi_l = 0, & \text{para } l < 0 \end{cases} \quad (3.36)$$

Para podermos analisar as duas expressões ao mesmo tempo, vamos definir uma função η , como sendo:

$$\eta = \begin{cases} +1, & \text{para } l \geq 0 \\ -1, & \text{para } l < 0 \end{cases} \quad (3.37)$$

e expressar as equações em (3.36) como:

$$\left[E\gamma^0 - mc^2 + i\hbar c\gamma^1 \left(\frac{d}{dl} + \frac{1}{l} \right) - \frac{\hbar c}{\alpha l} \left(j + \frac{1}{2} \right) \gamma^2 - \eta \frac{eB_0}{2\alpha} \gamma^2 \right] \psi_l = 0. \quad (3.38)$$

Multiplicando pela esquerda a matriz $\beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$ e expressando a equação de Dirac em termos de matrizes 2×2 , chegamos, após algumas manipulações algébricas, a duas equações diferenciais acopladas

$$\begin{cases} \left(\frac{E}{c} - mc \right) \psi_A = -i\hbar \left(\frac{d}{dl} + \frac{1}{l} \right) \psi_B - \frac{i\hbar}{\alpha l} \left(j + \frac{1}{2} \right) \psi_B - i\eta \frac{eB_0}{2\alpha} \psi_B \\ \left(\frac{E}{c} + mc \right) \psi_B = -i\hbar \left(\frac{d}{dl} + \frac{1}{l} \right) \psi_A + \frac{i\hbar}{\alpha l} \left(j + \frac{1}{2} \right) \psi_A + i\eta \frac{eB_0}{2\alpha} \psi_A \end{cases} \quad (3.39)$$

Resolvendo o sistema de equações em (3.39) chegamos às equações diferenciais para ψ_A e ψ_B :

$$\begin{aligned}
l^2 \frac{d^2 \psi_A}{dl^2} + 2l \frac{d\psi_A}{dl} - \left[\left(\frac{j + \frac{1}{2}}{\alpha} \right)^2 - \left(\frac{j + \frac{1}{2}}{\alpha} \right) \right] \psi_A - \frac{\eta e B_0}{\hbar c \alpha^2} \left(j + \frac{1}{2} \right) l \psi_A \\
+ \left[\frac{(E^2/c^2 - m^2 c^2)}{\hbar} - \left(\frac{\eta e B_0}{2 \hbar c \alpha} \right)^2 \right] l^2 \psi_A = 0.
\end{aligned} \tag{3.40}$$

$$\begin{aligned}
l^2 \frac{d^2 \psi_B}{dl^2} + 2l \frac{d\psi_B}{dl} - \left[\left(\frac{j + \frac{1}{2}}{\alpha} \right)^2 + \left(\frac{j + \frac{1}{2}}{\alpha} \right) \right] \psi_B - \frac{\eta e B_0}{\hbar c \alpha^2} \left(j + \frac{1}{2} \right) l \psi_B \\
+ \left[\frac{(E^2/c^2 - m^2 c^2)}{\hbar} - \left(\frac{\eta e B_0}{2 \hbar c \alpha} \right)^2 \right] l^2 \psi_B = 0.
\end{aligned} \tag{3.41}$$

Neste ponto dos cálculos, devemos definir novas quantidades de forma a facilitar as futuras operações e simplificar a notação. Já pensando em uma futura manipulação algébrica, definimos as quantidades:

$$\begin{aligned}
W &= -\frac{\eta e B_0}{\hbar c \alpha^2} \left(j + \frac{1}{2} \right), \\
N^2 &= -4 \left[\frac{\left(\frac{E^2}{c^2} - m^2 c^2 \right)}{\hbar} - \left(\frac{e B_0}{2 \hbar c \alpha} \right)^2 \right],
\end{aligned} \tag{3.42}$$

$$M_A^2 = \left[4 \left(\frac{j + \frac{1}{2}}{\alpha} \right)^2 - 4 \left(\frac{j + \frac{1}{2}}{\alpha} \right) + 1 \right], \quad M_B^2 = \left[4 \left(\frac{j + \frac{1}{2}}{\alpha} \right)^2 + 4 \left(\frac{j + \frac{1}{2}}{\alpha} \right) + 1 \right].$$

onde devemos perceber que para qualquer valor de l , teremos $\eta^2 = +1$. Para deixar a notação mais clara, incorporamos a função η junto a W fazendo:

$$W_{\pm} = \begin{cases} -\frac{e B_0}{\hbar c \alpha^2} \left(j + \frac{1}{2} \right), & \text{para } l \geq 0 \\ +\frac{e B_0}{\hbar c \alpha^2} \left(j + \frac{1}{2} \right), & \text{para } l < 0 \end{cases} \tag{3.43}$$

As equações (3.40) e (3.41) poderão ser então escritas como:

$$\left\{ \frac{d^2}{dl^2} + \frac{2}{l} \frac{d}{dl} - \left[\frac{M_A^2}{4} - \frac{1}{4} \right] \left(\frac{1}{l^2} \right) + \frac{W_{\pm}}{l} - \frac{N^2}{4} \right\} \psi_A = 0 \quad (3.44)$$

$$\left\{ \frac{d^2}{dl^2} + \frac{2}{l} \frac{d}{dl} - \left[\frac{M_B^2}{4} - \frac{1}{4} \right] \left(\frac{1}{l^2} \right) + \frac{W_{\pm}}{l} - \frac{N^2}{4} \right\} \psi_B = 0 \quad (3.45)$$

Com a definição das quantidades em (3.42) conseguimos duas equações semelhantes para ψ_A e ψ_B . Assim, vamos prosseguir os cálculos apenas com a equação para ψ_A . Um procedimento bastante utilizado para solucionar equações diferenciais como a equação (3.44) é propor uma solução baseada nos limites assintóticos. No entanto, o número 2 no segundo termo da equação nos impede de anular todos os termos com l^2 , nos levando a uma equação desnecessariamente complicada. Uma forma de chegarmos a uma expressão mais simples é avaliar soluções do tipo $\psi_A = Z(l)l^{-\frac{1}{2}}$. Devemos então avaliar a expressão:

$$\left\{ \frac{d^2}{dl^2} + \frac{1}{l} \frac{d}{dl} - \frac{M_A^2}{4l^2} + \frac{W_{\pm}}{l} - \frac{N^2}{4} \right\} Z(l) = 0. \quad (3.46)$$

A partir da expressão (3.46) avaliamos os limites assintóticos na tentativa de propor uma solução que nos leve a uma equação diferencial mais simples.

Quando $l \rightarrow \pm\infty$, os termos dominantes da expressão (3.46) são:

$$\frac{d^2 Z(l)}{dl^2} = \frac{N^2}{4} Z(l), \quad (3.47)$$

cuja solução pode ser escrita como:

$$Z(l) = K_1 e^{-\frac{N}{2}l}. \quad (3.48)$$

No caso de $l \rightarrow 0$, os termos dominantes são:

$$\frac{d^2 Z(l)}{dl^2} = \frac{M_A^2}{4l^2} Z(l), \quad (3.49)$$

cuja solução pode ser dada por:

$$Z(l) = K_2 l^{\frac{|M_A|}{2}}. \quad (3.50)$$

Baseado no comportamento da equação (3.46) nos limites assintóticos (3.48) e (3.50), propomos a seguinte solução para a função $Z(l)$:

$$Z(l) = e^{-\frac{Nl}{2} l^{\frac{|M_A|}{2}}} F(l). \quad (3.51)$$

Substituindo (3.51) na expressão (3.46), chegamos à equação:

$$l \frac{d^2 F(l)}{dl^2} - Nl \frac{dF(l)}{dl} + |M_A| \frac{dF(l)}{dl} + \frac{dF(l)}{dl} - \frac{N|M_A|}{2} F(l) + W_{\pm} F(l) - \frac{N}{2} F(l) = 0. \quad (3.52)$$

Ou ainda

$$l \frac{d^2 F(l)}{dl^2} + (1 + |M_A| - Nl) \frac{dF(l)}{dl} + \left(W_{\pm} - N \frac{|M_A| + 1}{2} \right) F(l) = 0. \quad (3.53)$$

Esta é a equação hipergeométrica confluyente, que tem como solução:

$$F(l) = \frac{\Gamma(|M_A| + 1)}{\Gamma\left(N \frac{|M_A| + 1}{2} - W_{\pm}\right)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma\left(n + N \frac{|M_A| + 1}{2} - W_{\pm}\right)}{\Gamma(n + |M_A| + 1)} \frac{l^n}{n!}. \quad (3.54)$$

Portanto, a função de onda ψ_A , em termos da variável l , será (utilizando (3.51), (3.54) e lembrando que $\psi_A = Z(l)l^{-\frac{1}{2}}$):

$$\psi_A = e^{-\frac{Nl}{2} l^{\frac{|M_A|}{2}}} \frac{\Gamma(|M_A| + 1)}{\Gamma\left(N \frac{|M_A| + 1}{2} - W_{\pm}\right)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma\left(n + N \frac{|M_A| + 1}{2} - W_{\pm}\right)}{\Gamma(n + |M_A| + 1)} \frac{l^n}{n!}. \quad (3.55)$$

O problema físico requer soluções que sejam de quadrado integrável. Consequentemente, a função de onda deve tender a zero quando l tende a infinito. Vamos avaliar então o que ocorre nesta situação. Quando l tende a infinito, a função ψ_A terá o seguinte comportamento:

$$\psi_A \rightarrow e^{\frac{Nl}{2} l^{\frac{|M_A|}{2} - \frac{1}{2} - W_{\pm}}}. \quad (3.56)$$

Pela expressão (3.56) vemos que a solução diverge para $l \rightarrow \pm\infty$. No entanto, podemos truncar a série hipergeométrica para obtermos soluções aceitáveis. No limite assintótico a função hipergeométrica é dada por:

$$F(a, c; x \rightarrow \infty) \approx \frac{e^x}{x^{c-a}} \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)}. \quad (3.57)$$

Para que esta função tenha valor nulo no limite assintótico devemos ter um valor inteiro negativo ou nulo para o parâmetro a .

$$a = 0, -1, -2, -3, \dots = -n \quad (3.58)$$

Portanto, para termos soluções fisicamente aceitáveis, devemos ter:

$$N \frac{|M_A| + 1}{2} - W_{\pm} = -n \quad (3.59)$$

Substituindo os valores em (3.42) chegamos aos níveis de energia permitidos para o problema:

$$E^2 = -\frac{\hbar c^2}{4} \left[\frac{-n + W_{\pm}}{\frac{|M_A| + 1}{2}} \right]^2 + \left(\frac{eB_0}{2\hbar c\alpha} \right)^2 + m^2 c^2 \quad (3.60)$$

Podemos perceber que a presença do campo magnético leva a níveis de energia quantizados que dependem da geometria do meio, conforme vemos a presença do termo α . Algo interessante que ocorre devido a geometria do cone duplo é a dependência indireta dos níveis de energia com a coordenada radial l . Esta coordenada não aparece diretamente na expressão (3.60), mas dela depende o sinal da quantidade $W_{\pm}$. O sistema se comporta como se cada cone fosse um sistema completamente independente do outro, tendo cada um seu espectro de energia. Lembrando que a função de onda é nula no vértice dos cones e observando a figura 8, podemos intuir que este comportamento esteja relacionado com a forma que o campo magnético age em cada um dos cones. No cone inferior, vemos que o campo se aproxima do vértice enquanto no cone superior o campo se afasta do vértice. Em relação à direção do campo, os cones têm sentido opostos, e como eles, neste caso, se comportam como sistemas independentes, ficamos com espectros distintos em cada cone.

CONCLUSÕES

Nesta dissertação estudamos a dinâmica clássica e quântica de partículas sob a influência de campos externos e superfícies de cones duplos. O estudo da influência da geometria de espaços curvos na dinâmica de partículas tem sido especialmente investigado após a descoberta do grafeno e dos isolantes topológicos. A superfície de cones duplos foi pouco estudada e apresenta efeitos interessantes.

Vimos que, classicamente, uma partícula livre na superfície de um cone duplo estará confinada a um dos cones caso ela tenha momento angular diferente de zero. Neste caso, o vértice dos cones funciona como uma espécie de filtro, permitindo o trânsito entre os dois cones apenas de partículas com momento angular nulo. Esta filtragem ocasiona instabilidade no movimento livre das partículas na geratriz dos cones. Quanticamente também notamos a presença de instabilidade, desta vez o número quântico de momento angular, j , apresenta soluções bastante diferentes quando saímos de $j = 0$ para $j \rightarrow 0$.

O estudo quântico relativístico da dinâmica de partículas na superfície de cones duplos foi apresentado no capítulo 3, utilizando a equação de Dirac. Montamos a equação de Dirac para o problema de uma partícula livre e a solucionamos utilizando o método de separação de variáveis. Como resultado, vimos que a função de onda resultante é nula na origem do sistema de coordenadas e também apresenta soluções instáveis. Desta vez, a instabilidade está ligada tanto ao número quântico de momento angular, j , como ao parâmetro α , relacionado à geometria do cone duplo, ocasionando em várias combinações de j e α que geram instabilidade. Mostramos dois exemplos, no primeiro caso, quando saímos da situação $j = 0$ e $\alpha = 1/2$, para a situação $\alpha = 1/2$ e $j \rightarrow 0$, ficamos com duas soluções bastante distintas. A mesma situação é notada quando saímos de $j = -1$ e $\alpha = 1/2$, para $j = -1$ e $\alpha \rightarrow 1/2$ pela direita. Este comportamento é uma cicatriz de instabilidade do movimento.

O último problema que avaliamos foi o de uma partícula na superfície de um cone duplo em presença de um campo magnético com direção z . A presença do campo magnético leva a níveis de energia quantizados que dependem da intensidade do campo, do parâmetro α relacionado à geometria do cone duplo, bem como do número quântico de momento angular. Algo interessante que ocorre nesta situação é uma aparente independência dos dois cones em relação ao espectro de energia, isto é, cada cone se comporta como se fosse um sistema independente, ocasionando em uma dependência indireta dos níveis de energia com a

coordenada radial l . Teremos, então, espectros de energia distintos dependendo se a partícula está no cone superior ou inferior. Entendemos que este comportamento pode estar ligado a forma como o campo magnético age sob cada cone. No cone inferior, vemos que o campo se aproxima do vértice enquanto no cone superior o campo se afasta do vértice. Em relação à direção do campo, os cones têm sentido opostos, e como eles, neste caso, se comportam como sistemas independentes, ficamos com espectros distintos em cada cone.

Como perspectiva de futuros trabalhos, pretendemos nos aprofundar no entendimento dos efeitos proveniente de superfícies de cones duplos, especialmente em relação ao problema com campo magnético. Também pretendemos estudar superfícies de cones duplos de grafeno e de isolantes topológicos, uma vez que já obtemos o potencial de gauge que dá conta de possíveis descontinuidades nas subredes, podemos montar e solucionar a equação de Dirac para diversos problemas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [01] A.A. de Lima, C. Filgueiras. Integer quantum Hall effect on a interface with disclinations. *The European Physical Journal B.*, 85:401 (2012).
- [02] J. Bardeen, L.N. Cooper, J. R. Schrieffer. Theory of Superconductivity. *Physical Review Letters.*, 108, 1175 (1957).
- [03] B. L. Bernando. Time-Correlation and decoherence in a two-particle interferometer. *Brazilian Journal of Physics*, v. 44, p. 202-207 (2014).
- [04] V. M. Villalba, A.R. Maggiolo. Energy spectrum of a 2D Dirac electron in the presence of a constant magnetic field. *The European Physical Journal B.*, v. 22, p. 31-35 (2001).
- [05] B. Jensen, R. Dandoloff. Remarks on quantum mechanics on surfaces. *Physics Letters A.*, v. 375, p. 448-451 (2011).
- [06] R. C. T. da Costa. Quantum mechanics of a constrained particle. *Physical Review A.*, v. 23, n. 4, p. 1982-1987 (1981).
- [07] P. E. Lammert, V. H. Crespi. Topological phases in graphitic cones. *Physical Review Letters.*, v. 85, p. 5190-5193 (2000).
- [08] V. A. Osipov, A. Kochetov. Dirac fermions on graphite cones. *JETP Letters.*, v. 73, n. 10, p. 562-565 (2001).
- [09] M. J. Bueno, C. Furtado, A. M. de M. Carvalho. Landau levels in graphene layers with topological defects. *The European Physics Journal B.*, v. 85, n. 2, p. 1 (2012).
- [10] J. K. Pachos. Manifestations of topological effects in graphene. *Contemporary Physics.*, v. 50, n. 2, p. 375-389 (2009).
- [11] M. A. H. Vozmediano, M. I. Katsnelson, F. Guinea. Gauge field in graphene. *Physics Reports.*, v. 496, p. 109-148 (2010).
- [12] S. Q. Shen, W. Y. Shan, H. Z. Lu. Topological insulator and the Dirac equation. *Spin.*, v. 01, n. 01, p. 33-44 (2011).

- [13] D. H. Lee. Surface States of topological insulators: the Dirac fermion in curved two-dimensional spaces. *Physical Review Letters.*, v. 103, 196804 (2009).
- [14] J. M. Fonseca, W. A. M. Melo, A. R. Pereira. Geometrically induced electric polarization in conical topological insulators. *Journal of Applied Physics.*, v. 111, 064913 (2012).
- [15] K. S. Novoselov, A. K. Geim *et al.* Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science.*, 306, 666-669 (2004).
- [16] D. Schmeltzer. A-geometrical approach to topological insulators with edge dislocations. *New Journal of Physics.*, v. 14, 063025 (2012).
- [17] Z. Yang, J. H. Han. Landau level states on a topological insulator thin film. *Physical Review B.*, v. 83, 045415 (2011).
- [18] P. Schwab, M. Dzierzawa. Landau levels in a topological insulator. *Physical Review B.*, v. 85, 155403 (2012).
- [19] C. X. Liu, X. L. Qi *et al.* Model Hamiltonian for topological insulators. *Physical Review B.*, v. 82, 045122 (2010).
- [20] K. I. Imura, Y. Yoshimura *et al.* Spherical topological insulator. *Physical Review B.*, v. 86, 235119 (2012).
- [21] C. Filgueiras, F. Moraes. On the quantum dynamics of a point particle in conical space. *Annals of Physics.*, v. 323, p. 3150-3157 (2008).
- [22] C. Filgueiras, E.O. Silva, F.M. Andrade. Nonrelativistic quantum dynamics on a cone with and without a constraining potencial. *Journal of Mathematical Physics.*, v. 53, 122106 (2012).
- [23] K. Kowalski, J. Rembielinski. On the dynamics of a particle on a cone. *Annals of Physics.*, v. 329, p. 146-157 (2012).
- [24] J. J. Sakurai. *Advanced quantum mechanics*. 1st ed. Massachusetts: Addison-Wesley (1967).

- [25] N. D. Birrell, P. C. W. Davies. Quantum fields in curved space. Cambridge Monographs on Mathematical Physics (1982).
- [26] P. E. Lammert, V. H. Crespi. Graphene cones: Classification by fictitious flux and electronic properties. Physical Review B., v. 69, 035406 (2004).
- [27] D. V. Kolesnikov, V. A. Osipov. The continuum gauge field-theory model for low-energy electronic states of icosahedral fullerenes. The European Physical Journal B., v. 49, p. 465-470 (2006).
- [28] C. Furtado, F. Moraes *et al.* Landau levels in the presence of disclinations. Physics Letters A., v. 195, p. 90-94 (1994).
- [29] C. Furtado, F. Moraes. Landau levels in the presence of a screw dislocation. Europhysics Letters., v. 45 (3), p.279-282 (1999).
- [30] M. Burgess, B. Jensen. Fermions near two-dimensional surfaces. Physical Review A., v. 48, n. 3, p. 1861-1868 (1993).
- [31] M. Hayashi. Differential geometry and morphology of graphitic carbon materials. Physics Letters A., v. 343, p. 237-246 (2005).
- [32] C. Kittel. Introduction to solid state physics. 8th ed. Berkeley: John Wiley and Sons, Inc (2005).
- [33] N. Ashcroft.; N. Mermin. Solid state physics. 1st ed. Orlando: Harcourt (1976).
- [34] G. B. Arfken, H. Weber. Física matemática: métodos matemáticos para engenharia e física. Ed. Elsevier (2007).
- [35] E. Butkov. Mathematical Physics. 1st ed. Addison-Wesley (1973).
- [36] B. F. Schutz. Geometrical methods of mathematical physics. Cambridge University press (1980).
- [37] J. Baez, J.P. Muniain. Gauge Fields, Knots and gravity. World Scientific Publishing (1994).

- [38] E. S. Neri. Dinâmica Quântica em um Meio Elástico com uma Densidade de Defeitos Topológicos. Monografia, Departamento de Física UEFS (2011).
- [39] M. J. Bueno. Propriedades eletrônicas de grafeno com defeitos. Tese de doutorado. Departamento de física UFPB (2011).
- [40] J. R. F. de Lima. Propriedades eletrônicas da matéria topológica: heteroestruturas e efeitos de rotação. Tese de doutorado. Departamento de física UFPB (2013).
- [41] J. M. Fonseca. Algumas contribuições ao estudo do grafeno e dos isolantes topológicos. Tese de Doutorado. Departamento de física UFV.