

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

Tese de Doutorado

**DINÂMICA QUÂNTICA EM ESPAÇOS COM
DEFEITOS**

por

ANIBAL LIVRAMENTO DA SILVA NETTO

João Pessoa - Paraíba - Brasil

Fevereiro, 2010

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

ANIBAL LIVRAMENTO DA SILVA NETTO

DINÂMICA QUÂNTICA EM ESPAÇOS COM DEFEITOS

Tese apresentada à Coordenação do Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal da Paraíba como parte dos requisitos para a obtenção do grau de Doutor em Física. Área de concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. CLÁUDIO B. S. FURTADO

João Pessoa - Paraíba - Brasil

Fevereiro, 2010

S586d Silva Netto, Anibal Livramento da
Dinâmica quântica em espaços com defeitos / Anibal Livramento da Silva Netto. - -
João Pessoa: [s.n], 2010.
138f.: il.
Orientador: Cláudio B. S. Furtado.
Tese (Doutorado) - UFPB / CCEN.

1.Física. 2.Nanoestruturas. 3.Defeitos Topológicos. 4.Torção. 5.Curvatura.

UFPB/BC CDU:53(043)

ANIBAL LIVRAMENTO DA SILVA NETTO

DINÂMICA QUÂNTICA EM ESPAÇOS COM DEFEITOS

Este exemplar corresponde à redação final da Tese apresentada à Coordenação do Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal da Paraíba como parte dos requisitos para a obtenção do grau de Doutor em Física. Área de concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovada em 24 de fevereiro de 2010.

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. CLÁUDIO B. S. FURTADO – orientador (UFPB)

Prof. Dr. INÁCIO DE ALMEIDA PEDROSA (UFPB)

Prof. Dr. JOSÉ ROBERTO SOARES DO NASCIMENTO (UFPB)

Prof. Dr. CARLOS CHESMAN (UFRN)

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

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

1 Aos **vinte e quatro dias do mês de fevereiro do ano de dois mil e dez**, às **10:00**, na
2 sala de reuniões do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza
3 da Universidade Federal da Paraíba, reuniram-se os membros da Banca Examinadora
4 constituída para examinar o candidato ao grau de Doutor em Física, na área de Física da
5 Matéria Condensada, o Sr. **Aníbal Livramento da Silva Netto**. A comissão
6 examinadora composta pelos professores doutores: *Cláudio Benedito da Silva Furtado*
7 (UFPB), orientador e presidente da banca examinadora, --- (---), co-orientador, *Inacio*
8 *de Almeida Pedrosa* (UFPB), *Jose Roberto Soares do Nascimento* (UFPB), *Carlos*
9 *Chesman* (UFRN) e *Alexandre Manoel de Moraes Carvalho* (UEFS). Dando início aos
10 trabalhos, o Prof. *Cláudio Benedito da Silva Furtado* comunicou aos presentes a
11 finalidade da reunião. A seguir, passou a palavra ao candidato para que o mesmo
12 fizesse, oralmente, a exposição do trabalho de tese intitulado “*Dinâmica quântica em*
13 *espaços com defeitos*”. Concluída a exposição, o candidato foi argüido pela Banca
14 Examinadora que emitiu o seguinte parecer: “**aprovado**”. Assim sendo, deve a
15 Universidade Federal da Paraíba expedir o respectivo diploma de Doutor em Física na
16 forma da lei. E para constar, eu, Danilo Wilson Lemos Menezes, servindo de Secretário,
17 lavrei a presente ata que vai assinada por mim mesmo e pelos membros da Banca
18 Examinadora. João Pessoa, Paraíba, 24 de fevereiro de 2010.

19

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

Cláudio Furtado

Prof. Dr. ---

NÃO HÁ

Co-orientador - ---

Prof. Dr. Inacio de Almeida Pedrosa
UFPB

Inacio Pedrosa

Prof. Dr. Jose Roberto Soares do Nascimento
UFPB

Jose Roberto Soares do Nascimento

Prof. Dr. Carlos Chesman
UFRN

Carlos Chesman

Prof. Dr. Alexandre Manoel de Moraes
Carvalho
UEFS

Alexandre de Moraes Carvalho

Danilo Wilson Lemos Menezes
Secretário

Danilo Wilson Lemos Menezes

A Deus, meu Senhor e Salvador

À minha esposa Sayonara

Aos meus pais, meus irmãos e minha avó Duva

Aos meus avós maternos, Anibal e Tidinha (in memoriam)

Aos meus amigos.

AGRADECIMENTOS

Primeiro a Deus, causa e efeito da minha existência e perseverança: obrigado!

Ao amor da minha vida, minha esposa Sayonara.

Aos meus pais, Edson e Edinalva, por quem hoje sou, pelas lições de vida, amor e carinho que me dedicaram: amo vocês! Longe de vocês, com muitas saudades, os levo onde quer que eu vá. Aos meus irmãos Gerson, Milena e Yuri: os amo muito! E a todos os meus demais familiares.

Ao Prof. Cláudio Furtado, pela orientação.

Aos meus amigos de Feira de Santana, Aracaju, Natal, João Pessoa e São Raimundo, que acompanharam todo o esforço para que esta tese ficasse pronta.

Aos professores das disciplinas que cursei desde o Ensino Fundamental à pós-graduação.

À D. Nazaré e a Ana, do Departamento de Física da UFPB, pelo auxílio e boa convivência. Ao Danilo da Coordenação de Pós-graduação. Ao seu Mariano (sempre engraçado) e à Josélia da biblioteca setorial da Física.

Ao coordenador e ao sub-coordenador do Colegiado de Engenharia Mecânica da

Universidade Federal do Vale do São Francisco (CENMEC/UNIVASF) pelo apoio para que eu pudesse estar em João Pessoa para minha defesa de tese.

E a todos aqueles que direta ou indiretamente contribuíram para o ser humano e profissional que me tornei mas que não foram citados explicitamente.

Ao CNPq pelo auxílio financeiro durante a execução do trabalho.

RESUMO

Neste trabalho estudamos a dinâmica de partículas em um espaço não-euclidiano. Inicialmente, estudamos a dinâmica de uma partícula em um espaço com um defeito topológico linear, para um confinamento através de um potencial que consegue modelar diferentes sistemas mesoscópicos [1, 2, 3]. Através da abordagem de massa efetiva [4, 5], pode-se aplicar nossos resultados a nanoestruturas semicondutoras.

Em um segundo momento, estudamos a dinâmica quântica de uma partícula, também na abordagem de massa efetiva, para o confinamento em um espaço esférico. O potencial confinante tratado é similar ao da referência [7], só que agora ajustado para uma superfície de curvatura positiva. Estudamos a dinâmica para o espaço esférico em duas situações: com e sem a inserção de um defeito topológico.

Em um terceiro momento, estudamos a dinâmica, tanto relativística quanto não-relativística, para um espaço com uma densidade de defeitos.

Parte dos resultados desta tese foram publicados nas referências [8, 9].

Palavras-Chave: Nanoestruturas; Defeitos Topológicos; Torção; Curvatura.

ABSTRACT

In this work we studied the quantum dynamics of particles in a non-euclidian space. First, we studied the dynamics of a particle in a space with a linear topological defect, by confinement potential which mimics different mesoscopic systems [1, 2, 3]. By the effective mass approach [4, 5], one can apply our results to semiconductor nanostructures.

Second, we studied the quantum dynamics of a particle, also in the effective mass approach, for the confinement in a spherical space. The confinement potential presented is alike the one in reference [7], but now fitted to a surface with positive curvature. We studied the dynamics for the spherical space in two situations: with and without including a topological defect.

Third, we studied, both relativistic and non-relativistic, for a space with a density of defects.

Some results from this thesis were published in references [8, 9].

Keywords: Nanostructures; Topological Defects; Torsion; Curvature.

Lista de Figuras

1.1	Esquema de funcionamento de um dessalinizador à base de nanotubos de carbono. Fonte: referência [20].	3
1.2	Heteroestrutura GaAs/AlGaAs formando um gás de elétrons bidimensional (<i>2DEG</i>).	6
1.3	Pontos Quânticos utilizados em aplicações fotovoltaicas.	6
1.4	Fio Quântico na presença de um fluxo magnético e o aparecimento de correntes persistentes.	8
1.5	Representação gráfica do Efeito Aharonov Bohm.	9
1.6	Perfil de energia para um <i>antidot</i>	11
1.7	Etapas da geração de uma desclinação positiva através do processo de Volterra	22
1.8	À esquerda temos uma deslocação lateral e à direita uma deslocação tipo hélice. Aqui \mathbf{b} representa o vetor de Burgers.	23
2.1	\mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} e \mathbf{D} representam as áreas de terra firme (\mathbf{B} e \mathbf{C} , duas margens; \mathbf{A} e \mathbf{D} , duas ilhas). Os elementos a, b, c, d, e, f, g são linhas associadas às sete pontes.	29
2.2	Fita de Möbius e não-orientabilidade.	31
2.3	Como fazer uma fita de Möbius.	31

2.4	Em cada uma das situações (a) e (b) é vista a distinção entre as regiões dos buracos e a região “usual” de cada espaço. A situação em (a) representa um espaço multiconexo, enquanto que a situação em (b) representa um espaço simplesmente conexo.	36
2.5	Esquema da representação de um mapa contínuo que leva a geometria de uma caneca naquela de um pneu.	37
2.6	Esquema de representação de uma variedade.	41
2.7	Linhas eqüipotenciais entre duas placas paralelas	52
2.8	Linhas de campo elétrico entre duas placas paralelas	52
2.9	Superfícies representando: (a) $d\rho$, (b) dz e (c) $d\phi$	53
2.10	Elemento de arco infinitesimal ao longo da direção $\hat{\phi}$	54
2.11	Postulado quinto de Euclides e a intersecção de duas retas.	59
2.12	Soma dos ângulos internos de um triângulo para duas geometrias não-euclidianas	60
3.1	Confinamento do tipo Parede Rígida.	66
3.2	Potencial de Tan e Inkson que modela sistemas mesoscópicos no plano.	74
3.3	Potencial de Tan e Inkson em torno do raio mínimo ρ_0 . A linha contínua representa o potencial definido em (3.43), para um anel de <i>GaAs</i> com $\rho_0 = 800 \text{ nm}$ e $\Delta\rho = 300 \text{ nm}$, com energia de Fermi $E_f = 2 \text{ meV}$. A linha tracejada corresponde ao perfil parabólico $\frac{1}{2}\mu\omega_0^2(\rho - \rho_0)^2$ com $\hbar\omega_0 = 0,449 \text{ meV}$. Fonte: Referência [1].	75
4.1	Projeção estereográfica da esfera: Visão longitudinal.	88
4.2	Projeção estereográfica da esfera: Visão espacial.	88

Lista de Tabelas

1.1	Energias do <i>gap</i> e massas efetivas de semicondutores importantes a 300 K. Utiliza-se a massa de repouso do elétron $\mu_0 = 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$. Fonte: Referência [5].	14
-----	--	----

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Sistemas Mesoscópicos e algumas de suas aplicações	1
1.2	Pontos quânticos, fios quânticos e <i>antidots</i>	4
1.3	Quantização em heterojunções e abordagem de massa efetiva	10
1.3.1	Efeito de um campo magnético externo	14
1.4	Exemplos de Influência da geometria na Física	15
1.4.1	A Geometria da gravidade	15
1.4.2	Teoria Geométrica de Defeitos	18
1.5	Sistemas estudados neste trabalho	25
2	BREVE REVISÃO DE GEOMETRIA E TOPOLOGIA	27
2.1	Uma questão de conexidade	27
2.2	Mapeando conjuntos com suavidade	38
2.3	Formas Diferenciais	51
2.4	O que são geometrias não-euclidianas?	58
3	SISTEMAS MESOSCÓPICOS NA PRESENÇA DE UM DEFEI- TO TOPOLÓGICO	62
3.1	Anéis e fios quânticos em um espaço com uma dispiração	62
3.1.1	Fio Quântico	63

3.1.2	Anel quântico modelado via Potencial <i>Parede Rígida</i>	66
3.2	Potencial de Tan e Inkson	72
3.2.1	Confinamento de Tan e Inkson aplicado a um espaço plano bidimensional	72
3.2.2	Confinamento de Tan e Inkson aplicado a uma dispiração . . .	80
3.2.3	Inclusão de um Campo Externo	83
4	SISTEMAS MESOSCÓPICOS EM UM ESPAÇO COM CURVA- TURA	86
4.1	Esfera	86
4.2	Esfera com uma desclinação	92
4.3	Discussão dos Resultados	97
5	DINÂMICA PARA UMA DENSIDADE DE DEFEITOS	98
5.1	Espaço com torção	99
5.2	Dinâmica Quântica não-relativística para a densidade de defeitos . . .	102
5.2.1	Partícula Livre	102
5.2.2	Partícula sob ação de um Campo Magnético	105
5.3	Dinâmica Quântica relativística para a densidade de defeitos	106
5.3.1	Equação de Klein-Gordon para partícula livre e com <i>spin</i> nulo	107
5.3.2	Equação de Klein-Gordon para partícula com <i>spin</i> nulo sujeita à ação de um campo magnético	109
5.3.3	Limite não-relativístico	111
6	CONCLUSÕES	112
	Referências	115

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

Nesta tese investigamos alguns sistemas onde há curvatura ou torção, ou ambos. Nessa conjuntura, buscamos obter indícios da influência de aspectos geométricos nas propriedades físicas destes sistemas.

1.1 Sistemas Mesoscópicos e algumas de suas aplicações

O prefixo *meso* significa “entre” ou “intermediário”. Sistemas mesoscópicos têm dimensões maiores que a escala atômica mas, por outro lado, são muito pequenos quando comparados à escala dos objetos macroscópicos. Tais sistemas têm dimensões da ordem de nanômetros ($10^{-9}m$): isso corresponde a ordens de grandeza milhares de vezes menores que a espessura do fio de cabelo de uma pessoa. São sistemas que, mesmo podendo chegar a algumas dezenas de átomos, têm seu comportamento influenciado por efeitos de interferência quânticos.

Devido à escala nanométrica envolvida, os sistemas mesoscópicos são costumeiramente conhecidos como *nanoestruturas*, sendo a tecnologia desenvolvida a partir deles rotulada como *nanotecnologia*. Nanoestruturas exibem propriedades físicas e

químicas não-usuais e bem diferentes dos sistemas macroscópicos.

Dentre os sistemas mesoscópicos naturais podemos citar a *porfirina*, que é uma molécula também presente na hemoglobina, sendo responsável pelo transporte dos gases no sangue [10].

São conhecidas várias aplicações biotecnológicas que já são uma realidade ou que poderão ser em um futuro próximo [11]. Dentre as aplicações biomédicas podemos citar a detecção de microbactérias responsáveis pela tuberculose [12], o desenvolvimento de tecidos com propriedades anti-bacterianas [13] e biosensores para detecção de proteínas [14, 15]. Na indústria têxtil, o desenvolvimento de nanotêxteis à prova d'água e de manchas e de uniformes militares com características especiais [16]. Na indústria alimentar destacam-se os processos de proteção contra contaminação microbiana, bem como a manipulação de sabor, conteúdo nutricional e textura dos alimentos [17]. Até mesmo o ramo da estética é afetado pelos avanços da Nanotecnologia: destaquem-se, por exemplo, a produção de novos cosméticos e o desenvolvimento de protetores solares mais eficazes [18].

Na conjuntura mundial atual de preocupação com o Meio Ambiente, economia dos recursos naturais e redução do uso de combustíveis fósseis, a Nanotecnologia também se faz atuante. Consoante isto, é interessante a questão da escassez de água doce, que já assola muitos países, e que em algumas décadas será um problema grave para todos os habitantes da Terra. Isso posto, um dos meios conhecidos para se obter água potável é o processo de dessalinização convencionais. Todavia, os mecanismos tradicionais de dessalinização trazem pelo menos dois graves problemas: primeiro, como subproduto do processo, resta uma quantidade de água altamente salgada que, se jogada *na natureza*, traz sérios danos ambientais; segundo, seu custo energético é elevado. Uma alternativa relativamente recente de dessalinização surgiu via utilização de dispositivos à base de nanotubos [19, 20] de carbono¹. A seguir

¹Os nanotubos de carbono constituem uma das formas alotrópicas do carbono; outras formas conhecidas são os fulerenos, o grafeno, o diamante e a grafite.

descrevemos o funcionamento de tais dessalinizadores [20]. Basicamente, há um capacitor, constituído de duas placas metálicas. Às placas do capacitor são aderidos filamentos de nanotubos de carbono (semelhantes a fios de cabelo). Entre essas placas é aplicada uma tensão elétrica da ordem de 1 volt. Quando é injetada água salina nesse dispositivo os íons de sódio e cloro (respectivamente, positiva e negativamente carregados) são atraídos para placas diferentes do capacitor, sendo adsorvidos². Os nanotubos, devido a sua grande área por unidade de massa, conseguem, assim, reter uma grande quantidade de íons. E remover os íons adsorvidos (para reutilização dos nanotubos em novas filtragens) é simples: reverte-se a polaridade das placas do capacitor, os íons adsorvidos são repelidos e pronto. O processo pode ser reiniciado.

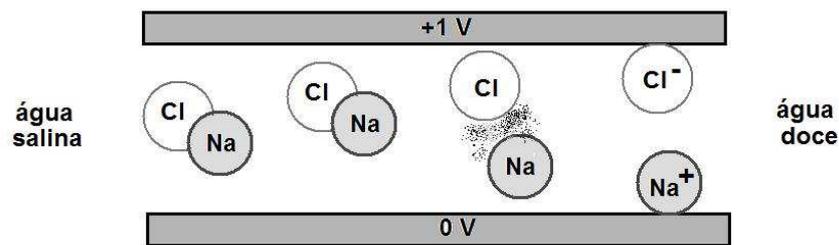


Figura 1.1: Esquema de funcionamento de um dessalinizador à base de nanotubos de carbono. Fonte: referência [20].

Nanotubos de carbono, a propósito, têm outras aplicações além da filtragem de água. Para efeito de exemplo, uma outra aplicação tecnológica dos nanotubos de carbono seria em filamentos de lâmpadas, evidenciada em um trabalho de 2004 devido a Jinqian Wei e colaboradores [20]. Neste caso, os nanotubos apresentaram, dentre as vantagens em comparação com os filamentos de tungstênio:

1. Irradiam intensamente a temperaturas bem menores que as dos filamentos de

²Os íons se fixam nos nanotubos.

tungstênio, o que ocasiona uma menor perda por efeito Joule.

2. Diferente do tungstênio (que só irradia por aquecimento do filamento), as lâmpadas baseadas em nanotubos de carbono também apresentam eletroluminescência³.
3. Além disso, a eletroluminescência dos nanotubos de carbono ocorre na região do espectro visível⁴, representando um ganho em eficiência em relação às lâmpadas incandescentes de tungstênio.

Outro ator nesse panorama nanotecnológico é a nanopartícula magnética. Esta nanoestrutura pode ser usada em aplicações distintas, indo desde o tratamento de câncer até a remoção de manchas de petróleo em águas contaminadas por vazamento. No caso da aplicação oncológica há dois processos bastante conhecidos. O primeiro consiste no encapsulamento de fármacos em nanopartículas magnéticas: as nanoestruturas têm seu movimento controlado pelo médico e a droga encapsulada é liberada no local (do organismo do paciente) que o médico prescrever. Por sua vez, uma outra aplicação é “alimentar” tumores com nanopartículas magnéticas e, em seguida, ligando-se campos magnéticos oscilantes, os tumores “alimentados” são aquecidos pelo campo oscilante, sendo destruídos quando atingem determinada temperatura [20].

1.2 Pontos quânticos, fios quânticos e *antidots*

Dentre os sistemas mesoscópicos mais conhecidos temos os pontos quânticos, os *antidots* e os fios quânticos.

Os pontos quânticos são estruturas que se caracterizam pelo confinamento nas três direções espaciais para os elétrons. Isto implica na completa localização dos

³Isto é, emitem luz quando uma corrente elétrica passa por eles.

⁴Isto é, região de frequências para as ondas luminosas que sensibilizam nossos olhos.

portadores, semelhante ao que acontece com os átomos [21, 22, 23, 24]. Daí também serem conhecidos como átomos artificiais [25].

Os efeitos do confinamento em nível quântico já eram conhecidos muito antes do advento dos pontos quânticos. Tais estudos de confinamento eram possíveis devido a técnicas de crescimento de *heteroestruturas*, por exemplo, a epitaxia por feixe molecular (do inglês *Molecular Beam Epitaxy* ou MBE). Para entender em que consiste a MBE, é necessário entender o que são heteroestruturas.

Quando crescemos um certo material sobre um substrato de mesmo tipo temos uma homoestrutura; por outro lado, quando o substrato e o material a ser crescido são distintos, temos uma heteroestrutura. Quando o crescimento ocorre ao longo de uma direção ou eixo diretor, temos um processo de epitaxia. A (MBE) é uma técnica segundo a qual são injetados feixes de moléculas sobre o substrato, possibilitando a construção de poços quânticos e heterojunções com níveis de energia quantizados, com movimento livre de portadores no plano ortogonal a z (ou seja, no plano XY). O controle desse confinamento é feito a partir da escolha dos parâmetros de crescimento da heteroestrutura. Desse modo podemos obter um gás de elétrons bidimensional (2DEG).

Um exemplo de montagem experimental para pontos quânticos é através de um gás de elétrons bidimensional colocado como interface entre um semicondutor e um isolante (este último colocado sobre uma camada metálica). Eletrodos metálicos colocados sobre a camada semicondutora criam potenciais sobre o gás de elétrons que confinam o movimento dos elétrons a certas regiões do plano [25], conforme é visto na Figura 1.2. O número N de partículas no dispositivo pode ser ajustado por um potencial ao qual o ponto quântico está ligado. Por sua vez, a condutância do sistema está relacionada ao número N e em geral ela é bem definida para os casos onde as condutâncias das junções que se conectam ao ponto quântico são pequenas em comparação com o *quantum* de condutância, a saber, $\frac{e^2}{h}$ [26]. As constantes e e

h são, respectivamente, a carga elétrica e a constante de Planck.

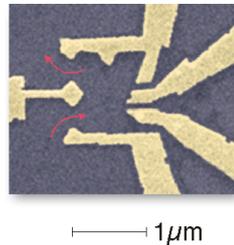
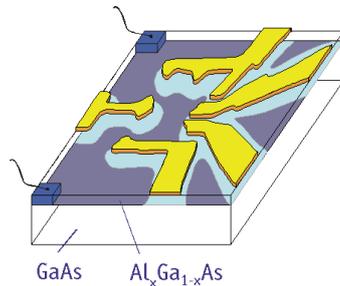


Figura 1.2: Heteroestrutura GaAs/AlGaAs formando um gás de elétrons bidimensional (2DEG).

Figura 1.3: Pontos Quânticos utilizados em aplicações fotovoltaicas.

Devido ao confinamento espacial, os pontos quânticos se caracterizam por apresentar níveis discretos de energia. Uma aplicação simples dessa propriedade física seria para a construção de laser e fotodetectores, aproveitando o fato de que as transições entre os níveis ocorram para energias bem definidas [4, 21].

Sabe-se da literatura que a coloração dos pontos quânticos depende mais das suas dimensões que do material de que é feito. Quanto maior o ponto quântico, mais para o vermelho do espectro tende a fluorescência⁵; quanto menor, mais para o azul ela tende. A fluorescência em pontos quânticos se deve à recombinação radiativa de um par elétron-buraco excitado, o *exciton* [22]. Exemplos de aplicação de aplicação dessa tecnologia em nosso cotidiano são os novos Playstation 3 e tocadores de DVD, os quais utilizam um laser azul para leitura de dados. Os pontos quânticos também podem ser aplicados em dispositivos fotovoltaicos para o aproveitamento de energia solar (ver Figura 1.3).

Outra possível aplicação futura para os pontos quânticos é na *Computação Quântica*, como substitutos aos bits clássicos. Enquanto, em Computação Clássica,

⁵A fluorescência é o processo de emissão de um fóton na passagem de um estado eletrônico de energia mais alta para um estado de energia mais baixa.

os bits 0 e 1 são obtidos a partir da variação de tensão em circuitos, em Computação Quântica temos os chamados *qubits*, os quais são implementados a partir de sistemas quânticos. Existem, inclusive, alguns critérios [27] que se espera sejam satisfeitos pelos sistemas que atuarão como *qubits*. Alguns deles são listados a seguir

- São utilizados sistemas de dois níveis que podem ser identificados separadamente, endereçáveis e adicionáveis.
- Deves ser possível desacoplar os *qubits* completamente, ou com uma acurácia elevada. Além disso, deve ser possível colocar os *qubits* no estado $|0\rangle$.
- O tempo de descoerência deve ser longo.

Nesse aspecto, os pontos quânticos constituem um dos sistemas da Matéria Condensada propostos para a implementação dos computadores quânticos [28, 29, 30].

Fios quânticos, nanofios ou anéis quânticos são estruturas que têm uma dimensão lateral confinada e uma dimensão longitudinal livre com dimensões envolvidas que são da ordem de nanômetros. Dentre os tipos de materiais com que os nanofios podem ser feitos temos os metais (de níquel, prata), isolantes (TiO_2) e semicondutores (InP , $GaAs$). Para os nanofios surgem os efeitos de borda, onde átomos na superfície do nanofio não se ligam fortemente aos átomos vizinhos e atuam como “obstáculos” à condução, diminuindo drasticamente a condutividade quando comparada ao *bulk*⁶. Vemos, dessa forma, que o transporte balístico⁷ não ocorre. Anéis metálicos de dimensões mesoscópicas em um campo magnético externo exibem uma gama de fenômenos físicos interessantes tais como : o efeito Aharonov-Bohm, o efeito Hall quântico, correntes persistentes, fases de Berry e o efeito spin-órbita [31, 32]. Recentemente muitos modelos teóricos que levam em consideração anéis de dimensões finitas [33, 2, 3, 34] tais como: anéis 2D com potencial confinante

⁶Entenda-se bulk como átomos agrupados formando uma estrutura extensa.

⁷O regime de transporte balístico ocorre quando a resistividade causada pelo espalhamento por obstáculos no meio é desprezível

tipo “hardwall” [35], potenciais parabólicos [33, 1], etc. Dentre os possíveis efeitos

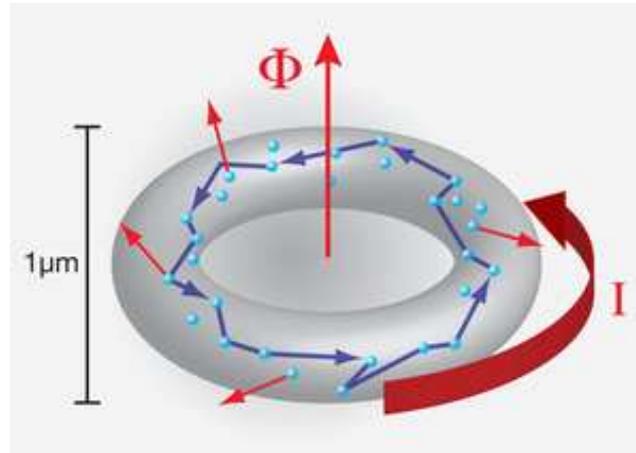


Figura 1.4: Fio Quântico na presença de um fluxo magnético e o aparecimento de correntes persistentes.

que se pode estudar a partir dos fios quânticos estão o efeito Aharonov-Bohm e as correntes persistentes.

O efeito Aharonov-Bohm é um fenômeno quântico em que uma partícula eletricamente carregada interage com um campo eletromagnético mesmo estando em uma região onde os campos elétrico e magnético estão blindados para ela. Ao fluxo associado a esse campo magnético blindado podemos chamar *fluxo de Aharonov-Bohm* Φ_{AB} . Tal interação é percebida a partir do potencial vetor \vec{A} que, a partir desse efeito, mostra ter um significado físico [36]. Segundo esse efeito, uma partícula com carga q em uma região onde o campo magnético \vec{B} é nulo, mas o potencial vetor \vec{A} é não-nulo, adquire sofre um deslocamento de fase γ dado por

$$\gamma = \frac{q}{\hbar} \int \vec{A} \cdot d\vec{r} \quad , \quad (1.1)$$

e duas partículas que têm os mesmos pontos de partida 1 e de chegada 2 apresentam

uma diferença de fase

$$\Delta\gamma = \frac{q\Phi}{\hbar} \quad , \quad (1.2)$$

onde Φ é o fluxo magnético “furando” a região entre as trajetórias das duas partículas, conforme a Figura 1.5.

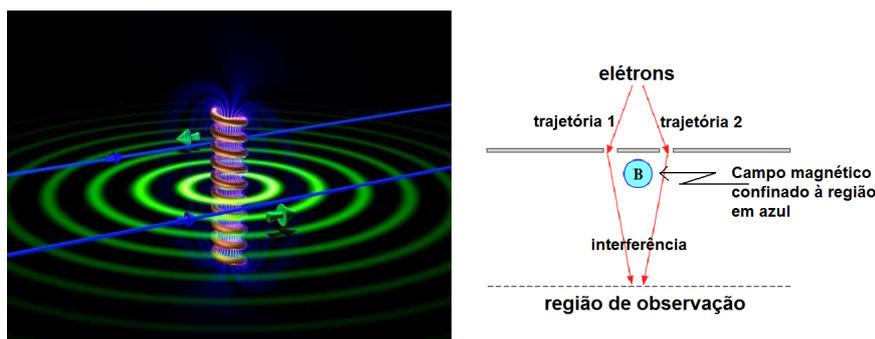


Figura 1.5: Representação gráfica do Efeito Aharonov Bohm.

As correntes persistentes ocorrem quando há um fluxo magnético passando na região central de um anel. O nome “persistente” vem da característica dessas correntes não diminuírem por efeitos de dissipação, podendo fluir por um longo período, mesmo em materiais condutores normais.

Desde muito tempo era conhecido que propriedades como energia média e magnetização de um sistema de elétrons livres, com dimensões pequenas, e apresentando a geometria ideal de um disco perfeito ou anel são sensíveis ao campo magnético aplicado [37, 38, 39]. No caso em que existe um fluxo Φ_{AB} perpassando o anel, as funções termodinâmicas (energia, magnetização etc) são periódicas, tal que $\Phi_0 = \frac{hc}{e}$ é o seu período⁸. Ressalte-se que a periodicidade mencionada, para moléculas, se torna perceptível para campos magnéticos bastante elevados (da ordem de $10^5 T$ ou mais) [40].

⁸Aqui, em unidades gaussianas, Φ_0 representa um *quantum* de fluxo, h é a constante de Planck, c é a velocidade da luz no vácuo e e é a carga elementar.

Um trabalho teórico interessante [7] a respeito de fios quânticos foi publicado em 2004 onde é estudado um gás de elétrons bidimensional sobre uma superfície de curvatura negativa. O confinamento deste sistema se faz através de um potencial. O potencial confinante utilizado é uma adaptação do modelo de confinamento proposto no artigo pioneiro de W-C Tan [1], agora levando em conta a contribuição da curvatura para o confinamento. Na referência [7] foi mostrado que a curvatura da superfície influencia decisivamente o espectro de autovalores e a intensidade de correntes persistentes que existam, por exemplo.

Um *quantum antidot*⁹ pode ser obtido a partir da sobreposição de fortes espalhadores em um gás de elétrons bidimensional, normalmente perfurando buracos em um intervalo regular em um gás de elétrons com alta mobilidade. O perfil do potencial para um antidot é semelhante ao de um ponto quântico visto de forma invertida: enquanto o potencial do ponto quântico é uma função convexa, o do antidot é uma função côncava. Ou ainda, podemos ver o *antidot* como um exemplo de barreira de potencial bidimensional.

1.3 Quantização em heterojunções e abordagem de massa efetiva

Nesta seção discutimos, sucintamente, a abordagem de massa efetiva para portadores de carga em um cristal. A partir desse tratamento pode-se lidar com sistemas de N partículas a partir de resultados obtidos para o problema de uma partícula. Com essa finalidade, chegaremos a equação de movimento de um elétron em uma banda de energia¹⁰. Investigaremos o comportamento de um pacote de

⁹Aqui preferimos utilizar o termo *quantum antidot* em lugar de “antifio” quântico, que seria a tradução literal do inglês.

¹⁰Um sólido, em geral, é formado por vários elétrons, os quais interagem com átomos vizinhos. Quando aproximamos vários átomos isolados, cada um perturba levemente os níveis de energia do outro. Aproximando um grande número de átomos, surgem vários níveis de energia muito

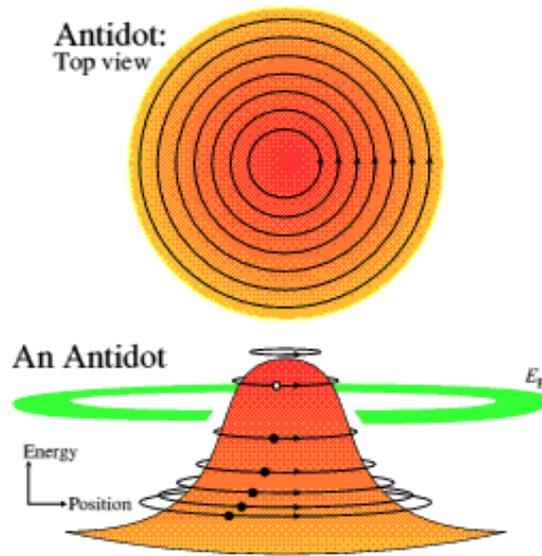


Figura 1.6: Perfil de energia para um *antidot*.

onda na presença de um campo elétrico externo. Assim, seja um pacote de onda, associado ao vetor de onda \vec{k} , que se movimenta com a velocidade de grupo

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} \quad . \quad (1.3)$$

De acordo com a teoria quântica, a energia E associada a uma certa função de onda se relaciona com a frequência ω através de

$$E = \hbar \omega \quad , \quad (1.4)$$

e assim,

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} \quad . \quad (1.5)$$

próximos uns dos outros, formando uma estrutura de níveis quase contínua no lugar dos níveis discretos de cada átomo individual. Essa estrutura de níveis quase contínua recebe o nome de **banda de energia**.

Os efeitos do cristal sobre o movimento do elétron estão contidos na relação de dispersão [4] $E(\vec{k})$. Por sua vez, se o elétron for submetido a uma força \vec{F} , de um campo elétrico, por exemplo, este campo realiza um trabalho sobre o elétron tal que

$$dE = F dx \quad . \quad (1.6)$$

Combinando (1.5) e (1.6), chegamos a expressão

$$F = \hbar \frac{dk}{dt} \quad , \quad (1.7)$$

que é a segunda lei de Newton para um elétron com *momentum* $\hbar k$ e, desta forma,

(...) o potencial da rede cristalina não afeta a forma da equação de variação do *momentum*. O que ela altera altera é a dependência da energia com o *momentum*, que corresponde a mudar a massa do elétron. ([5], p. 102)

A conclusão supracitada é evidenciada se obtemos o módulo da aceleração a do elétron em termos de E e k , lembramos da segunda lei de Newton para o caso em que a massa é constante, chegando a expressão

$$F = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2} a \quad , \quad (1.8)$$

que representa a segunda lei de Newton para um sistema onde a massa é constante para uma massa efetiva da forma

$$\mu = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2} \quad . \quad (1.9)$$

Para uma situação mais geral onde, além do módulo de \vec{k} , a energia E venha a

dependem também da direção¹¹ de \vec{k} , teremos a massa efetiva como uma grandeza tensorial representada por uma matriz, onde o elemento $\alpha\beta$ é dado por

$$\mu_{\alpha\beta} = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k_\alpha \partial k_\beta} \quad . \quad (1.10)$$

A definição acima é válida para elétrons em metais ou em semicondutores. Uma forma de obter a massa efetiva dos portadores (elétrons ou buracos) em semicondutores é através da ressonância de ciclotron nas bandas de condução e de valência próximas do extremo da banda. Segundo esse processo, os portadores são acelerados em órbitas helicoidais em torno do eixo de um campo magnético. A partir de campos elétricos oscilantes e perpendiculares ao campo magnético aplicado (causa da ressonância de ciclotron) se obtém absorção ressonante de energia (quando a frequência do campo oscilante coincide com a frequência de ciclotron) [4].

Vale lembrar que os valores das massas efetivas dos elétrons e dos buracos são distintos. Isso se explica a partir da “origem” da massa efetiva de cada um deles: a expressão de massa efetiva dos elétrons advém da banda de condução, enquanto a do buraco advém da banda de valência. Haja vista que as formas das bandas de valência e de condução não são iguais, as massas efetivas do elétron e do buraco, para um mesmo material, também serão diferentes [5]. Na Tabela 1.1 são apresentados os valores de energia de *gap*¹² e massas efetivas, de elétron (μ_e) e de buraco (μ_b), para alguns cristais semicondutores.

¹¹Neste caso, temos uma superfície de energia eletrônica anisotrópicas, que é o caso, por exemplo, dos elétrons no silício (Si) e no germânio (Ge) [4].

¹²Nos semicondutores, no zero absoluto, todos elétrons encontram-se na banda de valência. À medida que sua temperatura aumenta, os elétrons absorvem energia passando para a banda de condução. Esta “quantidade” de energia necessária para a transição entre tais bandas é chamada energia de *gap*.

Cristal	$E_g(eV)$	$\frac{\mu_e}{\mu_0}$	$\frac{\mu_b}{\mu_0}$
GaAs	1,43	0,068	0,5
InSb	0,18	0,013	0,6
InP	1,29	0,07	0,4

Tabela 1.1: Energias do *gap* e massas efetivas de semicondutores importantes a 300 K. Utiliza-se a massa de repouso do elétron $\mu_0 = 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$. Fonte: Referência [5].

1.3.1 Efeito de um campo magnético externo

No caso de nanoestruturas, o efeito de um campo magnético pode ser aproximadamente separado em dois casos. Um, quando o campo magnético está orientado paralelamente a uma das direções de propagação de elétrons livres; outro, quando este campo é perpendicular ao movimento livre do sistema. Neste caso os portadores de carga estarão sujeitos a uma força de Lorentz e, na ausência de outras forças, descreverão um movimento circular com frequência

$$\omega_c = \frac{eB}{\mu_c} \quad , \quad (1.11)$$

onde ω_c é chamada frequência de ciclotron. Aqui e , μ_c são, respectivamente, a carga do portador e a massa de ciclotron [6]; B representa a intensidade do fluxo de indução magnética externo. A expressão (1.11) é dada no Sistema Internacional de Unidades (SI).

Para sistemas isotrópicos, a massa de ciclotron equivale à massa efetiva do elétron μ_e . As órbitas circulares descritas pelos portadores sujeitos à força de Lorentz serão semelhantes ao que ocorre no caso da quantização devido a um potencial central. Assim, o espectro associado à dinâmica no plano perpendicular ao campo magnético será discreto. Conforme vemos na referência [6], será possível, consoante isto, tratar o sistema do 2DEG a partir do problema de uma partícula (com massa igual à massa

efetiva do sistema no plano do 2DEG) sujeita a um campo magnético externo.

Se escolhermos um *gauge* de Landau dado por $\vec{A} = (0, Bx, 0)$, a abordagem de massa efetiva nos leva à seguinte equação de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2\mu} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla_{\vec{r}} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V_{ef}(z) \right] \psi(\vec{r}, z) = E\psi(\vec{r}, z) \quad , \quad (1.12)$$

onde $V_{ef}(z)$ é a energia potencial efetiva normal à interface, m_z é a massa efetiva na direção perpendicular à heterointerface e μ é a massa efetiva na direção paralela à heterointerface. Aqui o problema é separável, com $\psi(\vec{r}, z) = \varphi(z)\chi(x, y)$.

1.4 Exemplos de Influência da geometria na Física

Nesta seção apresentamos situações onde a geometria foi utilizada para a descrição de fenômenos físicos. Primeiro, mencionamos a Teoria da Relatividade Geral que transforma a interação gravitacional em um aspecto geométrico. Em seguida, apresentamos a Teoria Geométrica de Defeitos a qual, a partir de ferramentas da Geometria Diferencial, consegue descrever sistemas da Matéria Condensada, Gravitação e Cosmologia.

1.4.1 A Geometria da gravidade

Com o advento da Teoria da Relatividade Geral a interação gravitacional apresenta-se como um aspecto geométrico. Tudo começa com a chamada Teoria da Relatividade Restrita. Nesse novo paradigma, espaço e tempo não existem isoladamente, mas em um *continuum* espaçotempo. Caem por terra idéias de espaço e tempo como entes separados e absolutos. Um exemplo dessa interdependência entre tempo e espaço é vista a partir da dependência com a

velocidade sentida por observadores que medem o tempo para um evento em referenciais diferentes. Grandezas como momento linear¹³ e comprimento também dependerão do movimento relativo do corpo (para o qual se mede tais quantidades) em relação ao observador. Acrescente-se a isso a relatividade da simultaneidade, segundo a qual dois eventos tidos como simultâneos em um dado referencial provavelmente não o serão em outro referencial.

A Teoria da Relatividade Restrita estudava sistemas em referenciais inerciais e foi apenas o prenúncio de algo mais geral para descrever o Universo. Nessa conjuntura surge a Teoria da Relatividade Geral. Conforme dito no início desta seção, agora a gravidade tem um caráter geometrizável. Einstein mostrou com suas equações que a luz era desviada por corpos massivos, fato comprovado por observações no céu de Sobral, estado do Ceará, no início do século XX. A explicação para esse desvio sofrido pela luz, uma forma de radiação eletromagnética, é que corpos massivos deformam o espaço-tempo ao seu redor. Uma forma de mostrar uma analogia para essa deformação é o exemplo famoso da cama elástica. Imagine então uma cama elástica sobre a qual colocamos uma bola de basquete, com certa massa. Essa bola causará um afundamento na cama elástica, que pode ser observado se colocarmos bolinhas de gude, por exemplo, nas proximidades da região onde a bola de basquete se encontra: as bolinhas de gude descreverão trajetórias que tendem a “colapsar” para a região mais baixa do afundamento [41].

O efeito de lente gravitacional é um outro exemplo observado em Astronomia para o desvio da luz, causado por corpos massivos. Nesse efeito, imagine um observador que recebe dois feixes luminosos provenientes de um corpo extenso que está atrás de um certo corpo massivo. À medida que a luz viaja nas proximidades do corpo massivo que está entre o observador e a fonte luminosa, ela sofre um desvio

¹³Os valores medidos para a massa de um mesmo corpo, em dois referenciais inerciais distintos, que apresentam uma velocidade relativa entre si, é diferente. Contudo, a **massa de repouso** ainda continua sendo um escalar; o valor medido da **massa relativística** muda de um referencial inercial para o outro tão somente em virtude da mudança do momento linear.

tal que os dois feixes, chegando ao observador, conjugam uma imagem semelhante àquela conjugada por uma lente convergente [42, 43, 44]. O artigo de Walsh *et al* [45] foi de grande impacto quando

noticiou um par de quasares no mesmo *redshift*¹⁴, em torno de 1,4, separados por apenas 6 polegadas. A similaridade do espectro dos dois quasares sugeriu (...) que havia realmente apenas um quasar, agora conhecido como *Q0957 + 561*, separado em duas imagens pela deflexão da luz no campo gravitacional de um corpo massivo interveniente. Esta sugestão foi verificada com a descoberta de uma galáxia com um *redshift* de 0,36 entre as linhas de visada para o quasar.

(...) Efeitos de lente gravitacional forte têm sido utilizados para buscar objetos ligados à matéria escura, explorar a estrutura de grupos de galáxias, e para medir a constante de Hubble. Efeitos de lente gravitacional fraca se mostram como grande promessa para medir a função de correlação de flutuações de densidade ([42], p. 433).

A Teoria da Relatividade Geral explica os exemplos acima e muitos outros via equações matemáticas. No exemplo do corpo massivo deformando o espaço ao seu redor, as trajetórias descritas por partículas que passem nas proximidades da região deformada serão chamadas geodésicas¹⁵. As geodésicas representam o menor caminho que liga dois pontos em um certo espaço (sem torção). No caso de um espaço euclidiano, as geodésicas são retas. Para um espaço esférico, arcos de circunferência, e assim por diante. Tais curvas, as geodésicas, nos dão uma idéia do encurvamento do espaço ao redor de um corpo massivo.

¹⁴Este termo significa “deslocamento para o vermelho”. Tal deslocamento está relacionado ao aumento no comprimento de onda (e conseqüente diminuição na frequência) em radiações eletromagnéticas. O *redshift* pode ser causado por *efeito Doppler* [46], pelo efeito cosmológico da expansão do Universo [42] ou por radiação eletromagnética que se movimenta em presença de campos gravitacionais [44], o que é o caso apresentado neste texto.

¹⁵Isto considerando que o espaço não apresente torção, caso contrário, as trajetórias serão chamadas auto-paralelas [47].

Contudo, com o advento da Teoria Geométrica de Defeitos, foi visto que a presença de certos defeitos (chamados topológicos) também causava distorções no espaço-tempo. Tais distorções poderiam ser em virtude do aparecimento de curvatura ou torção, por exemplo. Uma desclinação positiva, por exemplo, poderia gerar geodésicas semelhantes àsquelas do exemplo das lentes gravitacionais. Inclusive, alguns sistemas de Gravitação, que não poderiam ser realizados na escala natural em que eles ocorrem, por exemplo, devido às altas energias envolvidas, podem ter a Matéria Condensada como seu laboratório. Temos então os chamados *Sistemas Análogos* em que um efeito gravitacional pode ser estudado através de sistemas em Matéria Condensada. Um exemplo disso ocorre no estudo de cristais líquidos [48, 49]. Nessas duas últimas referências, os autores apresentam uma abordagem geométrica para o estudo de geodésicas em um substrato de cristal líquido nemático [50, 51], fazendo um paralelo com o caso gravitacional do desvio da luz na presença de uma corda cósmica. Nestas duas últimas referências é possível visualizar o efeito de lente gravitacional, de modo qualitativo, a partir de um cristal líquido nemático.

Uma discussão um pouco mais detalhada sobre a Teoria Geométrica de Defeitos é dada na seção 1.4.2.

1.4.2 Teoria Geométrica de Defeitos

Na Natureza encontramos vários sistemas físicos cristalinos onde defeitos estão presentes. Propriedades como plasticidade, ponto de fusão, dentre outras são fortemente influenciadas pela presença de defeitos na estrutura do material. Contudo ainda não há uma teoria de defeitos fundamental apesar dos vários trabalhos já publicados a respeito.

A primeira abordagem para a teoria de defeitos em um meio elástico foi feita pela escola italiana, com o desenvolvimento da teoria de deslocções em 1900. Depois

disso, muitos trabalhos teóricos e experimentais surgiram para descrever e observar defeitos em sólidos [52]. Recentemente uma série de artigos, inspirados pelas idéias de Kröner [53] e Bilby *et al* [54], desenvolveu uma teoria geométrica de defeitos. Neste paradigma, os sólidos elásticos com defeitos topológicos podem ser descritos por uma geometria de Riemann-Cartan [55, 56, 57, 58].

Neste tratamento utilizamos técnicas da Geometria Diferencial para descrever as alterações nas propriedades elásticas de um meio (elástico). Toda esta informação está contida nas quantidades geométricas, por exemplo, métrica, tensores de curvatura e torção etc, que descrevem o meio elástico com defeitos. As condições de contorno, impostas pelo defeito, são explicadas a partir de uma métrica não-euclidiana. No limite do *continuum*, o sólido pode ser visto como uma variedade de Riemann-Cartan.

Em geral, o defeito corresponde a uma singularidade, tangível na torção ou na curvatura (ou em ambas as quantidades), ao longo da linha do defeito [56]. A teoria geométrica de defeitos, no limite do *continuum*, descreve o sólido usando uma variedade de Riemann-Cartan. Neste aspecto, curvatura e torção são associadas com desclinações e deslocções, respectivamente, no meio.

Há algumas vantagens nesta descrição geométrica de defeitos em sólidos. Diferente da teoria da elasticidade usual, esta abordagem fornece uma linguagem adequada para a descrição quântica (ou clássica) de partículas (ou quasi-partículas), a qual se reduz a um problema em um espaço com curvo ou com torção. Neste referencial teórico, a influência dos defeitos sobre o movimento de elétrons e fônons, por exemplo, se torna razoavelmente fácil de analisar, pois as condições de contorno impostas pelos defeitos são incorporadas à geometria. Segundo este ponto de vista, as quasi-partículas em movimento experimentam uma métrica efetiva não-euclidiana em um meio elástico. O movimento clássico de quasi-partículas é descrito por geodésicas em uma métrica efetiva.

Nesta abordagem um cristal em três dimensões pode ser visto como um meio elástico tridimensional contínuo. Podemos supor que o meio não-deformado e sem defeitos é invariante por translações (homogeneidade) e por rotações (isotropia) em algum sistema de coordenadas. Neste sistema de coordenadas preferencial o meio é descrito por uma métrica¹⁶ euclidiana [59] do tipo

$$ds^2 = \sum_{i=1}^3 (dx^i)^2 \quad . \quad (1.13)$$

A métrica da forma (1.13) é chamada cartesiana. Assim no estado não-deformado temos o espaço euclidiano \mathbb{R}^3 com um sistema de coordenadas cartesianas. Imagine agora que efetuemos a translação de um vetor ao longo de um circuito fechado, o chamado transporte paralelo [60]. Se o espaço não apresenta curvatura ou torção (ou defeitos que originem estas quantidades), o vetor, após a translação, é superposto à sua posição inicial, integralmente em seus módulo, direção e sentido. Contudo, havendo torção ou curvatura (ou defeitos), esta superposição não é possível.

No caso de um espaço euclidiano sem defeitos podemos deformá-lo elasticamente até reduzi-lo a um ponto. Eis aí um exemplo de espaço simplesmente conexo. Contudo, quando o espaço contém defeitos chamados topológicos, ele se deforma de tal maneira que não pode ser reduzido a um ponto; um espaço desse tipo é dito multiconexo [59]. Na presença de defeitos topológicos, ao enlaçar qualquer vizinhança de pontos neste espaço, nem todos as regiões podem ser contraídas a um ponto. Defeitos topológicos não podem ser retirados do meio através das chamadas *deformações contínuas* (ou mapas contínuos).

Em nossa tese abordamos um tipo de defeito topológico linear, a dispiração. Este defeito seria o resultado da combinação de dois outros defeitos, a deslocação tipo hélice e a desclinação.

¹⁶A métrica é uma função não-negativa que descreve a “distância” entre dois pontos vizinhos para um dado espaço.

Uma forma de visualizar geometricamente a formação destes defeitos topológicos lineares é via processo de Volterra [61]. Neste procedimento, os defeitos são gerados “cortando”, colando, ou fazendo as duas coisas em relação a uma ou mais partes do meio elástico. Pode-se ainda inserir ou retirar material do meio, fazer translações, rotações ou encurvamentos do material.

Além das deslocções, um outro tipo de defeito linear é a desclinação. Uma maneira de representar geometricamente a formação de defeitos lineares é através do chamado processo de Volterra. Este procedimento consiste de um mecanismo de “corte” e “cola” em que, para gerar o defeito, podem ocorrer uma ou mais das seguintes etapas: inserção ou retirada de material do meio, deslocamentos ou encurvamentos do material.

No caso das desclinações ocorre a retirada ou inserção de material extra no meio. Quando é retirada uma fatia do material, temos desclinações positivas; quando é adicionado material, temos desclinações negativas. Na Figura (1.7) é representada a visualização do processo de Volterra para geração de uma desclinação do tipo cunha, que é um exemplo de desclinação positiva. Inicialmente temos um plano, do qual é retirada uma fatia de ângulo diedral λ ¹⁷ e em seguida as extremidades são identificadas, gerando um cone.

A métrica que descreve uma desclinação, em coordenadas cilíndricas, é da forma

$$ds^2 = d\rho^2 + \alpha^2 \rho^2 d\varphi^2 + dz^2 \quad , \quad (1.14)$$

onde $\rho > 0$, $0 < \varphi < 2\pi$, $-\infty < z < \infty$ e $\alpha < 1$ corresponde a desclinação positiva enquanto $\alpha > 1$ corresponde a desclinação negativa. O ângulo diedral λ e o parâmetro α na métrica acima relacionam-se [62] via expressão $\lambda = 2\pi(\alpha - 1)$. Além

¹⁷O ângulo diedral corresponde ao ângulo que há entre os dois planos (lados) separados após a retirada do material e que serão identificados. Ou seja, λ é o ângulo da “fatia” que foi retirada para gerar o cone.

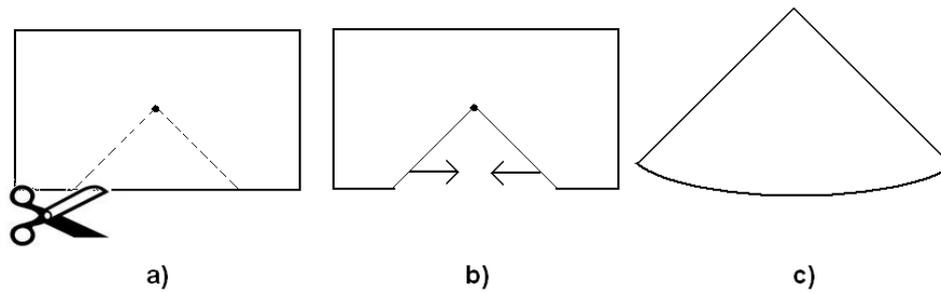


Figura 1.7: Etapas da geração de uma desclinação positiva através do processo de Volterra

disso, ao ângulo diedral λ podemos associar o vetor axial $\vec{\lambda}$, que está orientado ao longo do eixo z para o caso da desclinação em cunha. Este vetor axial é o chamado vetor de Frank. Sua relação com o tensor de curvatura é dada por [63]

$$\lambda^{ij} = \int \int_S dx^\mu \wedge dx^\nu R_{\mu\nu}{}^{ij} \quad . \quad (1.15)$$

A partir da expressão (1.15) vemos que o tensor de curvatura representa a densidade superficial do vetor de Frank. Assim, a presença de desclinações em um meio está associada ao fato de o espaço em questão ser curvo.

Um outro tipo de defeito linear é a deslocação. Os principais tipos de deslocações são a deslocação tipo hélice (do inglês *screw dislocation*) e a deslocação lateral (do inglês *edge dislocation*). A visualização desses dois tipos de deslocações através do processo de Volterra está representada na Figura (1.8). Nela aparece um vetor (representado pela letra **b**) que dá uma idéia da intensidade do deslocamento relativo dos planos separados para gerar a deslocação a partir do processo de Volterra. Este vetor é denominado vetor de Burgers.

Como exemplo de métrica para um meio com uma deslocação do tipo hélice ao

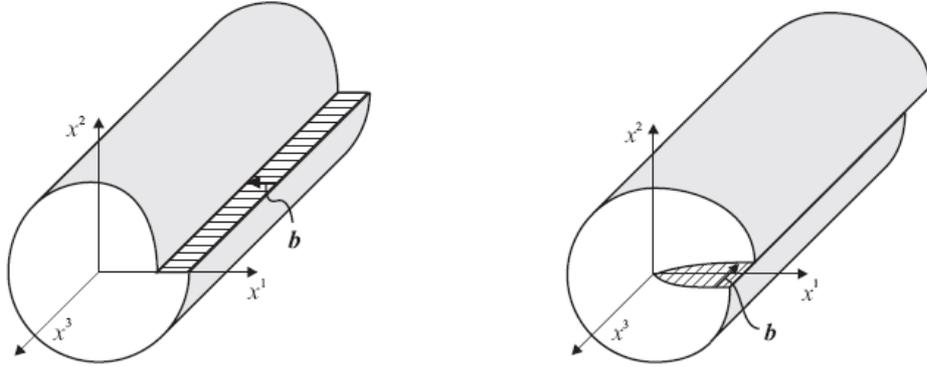


Figura 1.8: À esquerda temos uma deslocação lateral e à direita uma deslocação tipo hélice. Aqui \mathbf{b} representa o vetor de Burgers.

longo do eixo z temos

$$ds^2 = d\rho^2 + (dz + \beta d\varphi)^2 + \rho^2 d\varphi^2 \quad , \quad (1.16)$$

onde $\rho > 0$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ e $-\infty \leq z \leq \infty$.

No caso da métrica que aparece na expressão (1.16), o vetor de Burgers tem apenas a componente b^z não-nula. A intensidade do vetor de Burgers e o parâmetro β relacionam-se via relação $b^z = 2\pi\beta$.

Vimos anteriormente que a presença de desclinações está ligada à curvatura no meio. A existência de deslocações, por sua vez, tem ligação com outra propriedade do meio, a torção. O tensor de torção e o vetor de Burgers se relacionam através da expressão

$$b^i = \int \int_S dx^\mu \wedge dx^\nu T_{\mu\nu}^i \quad , \quad (1.17)$$

onde $dx^\mu \wedge dx^\nu$ é o elemento de superfície e $T_{\mu\nu}^i$ é o tensor de torção. A região de integração S para o caso em que o vetor de Burgers aponta numa certa direção x^3 , corresponde à superfície que foi gerada via processo de Volterra que antes do surgimento da deslocação era formada pelas direções x^1 e x^2 , conforme a figura (1.8).

Observamos, a partir da expressão (1.17), que o tensor de torção representa a

densidade superficial do vetor de Burgers [63].

O processo de Volterra para a geração de uma dispiração poderia ser representado da seguinte forma:

- Primeiro procede-se conforme a figura (1.7), gerando um cone;
- Em segundo lugar, faz-se a translação de um dos “lados” da superfície do cone anteriormente colada, isto é, com as partes identificadas ao longo da direção z , tal qual o processo de geração da deslocação tipo hélice;
- Pronto, temos uma dispiração.

Em sólidos com rede cristalina, por exemplo, as deslocações surgem devido ao mal-alinhamento de átomos, correspondendo a uma imperfeição local no alinhamento das camadas de átomos na rede. Estas imperfeições podem ser produzidas durante a solidificação, na deformação plástica de sólidos cristalinos ou ainda como resultado da concentração de vacâncias¹⁸.

Vemos também o aparecimento de desclinações em outros sistemas de Matéria Condensada, como é o caso de cristais líquidos, para os quais se pode ter um laboratório para simular fenômenos em Cosmologia. Eis alguns exemplos que podemos citar: da passagem da luz próximo a corpos massivos ou estudo de cordas cósmicas via modelagem por sistemas de cristais líquidos na fase nemática [64, 65].

Ao longo do tempo vários trabalhos envolvendo defeitos topológicos, seja em Gravitação e Cosmologia [66], seja em Matéria Condensada [57], foram publicados. Nos trabalhos sobre defeitos topológicos têm sido investigadas fases quânticas [67, 68, 69, 70, 71, 72], a dinâmica clássica de partículas [73, 74], a dinâmica quântica e a quantização de Landau [75, 76], só para citar alguns exemplos.

Vemos que a Teoria Geométrica de Defeitos, utilizando ferramentas de Geometria Diferencial, comuns à Relatividade Geral, descreve meios variados que apresentam

¹⁸Vacâncias surgem quando um sítio (local) de uma rede formada por átomos está desocupado.

torção, curvatura ou ambos.

1.5 Sistemas estudados neste trabalho

Uma característica dos sistemas mesoscópicos é a dependência de propriedades físicas com as dimensões do sistema abordado. Este aspecto nos motivou a investigar nanoestruturas geométricas, observando como a torção e a curvatura influenciam as propriedades físicas de tais sistemas. Em nosso trabalho estudamos quatro sistemas geométricos distintos.

O primeiro se constitui em um espaço com uma dispiração, tipo de defeito topológico que carrega curvatura e torção. Estudamos a dinâmica quântica de partículas nesse espaço, obtendo autovalores de energia e autofunções, para tipos diferentes de confinamento. Inicialmente estudamos um fio quântico unidimensional, em seguida um anel (modelado via potencial tipo *parede rígida*) e, por fim, estudamos o confinamento proposto em [1] e estudado também em [2] e [3]. Esta discussão pode ser encontrada no Capítulo 3. Publicamos parte dos resultados deste capítulo na referência [8].

A segunda e a terceira geometrias estudadas foram a esfera e a esfera com uma desclinação. Em ambos os casos, o espaço é não-euclidiano. Contudo, a presença de uma desclinação inova o sistema introduzindo uma curvatura singular, característica do tipo de defeito linear que é a desclinação. O tipo de confinamento utilizado é análogo àquele da referência [7]¹⁹, uma adaptação do potencial em [1] quando o espaço apresenta curvatura. Esta discussão pode ser encontrada no Capítulo 4.

A quarta geometria que estudamos foi a de um espaço com uma densidade de deslocções. A métrica que utilizamos é uma analogia com a geometria de

¹⁹Nesta referência os autores investigam o confinamento em um plano de Lobachevsky ou espaço tipo sela, onde a curvatura é negativa. No trabalho [7] os autores obtêm um espectro de energia composto de duas partes, uma discreta e outra contínua, enquanto nosso trabalho, envolvendo a esfera, tanto com quanto sem a desclinação, apresentam um espectro unicamente discreto.

Som-Raychadhuri, presente na referência [77], onde mudamos o acoplamento entre coordenadas: lá, t e φ são acoplados; aqui, z e φ apresentam acoplamento. Esse espaço apresenta torção e o parâmetro Ω , presente na métrica, está associado a uma densidade do vetor de Burgers. Nossa investigação, em um primeiro momento, abordou a dinâmica não-relativística (via equação de Schrödinger) em um espaço tridimensional. Em um segundo momento, fizemos a extensão do sistema inicial, indo de um espaço com 5 dimensões para um com $3 + 1$, a fim de estudar a dinâmica relativística de partículas escalares, sem *spin*, via equação de Klein-Gordon. Publicamos parte dos resultados deste capítulo na referência [9].

Devido ao uso de ferramentas da Geometria Diferencial, apresentamos o capítulo 2, uma breve revisão a respeito dos conceitos ligados a essa área.

Capítulo 2

BREVE REVISÃO DE GEOMETRIA E TOPOLOGIA

2.1 Uma questão de conexidade

A Topologia é bem recente, quando comparada com alguns outros ramos da Matemática. Enquanto, por exemplo, Álgebra e Geometria, têm inícios que datam da Antigüidade, a Topologia não existia até, pelo menos, o século XVI ou XVII. Entre os séculos XVII e XIX, temas intrínsecos à Topologia foram estudados no seio de áreas da matemática com outras denominações, a saber, *geometria situs*, e *analysis situs*¹. Estas últimas formas de denominação só foram definitivamente abandonadas no início do século XX.

A topologia, segundo [78], pode ser entendida como

(...) a história de sucesso da matemática do século 20, que mal existia no início do século e já se intrometia completamente outros campos. Embora haja, obviamente, razões múltiplas para isto, podemos citar duas: primeiro, que qualquer problema que requeira a passagem de uma

¹Ou seja, Geometria de posição e Análise de posição, respectivamente

simples declaração local para uma global mais difícil (com o que campos eletromagnéticos se parecem na presença de correntes? que forma o espaço-tempo da relatividade de Einstein pode ter?) é uma questão topológica; e segundo, que maquinaria estava no lugar, ou poderia ser desenvolvida para solucionar tais problemas. ([78], p. 223)

A Topologia inclui muitas sub-áreas. Talvez a divisão mais tradicional para agrupar as sub-áreas desse ramo da matemática seja a seguinte:

- **Topologia Geral**, que lida com conceitos como *compacidade* e *conexidade*;
- **Topologia Algébrica**, que lida com estruturas algébricas como grupos de homotopia e homologia;
- **Topologia Geométrica**, que estuda estruturas como as variedades, os fibrados e os nós.

A seguir mencionamos alguns nomes que contribuíram para a consolidação nos primórdios da Topologia.

No ano de 1679 o livro *Characteristica Geometrica*, de Leibniz, foi publicado. Nesse trabalho Leibniz estudou propriedades topológicas de figuras geométricas. Inclusive, Leibniz tentou fazer com que Christiaan Huygens, conhecido por suas grandes contribuições em Física, notadamente na área de Física Ondulatória, se interessasse pelos resultados publicados. Mas Huygens não mostrou empolgação a respeito do tema.

Um dos primeiros trabalhos relacionados a Topologia foi o problema das Sete Pontes de Königsberg (atual Kaliningrado), devido a Leonard Euler². Königsberg era banhada pelo rio Pregel, o qual atravessa a cidade dando origem a ilha Kneiphof.

²O problema apresentado também se relaciona à chamada Teoria dos Grafos, ramo da matemática que estuda as relações entre os objetos de um determinado conjunto. Este tema não será aprofundado aqui, visto que a abordagem do mesmo não é fundamental para o entendimento do nosso trabalho.

Esta última se liga a cidade por meio de sete pontes, as quais ligavam duas porções de terra (ilhas) entre si, e essas ilhas às margens. Atualmente apenas duas dessas pontes são as mesmas da época em que Euler viveu; as demais, ou foram destruídas durante a Segunda Guerra Mundial, ou foram alteradas pela administração da cidade.

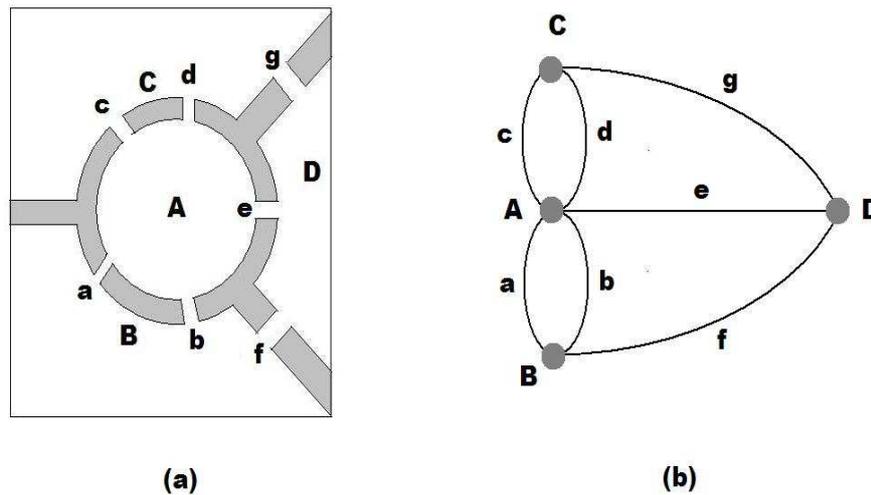


Figura 2.1: A, B, C e D representam as áreas de terra firme (B e C, duas margens; A e D, duas ilhas). Os elementos a, b, c, d, e, f, g são linhas associadas às sete pontes.

Durante muito tempo, até o advento do trabalho de Euler, um dos temas das conversas entre os moradores da cidade era a possibilidade ou não de uma rota que, atravessando todas as sete pontes, passasse uma só vez por cada uma delas. Muitos tentaram realizar tal façanha, mas ninguém conseguia. Foi quando, em 1736, Leonard Euler mostrou ser impossível tal intento. Ele apresentou esse resultado à Academia de Ciências Russa de São Petesburgo na forma de um diagrama simples, onde associou quatro pontos às duas margens do rio e às duas ilhas; às pontes, associou sete linhas. Tem-se portanto um certo número de pontos, chamados vértices, e um certo número de linhas, chamadas arestas. Outrossim, os vértices terminam ou começam em linhas. Linhas só têm pontos em comum na condição de

vértices. Acrescente-se o fato de que um vértice pode ser par ou ímpar, dependendo do número de linhas que o forma: se o número de linhas é par (ímpar), ele é par (ímpar).

O diagrama criado por Euler é semelhante ao da Figura (2.1b). O problema das sete pontes, desse modo, se transformou na atividade (quase lúdica) de tentar desenhar a lápis uma rota, através de uma linha que obedecesse ao seguinte critério: o desenho deve ser contínuo, sem levantar o lápis do papel, e a linha não pode se cruzar em ponto algum. Dessa forma Euler criou um *grafo* para resolver o problema. Grafos que obedecessem ao critério utilizado por Euler para resolver o problema das sete pontes eram chamados de grafos eulerianos. Um grafo seria euleriano se e somente se ele fosse conexo e o número de vértices de número ímpar fosse zero ou dois. Como o grafo para as sete pontes não satisfazia a esta última condição, Euler mostrou ser impossível obter a tal rota. O resultado demonstrado por ele não dependia das dimensões das pontes ou das distâncias delas entre si, mas apenas da maneira que as pontes se ligavam às áreas de terra firme. Ou seja, é uma questão de conexidade, um conceito a ser discutido mais à frente neste capítulo, não sem o entendimento de algumas idéias que o antecedem.

Apesar das contribuições de Euler em temas ligados a topologia, foram Listing e Möbius os primeiros a dar o nome que esse ramo da matemática tem hoje, classificando surfaces em meados do século XIX [78]. Todavia, a organização metodológica é devida a Poincaré [78] e Hausdorff [79], do final do século XIX até o início do século XX.

Johann Benedict Listing é considerado um dos fundadores da disciplina topologia, mesmo não tendo feito qualquer contribuição de grande vulto na área [79]. Publicou o livro ³ *Vorstudien zur Topologie* ⁴, onde introduz o termo topologia.

³Esse livro, publicado em 1848, é fruto da republicação de um artigo de sua autoria, datando de 1847 [79].

⁴O termo *Vorstudien* significa, em alemão, “estudos preliminares”.

A *fita de Möbius* é uma das grandes contribuições de August Ferdinand Möbius à topologia. Esse sistema representa um *espaço topológico* que é não-orientável [80].

Poincaré, por sua vez, em relação a topologia, foi

quem estendeu o campo a dimensões maiores e deu a ela seu primeiro teorema principal (*dualidade de Poincaré*) e seu primeiro problema duradouro (a *conjectura de Poincaré*) [78].

Além disso,

os escritos de Poincaré se caracterizam pela grande ludicidade de pensamento, uma habilidade intuitiva de alcançar o cerne dos assuntos [com os quais lidava] e pela clareza de exposição ([79], p. 123).

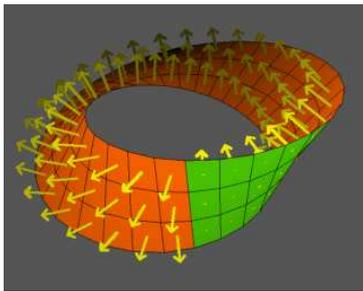


Figura 2.2: Fita de Möbius e não-orientabilidade.

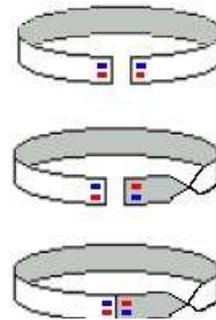


Figura 2.3: Como fazer uma fita de Möbius.

Felix Hausdorff em sua obra de 1914 intitulada *Grundzüge der Mengenlehre* apresenta a definição de *espaço topológico* utilizando o conceito de *vizinhança*.

Vimos que os chamados *espaços topológicos* correspondem a um dos objetos de estudo da Topologia. Eles são estruturas matemáticas que permitem o entendimento de conceitos como conexidade e continuidade, por exemplo. Passemos então à sua definição.

Conforme Nakahara [80], sejam um conjunto M , o conjunto vazio \emptyset e uma coleção $\tau = \{U_i\}$ de subconjuntos⁵ de M . O par (M, τ) é um espaço topológico, desde que satisfaça as seguintes exigências:

i. $\emptyset, M \in \tau$.

ii. Para qualquer coleção (mesmo que infinita) V_i de subconjuntos de τ se tem que a intersecção entre dois ou mais dos subconjuntos que a constituem também é um subconjunto de τ .

iii. Para qualquer coleção finita V_i de subconjuntos de τ se tem que a união entre dois ou mais dos subconjuntos que a constituem também é um subconjunto de τ .

No que concerne ao par (M, τ) , dizemos que M é um conjunto e τ é uma topologia em M .

Um tipo de espaço topológico particularmente útil para nós é o chamado espaço métrico. Considere que o conjunto M é não-vazio e, além disso, que existe uma função distância de x a y , isto é, $d(x, y)$, com $d : M \times M \rightarrow \mathbb{R}_+$. A função $d(x, y)$ é um ente **positivo definido**, chamado métrica, sobre o conjunto M se são verificadas as seguintes propriedades, para todo $x, y, z \in M$:

i. $d(x, y) = 0 \Leftrightarrow x = y$

ii. $d(x, y) = d(y, x)$

iii. $d(x, y) \leq d(x, z) + d(z, y)$

O espaço topológico (M, τ) , dotado da métrica $d(x, y)$, é chamado espaço métrico.

Os elementos de um espaço métrico são referidos como pontos desse espaço, embora nem sempre sejam pontos geométricos, de fato. Cada ponto de um espaço métrico pode ser constituído de um ponto geométrico, ou um número, ou uma função, ou um vetor etc.

Outro conceito bastante útil em Topologia é a idéia de mapa. Um mapa f é uma

⁵Estes subconjuntos são chamados abertos de M .

regra relacionando dois conjuntos V e W , definido da seguinte forma

$$f : V \rightarrow W \quad , \quad (2.1)$$

ou

$$f : v \mapsto f(v) \quad , \quad (2.2)$$

com $v \in V$ e $w \in W$. O domínio do mapa é formado pelos elementos do conjunto V , enquanto a imagem do mapa é formada pelos elementos do conjunto W tais que $f(V) = \{w \in W | w = f(v)\}$ para pelo menos um $v \in V$. Observe que o conjunto imagem está contido no conjunto W mas não coincide, necessariamente, com W na totalidade de seus elementos.

Alguns mapas recebem nomes especiais por apresentarem certas características ou satisfazer determinadas condições. A seguir destacamos três casos.

i. Um mapa $f : V \rightarrow W$ é **injetor** ou unívoco se para todo $x_i \neq x_j$ corresponde $f(x_i) \neq f(x_j)$. Ou seja, dois elementos diferentes deverão ter imagens diferentes. Um caso de mapa não-injetor é o da função $f(x) = x^2$: por exemplo, $f(3)=f(-3)=9$.

ii. Um mapa $f : V \rightarrow W$ é **sobrejetor** se cada elemento do conjunto imagem é imagem de pelo menos um elemento do domínio. Neste caso, W , em sua totalidade de elementos, coincide com o conjunto imagem.

iii. Um mapa $f : V \rightarrow W$ é **bijetor** se é, simultaneamente, injetor e sobrejetor.

Um conceito-chave é o de homomorfismo: ele é um mapa que preserva certas estruturas algébricas (adição ou multiplicação, por exemplo). Por exemplo, seja um certo espaço topológico V dotado de uma soma, por exemplo, um mapa f que preserve tal operação terá que contemplar a exigência $f(a+b) = f(a) + f(b)$. Temos aí um *homomorfismo*⁶. Quando o homomorfismo é bijetivo, ou seja, tanto f quanto f^{-1} são homomorfismos, diz-se que tal mapa é um isomorfismo. Um exemplo de

⁶Não confundir *homomorfismo* com *homeomorfismo*. Este último conceito está ligado a idéia de continuidade, o que veremos mais adiante.

isomorfismo é a representação de um vetor como uma matriz (linha ou coluna), onde os elementos da matriz correspondem às coordenadas do vetor. Tal fato só é possível porque ocorre um isomorfismo entre o espaço das matrizes e o espaço dos vetores.

Uma *isometria* é um mapa feito entre dois espaços métricos que preserva a distância entre quaisquer dois pontos em cada espaço. Objetos geométricos são ditos congruentes quando podem ser relacionados por uma isometria. Assim, a métrica é preservada quando uma isometria relaciona dois espaços (métricos).

Destaquemos agora dois tipos de mapas: as curvas e as funções.

Uma curva aberta c em uma variedade⁷ M m -dimensional é um mapa que leva pontos de um certo intervalo aberto a pontos da variedade M , isto é, $c : (a, b) \rightarrow M$, com $a < 0 < b$. Já uma curva fechada é um mapa $c' : S^1 \rightarrow M$ ⁸.

Uma função f sobre uma variedade M é um mapa suave que leva pontos da variedade M em \mathbb{R} , ou seja, $f : M \rightarrow \mathbb{R}$. O conjunto de funções suaves (diferenciáveis) sobre M é denotado por $\mathcal{F}(M)$.

Uma outra idéia que precisamos entender é a de mapa contínuo. Com esse objetivo, consideremos dois espaços topológicos V e W , considerados, respectivamente, o domínio e o contra-domínio de um certo mapa f . Este mapa é dito contínuo quando uma vizinhança de $f(v)$ sempre contém a imagem de uma vizinhança de v . Dito de outra forma, temos que o mapa é contínuo num ponto v_0 se, para todo $\epsilon > 0$, há um $\delta > 0$ tal que

$$|v - v_0| < \delta \implies |f(v) - f(v_0)| < \epsilon \quad (2.3)$$

Um exemplo de mapa contínuo é o homeomorfismo. Um mapa f , com inversa f^{-1} , é dito ser um homeomorfismo se é contínuo tanto na ida quanto na volta, ou seja, se $f : V \rightarrow W$ e $f^{-1} : W \rightarrow V$ são, ambos, mapas contínuos e, além disso, f é

⁷Neste ponto, entendamos variedade como um conjunto. Mais adiante será feita uma discussão mais aprofundada sobre o conceito de variedade.

⁸Aqui S^1 representa o conjunto dos pontos que formam uma circunferência.

bijetora. Um exemplo de homeomorfismo é a projeção estereográfica f que leva os pontos de uma esfera (menos um pólo $r_0 = (0, 0, 1)$) no plano \mathbb{R}^2 , definida por

$$f(x, y, z) = \left(\frac{x}{1-z}, \frac{y}{1-z} \right) . \quad (2.4)$$

Outro exemplo de homeomorfismo seria o mapa $g : Q \rightarrow S^1$, que leva os pontos de um quadrado $Q = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid |x| + |y| = 1\}$ no círculo $S^1 = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x^2 + y^2 = 1\}$, definido por

$$g(x, y) = \left(\frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}, \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right) . \quad (2.5)$$

O homeomorfismo pode ser entendido, intuitivamente, como um processo de deformação em que cada espaço teria o comportamento tal qual o de um corpo feito de uma borracha bastante flexível. Assim, poderíamos esticá-la, amassá-la ou encurvá-la facilmente. Por exemplo, um homeomorfismo atuando sobre uma superfície plana preserva seus aspectos topológicos, alterando apenas sua topografia [81]. Outrossim, a idéia de homeomorfismo nos permite agrupar espaços topológicos em classes de equivalência. Cada classe seria formada por espaços que podem ser deformados continuamente (ou seja, são homeomorfos um ao outro) a partir de um homeomorfismo. Desse modo, o círculo e o quadrado de nosso exemplo, a despeito de sua distinção geométrica, são equivalentes em termos topológicos. O mesmo valeria para o exemplo da caneca e do pneu.

Nem sempre é possível encontrar mapas para os quais exista uma inversa. Neste caso, a análise da equivalência entre dois espaços via homeomorfismos não se apresenta mais tão atraente, conforme o caso. Na busca da equivalência topológica entre dois ou mais espaços uma outra idéia bastante útil, a de *homotopia*. Para isso precisamos definir o que é um circuito fechado.

Um circuito fechado em um espaço topológico M, τ é um mapa contínuo $f : I \rightarrow M$, com $I = [0, 1]$, tal que $f(0) = f(1) = r_0$, e onde r_0 é o ponto do

espaço topológico em torno do qual o circuito fechado é feito. Vejamos então a Figura 2.4: nela são observados os circuitos α , β , γ e δ .

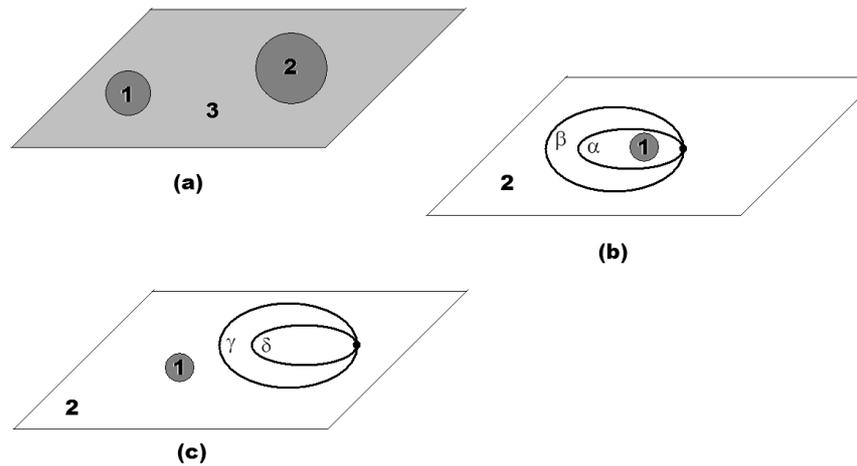


Figura 2.4: Em cada uma das situações (a) e (b) é vista a distinção entre as regiões dos buracos e a região “usual” de cada espaço. A situação em (a) representa um espaço multiconexo, enquanto que a situação em (b) representa um espaço simplesmente conexo.

Os circuitos α e β podem ser deformados um no outro. Os parâmetros γ e δ são, também, deformáveis entre si. Há como relacionar a deformação desses pares de mapas a partir de um tipo de mapa contínuo denominado *homotopia*.

Para chegar a definição de homotopia, consideremos dois circuitos fechados α_1 e α_2 em torno de um certo ponto r_0 . O par α_1, α_2 será homotópico se existe um mapa contínuo $G : I \times I \rightarrow M$ tal que

$$\begin{aligned} G(k, 0) &= \alpha(k), & G(s, 1) &= \beta(k) & \forall k \in I \\ G(0, t) &= G(1, t) = r_0 & \forall t \in I \end{aligned} \quad (2.6)$$

Podemos assim reunir espaços topológicos em classes de equivalência com base

no critério de serem “do mesmo tipo de homotopia”. Por exemplo, um disco com um furo no centro é do mesmo tipo de homotopia que um ponto. Neste caso a idéia é imaginar apenas circuitos fechados se deformando de modo a “levar” um espaço no outro, sem se preocupar com a existência da inversa de uma certo mapa que relacione os dois espaços.

Um outro aspecto que se pode explorar em Topologia é se o espaço topológico apresenta “buracos” ou não, pois isso tem a ver com a idéia de conexidade. Um espaço M é dito desconexo quando ele pode ser dividido em dois conjuntos M_1 e M_2 tais que $M = M_1 \cup M_2$ e $M_1 \cap M_2 = \emptyset$. A desconexão de M , formada por M_1 e M_2 , é representada pela simbologia $M = M_1 | M_2$. Espaços desconexos podem apresentar buracos, quando é possível separá-los em duas (ou mais) regiões distintas. A Figura 2.4 será útil aqui novamente, ao observar suas partes (b) e (c). Em (b) os circuitos α e β envolvem uma região que contém um buraco, enquanto que em (c) os circuitos γ e δ envolvem uma região sem buracos. Dizemos que um espaço é simplesmente conexo quando quaisquer circuitos que envolvam quaisquer pontos contidos nesse espaço sejam redutíveis a um ponto, e isso só é possível se o espaço não contém buracos em seu interior. Existindo um ou mais buracos no interior do espaço, ele é denominado multiconexo.

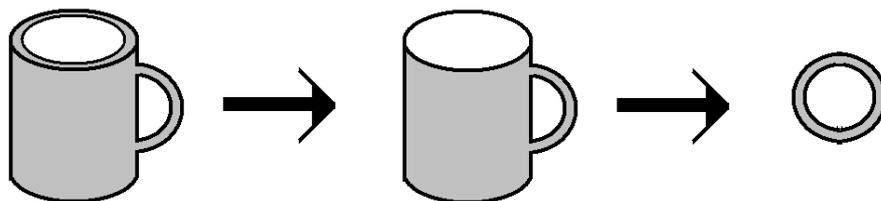


Figura 2.5: Esquema da representação de um mapa contínuo que leva a geometria de uma caneca naquela de um pneu.

Um conceito importante em Topologia é o de *compacidade*, o qual depende do

entendimento sobre o que é *recobrimento*. Deste modo, consideremos uma família $\{Z_k\}$ de subconjuntos de um espaço topológico (M, τ) . Quando a reunião destes subconjuntos, isto é, $\bigcup\{Z_k\}$, corresponde a M , dizemos que a coleção $\{Z_k\}$ é um recobrimento de M . Se todos os subconjuntos dessa coleção são também conjuntos abertos, dizemos que $\{Z_k\}$ é um *recobrimento aberto* de M . Por sua vez, um espaço topológico é compacto se, e somente se, qualquer recobrimento aberto dele possuir um subrecobrimento finito.

Um exemplo de aplicação em Física da idéia de espaço compacto é um sistema de elétrons em um sólido. Há duas abordagens possíveis, ou considerando o sólido como não-compacto e com volume infinito, ou sendo compacto e tendo volume finito. A segunda opção se revela mais vantajosa, pois a Mecânica Estatística é bastante complicada para um sistema com volume infinito. Uma saída seria, então, modelar um sistema com volume infinito a partir de um com volume finito. Isso é possível impondo certas condições de contorno e propondo certos potenciais confinantes, por exemplo, um potencial do tipo *parede rígida*.

Voltemos a tratar de homeomorfismo. Uma propriedade conhecida em Topologia é que algumas quantidades, conhecidas como ‘invariantes topológicos’, são preservadas quando quaisquer homeomorfismos são aplicados a um espaço. Dentre os possíveis invariantes topológicos podem estar a compacidade ou a conexidade, por exemplo. Daí, um critério que permite dizer que dois espaços não são homeomorfos é que eles tenham invariantes topológicos diferentes.

2.2 Mapeando conjuntos com suavidade

Nesta seção discutiremos algumas idéias no âmbito da Geometria Diferencial. Um conceito primordial é o de variedade diferenciável. Todavia, antes de chegarmos a uma definição matematicamente formal, será feita uma discussão qualitativa do

que ela representa.

Considere uma pessoa que nunca teve instrução formal sobre Sistema Solar, planetas e, principalmente, sobre as características de nosso planeta. Quando olha para o chão de sua casa ela vê uma superfície plana (embora a esfericidade da Terra seja um fato conhecido). Mas então por que vemos o chão plano se a Terra é aproximadamente esférica? A explicação disso é que, sendo a Terra um objeto esferoidal de raio muito grande em comparação com as dimensões do observador (no caso, a pessoa que olha o chão de sua casa, por exemplo), uma superfície sobre essa esfera que tenha comprimentos pequenos (em relação ao raio da Terra) serão vistas como aproximadamente planas.

Uma variedade, grosso modo, pode ser entendida com base no exemplo do observador acima. Ela é uma generalização da idéia de superfície. As variedades são espaços que, em pequena escala, se assemelham ao espaço euclidiano de certa dimensão. Assim, no caso da Terra e do observador do nosso exemplo, uma esfera \mathbb{S}^2 se assemelha ao plano \mathbb{R}^2 , em pequena escala. Já uma circunferência de grande raio será semelhante a um segmento de reta, ou a uma reta, para alguém que a observe a pequenas distâncias; tem-se agora, portanto, uma semelhança entre os espaços \mathbb{S}^1 , da circunferência, e \mathbb{R}^1 , da reta. Dessa forma podemos dizer que, por exemplo, a esfera \mathbb{S}^2 e o plano \mathbb{R}^2 são semelhantes localmente, isto é, a pequenas distâncias; por outro lado, são diferentes globalmente, ou seja, quando se observa em escalas não-diminutas. E mais: \mathbb{S}^2 é homeomorfo a \mathbb{R}^2 localmente e, desse modo, podemos deformar um pequeno fragmento de \mathbb{S}^2 para se chegar a \mathbb{R}^2 , em uma transformação contínua.

Podemos dizer que um espaço topológico $M \subseteq \mathbb{R}^m$ é uma variedade se para cada $x \in M$ existe um conjunto aberto $O \subset M$ tal que as seguintes condições sejam satisfeitas

- i. $x \in O$;

- ii. O é homeomorfo a \mathbb{R}^n ;
- iii. n é fixo para todo $x \in M$.

Aqui o número fixo n representa a dimensão da variedade M . Observe que, a partir das condições acima, $m \geq n$. A segunda condição representa a parte de nossa discussão qualitativa de que uma variedade, em pequena escala, se assemelha ao espaço euclidiano de determinada dimensão.

Uma vez que trataremos sistemas cuja descrição envolve o uso de equações diferenciais, a diferenciação deve estar definida nas variedades com que trabalharemos. As variedades diferenciáveis são aquelas que contemplam essa necessidade. Desse modo, M é uma variedade diferenciável se satisfizer as seguintes condições

- i. M é um espaço topológico;
- ii. M é provido de uma família de pares (U_i, ϕ_i) , onde $\{U_i\}$ é um recobrimento de M e ϕ_i , chamada função coordenada, é um homeomorfismo que leva o conjunto U_i no subconjunto aberto $\phi_U(U)$;
- iii. Dados U e V tais que $U \cap V \neq \emptyset$, o mapa $f_{UV} = \phi_V \circ \phi_U^{-1}$ de $\phi_U(U \cap V)$ em $\phi_V(U \cap V)$ é infinitamente diferenciável.

O par (U_i, ϕ_i) recebe o nome de carta, enquanto que um conjunto de cartas recebe o nome de atlas⁹.

No escopo das variedades diferenciáveis, um tipo útil em algumas situações-problema é a chamada *variedade com uma fronteira*. Tal variedade é um espaço topológico M , com um recobrimento $\{U_i\}$ que é homeomorfo a um conjunto aberto $V^m \equiv \{(x^1, \dots, x^m) \in \mathbb{R}^m | x^m \geq 0\}$. O conjunto de pontos que são mapeados em pontos com $x^m = 0$ é chamado de fronteira de M , com notação ∂M .

Dentre os exemplos de variedades desse tipo podemos mencionar o espaço eucli-

⁹Entendendo que uma carta, no contexto ora abordado, poderia, em uma analogia, ter o mesmo papel de um mapa geográfico, o entendimento da razão pela qual um conjunto de cartas é um atlas se torna mais simples.

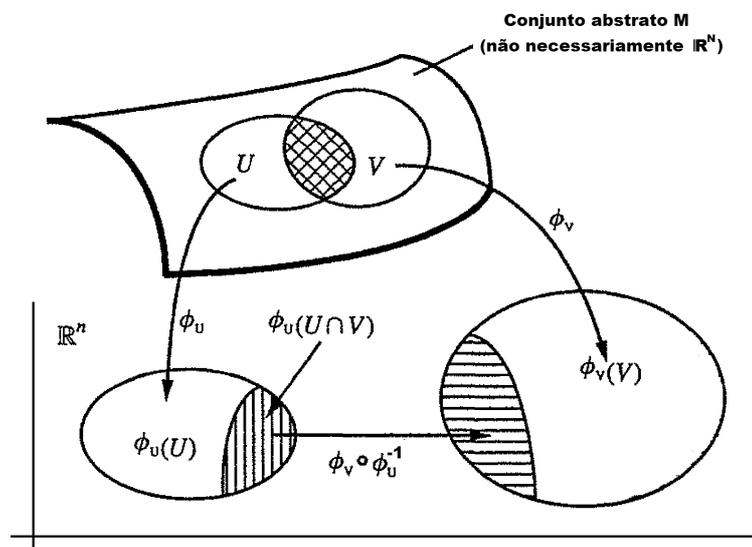


Figura 2.6: Esquema de representação de uma variedade.

diano m -dimensional (\mathbb{R}^m), a esfera¹⁰ n -dimensional S^n e o toro n -dimensional¹¹.

Mapas também podem ser classificados quanto à diferenciabilidade. Definamos então um mapa f diferenciável. Sejam M e N duas variedades, e $f : M \rightarrow N$. Sejam ainda um ponto $p \in M$ tal que $f : p \mapsto f(p)$, com $f(p) \in N$, e as cartas (U, φ) sobre M e (V, ψ) sobre N , onde $p \in U$ e $f(p) \in V$. Então vale o seguinte

$$\alpha \equiv \psi \circ f \circ \varphi^{-1} : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n \quad , \quad (2.7)$$

onde m e n representam as dimensões, respectivamente, das variedades M e N . Se α é C^∞ (ou seja, infinitamente diferenciável), então f é dito diferenciável ou suave. Se f é um homeomorfismo e tanto α quanto α^{-1} são infinitamente diferenciáveis, então f é dito ser um *difeomorfismo*; M e N são ditos difeomorfos entre si.

¹⁰No espaço \mathbb{R}^{n+1} tal esfera é construída a partir da relação $\sum_{k=0}^n (x^k)^2 = 1$.

¹¹O toro n -dimensional, ou seja, T^n , pode ser obtido a partir de um produto de n círculos, $T^n = S^1 \times S^1 \times \dots \times S^1$.

Um outro exemplo de variedade diferenciável é a *variedade riemanniana* cujo estudo inicial é devido ao matemático alemão Bernhard Riemann. Ele apresentou esse estudo à Universidade de Göttingen, em 1854. Este era um dos pré-requisitos para se tornar docente (*Privatdozent*) em universidades alemãs, em um processo semelhante ao da obtenção do título de livre-docente, o qual ainda persiste em universidades do estado de São Paulo. Esse título só podia ser obtido a por detentores do título de doutor (Ph.D.). Então, para se tornar *Privatdozent*, Riemann apresentou a um comitê acadêmico de Göttingen seu *Habilitationsschrift*, que consistia em um conjunto de seminários com trabalho original sobre um certo tema. Como co-requisito, ele também entregou um *Habilitationsvortrag*, uma tese sobre um tema delimitado, escolhido pelo conselho acadêmico. O conselho de Göttingen, na pessoa de Friedrich Gauss, propôs para Riemann que o tema fosse a respeito dos fundamentos de geometria. Como resultado, o *Habilitationsvortrag* de Riemann foi intitulado *Über die Hypothesen welche der Geometrie zu Grunde liegen* (Sobre a hipótese em que se baseia a geometria), publicado em 1868. Mais tarde, a geometria descrita por Riemann recebeu o nome de riemanniana.

Uma variedade riemanniana (M, g) é uma variedade diferenciável M na qual cada espaço tangente a ela é dotado de um produto interno g , chamado métrica riemanniana, de modo a variar suavemente de ponto a ponto. A métrica g é um tensor simétrico e positivo definido. Assim, para uma variedade riemanniana M de dimensão n , uma métrica riemanniana g_p sobre M é uma família de produtos internos

$$g_p : T_p M \times T_p M \longrightarrow \mathbb{R}, \quad p \in M \quad , \quad (2.8)$$

com $T_p M$ representando os espaços tangentes a M no ponto p , tais que, para quaisquer campos vetoriais diferenciáveis V, W sobre M ,

$$p \mapsto g_p (X(p), Y(p)) \quad (2.9)$$

define um mapa suave (isto é, diferenciável) $f : M \rightarrow \mathbb{R}$.

Para um sistema de coordenadas local sobre M dado por $\{x_1, \dots, x_\beta\}$, os campos vetoriais $\{\frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_\beta}\}$ fornecem uma base de vetores tangentes em cada ponto $p \in M$. O tensor métrico para este sistema de coordenadas será dado por

$$g_{\mu\nu}(p) = g_p \left(\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} \right)_p, \left(\frac{\partial}{\partial x_\nu} \right)_p \right) = g_{\nu\mu}(p) \quad . \quad (2.10)$$

O tensor métrico $g(p)$ pode ser expandido [80] ainda como

$$g(p) = g_{\mu\nu}(p) dx^\mu \otimes dx^\nu \quad , \quad (2.11)$$

e chegamos à forma

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu \quad . \quad (2.12)$$

Por exemplo, em um sistema de coordenadas ortogonais [106, 107], tem-se

$$ds^2 = h_l^2 dl^2 + h_m^2 dm^2 + h_n^2 dn^2 \quad , \quad (2.13)$$

onde h_i são os fatores de escala e l , m e n são as coordenadas generalizadas.

Em (2.14) apresentamos a expressão da métrica para três exemplos de sistemas de coordenadas ortogonais. Na ordem, coordenadas cartesianas, cilíndricas e esféricas.

$$\begin{aligned} ds^2 &= dx^2 + dy^2 + dz^2 \quad , \\ ds^2 &= d\rho^2 + \rho^2 d\varphi^2 + dz^2 \quad , \\ ds^2 &= d\rho^2 + \rho^2 d\theta^2 + \rho^2 \text{sen}^2\theta d\varphi^2 \quad . \end{aligned} \quad (2.14)$$

Uma variedade riemanniana pode vir a ser um espaço métrico. Para entender isso, precisamos definir, inicialmente, a expressão para o comprimento de uma dada curva. Sejam $\gamma(t)$ uma curva suave (ou seja, diferenciável) e $L(\gamma)$ o seu comprimento.

Então

$$L(\gamma) = \int_a^b \|\gamma'(t)\| dt \quad , \quad (2.15)$$

onde o apóstrofe denota a diferenciação em relação ao parâmetro t . Com esta definição de comprimento, se a variedade riemanniana M for conexa e compacta, ela se torna um espaço métrico quando a distância $d(x, y)$ entre dois pontos x e y , em M , é dada por

$$d(x, y) = \inf\{L(\gamma)\} \quad , \quad (2.16)$$

e γ é uma curva continuamente diferenciável unindo x e y .

Mesmo que a variedade M seja curva, pode-se lançar mão das chamadas geodésicas. Elas representam curvas que ligam dois pontos quaisquer num dado espaço através da menor distância. No espaço euclidiano, por exemplo, as geodésicas são retas, enquanto que em uma esfera S^2 as geodésicas seriam arcos de circunferência¹².

Antes de definirmos mais rigorosamente o que são geodésicas, analisemos a seguinte situação: imagine dois vetores sendo transportados ao longo de uma trajetória de comprimento infinitesimal, em certa variedade. Quando variedade se constitui em um espaço euclidiano, a diferença entre dois vetores, antes do transporte, é igual à diferença entre eles após o transporte. Contudo, para um espaço não-euclidiano, descrito por coordenadas curvilíneas, isso não é necessariamente verdade¹³. Portanto, para medir a diferença entre dois vetores quaisquer, em um espaço não-euclidiano, é necessário fazer com que os dois vetores sejam trazidos ao mesmo ponto. Um dos vetores deve ser trazido ao ponto onde o segundo vetor se encontra. Um transporte desse tipo é chamado *transporte paralelo* [80, 82, 83, 84, 85]. Passemos então à definição mais formal de transporte paralelo.

¹²É importante ressaltar que as geodésicas só poderão unir dois pontos quaisquer no espaço se este último for compacto [80].

¹³Vale lembrar que um vetor é definido por sua intensidade, direção e sentido; a variação em uma dessas características altera o vetor.

Seja $c : (a, b) \rightarrow M$ uma curva em uma variedade M . Dizemos que um vetor v é transportado paralelamente ao longo dessa curva quando é válida a seguinte condição

$$\frac{dv^\mu}{dt} + \Gamma^\mu_{\nu\lambda} \frac{dx^\nu(c(t))}{dt} v^\lambda = 0 \quad . \quad (2.17)$$

Em outras palavras, o transporte é paralelo quando a derivada covariante desse vetor sobre a curva é zero. Um caso especial ocorre quando o vetor transportado paralelamente for justamente o vetor tangente a $c(t)$. Nesta situação, a curva $c(t)$ é chamada *geodésica*. Expressando (2.17) em termos das coordenadas x^μ , podemos definir

$$v^\mu \equiv \frac{dx^\mu}{dt} \quad , \quad (2.18)$$

e obter a equação de geodésicas na forma

$$\frac{d^2x^\mu}{dt^2} + \Gamma^\mu_{\nu\lambda} \frac{dx^\nu}{dt} \frac{dx^\lambda}{dt} = 0 \quad . \quad (2.19)$$

As geodésicas representam as curvas de menor extensão que ligam dois pontos em uma variedade riemanniana.

Os elementos $\Gamma^\mu_{\nu\lambda}$, que aparecem nas expressões (2.17) e (2.19), constituem os chamados coeficientes de conexão, os quais estão relacionados à definição de *conexão afim*. Conhecer os coeficientes de conexão significa ter informação sobre como os vetores da base, para um certo espaço vetorial, variam de ponto a ponto.

Uma conexão afim ∇ é um mapa $(X, Y) \mapsto \nabla_X Y$ que satisfaz algumas

condições [82, 80, 83, 84, 85], a saber

$$\begin{aligned}
\nabla_X(Y + Z) &= \nabla_X Y + \nabla_X Z \\
\nabla_{X+Y}Z &= \nabla_X Z + \nabla_Y Z \\
\nabla_{fX}Y &= f\nabla_X Y \\
\nabla_X(fY) &= X[f]Y + f\nabla_X Y \quad ,
\end{aligned}
\tag{2.20}$$

onde $X[f] \equiv X^\mu \frac{\partial f}{\partial x^\mu} \in \mathbb{R}$, $f \in \mathcal{F}(\mathcal{M})$ e X, Y, Z são campos vetoriais sobre a variedade M , ou seja, $X, Y, Z \in \mathcal{X}(\mathcal{M})$ ¹⁴.

Seja agora uma carta (U, φ) e o ponto $x = \varphi(p)$ sobre uma variedade M . Os coeficientes de conexão corresponderão às funções definidas através da expressão

$$\nabla_\nu e_\nu \equiv \nabla_{e_\nu} e_\nu = e_\lambda \Gamma^\lambda_{\nu\mu} \quad . \tag{2.21}$$

Podemos ainda expressar a conexão em termos das componentes do vetor $\nabla_\mu W = \nabla_\mu W^\lambda e_\lambda$, tal que

$$\nabla_\mu W^\lambda \equiv \frac{\partial W^\lambda}{\partial x^\mu} + \Gamma^\lambda_{\mu\nu} W^\nu \quad . \tag{2.22}$$

Um questionamento que pode ser feito é se, quando é feito o transporte paralelo de dois vetores quaisquer, o produto interno entre eles permanece constante. Para que isso ocorra, é necessário que [80, 82, 83, 84, 85]

$$(\nabla_\kappa g)_{\mu\nu} = 0 \tag{2.23}$$

ou seja,

$$\frac{\partial}{\partial x^\lambda} g_{\mu\nu} - \Gamma^\kappa_{\lambda\mu} g_{\kappa\nu} - \Gamma^\kappa_{\lambda\nu} g_{\mu\kappa} = 0 \quad . \tag{2.24}$$

¹⁴Quando cada componente de um certo campo vetorial W é uma função suave que leva pontos da variedade M em \mathbb{R} , dizemos que W é um campo vetorial sobre M .

Sendo válida a igualdade em (2.23), dizemos que ∇ é uma *conexão métrica* ou que ∇ é compatível com a métrica g .

Até aqui adiamos a discussão sobre um objeto matemático de grande relevância, o tensor. Já discutimos aspectos relativos a pelo menos um dos exemplos de tensores, ou seja, o tensor métrico. A partir deste ponto vamos descrever, de forma geral, os tensores. Em primeiro lugar, um tensor representa a generalização da idéia de vetor. Portanto, antes de partirmos à descrição dos tensores, faremos uma breve revisão sobre campos vetoriais.

Lembrando um pouco do que vimos em Geometria Analítica e Álgebra Linear, um espaço vetorial V representa um conjunto de objetos v_i (chamados vetores) para o qual duas operações estão definidas: adição e multiplicação por um escalar. Então seja K um conjunto formado por escalares. Tem-se um espaço vetorial V sobre um campo (escalar) K , que denotamos por $V(n, K)$, onde n é a dimensão do espaço vetorial, se os vetores de V satisfazem as oito condições a seguir

- (i) $\vec{u} + \vec{v} = \vec{v} + \vec{u}$.
- (ii) $(\vec{u} + \vec{v}) + \vec{w} = \vec{u} + (\vec{v} + \vec{w})$.
- (iii) Existe um vetor nulo $\vec{0}$ tal que $\vec{v} + \vec{0} = \vec{0} + \vec{v} = \vec{v}$.
- (iv) Para todo \vec{v} existe um $-\vec{v}$, tal que $\vec{v} + (-\vec{v}) = \vec{0}$.
- (v) $c(\vec{u} + \vec{v}) = c\vec{u} + c\vec{v}$.
- (vi) $(c + d)\vec{v} = c\vec{v} + d\vec{v}$.
- (vii) $(cd)\vec{v} = c(d\vec{v})$.
- (viii) $1\vec{v} = \vec{v}$.

Aqui $\vec{u}, \vec{v}, \vec{w} \in V$, $c, d \in K$ e 1 é o elemento unidade de K .

Seja um conjunto $\{\vec{e}_i\}$ de vetores linearmente independentes (LI)¹⁵. Tal conjunto será chamado de uma base de V se, para todo $\vec{v} \in V$, só há uma maneira de escrever

¹⁵Um conjunto de N vetores $\{\vec{e}_k\}$ é LI se a equação $\sum_{k=1}^n a^k \vec{e}_k = 0$ só é válida se todos os a^k forem nulos.

v como combinação linear de $\{\vec{e}_i\}$, a saber,

$$\vec{v} = \sum_{i=1}^n v^i \vec{e}_i \quad , \quad (2.25)$$

onde v^i são as componentes de \vec{v} na base dada e a dimensão do espaço vetorial V é igual ao número n de vetores LI que expandem V , isto é, é igual a quantidade de vetores necessários para descrever o vetor em relação à base dada.

Agora seja uma função linear $f : V \rightarrow K$. Sendo f linear, a seguinte igualdade é válida

$$f(\vec{v}) = f\left(\sum_{i=1}^n v^i \vec{e}_i\right) = \sum_{i=1}^n v^i f(\vec{e}_i) \quad , \quad (2.26)$$

o que nos permite saber a atuação de f sobre um vetor qualquer, quando é conhecida a atuação de f sobre os vetores da base. A linearidade de f também ratifica a igualdade

$$\left(\sum_{k=1}^n a_k f_k\right) \vec{v} = \sum_{k=1}^n a_k (f_k(\vec{v})) \quad , \quad (2.27)$$

pois a combinação linear de funções lineares também é uma função linear.

O espaço que acabamos de descrever, onde a função f atua sobre o espaço vetorial $V(n, K)$ é chamado *espaço dual* (ao espaço $V(n, K)$). O espaço dual é denotado por $V^*(n, K)$ ou V^* . O conjunto $\{e^{*i}\}$ de vetores que expandem V^* é chamado de base dual, satisfazendo a condição

$$e^{*i} e_j = \delta_j^i \quad . \quad (2.28)$$

Após esta rápida revisão sobre espaços vetoriais (e espaços duais), descreveremos sucintamente os tensores. Tensores são objetos que mapeiam vários vetores (e vetores duais) em um escalar. Nesse ínterim, um tensor T que mapeia p vetores duais e q vetores em \mathbb{R} é dito do tipo (p, q) . Um conjunto de vetores de um mesmo tipo forma um espaço tensorial. Assim, denotamos por \mathcal{T}_q^p um conjunto de vetores

do tipo (p, q) . Por fim, um produto tensorial de um tensor pertencente ao espaço \mathcal{T}_q^p por um tensor do espaço $\mathcal{T}_{q'}^{p'}$ é um elemento do espaço tensorial $\mathcal{T}_{q+q'}^{p+p'}$.

Retornemos ao estudo de conexões métricas. Ainda considerando (2.23) válida, podemos definir [82, 80, 83] o tensor de torção da seguinte forma

$$T^\kappa_{\lambda\mu} \equiv \Gamma^\kappa_{\lambda\mu} - \Gamma^\kappa_{\mu\lambda} \quad . \quad (2.29)$$

Uma característica importante do tensor de torção é sua anti-simetricidade em relação aos índices inferiores¹⁶, ou seja, $T^\kappa_{\lambda\mu} = -T^\kappa_{\mu\lambda}$. Geometricamente falando, o tensor de torção nos indica o quão “torcidos” em torno de uma curva são os espaços tangentes, quando os vetores tangentes que determinam esse espaço são transportados paralelamente ao longo da curva.

Podemos ainda definir os chamados símbolos de Christoffel via expressão

$$\left\{ \begin{array}{c} \kappa \\ \mu \quad \nu \end{array} \right\} = \frac{1}{2} g^{\kappa\lambda} \left(\frac{\partial}{\partial x^\mu} g_{\nu\lambda} + \frac{\partial}{\partial x^\nu} g_{\mu\lambda} - \frac{\partial}{\partial x^\lambda} g_{\mu\nu} \right) \quad . \quad (2.30)$$

Por fim, os coeficientes de conexão $\Gamma^\kappa_{\mu\nu}$ são dados por

$$\Gamma^\kappa_{\mu\nu} = \left\{ \begin{array}{c} \kappa \\ \mu \quad \nu \end{array} \right\} + \frac{1}{2} \underbrace{(T^\kappa_{\mu\nu} + T^\kappa_{\nu\mu} + T^\kappa_{\mu\nu})}_{\equiv K^\kappa_{\mu\nu}} \quad , \quad (2.31)$$

onde $K^\kappa_{\mu\nu}$ é chamado tensor de contorção.

Observe que, quando o tensor de torção é nulo, os valores dos coeficientes de conexão coincidem com os valores dos símbolos de Christoffel.

Se o tensor de torção é nulo e a condição de metricidade em (2.23) for válida, dizemos que se tem uma *geometria de Riemann* sobre uma variedade.

¹⁶Os índices inferiores são os índices covariantes do tensor.

Se o tensor de torção e a métrica forem não-triviais¹⁷, mas a condição (2.23) ainda for válida, dizemos que se tem uma *geometria de Riemann-Cartan* sobre uma variedade. Este tipo de geometria será base para a Teoria Geométrica de Defeitos, paradigma teórico no qual está baseada esta tese.

Outro tensor importante em Geometria Diferencial (e com papel ímpar na Teoria da Relatividade Geral) é o tensor de curvatura de Riemann. Em termos das conexões, o tensor de Riemann é dado por

$$R^{\rho}_{\sigma\mu\nu} = \frac{\partial}{\partial x^{\mu}}\Gamma^{\rho}_{\sigma\nu} - \frac{\partial}{\partial x^{\nu}}\Gamma^{\rho}_{\sigma\mu} + \Gamma^{\rho}_{\mu\lambda}\Gamma^{\lambda}_{\sigma\nu} - \Gamma^{\rho}_{\nu\lambda}\Gamma^{\lambda}_{\sigma\mu} \quad , \quad (2.32)$$

ou, também, em termos das componentes do tensor métrico,

$$R_{\sigma\nu\rho\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 g_{\sigma\beta}}{\partial x^{\nu}\partial x^{\rho}} + \frac{\partial^2 g_{\nu\rho}}{\partial x^{\sigma}\partial x^{\beta}} - \frac{\partial^2 g_{\sigma\rho}}{\partial x^{\nu}\partial x^{\beta}} - \frac{\partial^2 g_{\nu\beta}}{\partial x^{\sigma}\partial x^{\rho}} \right) + g_{\eta\kappa} (\Gamma^{\eta}_{\nu\rho}\Gamma^{\kappa}_{\sigma\beta} - \Gamma^{\eta}_{\nu\beta}\Gamma^{\kappa}_{\sigma\rho}) \quad . \quad (2.33)$$

Agora falemos sobre o significado geométrico do tensor de curvatura de Riemann. Para um espaço euclidiano, quando fazemos o transporte paralelo de um vetor ao longo de uma curva fechada, esse vetor retorna à sua posição original. Em outras palavras, podemos sobrepor os vetores “inicial” e “final”. Quando o espaço apresenta curvatura (por exemplo, esse é o caso de uma esfera S^2), o vetor transportado paralelamente sofre uma alteração ou desvio em relação à sua posição inicial; assim não podemos sobrepor os dois vetores (de antes e após o transporte paralelo). O tensor de curvatura de Riemann fornece uma medida desta “falha” em sobrepor as posições inicial e final, em relação ao transporte paralelo, para este vetor.

¹⁷Entenda-se por torção não-trivial um valor não-nulo para o tensor de torção; e por métrica não-trivial, aquela que não é do tipo euclidiana.

2.3 Formas Diferenciais

Uma outra estrutura matemática de grande utilidade para os físicos é constituída pelas formas diferenciais. Dizemos que uma r -forma é um tensor totalmente simétrico do tipo $(0, r)$. Vale lembrar que, conforme a discussão sobre tensores, um tensor do tipo $(0, r)$ mapeia r vetores (e nenhum vetor dual) em \mathbb{R} .

Um exemplo de r -forma é a 1-forma. Para entender o que são 1-formas, devemos voltar um pouco nossa discussão à parte sobre vetores (e espaços) duais. Assim, se T_pM representa o conjunto de espaços (vetoriais) tangentes à variedade M no ponto p , existe ao menos um elemento do espaço vetorial dual a T_pM que seja uma função linear de T_pM em \mathbb{R} . Esse elemento $\omega \in T_p^*M$, com $\omega : T_pM \rightarrow \mathbb{R}$, pode ser chamado de uma 1-forma.

O exemplo mais simples de 1-forma é a diferencial df de uma função $f \in \mathcal{F}(\mathcal{M})$. Deste modo, seja a expressão que nos dá a função potencial calculada na região entre duas placas condutoras A e B de um capacitor, onde existe um campo elétrico em uma direção x , tal que

$$V = \int_A^B E_x dx \quad . \quad (2.34)$$

O integrando em (2.34) representa uma 1-forma; digamos que seria a 1-forma para um certo campo elétrico na direção x . Esta 1-forma do campo elétrico “furaria” as superfícies de potencial constante [86, 87] (equipotenciais) da figura 2.7, ao longo da direção x , a direção do campo elétrico.

Uma 1-forma arbitrária pode ser representada, por exemplo, em coordenadas cartesianas como $\alpha = \alpha_1 dx + \alpha_2 dy + \alpha_3 dz$. Vetores e formas diferenciais têm estruturas bastante parecidas. Em coordenadas cartesianas, podemos fazer uma correspondência entre um certo vetor \vec{v} e uma 1-forma v da seguinte maneira

$$v_1 \hat{x} + v_2 \hat{y} + v_3 \hat{z} \leftrightarrow v_1 dx + v_2 dy + v_3 dz \quad . \quad (2.35)$$

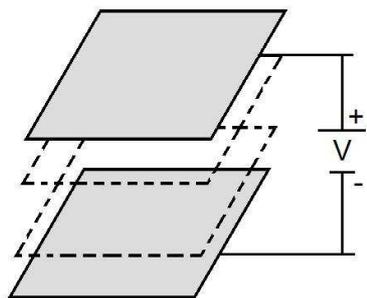


Figura 2.7: Linhas equipotenciais entre duas placas paralelas

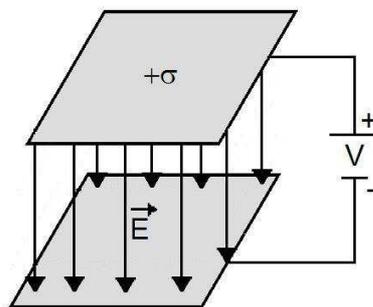


Figura 2.8: Linhas de campo elétrico entre duas placas paralelas

Dizemos que o vetor \vec{v} e a 1-forma v são *duais* um ao outro. A relação (de dualidade) que faz corresponder um certo vetor a determinada 1-forma pode variar quando se passa de um sistema de coordenadas para outro. Um exemplo disso seria a relação entre os versores $(\hat{\rho}, \hat{\phi}, \hat{z})$ para coordenadas cilíndricas e as 1-formas correspondentes. Para chegar a tal correspondência, devemos obter os comprimentos de arco infinitesimais na direção em que aponta o versor para o qual se deseja obter a 1-forma que lhe é dual. No caso da direção ϕ o comprimento infinitesimal ao longo de $\hat{\phi}$ é um elemento de arco $ds = \rho d\phi$, conforme visto na figura 2.10. Assim, teríamos a seguinte relação entre os versores em coordenadas cilíndricas e as formas diferenciais que lhes são associadas

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &\leftrightarrow d\rho \\ \hat{\phi} &\leftrightarrow \rho d\phi \\ \hat{z} &\leftrightarrow dz\end{aligned}\tag{2.36}$$

O campo elétrico $\vec{E} = E_x \hat{x}$ do nosso exemplo causa uma separação de cargas no sistema, fazendo com que haja uma densidade $+\sigma$ na placa superior e $-\sigma$ na placa

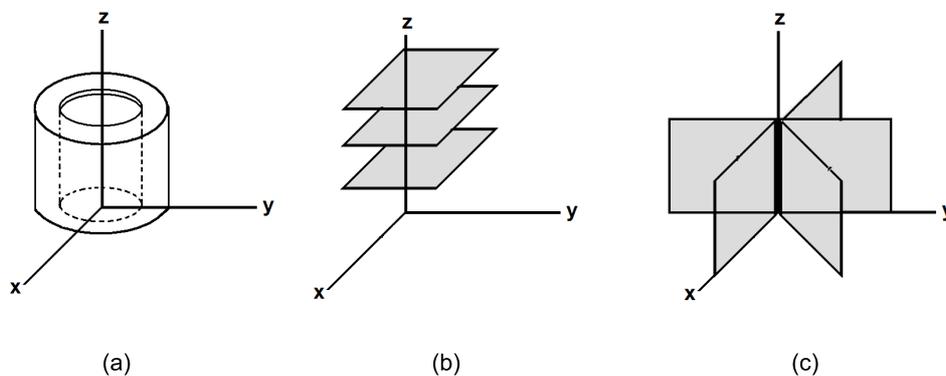


Figura 2.9: Superfícies representando: (a) $d\rho$, (b) dz e (c) $d\phi$.

inferior, conforme é visto na figura 2.8. Poderíamos pensar, então, em tubos de fluxo das linhas de campo elétrico, ligando as duas densidades de carga, iguais em módulo, $+\sigma$ e $-\sigma$. Tais tubos seriam delimitados pelas superfícies $y = \text{constante}$ e $z = \text{constante}$, as quais representam “bordas” dos retângulos com valor $x = \text{constante}$, perfurados pelas linhas de campo elétrico. A carga elétrica total Q será igual ao módulo da densidade de carga σ integrada ao longo da superfície $x = \text{constante}$, onde a carga se distribui. Para a configuração apresentada, temos

$$Q = \int \int D \, dy \, dz \quad . \quad (2.37)$$

O integrando na expressão (2.37) representa uma 2-forma, pois envolve o produto de duas diferenciais.

Uma das operações que podemos realizar sobre uma forma diferencial é o *produto*

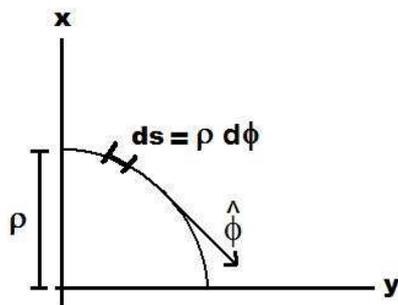


Figura 2.10: Elemento de arco infinitesimal ao longo da direção $\hat{\phi}$.

\wedge , o qual pode ser expresso a partir dos produtos de diferenciais, do seguinte modo

$$dx^{\mu_1} \wedge \dots \wedge dx^{\mu_r} = \sum_{P \in S_r} \text{sgn}(P) dx^{\mu_{P_1}} \wedge \dots \wedge dx^{\mu_{P_r}} \quad , \quad (2.38)$$

onde

$$\text{sgn}(P) = \begin{cases} +1, & \text{para uma permutação par} \\ -1, & \text{para uma permutação ímpar} \end{cases} \quad . \quad (2.39)$$

Por exemplo,

$$dx^\alpha \wedge dx^\beta = dx^\alpha \otimes dx^\beta - dx^\beta \otimes dx^\alpha \quad . \quad (2.40)$$

Denotando o espaço vetorial de r -formas em $p \in M$ por $\Omega_p^r(M)$, o conjunto de r -formas em (2.38) forma uma base para esse conjunto, e um elemento $\omega \in \Omega_p^r(M)$ é expandido a partir da expressão

$$\omega = \frac{1}{r!} \omega_{\mu_1 \mu_2 \dots \mu_r} dx^{\mu_1} \wedge \dots \wedge dx^{\mu_r} \quad . \quad (2.41)$$

Quando o produto \wedge é realizado entre duas formas diferenciais, é comum utilizar a denominação *produto exterior* para essa operação. Assim, o produto de uma r -

forma $\omega \in \Omega_p^r(M)$ e uma q -forma $\xi \in \Omega_p^q(M)$ será uma $q+r$ -forma $\eta \in \Omega_p^{q+r}(M)$. O mapa que representa tal produto exterior é dado por

$$\wedge : \Omega_p^r(M) \times \Omega_p^q(M) \rightarrow \Omega_p^{r+q}(M) \quad . \quad (2.42)$$

O produto externo apresenta a propriedade de associatividade quanto ao produto \wedge . Além disso, sejam duas formas diferenciais $\alpha \in \Omega_p^r(M)$ e $\beta \in \Omega_p^q(M)$; então valem as seguintes propriedades adicionais

$$\begin{aligned} (i) \quad \alpha \wedge \alpha &= 0, \quad \text{se } p \text{ for ímpar} \\ (ii) \quad \alpha \wedge \beta &= (-1)^{qr} \beta \wedge \alpha \quad . \end{aligned} \quad (2.43)$$

A partir de (2.43) é fácil ver que o produto externo de duas 1-formas iguais é nulo, e $dx^\mu \wedge dx^\nu = -dx^\nu \wedge dx^\mu$.

Além da 1-forma, façamos uma breve descrição das 2-formas e 3-formas.

Uma 2-forma, em coordenadas cartesianas, pode ser dada pela expressão geral

$$\xi = \xi_1 dx \wedge dy + \xi_2 dy \wedge dz + \xi_3 dz \wedge dx \quad . \quad (2.44)$$

Podemos agora investigar como duas 2-formas se comportam quanto à soma. Assim, seja η igual à soma de $\alpha = \alpha_1 dx \wedge dy + \alpha_2 dy \wedge dz + \alpha_3 dz \wedge dx$ e $\beta = \beta_1 dx \wedge dy + \beta_2 dy \wedge dz + \beta_3 dz \wedge dx$, com $\alpha, \beta \in \Omega_p^2(M)$. Nessas condições,

$$\eta = (\alpha_1 + \beta_1) dx \wedge dy + (\alpha_2 + \beta_2) dy \wedge dz + (\alpha_3 + \beta_3) dz \wedge dx \quad . \quad (2.45)$$

De maneira análoga ao caso das 1-formas, também podemos fazer uma correspondência entre 2-formas e vetores. Para isso iniciemos com o sistema de coordenadas cartesianas. O versor \hat{z} , por exemplo, estaria associado ao produto $dx \wedge dy$. Em outras palavras, \hat{z} teria direção e sentido da normal à superfície orientada formada

pelos versores \hat{x} e \hat{y} . Ou seja, podemos fazer a seguinte associação

$$\begin{aligned}\hat{z} &\leftrightarrow dx \wedge dy \\ \hat{x} &\leftrightarrow dy \wedge dz \\ \hat{y} &\leftrightarrow dz \wedge dx \quad .\end{aligned}\tag{2.46}$$

Observe que a superfície é orientada, de forma tal que o produto \wedge age de modo análogo ao produto vetorial entre dois vetores quaisquer. Assim, \hat{z} apontaria na direção e sentido do vetor $\hat{x} \times \hat{y}$.

No caso de coordenadas cilíndricas, as 2-formas seriam associadas aos versores (em coordenadas cilíndricas) da seguinte maneira

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &\leftrightarrow \rho d\phi \wedge dz \\ \hat{\phi} &\leftrightarrow dz \wedge d\rho \\ \hat{z} &\leftrightarrow d\rho \wedge \rho d\phi \quad .\end{aligned}\tag{2.47}$$

Além de realizar produtos \wedge também podemos integrar formas diferenciais. Assim, seja uma densidade superficial de carga $D = D_1 dy dz + D_2 dz dx + D_3 dx dy$ tal que

$$\int_{\text{superfície}} D = \int_{\text{volume}} \rho \quad .\tag{2.48}$$

Outro exemplo de integração r -formas (no caso, a integral de uma 1-forma) consta na expressão (2.34): nesta, temos uma integral de linha (ou caminho). Em (2.48) há uma relação entre uma integral de superfície (membro esquerdo) com uma de volume (membro direito).

Observe-se que a expressão (2.48) representa a lei de Gauss do Eletromagnetismo, no paradigma de formas diferenciais. O elemento ρ (que não é a coordenada radial) é uma 3-forma que representa, de modo semelhante a D , uma densidade: a

densidade volumétrica de carga. Assim, a expressão para ρ seria do tipo

$$\rho = \rho(x, y, z) \, dx \, dy \, dz \quad . \quad (2.49)$$

Podemos, inclusive, expressar as leis do Eletromagnetismo, conhecidas como *equações de Maxwell*, no formalismo de r -formas [86, 87]. Utilizando r -formas, as equações de Maxwell, na forma integral, ficam

$$\begin{aligned} \oint_C E &= -\frac{d}{dt} \oint_S B \\ \oint_C H &= \frac{d}{dt} \oint_S D + \int_S J \\ \oint_S D &= \int_V \rho \\ \oint_S B &= 0 \end{aligned} \quad (2.50)$$

Outra operação comum no tratamento de formas diferenciais é a *derivada exterior*. Ela é um mapa $\Omega_p^q(M) \rightarrow \Omega_p^{q+1}(M)$, cuja atuação sobre uma forma diferencial da forma (2.41) é dada por

$$d\omega = \frac{1}{r!} \left(\frac{\partial}{\partial x^\nu} \omega_{\mu_1 \mu_2 \dots \mu_r} \right) dx^\nu dx^{\mu_1} \wedge \dots \wedge dx^{\mu_r} \quad . \quad (2.51)$$

Para a derivada exterior, quando aplicada a duas formas diferenciais $\alpha \in \Omega_p^r(M)$ e $\beta \in \Omega_p^q(M)$, vale ainda a seguinte identidade

$$d(\alpha \wedge \beta) = d\alpha \wedge \beta + (-1)^r \alpha \wedge d\beta \quad . \quad (2.52)$$

Além disso, aplicar duas ou mais vezes a derivada exterior sobre uma r -forma tem como resultado o valor nulo, ou seja,

$$d^m(d\alpha) \equiv 0 \quad \forall m \geq 2 \quad . \quad (2.53)$$

2.4 O que são geometrias não-euclidianas?

Euclides foi um dos grandes, senão o maior, geômetras que se tem notícia. Ele tentou reunir em sua obra *Elementos* todos os conhecimentos de geometria da sua época. Para isso tentou compilar todo o saber geométrico intuitivo sobre o espaço em uma descrição racional. Os tijolos primordiais na abordagem de Euclides foram entes como o ponto, a reta ou o plano, por exemplo. A definição para estes entes geométricos, bem como as relações existentes entre eles, eram feitas, na abordagem euclidiana, a partir de axiomas ou postulados. Os cinco postulados de Euclides foram os seguintes:

1. Uma linha reta pode ser tratada de um ponto para outro qualquer.
2. Qualquer segmento finito de reta pode ser prolongado indefinidamente para gerar uma reta.
3. Dados um ponto qualquer e uma distância qualquer, é possível traçar um círculo centrado naquele ponto e com raio igual à dada distância.
4. Todos os ângulos retos são iguais entre si.
5. **Se uma reta cortar duas outras retas (no mesmo plano) de modo que a soma dos dois ângulos interiores, de um mesmo lado, seja menor que dois ângulos retos (180°), então as duas outras retas se cruzam, quando suficientemente prolongadas, do lado da primeira reta em que se encontram os dois ângulos.**

O 5º postulado encerra algo peculiar e, com vistas a entendê-lo, faremos uso da Figura 2.11. Dessa forma vemos que se a intersecção da reta AA' com as retas BB' e CC' gerar ângulos \hat{D} e \hat{E} tais que $\hat{D} + \hat{E} < 180^\circ$, então as retas BB' e CC' se interceptam em algum ponto do espaço, quando suficientemente prolongadas. No

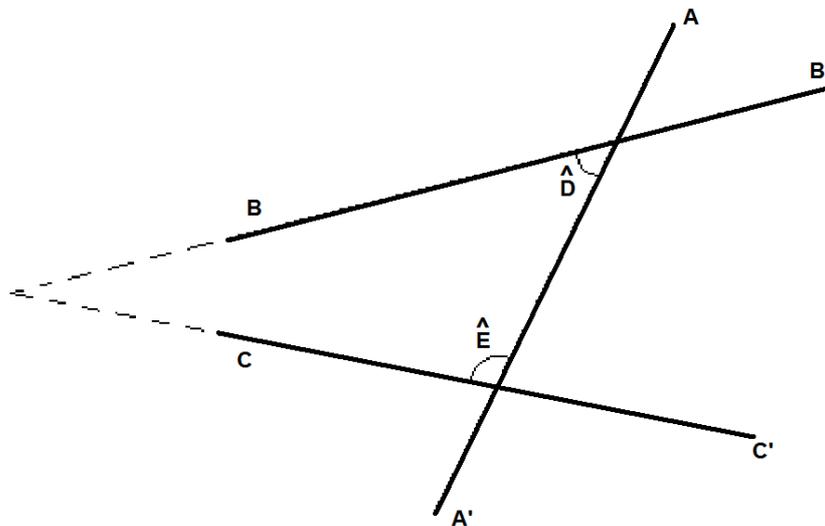


Figura 2.11: Postulado quinto de Euclides e a intersecção de duas retas.

caso de um triângulo, para a geometria euclidiana, a soma dos ângulos internos é igual a 180° .

O postulado quinto de Euclides é equivalente ao *axioma das paralelas*, segundo o qual por um ponto p exterior a uma reta VV' só pode passar uma única reta paralela a VV' . Muitos séculos após Euclides, alguns matemáticos, como Bolyai, Lobachevsky, Gauss e Riemann indagaram acerca de geometrias onde o quinto postulado de Euclides não fosse, necessariamente, válido. Como resultado dessa busca, surgem as geometrias hiperbólica (ou de Lobachevsky) e a geometria esférica, também chamada elíptica (ou de Riemann). Comparemos, a seguir, estas duas últimas geometrias com a geometria euclidiana no que concerne à soma dos ângulos internos de um triângulo e em relação ao teor do axioma das paralelas. Na geometria de Lobachevsky a soma dos ângulos internos de um triângulo é menor que 180° e por um ponto podemos traçar mais de uma paralela a uma linha reta. Na geometria esférica, a soma dos ângulos internos de um triângulo é maior que 180° e por um

ponto não se pode traçar nenhuma paralela a um dado ponto.

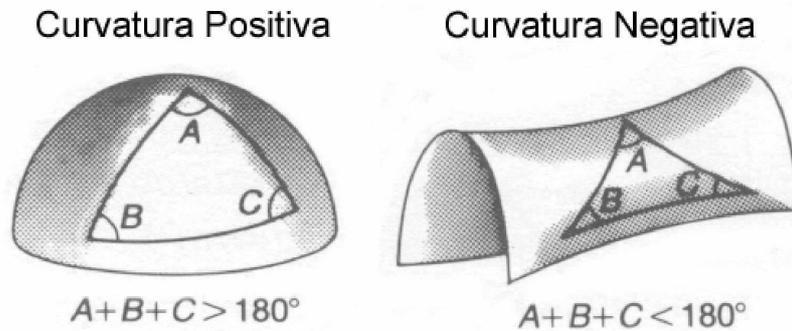


Figura 2.12: Soma dos ângulos internos de um triângulo para duas geometrias não-euclidianas

Para entender melhor a questão do *axioma das paralelas* e sua não-validade para espaços curvos, vejamos o caso de um espaço esférico, através da descrição a seguir:

Suponha que a Terra é perfeitamente esférica e que ela é habitada por “seres planos”, criaturas absolutamente sem graça que têm apenas duas dimensões e que não percebem o sentido de “altura”. Lembre-se que estas criaturas se deslocam se arrastando sobre a superfície terrestre. O método usado por estas criaturas para identificar “linhas retas” como sendo as linhas de mais curta distância entre dois pontos consiste em estender linhas através da superfície conectando dois pontos quaisquer. Para essas criaturas essa linha parece ser uma reta à medida que elas se movem ao longo delas uma vez que as direções de chegada ou de partida dessas criaturas em qualquer ponto sobre a linha tem ângulo zero entre elas. Com esta definição os “seres planos” encontram que todas as linhas retas se interceptam e que movendo-se ao longo de qualquer linha reta eles finalmente retornam ao seu ponto de partida (lembre-se que os “seres planos” estão vivendo sobre a superfície de uma esfera). Eles

também descubrem que a soma dos três ângulos internos de qualquer triângulo que eles desenham sobre a Terra não dá mais como resultado o valor correspondente a dois ângulos retos como ocorre na geometria de Euclides. Em vez disso a soma desses três ângulos internos sempre excede dois ângulos retos. A figura abaixo mostra uma situação onde a soma é igual a três ângulos retos. (Fonte: Referência [88], p. 3)

Em suma, o que caracteriza uma geometria como não-euclidiana é a incompatibilidade com o quinto postulado de Euclides.

Capítulo 3

SISTEMAS MESOSCÓPICOS NA PRESENÇA DE UM DEFEITO TOPOLÓGICO

3.1 Anéis e fios quânticos em um espaço com uma dispiração

Nesta seção e nas próximas, tanto as deste quanto as do próximo capítulo, os resultados obtidos são de nossa autoria. Nas próximas seções deste capítulo investigaremos o papel da curvatura nas propriedades físicas de uma partícula cuja dinâmica acontece em um meio (com curvatura). Aqui a contribuição de curvatura não é uma característica intrínseca da superfície (qual seria no caso de uma esfera ou de um espaço hiperbólico), mas algo causada pelo defeito linear, a dispiração.

Partiremos dos tipos de confinamento mais simples até o mais refinado. Nosso estudo também investigará como um campo magnético externo influi nas propriedades físicas do sistema.

3.1.1 Fio Quântico

Nesta seção investigaremos a dinâmica de uma partícula em um meio com uma deslocação ao longo da direção z , comparando com os resultados discutidos na seção anterior.

Considere um fio cilíndrico contendo uma dispiração orientada ao longo do eixo z . A métrica neste caso é dada por

$$ds^2 = d\rho^2 + (dz + \beta d\varphi)^2 + \alpha^2 \rho^2 d\varphi^2 \quad , \quad (3.1)$$

onde $\rho > 0$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ e $-\infty \leq z \leq \infty$.

Há um acoplamento entre as coordenadas z e φ , o que pode ser visualizado pela maneira como as deslocações são construídas através do chamado processo de Volterra.

Visto que estudaremos o caso do fio quântico com um raio constante, faremos $\rho = \text{const}$ na métrica (3.1). Então,

$$ds^2 = (dz + \beta d\varphi)^2 + \alpha^2 R_0^2 d\varphi^2, \quad (3.2)$$

Os tensores métricos covariante e contravariante associados a (3.2) são, respectivamente,

$$g_{ij} = \begin{bmatrix} \alpha^2 R_0^2 + \beta^2 & \beta \\ \beta & 1 \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

e

$$g^{ij} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\alpha^2 R_0^2} & \frac{-\beta}{\alpha^2 R_0^2} \\ \frac{-\beta}{\alpha^2 R_0^2} & \frac{\alpha^2 R_0^2 + \beta^2}{\alpha^2 R_0^2} \end{bmatrix} . \quad (3.4)$$

O determinante do tensor covariante (\mathbf{g}) é igual a $\alpha^2 R_0^2$. Por sua vez, a forma geral para o hamiltoniano em termos do tensor métrico é dada por

$$H = \frac{1}{2\mu\sqrt{g}} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x^i} - \frac{e}{c} A_i \right) \sqrt{g} g^{ij} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x^j} - \frac{e}{c} A_j \right), \quad (3.5)$$

Observe-se que a expressão (3.5) representa o operador de Laplace-Beltrami, uma generalização do laplaciano quando a geometria do espaço é não-euclidiana. Por sua vez, a expressão para o hamiltoniano é dada por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{\alpha^2 R_0^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - \beta \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right]. \quad (3.6)$$

Construindo a solução para a equação de autovalor $H\Psi = E\Psi$ a partir do *ansatz*

$$\Psi(\varphi, z) = e^{im\varphi} e^{ikz}, \quad (3.7)$$

encontramos a seguinte expressão para os autovalores:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 (m - k\beta)^2}{2\mu \alpha^2 R_0^2} \quad (3.8)$$

onde o primeiro termo está associado a energia cinética de translação para uma partícula em um espaço euclidiano e o segundo termo representa a energia cinética de rotação em torno do centro do fio. Este segundo termo difere daquele que seria encontrado para o caso de um espaço euclidiano, sem defeitos: a passagem do caso euclidiano (sem defeitos) para o caso em que há a deslocação se dá via transição $\frac{\hbar^2 m^2}{2\mu R_0^2} \rightarrow \frac{\hbar^2 (m-k\beta)^2}{2\mu \alpha^2 R_0^2}$.

Os autovalores de energia na expressão (3.8) mostram uma dependência com o parâmetro β , que está relacionado ao vetor de Burgers b^z pela sentença $b^z = 2\pi\beta$, bem como da geometria, o que se vê pela dependência em R_0 . Outro fato verificado

é que o número quântico m sofre um deslocamento, situação esta que ocorre quando aplicamos um campo magnético externo, conforme veremos mais adiante.

Agora investigaremos como os autovalores mudam quando a partícula que se movimenta no fio quântico sente o fluxo magnético $\frac{\Phi_{AB}}{2\pi R_0}$. Aqui a única componente do potencial vetor é a azimutal, e a contribuição de fluxo se faz via acoplamento com a componente φ do hamiltoniano, conforme expressão abaixo

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{\alpha^2 R_0^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - \beta \frac{\partial}{\partial z} - i \frac{\Phi_{AB}}{\Phi_0} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right], \quad (3.9)$$

Utilizando *ansatz* (3.7), encontramos:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 (m' - k\beta)^2}{2\mu \alpha^2 R_0^2} \quad (3.10)$$

onde $m' \equiv m - \frac{\Phi_{AB}}{\Phi_0}$ e $\Phi_0 \equiv hc/|e|$.

Além de os autovalores de energia dependerem do vetor de Burgers, causando um deslocamento do número quântico m – como aconteceu para o caso sem fluxo magnético –, o valor de m também sofre um deslocamento decorrente da presença do fluxo magnético.

Comparando a expressão de autovalores de energia acima com aquelas em (3.58) e vemos que em (3.8) e (3.10), vemos que as três expressões mencionadas são semelhantes em sua dependência com a dimensão radial (seja ρ_0 ou R_0), com $\bar{m} \rightarrow m' - k\beta$ (ou $\bar{m} \rightarrow m - k\beta$, no caso em que não há fluxo magnético). Por outro lado, no caso do meio com deslocação, os níveis de Landau não aparecem na expressão dos autovalores de energia.

3.1.2 Anel quântico modelado via Potencial *Parede Rígida*

Nesta seção consideraremos um fio quântico com uma dispiração ao longo da direção Z , considerando um confinamento do tipo *parede rígida*.

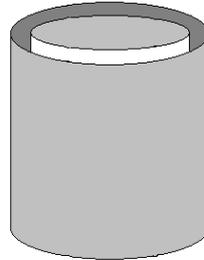


Figura 3.1: Confinamento do tipo Parede Rígida.

O potencial do tipo parede rígida aqui apresentado pode ser visualizado via Figura (3.1). Nesse tipo de confinamento a partícula teria seu movimento restrito à região entre os raios interno e externo iguais a a e b , respectivamente, da casca cilíndrica. Conseqüentemente, as regiões para $\rho < a$ e para $\rho > b$ são proibidas à partícula. Este último fato é expresso pelas condições de contorno $\Psi(\rho = a) = \Psi(\rho = b) = 0$.

Este modelo de confinamento é mais realístico do que o discutido na seção anterior; agora a largura finita do anel será levada em conta. O modelo aqui apresentado trata de uma partícula confinada em uma faixa circular da superfície que corta o eixo Z , mas com o movimento livre ao longo do eixo Z .

A métrica que descreve o meio é dada por

$$ds^2 = d\rho^2 + (dz + \beta d\varphi)^2 + \alpha^2 \rho^2 d\varphi^2 \quad . \quad (3.11)$$

Os tensores métricos covariante e contravariante que correspondem à métrica

acima são da forma:

$$g_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha^2 \rho^2 + \beta^2 & \beta \\ 0 & \beta & 1 \end{bmatrix} \quad (3.12)$$

e

$$g^{ij} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\alpha^2 \rho^2} & -\frac{\beta}{\alpha^2 \rho^2} \\ 0 & -\frac{\beta}{\alpha^2 \rho^2} & 1 + \frac{\beta^2}{\alpha^2 \rho^2} \end{bmatrix} \quad (3.13)$$

O hamiltoniano para o sistema ora descrito é

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left\{ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\alpha^2 \rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - 2\beta \frac{1}{\alpha^2 \rho^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial z} + \left(1 + \frac{\beta^2}{\alpha^2 \rho^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\}. \quad (3.14)$$

Logo a eq. de Schrödinger independente do tempo (ESIT) é dada por

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\alpha^2 \rho^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} - \left(2\beta \frac{1}{\alpha^2 \rho^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial z} \right) \Psi + \left(1 + \frac{\beta^2}{\alpha^2 \rho^2} \right) \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} \Psi = 0 \quad (3.15)$$

Utilizando o *ansatz*

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = R(\rho) e^{im\varphi} e^{ikz}, \quad (3.16)$$

e substituindo na equação (3.15), encontramos

$$\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) - \frac{m^2}{\alpha^2 \rho^2} R + 2 \frac{\beta m k}{\alpha^2 \rho^2} R - k^2 R - \frac{k^2 \beta^2}{\alpha^2 \rho^2} R + \frac{2\mu E}{\hbar^2} R = 0, \quad (3.17)$$

que pode ser reescrita como

$$\rho^2 \frac{d^2 R}{d\rho^2} + \rho \frac{dR}{d\rho} - \left(\frac{m - k\beta}{\alpha} \right)^2 R + \left(\frac{2\mu E}{\hbar^2} - k^2 \right) \rho^2 R = 0 \quad (3.18)$$

Para simplificar a forma das equações, definiremos as constantes

$$\gamma^2 \equiv \frac{2\mu E}{\hbar^2} - k^2 \quad (3.19)$$

e

$$\eta \equiv \frac{m - k\beta}{\alpha} \quad . \quad (3.20)$$

Podemos reescrever a equação diferencial radial acima da seguinte forma:

$$\rho^2 \frac{d^2 R}{d\rho^2} + \rho \frac{dR}{d\rho} + \gamma^2 \rho^2 R - \eta^2 R = 0 \quad (3.21)$$

ou

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left(1 - \frac{\eta^2}{\gamma^2 \rho^2} \right) \gamma^2 \rho^2 R = 0 \quad . \quad (3.22)$$

Fazendo a mudança de variável $x = \gamma\rho$, temos

$$\frac{d}{d\rho} = \frac{dx}{d\rho} \frac{d}{dx} = \gamma \frac{d}{dx} \quad , \quad (3.23)$$

$$\frac{d^2}{d\rho^2} = \gamma^2 \frac{d^2}{dx^2} \quad , \quad (3.24)$$

o que nos leva à nova equação diferencial radial

$$\frac{d^2 R}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dR}{dx} + \left(1 - \frac{\eta^2}{x^2} \right) R = 0, \quad (3.25)$$

cujas soluções são funções de Bessel. Assim é possível escrever a solução de (3.25) na

forma

$$R(\gamma\rho) = A_\eta J_\eta(\gamma\rho) + B_\eta N_\eta(\gamma\rho) \quad . \quad (3.26)$$

A motivação inicial desta seção foi modelar a situação de um fio quântico com largura finita. Ou seja, para um anel de raio interno a e raio externo b isso pode ser feito através do seguinte processo: vamos confinar a partícula a uma região cilíndrica contida no intervalo $a < \rho < b$, com $b > a$.

Utilizando as condições de contorno $\Psi(\rho = a) = \Psi(\rho = b) = 0$, chegamos à seguinte equação matricial

$$\begin{bmatrix} J_\eta(\gamma a) & N_\eta(\gamma a) \\ J_\eta(\gamma b) & N_\eta(\gamma b) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_\eta \\ B_\eta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad . \quad (3.27)$$

A solução não-trivial para este sistema é obtida desde que a matriz cujos elementos são as funções de Bessel tenha determinante nulo. Assim,

$$J_\eta(\gamma a) \cdot N_\eta(\gamma b) - J_\eta(\gamma b) \cdot N_\eta(\gamma a) = 0 \quad (3.28)$$

e chegamos às relações

$$\frac{B_\eta}{A_\eta} = -\frac{J_\eta(\gamma a)}{N_\eta(\gamma a)} \quad (3.29)$$

e

$$\frac{B_\eta}{A_\eta} = -\frac{J_\eta(\gamma b)}{N_\eta(\gamma b)} \quad . \quad (3.30)$$

Portanto a expressão (3.26) é dada por

$$R(\rho) = M' \left(J_\eta(\gamma_{\eta,s}\rho) - N_\eta(\gamma_{\eta,s}\rho) \frac{J_\eta(\gamma_{\eta,s}b)}{N_\eta(\gamma_{\eta,s}b)} \right) \quad , \quad (3.31)$$

onde $\gamma_{\eta,s}$ é a s -ésima raiz da equação (3.28).

$$J_{\eta}(\gamma a)N_{\eta}(\gamma b) - J_{\eta}(\gamma b)N_{\eta}(\gamma a) = 0, \quad (3.32)$$

Chegamos a partir da definição de γ à seguinte expressão dos autovalores

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu} (\gamma_{\eta,s}^2 + k^2) \quad . \quad (3.33)$$

Agora vamos confinar a partícula a uma região cilíndrica contida no intervalo $a < \rho < b$, com $b > a$. Das condições de contorno encontramos a seguinte equação para os autovalores de energia (explicitando η):

$$J_{\frac{m-k\beta}{\alpha}}(\gamma a) N_{\frac{m-k\beta}{\alpha}}(\gamma b) - J_{\frac{m-k\beta}{\alpha}}(\gamma b) N_{\frac{m-k\beta}{\alpha}}(\gamma a) = 0 \quad (3.34)$$

Vemos que os níveis de energia dependerão do parâmetro η , o qual acabamos de explicitar. Para uma melhor visualização do comportamento dos níveis em relação aos parâmetros que os influenciam, buscamos os valores de γ para os quais a expressão (3.34) são válidos.

Consideremos, portanto, a expansão assintótica dos produtos cruzados das funções de Bessel em (3.34), nos limites $\gamma a \gg 0$ e $\gamma b \gg 0$, com $b > a$. Definamos ainda as quantidades

$$\xi_0 = \sqrt{ab} \quad , \quad L = b - a \quad , \quad (3.35)$$

onde ξ_0 representa um raio médio geométrico e L é similar a uma “largura” do anel [33] delimitado pelos raios a e b . Consoante isto, vamos impor a condição

$$L \ll \xi_0 \quad (3.36)$$

para aplicar a expansão assintótica em 3.34, o que significa que temos um anel delgado, e sua largura é desprezível em comparação com seu raio.

Levando em conta a expansão assintótica de Hankel [89], para η fixo, temos

$$J_{|\eta|}(\gamma a) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi\gamma a}} \left[\cos\left(\gamma a - \frac{\eta}{2}\pi - \frac{\pi}{4}\right) - \frac{4\eta^2 - 1}{8\gamma a} \text{sen}\left(\gamma a - \frac{\eta}{2}\pi - \frac{\pi}{4}\right) \right] , \quad (3.37)$$

$$N_{|\eta|}(\gamma a) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi\gamma a}} \left[\text{sen}\left(\gamma a - \frac{\eta}{2}\pi - \frac{\pi}{4}\right) + \frac{4\eta^2 - 1}{8\gamma a} \cos\left(\gamma a - \frac{\eta}{2}\pi - \frac{\pi}{4}\right) \right] \quad (3.38)$$

e expressões similares para $J_{|\eta|}(\gamma b)$ e $N_{|\eta|}(\gamma b)$, e substituindo tais expansões em (3.33), obtemos

$$\gamma^2 \approx \left(\frac{s\pi}{b-a}\right)^2 + \frac{(m-k\beta)^2}{4\alpha^2 ab} . \quad (3.39)$$

A partir da definição de k^2 , obtemos a expressão de níveis de energia

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 (m-k\beta)^2}{2\mu\alpha^2 \xi_0^2} + \frac{4\xi_0^2 \hbar^2 (s\pi)^2 - \hbar^2 L^2}{8\mu\xi_0^2 L^2} , \quad (3.40)$$

com s inteiro.

Em (3.40) vemos que os valores de m são deslocados por uma quantidade $k\beta$ ligada à componente de deslocação, além de reduzida por um fator multiplicativo $\frac{1}{\alpha}$ ligado à componente de desclinação do defeito.

Podemos adicionar um fluxo de Aharonov-Bohm, no centro do anel, à configuração do sistema. Isso seria equivalente a fazer uma translação $m \rightarrow m - \frac{\Phi_{AB}}{\Phi_0}$, o que transforma a expressão(3.40) em

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 \left(m - \frac{\Phi_{AB}}{\Phi_0} - k\beta\right)^2}{2\mu\alpha^2 \xi_0^2} + \frac{4\xi_0^2 \hbar^2 (s\pi)^2 - \hbar^2 L^2}{8\mu\xi_0^2 L^2} . \quad (3.41)$$

Na expressão (3.40) vemos que no limite de um anel delgado, ou seja, $b \rightarrow a$, a energia E tende ao infinito. Assim, para que $E \rightarrow$ constante quando $b \rightarrow a$,

devemos adicionar um potencial atrativo na região $a \leq \rho \leq b$ para compensar o aumento da energia neste limite. Fazendo isto, encontramos

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{(m-k\beta)^2}{a^2} - \frac{\hbar^2}{8\mu a^2} \quad (3.42)$$

Analisando o resultado em (3.42), vemos que o primeiro termo é a contribuição devida ao movimento livre da partícula na direção z . O segundo termo é devido ao confinamento da partícula, na geometria do anel, e na presença de uma dispersão. O terceiro termo corresponde à contribuição devido à dinâmica em uma superfície bidimensional imersa¹ em um espaço tridimensional [90]. Observe-se ainda que, para $\alpha = 1$ e $\beta = 0$, a expressão de energia é formalmente igual à do efeito Aharonov-Bohm para estados ligados [91, 92].

3.2 Potencial de Tan e Inkson

3.2.1 Confinamento de Tan e Inkson aplicado a um espaço plano bidimensional

Nesta seção, a título de revisão teórica, apresentamos um modelo de potencial confinante proposto por Tan e Inkson. Esse modelo não é de nossa autoria e que consta na referência [1]. Neste trabalho, o modelo de confinamento é aplicado a um sistema sem curvatura ou torção, isto é, um espaço euclidiano. Contudo, por ser um potencial do tipo radial, com simetria cilíndrica, não tem sua forma modificada se aplicado a espaços com uma desclinação², com uma deslocação tipo hélice ou para

¹Na referência [90] é proposto um método geométrico para estudar a dinâmica de partículas em superfícies que estão imersas em espaços de dimensões maiores. Nesta abordagem a contribuição dessa geometria é feita a partir da adição, ao hamiltoniano, de um termo dependente da curvatura da superfície em questão.

²Apesar de um espaço com desclinação possuir curvatura, esta é singular: o tensor de curvatura é nulo em toda parte, exceto em um ponto, que é o eixo do defeito. Ou seja, a simetria cilíndrica

aqueles com uma dispiração.

O modelo é bastante flexível, podendo ser ajustado para descrever diferentes sistemas mesoscópicos – pontos quânticos, *antidots*, fios e anéis quânticos, por exemplo. O ajuste é feito a partir do controle de dois parâmetros no potencial, a_1 e a_2 , os quais têm unidade de densidade superficial de energia.

O potencial $V(\rho)$ radial proposto em [1] para um anel bidimensional no plano XY é dado pela seguinte expressão

$$V(\rho) = \frac{a_1}{\rho^2} + a_2\rho^2 - V_0 \quad (3.43)$$

com $V_0 = 2\sqrt{a_1a_2}$. O gráfico para $V(\rho)$ é expresso na Figura 3.2.

O mínimo de $V(\rho)$, tal que $V(\rho_0) = 0$ ocorre para

$$\rho = \rho_0 = (a_1/a_2)^{1/4} \quad , \quad (3.44)$$

e na vizinhança de ρ_0 o potencial tem a forma parabólica, conforme se vê na Figura 3.3.

$$V(\rho) = \frac{1}{2}\mu\omega_0^2(\rho - \rho_0)^2 \quad , \quad (3.45)$$

com $\omega_0 = \sqrt{8\frac{a_2}{\mu}}$, que indica a intensidade do confinamento transversal, e com μ representando a massa efetiva do elétron.

Para o potencial (3.43), teremos os seguintes limites [1]:

- para ρ_0 constante e $\omega_0 \rightarrow \infty$ temos o limite de um anel unidimensional;
- para ω_0 constante e $\rho_0 \rightarrow \infty$ temos o fio reto $2D$, ou seja, uma fita no plano;
- para $a_1 = 0$ temos o potencial confinante típico de um ponto quântico;

do processo de formação do defeito faz com que possamos considerar o potencial radial de [1] inalterado. Para uma esfera ou um plano de Lobachevsky, por outro lado, o potencial confinante inicialmente proposto na referência [1] terá de sofrer algumas alterações em sua forma, conforme veremos no capítulo 4.

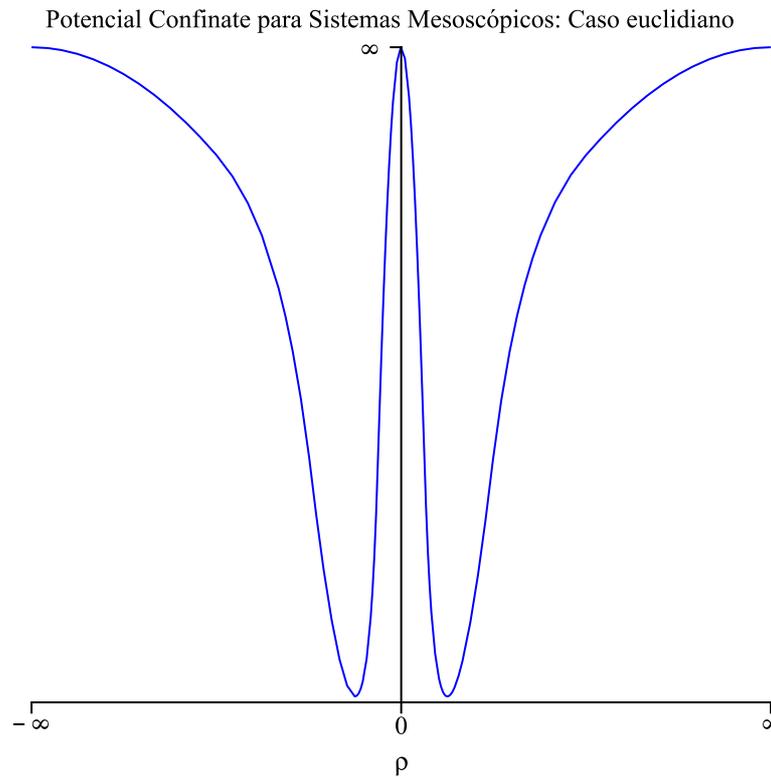


Figura 3.2: Potencial de Tan e Inkson que modela sistemas mesoscópicos no plano.

- para $a_2 = 0$ temos o potencial confinante de um antidot centrado em $\rho = 0$.

O espaço plano XY pode ser descrito pela seguinte métrica em coordenadas cilíndricas

$$ds^2 = d\rho^2 + \rho^2 d\varphi^2 \quad , \quad (3.46)$$

onde $\rho > 0$ e $0 \leq \varphi \leq 2\pi$.

Em nosso estudo consideraremos a presença de um fluxo magnético Φ_{AB} que perpassa o centro do anel $2D$. O hamiltoniano para esse sistema pode ser dado, em

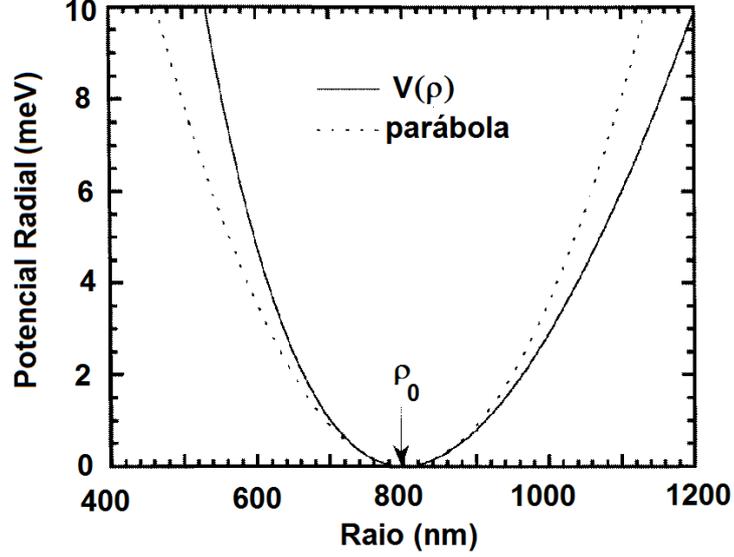


Figura 3.3: Potencial de Tan e Inkson em torno do raio mínimo ρ_0 . A linha contínua representa o potencial definido em (3.43), para um anel de *GaAs* com $\rho_0 = 800 \text{ nm}$ e $\Delta\rho = 300 \text{ nm}$, com energia de Fermi $E_f = 2 \text{ meV}$. A linha tracejada corresponde ao perfil parabólico $\frac{1}{2}\mu\omega_0^2(\rho - \rho_0)^2$ com $\hbar\omega_0 = 0,449 \text{ meV}$. Fonte: Referência [1].

termos da métrica a partir da expressão:

$$H = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{\Phi_{AB}}{\Phi_0} \right)^2 - i \frac{eB}{\hbar} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{\Phi_{AB}}{\Phi_0} \right) + \frac{e^2 B^2}{4\hbar^2} \rho^2 \right] + V(\rho) \quad , \quad (3.47)$$

com Φ_{AB} e Φ_0 representando, respectivamente, o fluxo magnético que passa pelo centro do anel e o período do fluxo magnético ligado ao efeito Aharonov-Bohm.

Para encontrar as autofunções e autovalores da equação $H\Psi = E\Psi$, consideraremos o seguinte *ansatz* para a forma das autofunções:

$$\Psi(\rho, \varphi) = R(\rho) \exp^{im\varphi} \quad (3.48)$$

Dessa maneira chegamos à seguinte equação diferencial radial

$$\left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{M^2}{\rho^2} + \frac{\mu}{4\hbar^2} \omega^2 \rho^2 - (m - \phi_{AB}) \frac{eB}{\hbar} - \frac{\mu^2 \omega_0^2 \rho_0^2}{2\hbar^2} - \frac{2\mu E}{\hbar^2} \right] R = 0 \quad (3.49)$$

onde $M = \sqrt{(m - \phi_{AB})^2 + \frac{2\mu a_1}{\hbar^2}}$, $\phi_{AB} \equiv \frac{\Phi_{AB}}{\Phi_0}$, $\omega_c = \frac{eB}{\mu}$, $\omega_0 = \sqrt{\frac{8a_2}{\mu}}$ e $\omega \equiv \sqrt{\omega_c^2 + \omega_0^2}$. Aqui ω_c é a frequência de cíclotron adquirida por elétrons que se movem em um plano na presença de um campo magnético perpendicular.

Definindo a variável $\xi \equiv \frac{\rho^2}{2\lambda^2}$, onde $\lambda \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}$, teremos

$$\frac{d}{d\rho} = \frac{d\xi}{d\rho} \frac{\sqrt{2\xi}}{\lambda} \quad e \quad \frac{d^2}{d\rho^2} = \frac{2\xi}{\lambda^2} \frac{d^2}{d\xi^2} \quad (3.50)$$

o que nos leva à equação

$$\xi \frac{d^2 R}{d\xi^2} + \frac{dR}{d\xi} + \beta R - \frac{\xi}{4} - \frac{M^2}{4\xi} R = 0 \quad . \quad (3.51)$$

Se $R(\xi) = \exp(-\frac{\xi}{2}) \xi^{\frac{M}{2}} u(\xi)$, logo

$$\frac{dR}{d\xi} = \exp(-\frac{\xi}{2}) \xi^{\frac{M}{2}} \left[-\frac{1}{2}u + \frac{M}{2} \frac{1}{\xi} u + \frac{du}{d\xi} \right] \quad , \quad (3.52)$$

então

$$\xi \frac{d^2 R}{d\xi^2} = \exp(-\frac{\xi}{2}) \xi^{\frac{M}{2}} \left[\frac{\xi}{4} u - \frac{M}{2} u + \frac{M^2}{4} \frac{1}{\xi} u + (-\xi + M) \frac{du}{d\xi} + \frac{d^2 u}{d\xi^2} \right] \quad . \quad (3.53)$$

Dessa maneira chegamos a equação diferencial hipergeométrica confluyente na variável $u(\xi)$

$$\xi \frac{d^2 u}{d\xi^2} + (M + 1 - \xi) \frac{du}{d\xi} + \left(\beta - \frac{M + 1}{2} \right) u = 0 \quad , \quad (3.54)$$

cujas solução é

$$u(\xi) = F \left(-\beta + \frac{M + 1}{2}, M + 1, \xi \right) \quad , \quad (3.55)$$

que é uma *função hipergeométrica confluyente*.

Para encontrar os autovalores de energia, utilizemos a condição para que ocorra a normalização das funções hipergeométricas confluentes,

$$-\beta + \frac{M+1}{2} = -n \quad . \quad (3.56)$$

Chegamos à seguinte expressão para os autovalores de energia

$$E_{n,m} = \left(n + \frac{M}{2} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega - \frac{(m - \phi_{AB})}{2} \hbar\omega_c - \frac{\mu\omega_0^2\rho_0^2}{4} \quad (3.57)$$

onde $n = 0, 1, 2, \dots$ e $m = \dots, -1, 0, 1, \dots$

Tomando o limite para o anel unidimensional (ρ_0 constante e $\omega_0 \rightarrow \infty$) teremos

$$E_{n,m} \approx \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega + \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\bar{m}}{\rho_0} \right)^2, \quad (3.58)$$

com $|\bar{m}| = |m - m_0|$ e $m_0 \equiv \frac{eB\rho_0^2}{2\hbar}$. Esta última constante, a saber, m_0 representa o número de *quanta* de fluxo envolvido por um anel com um raio efetivo ρ_0 . A expressão de autovalores acima tem a estrutura de níveis de um confinamento parabólico.

Na expressão de autovalores em (3.57) observamos que o número quântico m é deslocado por um fator ligado aos *quanta* de fluxo magnético existentes na região onde está a partícula. Uma outra característica dos autovalores encontrados é que os níveis de Landau estão ligados a uma frequência de Landau efetiva ω que depende implicitamente dos parâmetros do potencial radial em 3.43 – se a partícula não estivesse confinada ao anel, a frequência de Landau seria ω_c , que é a de cíclotron [93, 94].

Um fenômeno que podemos investigar é o aparecimento das chamadas correntes persistentes [32, 2, 7], as quais surgem quando anéis metálicos mesoscópicos são

atravessados por um fluxo magnético. Sabe-se que tais correntes são funções periódicas do fluxo magnético, com período Φ_0 . Mas para isso teremos de calcular inicialmente a magnetização.

Da Termodinâmica sabemos que, a temperatura nula, a magnetização de um sistema com um número N de elétrons é dada por

$$\mathcal{M}(B) = -\frac{\partial U}{\partial B} \quad , \quad (3.59)$$

onde a grandeza U dada por

$$U = \sum_{n,m} E_{n,m} \quad , \quad (3.60)$$

representa a energia interna do sistema.

Em termos do momento magnético $\mathcal{M}_{n,m}$ magnetização é dada por

$$\mathcal{M}(B) = \sum_{n,m} \mathcal{M}_{n,m} \quad . \quad (3.61)$$

Logo chegamos a uma expressão que nos permite obter a magnetização a partir da expressão de autovalores que encontramos

$$\mathcal{M}(B) = -\frac{\partial E_{n,m}}{\partial B} \quad . \quad (3.62)$$

Para obter a expressão da magnetização devemos combinar as expressões (3.57) e (3.62). Para fazer isto devemos lembrar das definições de ω e ω_c , as quais apresentam dependência com o campo magnético B , o que nos permite chegar a

$$\frac{d\omega}{dB} = \frac{e \omega_c}{\mu \omega} \quad e \quad \frac{d\omega_c}{dB} = \frac{e}{\mu} \quad , \quad (3.63)$$

então,

$$\mathcal{M}_{n,m} = -\frac{\hbar e}{\mu} \left[\left(n + \frac{M}{2} + \frac{1}{2} \right) \frac{\omega_c}{\omega} - \frac{m - \phi_{AB}}{2} \right] \quad (3.64)$$

A magnetização, portanto, aumenta através de valores negativos à medida que a contribuição da frequência natural ω_0 se torna muito superior a ω_c ; por sua vez, quando ω_0 torna-se muito inferior a ω_c , a magnetização torna-se cada vez mais negativa, ou seja: o diamagnetismo, caracterizado por valores negativos de \mathcal{M} , torna-se mais acentuado.

Temos aqui uma situação semelhante àquela apresentada em um Physical Review Letters (PRL) de 1961 [95]. Nesse artigo os autores apresentam um teorema em que relacionam as correntes persistentes I presentes em um corpo supercondutor com uma cavidade central com a função de partição Z do sistema. Discutindo-se aí apenas a situação onde as dimensões do corpo são muito superiores ao chamado **comprimento de penetração**³, os autores do referido artigo chegaram à seguinte relação entre I e Z :

$$I = ck_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial \Phi_{AB}} \quad , \quad (3.65)$$

A partir da expressão da energia livre de Helmholtz F em função da função de partição, a saber,

$$F = -k_B T \ln Z \quad , \quad (3.66)$$

em unidades do Sistema Internacional (SI) encontramos a seguinte expressão, denominada relação de Byers-Yang [2]:

$$I_{n,m} = -c \frac{\partial E_{n,m}}{\partial \Phi} \quad . \quad (3.67)$$

Dessa forma, combinando (3.67) e (3.57), chegamos à seguinte forma para as

³O comprimento de penetração representa a distância dentro do supercondutor penetrada por um campo magnético externo do lado de fora desse supercondutor.

correntes persistentes:

$$I_{n,m} = -\frac{e\omega}{4\pi} \left(\frac{m - \phi_{AB}}{M} - \frac{\omega_c}{\omega} \right) . \quad (3.68)$$

Ressaltamos que a utilização da relação de Byers-Yang só foi possível devido ao fato de os autoestados serem nulos em $\rho = 0$, o que corresponde a multiconexidade no sistema descrito em [95].

Observamos que a intensidade das correntes persistentes, conforme a expressão (4.19), aumenta à medida que o campo magnético externo aplicado cresce, visto que a frequência ω_c é diretamente proporcional à intensidade do campo magnético B aplicado. Vale lembrar

Podemos colocar a magnetização em termos da expressão para as correntes persistentes de tal modo que

$$\mathcal{M} = \pi\rho_{n,m}^2 I_{n,m} - \frac{e\hbar}{\mu} \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\omega_c}{\omega} \quad (3.69)$$

com $\rho_{n,m} \equiv \sqrt{2M}\lambda$ representando o raio efetivo do (n, m) -ésimo estado.

O primeiro termo na expressão acima corresponde ao momento magnético clássico para um *loop* de corrente com raio igual ao raio efetivo $\rho_{n,m}$. O segundo termo representa um deslocamento diamagnético (pois tende a diminuir a magnetização). Pode-se ver ainda que no limite de campos fracos o momento magnético será proporcional à corrente.

3.2.2 Confinamento de Tan e Inkson aplicado a uma dispiração

Nesta seção discutiremos o confinamento de uma partícula, via potencial (3.43), em um meio com uma dispiração. Nosso objetivo é verificar a influência do defeito

no espectro de autovalores.

O hamiltoniano para esse sistema é

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\alpha^2 \rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - 2\beta \frac{1}{\alpha^2 \rho^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial z} \right] - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\left(1 + \frac{\beta^2}{\alpha^2 \rho^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{2\mu a_1}{\hbar^2} \frac{1}{\rho^2} - \frac{2\mu a_2}{\hbar^2} \rho^2 - \frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \right] , \quad (3.70)$$

o que nos leva à seguinte equação de Schrödinger independente do tempo (ESIT):

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\alpha^2 \rho^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} - 2\beta \frac{1}{\alpha^2 \rho^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial z} \right) \Psi + \left(1 + \frac{\beta^2}{\alpha^2 \rho^2} \right) \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} - \frac{2\mu a_1}{\hbar^2} \frac{\Psi}{\rho^2} - \frac{2\mu a_2}{\hbar^2} \rho^2 \Psi + 2\mu \frac{E - V_0}{\hbar^2} \Psi = 0 . \quad (3.71)$$

Supondo $\Psi(\rho, \varphi, z) = R(\rho) e^{im\varphi} e^{ikz}$,

$$\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) - \frac{M^2}{\rho^2} R + \left(2\mu \frac{E - V_0}{\hbar^2} - k^2 \right) R - \frac{2\mu a_2}{\hbar^2} \rho^2 R = 0 , \quad (3.72)$$

onde $M \equiv \left(\frac{m-k\beta}{\alpha} \right)^2 + \frac{2\mu a_1}{\hbar^2}$.

Introduzindo a variável $\xi = \sqrt{\frac{2\mu a_2}{\hbar^2}} \rho^2$, obtemos equação diferencial:

$$\xi \frac{d^2 R}{d\xi^2} + \frac{dR}{d\xi} - \frac{M^2}{4\xi} R + \beta' R - \frac{\xi}{4} R = 0 , \quad (3.73)$$

cuja solução é

$$R(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|M|}{2}} F \left(-\beta' + \frac{|M|+1}{2}, |M|+1, \xi \right) . \quad (3.74)$$

Para que a função de onda seja normalizada, a série que representa a função hipergeométrica confluyente $F \left(-\beta' + \frac{|M|+1}{2}, |M|+1, \xi \right)$ deve ser um polinômio de

grau n [96]. Conseqüentemente,

$$-\beta' + \frac{|M| + 1}{2} = -n \quad , \quad (3.75)$$

o que nos leva à seguinte expressão dos autovalores de energia:

$$E = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{|(\frac{m-k\beta}{\alpha})^2 + \frac{2\mu a_1}{\hbar^2}|}{2} + \frac{1}{2} \right) + \frac{k^2 \hbar^2}{2\mu} + V_0 \quad . \quad (3.76)$$

A expressão de autovalores de energia acima apresenta níveis de Landau, os quais não são esperados, visto que nenhum campo magnético externo está ligado ao sistema. A frequência ω_0 aqui faz o papel de frequência de ciclotron – a frequência que apareceria nos níveis energia (com níveis de Landau) para um sistema de partículas sujeitas a um campo magnético perpendicular ao plano em que elas se movimentam.

Outro fato verificado é a quebra da degenerescência introduzida por dois termos: um relacionado ao defeito (termo $k\beta$) e outro ao termo proporcional a $\frac{1}{\rho^2}$ no potencial (3.43) – ou seja, a parcela $\frac{2\mu a_1}{\hbar^2}$. Contudo, no caso deste último fator, a sua influência decai rapidamente com a distância em relação à origem do sistema, ao passo que a contribuição do defeito permanece.

Outro aspecto em relação à expressão (3.76) é a possibilidade de comparação com os autovalores associados a um sistema do tipo oscilador harmônico em um meio com uma deslocação [96], bastando fazer $a_1 \equiv 0$ na expressão (3.43). No entanto o potencial confinante apresentado neste capítulo é mais geral. Ele leva em conta a contribuição de repulsão que afeta os autovalores a pequenas distâncias, reforçando a quebra de degenerescência, conforme discutido no parágrafo anterior.

3.2.3 Inclusão de um Campo Externo

Sabemos que no espaço euclidiano, sem defeitos, elétrons que se movem numa superfície e sujeitos à ação de um campo magnético perpendicular (a essa superfície) apresentam níveis de Landau em seu espectro de autovalores. Na subseção anterior vimos que a introdução de uma dispiração, juntamente com o confinamento pelo potencial da forma (3.43), causa o surgimento de níveis de Landau associados a uma frequência de ciclotron efetiva, que está ligada a um dos parâmetros do potencial.

Esta seção, em virtude dos fatos supracitados, visa estudar a dinâmica quântica de uma partícula sujeita à ação de um campo magnético externo. Compararemos as situações, respectivamente, sem e com confinamento, investigando a contribuição isolada, seja dos parâmetros do potencial confinante, seja do campo magnético, para os níveis de Landau nesse meio.

Considerando a introdução de um campo magnético externo, sem confinamento, obtemos a ESIT

$$\left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\alpha^2 \rho^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{e B \rho}{c} \right)^2 - \frac{2\beta}{\alpha^2 \rho^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{e B \rho}{c} \right) \frac{\partial}{\partial z} \right] \Psi + \left[\left(1 + \frac{\beta^2}{\alpha^2 \rho^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} \right] \Psi = 0 \quad (3.77)$$

Supondo o *ansatz* (3.16) chegamos à seguinte equação diferencial radial

$$\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) - \frac{\left(\frac{m-k\beta}{\alpha} \right)^2}{\rho^2} R + \left[\frac{2\mu E}{\hbar^2} - k^2 + \frac{eB}{\hbar c} \left(\frac{m-k\beta}{\alpha} \right) \right] R - \frac{e^2 B^2}{4\hbar^2 c^2} \rho^2 R = 0 \quad (3.78)$$

Fazendo a mudança de variável $\xi = \frac{eB}{2\hbar c} \rho^2$, chegamos à equação diferencial radial

$$\xi \frac{d^2 R}{d\xi^2} + \frac{dR}{d\xi} - \frac{m'^2}{4\xi} R + \beta' R - \frac{\xi}{4} R = 0 \quad , \quad (3.79)$$

onde $\beta' \equiv \frac{1}{2} \left[\frac{m-k\beta}{\alpha} + \frac{\hbar c}{eB} \left(\frac{2\mu E}{\hbar^2} - k^2 \right) \right]$.

As soluções de (3.79) são da forma

$$R(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m-k\beta|}{2}} F \left(-\beta' + \frac{|m-k\beta|}{2} + 1, \left| \frac{m-k\beta}{\alpha} \right| + 1, \xi \right) , \quad (3.80)$$

e os autovalores de energia que encontramos, após impor a condição de normalização, são

$$E = \hbar\omega_c \left[n + \frac{|m-k\beta|}{2} - \frac{m-k\beta}{2} + \frac{1}{2} \right] + \frac{k^2 \hbar^2}{2\mu} . \quad (3.81)$$

Temos na expressão acima os níveis de Landau usuais⁴ na presença de uma dispiração, com frequência de ciclotron dada por $\omega_c \equiv \frac{eB}{\mu c}$ no sistema gaussiano (ou CGS) de unidades.

Agora generalizemos um pouco mais nosso sistema incluindo, além do campo magnético externo, o potencial confinante proposto na seção anterior. Dessa forma, o hamiltoniano para essa situação é

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\alpha^2 \rho^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{eB\rho}{c} \right)^2 - \frac{2\beta}{\alpha^2 \rho^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{eB\rho}{c} \right) \frac{\partial}{\partial z} \right] - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\left(1 + \frac{\beta^2}{\alpha^2 \rho^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{2\mu a_1}{\hbar^2} \frac{1}{\rho^2} - \frac{2\mu a_2}{\hbar^2} \rho^2 - \frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \right] , \quad (3.82)$$

e chegamos à ESIT:

$$\left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\alpha^2 \rho^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{eB\rho}{c} \right)^2 - \frac{2\beta}{\alpha^2 \rho^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{eB\rho}{c} \right) \frac{\partial}{\partial z} \right] \Psi + \left[\left(1 + \frac{\beta^2}{\alpha^2 \rho^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{2\mu a_1}{\hbar^2} \frac{1}{\rho^2} - \frac{2\mu a_2}{\hbar^2} \rho^2 - \frac{2\mu V_0}{\hbar^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} \right] \Psi . \quad (3.83)$$

⁴Entenda-se “usual” como significando que esses níveis advêm da presença de um campo magnético perpendicular.

Para o *ansatz* (3.16), encontramos a equação diferencial radial

$$\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) - \frac{M'^2}{\rho^2} R + \left[\frac{2\mu E}{\hbar^2} - k^2 + \frac{eB}{\hbar c} \left(\frac{m - k\beta}{\alpha} \right) - \frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \right] R - \lambda^2 \rho^2 R = 0 \quad , \quad (3.84)$$

onde $M'^2 \equiv \left(\frac{m - k\beta}{\alpha} \right)^2 - \frac{2\mu a_1}{\hbar^2}$ e $\lambda^2 \equiv \frac{e^2 B^2}{4\hbar^2 c^2} + \frac{2\mu a_2}{\hbar^2}$.

Fazendo a mudança de variável $\xi = \lambda \rho^2$, chegamos à equação diferencial

$$\xi \frac{d^2 R}{d\xi^2} + \frac{dR}{d\xi} - \frac{M'^2}{4\xi} R + \beta' R - \frac{\xi}{4} R = 0 \quad , \quad (3.85)$$

onde $\beta' \equiv \frac{1}{4\lambda} \left(\frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{eB}{\hbar c} \left(\frac{m - k\beta}{\alpha} \right) - k^2 - \frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \right)$.

A solução para (3.85) é

$$R(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|M'|}{2}} F \left(-\beta' + \frac{|M'| + 1}{2}, |M'| + 1, \xi \right) \quad , \quad (3.86)$$

enquanto os autovalores são dados por

$$E = \hbar\omega \left[n + \frac{|M'|}{2} + \frac{1}{2} \right] - \frac{(m - k\beta)}{2} \hbar\omega_c + \frac{k^2 \hbar^2}{2\mu} + V_0 \quad (3.87)$$

A expressão de autovalores que acabamos de encontrar é semelhante à que chegamos na seção imediatamente anterior, sendo que na expressão logo acima surge uma parcela dependente da frequência de cíclotron. Analisando a situação onde o confinamento é feito via um potencial do tipo oscilador harmônico veremos que a diferença se dá apenas no parâmetro M , por uma parcela $\frac{2\mu a_1}{\hbar^2}$, conforme também visto na seção anterior.

Na referência [75] foi estudado o confinamento proposto em [1] para um espaço com uma deslinação, o que seria um caso especial do espaço com dispiração (para $\beta = 0$) abordado nesta seção.

Capítulo 4

SISTEMAS MESOSCÓPICOS EM UM ESPAÇO COM CURVATURA

4.1 Esfera

Nesta seção investigaremos o problema de uma fita sobre uma esfera, buscando as autofunções e autovalores associados para esse sistema. O confinamento proposto permite a descrição das propriedades de estruturas como pontos quânticos, fios e anéis quânticos, e *antidots*. Os dados experimentais podem ser comparados com os parâmetros teóricos, de acordo com os trabalhos [1, 2, 3].

À medida que os resultados forem obtidos, far-se-á um paralelo com a referência [7], na qual é apresentado o estudo da dinâmica de uma partícula em um plano de Lobachevsky.

A dinâmica quântica para nosso sistema acontece em um espaço com curvatura. Aqui a curvatura é uma propriedade intrínseca ao espaço, diferente do Capítulo 3, onde a contribuição de curvatura era devida a um defeito. As expressões

para os operadores associados aos observáveis devem refletir, de algum modo, essa característica. Para começar, precisamos saber como as distâncias são medidas no espaço com o qual trabalhamos. Tal informação é dada pela métrica, representada em diferentes sistemas de coordenadas. A escolha deste ou daquele grupo de coordenadas deve considerar as simetrias envolvidas. Escolher bem geralmente significa reduzir o esforço matemático para se chegar aos resultados. Assim, nosso espaço esférico será descrito pela métrica em coordenadas esféricas na forma

$$ds^2 = d\rho^2 + \rho^2 d\theta^2 + \rho^2 \sin^2 \theta d\varphi^2, \quad (4.1)$$

Tendo em conta a simetria (esférica) para a escolha do sistema de coordenadas, podemos simplificar mais ainda nosso tratamento matemático. Espera-se que as equações da dinâmica de um sistema em um espaço sem curvatura sejam mais simples do que aquelas para um espaço curvo. A busca de uma ponte entre os casos curvo e não-curvo seria interessante nesse aspecto. A métrica que descreverá o meio (fita sobre uma esfera) é obtida a partir da projeção estereográfica [97] dos pontos de uma esfera sobre um plano tangente a um dos pólos da esfera. Através desse procedimento obtemos a métrica de um espaço que corresponde a um plano mais um ponto no infinito (ponto este que corresponde à projeção do outro pólo da esfera), conforme representado nas figuras (4.1) e (4.2).

Aqui os pontos projetados estarão a uma distância ρ da origem (isto é, a projeção do centro da esfera) no plano de projeção. Utilizamos θ para a medida do ângulo zenital em lugar do ψ utilizado na figura (4.1). Após alguma manipulação algébrica obtemos as relações

$$\tan \frac{\theta}{2} = \frac{\rho}{2a}, \quad (4.2)$$

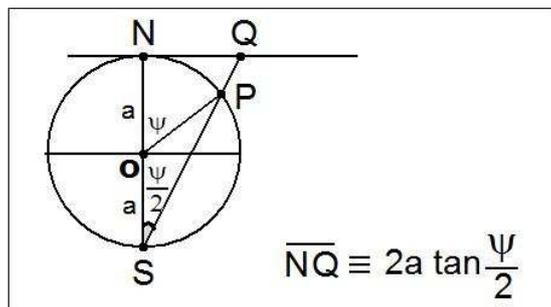


Figura 4.1: Projeção estereográfica da esfera: Visão longitudinal.

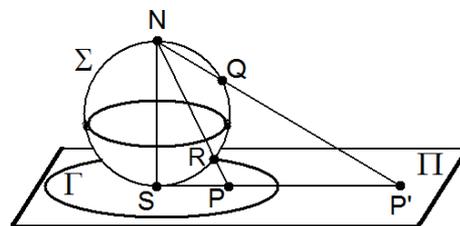


Figura 4.2: Projeção estereográfica da esfera: Visão espacial.

e

$$d\theta^2 = \frac{1}{a^2 \left[1 + \left(\frac{\rho}{2a} \right)^2 \right]^2} d\rho^2 . \quad (4.3)$$

Substituindo (4.2) e (4.3) na métrica (4.22), e a partir de algumas relações trigonométricas, chegamos a seguinte expressão

$$ds^2 = \frac{d\rho^2 + \rho^2 d\varphi^2}{\left[1 + \left(\frac{\rho}{2a} \right)^2 \right]^2} . \quad (4.4)$$

Em (4.4) temos uma métrica conforme, ou seja, é uma métrica que difere da euclidiana por um fator multiplicativo, chamado *fator conforme*.

Estudamos o caso de uma partícula sem *spin* ou momento magnético intrínseco, sujeita a um campo magnético constante no tempo. Tal campo é radial, seja em três dimensões (antes da projeção estereográfica), seja em duas dimensões (após a projeção estereográfica). Todavia as coordenadas radiais são medidas de forma diferente nestes dois casos. No primeiro, se trata de uma coordenada esférica, no segundo, de uma coordenada cilíndrica. Assim, na segunda situação, o sistema é simétrico em relação a um eixo z normal ao plano de simetria.

Agora estamos aptos a encontrar a expressão para o potencial vetor \vec{A} . Sabe-se do Eletromagnetismo que a escolha do potencial vetor (ou *gauge*, ou calibre) é arbitrária: “o potencial vetor é definido com uma precisão até o gradiente de uma função arbitrária” ([60], p.75). Visando simplificar a abordagem matemática, escolhamos um calibre que não se altera quando efetuadas rotações em torno de z . Ou seja, o calibre simétrico [93], que é dado por

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r} \quad , \quad (4.5)$$

que, em coordenadas cilíndricas, apresenta a componente $A_\varphi = \frac{1}{2} B \rho$ como única não-nula. É fácil ver que este calibre satisfaz a condição de Coulomb¹.

Após a projeção estereográfica, o campo magnético equivalente fica orientado ao longo da direção Z , ortogonal ao plano. Incluímos ainda um fluxo de Aharonov-Bohm (Φ_{AB}) [98, 36, 99, 100, 101], atravessando o centro do sistema.

Conseqüentemente, o potencial vetor associado terá componente radial nula e componente azimutal dada por $\vec{A}_\varphi = \vec{A}_1 + \vec{A}_2$, com

$$\vec{A}_1 = \left(0, \frac{B\rho}{2 \left[1 + \left(\frac{\rho}{2a} \right)^2 \right]^2} \right) \quad (4.6)$$

e

$$\vec{A}_2 = \left(0, \frac{\Phi_{AB}}{2\pi\rho} \right) \quad . \quad (4.7)$$

As parcelas \vec{A}_1 e \vec{A}_2 representam, respectivamente, a componente uniforme do potencial vetor e o potencial vetor do fluxo de Aharonov-Bohm.

Para a métrica e a configuração de campo magnético descrita para o nosso

¹A condição de *gauge* de Coulomb é satisfeita quando $\nabla \cdot \vec{A} = 0$

sistema, se chega ao seguinte hamiltoniano

$$H_0 = \frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \left\{ -a^2 \left[1 + \left(\frac{\rho}{2a} \right)^2 \right]^2 \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{\Phi_{AB}}{\Phi_0} \right)^2 \right] \right\} - \quad (4.8)$$

$$-i\hbar \frac{\omega_c}{2} \left[1 + \left(\frac{\rho}{2a} \right)^2 \right] \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{\Phi_{AB}}{\Phi_0} \right) + \mu \frac{\omega_c^2}{8} \rho^2 + \frac{\hbar^2}{8\mu a^2} .$$

Agora acrescentemos a modelagem do sistema contemplando o comportamento de sistemas mesoscópicos. Tal objetivo é alcançado a partir da utilização do potencial de Tan e Inkson, com a alteração apropriada à descrição de espaços com curvatura [7]. A forma do potencial confinante será

$$V(\rho) = \lambda_1 \rho^2 + \frac{\lambda_2}{\rho^2} \left[1 + \left(\frac{\rho}{2a} \right)^2 \right]^2 - V_0 , \quad (4.9)$$

com

$$V_0 = \frac{\lambda_2}{2a^2} + 2\sqrt{\lambda_2 \left(\lambda_1 + \frac{\lambda_2}{(2a)^4} \right)} \quad (4.10)$$

e

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{8}{\mu} \left[\lambda_1 + \frac{\lambda_2}{(2a)^4} \right]} , \quad (4.11)$$

tal que o mínimo ρ_0 do potencial $V(\rho)$ seja

$$\rho_0 = \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1 + \frac{\lambda_2}{(2a)^4}} \right)^{1/4} . \quad (4.12)$$

Escrevendo o hamiltoniano como $H = H_0 + V(\rho)$ e, em seguida, aplicando sucessivamente a mudança de variável $x = \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{\rho}{2a} \right)^2 \right]}$ e o *ansatz* $\Psi(\rho, \varphi) = e^{im\varphi} R(\rho)$,

chegamos à equação diferencial

$$\begin{aligned}
& -\frac{d}{dx}x(1-x)\frac{dR}{dx} + \frac{1}{4} \left((m - \phi_{AB})^2 + \frac{2\mu\lambda_2}{\hbar^2} \right) \frac{1}{x(1-x)}R + \\
& + \frac{\mu^2 a^4}{\hbar^2} \left(\omega_c^2 + \frac{\hbar(m - \phi_{AB})}{\mu a^2} + \frac{8}{\mu}\lambda_1 \right) \frac{1}{x}R + \frac{1}{4}R - \frac{\mu^2 a^4}{\hbar^2} \left(\omega_c^2 + \frac{8}{\mu}\lambda_1 \right) - \\
& - \frac{2\mu a^2}{\hbar^2} \frac{\lambda_2}{2a^2}R - \frac{2\mu a^2}{\hbar^2} 2\sqrt{\lambda_2 \left(\lambda_1 + \frac{\lambda_2}{(2a)^4} \right)}R - \frac{2\mu a^2}{\hbar^2} ER = 0 \quad .
\end{aligned} \tag{4.13}$$

A equação acima pode ser reescrita na forma

$$\begin{aligned}
& -x(1-x)\frac{d^2R}{dx^2} - (1-2x)\frac{dR}{dx} + \frac{M^2}{4} \frac{1}{1-x}R + \\
& + \frac{\mu^2 a^4}{\hbar^2} \left[\left(\omega_c + \frac{\hbar(m - \phi_{AB})}{2\mu a^2} \right)^2 + \omega_0^2 - \frac{\hbar^2}{\mu^2 a^4} \frac{M^2}{4} \right] \frac{1}{x}R - \\
& - \frac{\mu^2 a^4}{\hbar^2} \left[\omega_c^2 + \omega_0^2 \left(1 - \left(\frac{\rho_0}{2a} \right)^2 \right)^2 + \frac{1}{4} - \lambda \right] R = 0 \quad ,
\end{aligned} \tag{4.14}$$

ou ainda,

$$\begin{aligned}
& -x(1-x)\frac{d^2R}{dx^2} - (1-2x)\frac{dR}{dx} + \frac{M^2}{4} \frac{1}{1-x}R + \\
& + \left(A - \frac{M^2}{4} \right) \frac{1}{x}R - \\
& + \left(-b + \frac{1}{4} + \lambda \right) R = 0 \quad ,
\end{aligned} \tag{4.15}$$

onde $M \equiv \sqrt{(m - \phi_{AB})^2 + (\mu\omega_0\rho_0^2/2\hbar)^2}$, $\phi_{AB} \equiv \frac{\Phi_{AB}}{\Phi_0}$ e $\lambda \equiv -\frac{2\mu a^2}{\hbar^2}E$. Além disso, $A \equiv \frac{\mu^2 a^4}{\hbar^2} \left[\left(\omega_c + \frac{\hbar(m - \phi_{AB})}{2\mu a^2} \right)^2 + \omega_0^2 \right]$, $b \equiv \frac{\mu^2 a^4}{\hbar^2} \left[\omega_c^2 + \omega_0^2 \left(1 - \left(\frac{\rho_0}{2a} \right)^2 \right)^2 \right]$.

A solução de (4.14), utilizando o aplicativo *Maple*, é dada por

$$R(x) = C_1(x(x-1))^{M/2} F \left(M + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{-4A + M^2 + 4b - 4\lambda}, M + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{-4A + M^2 + 4b - 4\lambda}, M + 1, x \right) . \tag{4.16}$$

A partir da condição de normalização das autofunções, a função hipergeométrica

acima deve ter

$$M + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{-4A + M^2 + 4b - 4\lambda} = -n \quad . \quad (4.17)$$

Dessa forma chegamos à seguinte expressão para os autovalores de energia

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \left[\left(n + \frac{1}{2} \right)^2 + 2M \left(n + \frac{1}{2} \right) + (m - \phi_{AB})^2 \right] + \mu a^2 \omega_0^2 \left(\frac{\rho_0}{2a} \right)^4 + \frac{1}{4} \mu \omega_0^2 \rho_0^2 + \frac{\hbar \omega_c}{2} (m - \phi_{AB}) \quad . \quad (4.18)$$

Como fizemos no Capítulo 2, investigaremos o surgimento de correntes persistentes em nosso sistema com curvatura. A partir da relação de Byers-Yang [2], a saber

$$I_{n,m} = -\frac{\partial E_{n,m}}{\partial \Phi_{AB}} = -\frac{1}{\Phi_0} \frac{\partial E_{n,m}}{\partial \phi_{AB}} \quad , \quad (4.19)$$

o que nos leva à seguinte expressão para as correntes persistentes:

$$I_{n,m} = \frac{1}{\Phi_0} \left[2 \frac{m - \phi_{AB}}{\sqrt{M}} \left(n + \frac{1}{2} \right) + 2(m - \phi_{AB}) \right] \frac{\hbar^2}{2\mu a^2} + \frac{1}{\Phi_0} \frac{\hbar \omega_c}{2} \quad . \quad (4.20)$$

Investiguemos também a magnetização que pode ser obtida a partir das relações (3.59) e (3.62), resultando em:

$$M_{n,m} = -\frac{e}{\mu c} \frac{\hbar(m - \Phi_{AB})}{2} \quad . \quad (4.21)$$

4.2 Esfera com uma desclinação

Nesta seção investigaremos a dinâmica de uma partícula em uma esfera com desclinação. Para modelar um sistema mesoscópico, adaptaremos o potencial em Bulaev *et al* [7] para o caso de uma esfera, de modo análogo ao que fizemos na seção anterior.

Façamos uma breve descrição geométrica do espaço que investigamos. A geração da desclinação na esfera pode ser visualizada a partir do chamado processo de Volterra [61]. Através desse procedimento, fazendo uso de translações ou rotações de partes do espaço com que se lida, pode ser obtido um número significativo de defeitos topológicos. Um espaço com esse tipo de defeito é dito multiconexo e não pode ser trazido à condição de simplesmente conexo via transformações contínuas. Dentre os defeitos topológicos, que podemos criar por meio do processo de Volterra, estão as desclinações e as deslocações², por exemplo.

Retornando ao nosso sistema, seja uma esfera composta de gomos (tal qual uma tangerina). Retirando-se um desses gomos (de abertura α) teríamos a esfera com desclinação. O sólido gerado tem geometria oval, semelhante a uma bola de *football*³. A diferença entre a bola de *football* e a esfera com desclinação é que nesta última há duas singularidades nos pólos, constituindo extremidades em forma de cone.

Um espaço esférico, em coordenadas esféricas, antes de aplicar o processo de Volterra, é descrito pela métrica

$$ds^2 = d\rho^2 + \rho^2 d\theta^2 + \rho^2 \sin^2 \theta d\varphi^2, \quad (4.22)$$

enquanto o espaço dado por uma esfera com desclinação tem associada a métrica

$$ds^2 = d\rho^2 + \rho^2 d\theta^2 + \alpha^2 \rho^2 \sin^2 \theta d\varphi^2. \quad (4.23)$$

A diferença entre (4.22) e (4.23) é basicamente a maneira de medir o ângulo azimutal φ . No primeiro caso, da esfera sem defeito, φ varia de 0 a 2π , enquanto que no segundo caso, se quisermos considerar a descrição do sistema com desclinação via

²em Ciência dos Materiais as deslocações são conhecidas como *discordâncias*.

³*Football* aqui se refere ao chamado futebol americano, esporte muito comum nos Estados Unidos da América, em que a bola utilizada tem formato alongado e, por isso, com uma aerodinâmica adequada às características do esporte citado.

expressão (4.22), φ vai de 0 a $2\alpha\pi$.

A projeção das esferas, respectivamente, usual e com desclinação, se torna equivalente quando, para o segundo sistema, é feita a mudança de variável $\alpha\varphi \rightarrow \Phi$. Podemos tratar, consoante isto, o caso da projeção de uma esfera (sem defeito) de raio a e adaptar o resultado para o caso com defeito.

A métrica do espaço projetado, que descreve nosso sistema com desclinação, é dada por

$$ds^2 = \frac{d\rho^2 + \alpha^2 \rho^2 d\varphi^2}{\left[1 + \left(\frac{\rho}{2a}\right)^2\right]^2} . \quad (4.24)$$

Em (4.24), semelhante ao caso da esfera sem defeito, temos uma métrica conforme.

Escolhendo o calibre simétrico [93], dado por

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r} , \quad (4.25)$$

teremos as componentes uniforme e do fluxo de Aharonov-Bohm, respectivamente \vec{A}_1 e \vec{A}_2 , terão formas

$$\vec{A}_1 = \left(0, \frac{B\rho}{2 \left[1 + \left(\frac{\rho}{2a}\right)^2\right]^2} \right) \quad (4.26)$$

e

$$\vec{A}_2 = \left(0, \frac{\Phi_{AB}}{2\pi\alpha\rho} \right) . \quad (4.27)$$

Para a métrica e a configuração de campo magnético descrita para o nosso

sistema, se chega ao seguinte hamiltoniano

$$H_0 = \frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \left\{ -a^2 \left[1 + \left(\frac{\rho}{2a} \right)^2 \right]^2 \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\alpha^2 \rho^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{\Phi_{AB}}{\Phi_0} \right)^2 \right] \right\} - \\ - i \hbar \frac{\omega_c}{2\alpha} \left[1 + \left(\frac{\rho}{2a} \right)^2 \right] \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{\Phi_{AB}}{\Phi_0} \right) + \mu \frac{\omega_c^2}{8} \rho^2 + \frac{\hbar^2}{8\mu a^2} . \quad (4.28)$$

Agora acrescentemos o potencial confinante

$$V(\rho) = \lambda_1 \rho^2 + \frac{\lambda_2}{\rho^2} \left[1 + \left(\frac{\rho}{2a} \right)^2 \right]^2 - V_0 , \quad (4.29)$$

com

$$V_0 = \frac{\lambda_2}{2a^2} + 2 \sqrt{\lambda_2 \left(\lambda_1 + \frac{\lambda_2}{(2a)^4} \right)} \quad (4.30)$$

e

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{8}{\mu} \left[\lambda_1 + \frac{\lambda_2}{(2a)^4} \right]} , \quad (4.31)$$

tal que o mínimo ρ_0 do potencial $V(\rho)$ seja

$$\rho_0 = \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1 + \frac{\lambda_2}{(2a)^4}} \right)^{1/4} . \quad (4.32)$$

Escrevendo o hamiltoniano na forma $H = H_0 + V(\rho)$, aplicando a mudança de variável $x = \frac{1}{[1+(\frac{\rho}{2a})^2]}$ e escolhendo o *ansatz* $\Psi(\rho, \varphi) = e^{im\varphi} R(\rho)$, chegamos à equação

$$-x(1-x) \frac{d^2 R}{dx^2} - (1-2x) \frac{dR}{dx} + \frac{M^2}{4} \frac{1}{1-x} R + \\ + \left(A - \frac{M^2}{4} \right) \frac{1}{x} R - \\ + \left(-b + \frac{1}{4} + \lambda \right) R = 0 , \quad (4.33)$$

onde $M \equiv \sqrt{\left(\frac{m-\phi_{AB}}{\alpha}\right)^2 + (\mu\omega_0\rho_0^2/2\hbar)^2}$, $\phi_{AB} \equiv \frac{\Phi_{AB}}{\Phi_0}$ e $\lambda \equiv -\frac{2\mu a^2}{\hbar^2}E$. Além disso, $A \equiv \frac{\mu^2 a^4}{\hbar^2} \left[\left(\omega_c + \frac{\hbar(m-\phi_{AB})/\alpha}{2\mu a^2} \right)^2 + \omega_0^2 \right]$, $b \equiv \frac{\mu^2 a^4}{\hbar^2} \left[\omega_c^2 + \omega_0^2 \left(1 - \left(\frac{\rho_0}{2a} \right)^2 \right)^2 \right]$.

A solução de (4.14), utilizando o aplicativo *Maple*, é dada por

$$R(x) = C_1(x(x-1))^{M/2} F \left(M + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{-4A + M^2 + 4b - 4\lambda}, M + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{-4A + M^2 + 4b - 4\lambda}, M + 1, x \right). \quad (4.34)$$

A partir da condição de normalização das autofunções, a função hipergeométrica acima deve ter

$$M + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{-4A + M^2 + 4b - 4\lambda} = -n. \quad (4.35)$$

Dessa forma chegamos à seguinte expressão para os autovalores de energia

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \left[\left(n + \frac{1}{2} \right)^2 + 2M \left(n + \frac{1}{2} \right) + \left(\frac{m - \phi_{AB}}{\alpha} \right)^2 \right] + \mu a^2 \omega_0^2 \left(\frac{\rho_0}{2a} \right)^4 + \frac{1}{4} \mu \omega_0^2 \rho_0^2 + \frac{\hbar \omega_c}{2} \left(\frac{m - \phi_{AB}}{\alpha} \right). \quad (4.36)$$

Como fizemos no Capítulo 2, investigaremos o surgimento de correntes persistentes em nosso sistema com curvatura. A partir da relação de Byers-Yang [2] chegamos à seguinte expressão para as correntes persistentes:

$$I_{n,m} = \frac{1}{\Phi_0} \left[2 \frac{m - \phi_{AB}}{\alpha \sqrt{M}} \left(n + \frac{1}{2} \right) + 2 \left(\frac{m - \phi_{AB}}{\alpha} \right) \right] \frac{\hbar^2}{2\mu a^2} + \frac{1}{\Phi_0} \frac{\hbar \omega_c}{2}. \quad (4.37)$$

Investiguemos também a magnetização que pode ser obtida a partir das relações (3.59) e (3.62), resultando em:

$$M_{n,m} = -\frac{e}{\mu c} \frac{\hbar(m - \Phi_{AB})}{2\alpha}. \quad (4.38)$$

4.3 Discussão dos Resultados

Observamos que os fatores geométricos influenciam as propriedades físicas, a saber, níveis de energia, magnetização e correntes persistentes, dos sistemas estudados nas duas últimas seções. No caso da energia vemos que existe uma degenerescência dupla nos autovalores, conforme se vê nos termos quadráticos da dependência com os números quânticos n e m , respectivamente. No caso da esfera sem desclinação, quando se trata da degenerescência dupla em m , vemos que há um caso-limite em que o termo quadrático $m - \phi_{AB}$ tem sua contribuição reduzida: se $m = \phi_{AB}$. Para a esfera com desclinação, por sua vez, tal degenerescência dupla também pode ser reduzida quando $\alpha \gg m - \phi_{AB}$.

O espectro de energia para o caso específico em que $m = \phi_{AB}$, além de um termo do tipo oscilador, isto é, $\frac{1}{4}\mu\omega_0^2\rho_0^2$, tem uma contribuição dependente do raio de curvatura a da superfície do sistema estudado. Esta última contribuição, por sua vez, tende a zero quando no limite do plano, ou seja, para $a \rightarrow \infty$.

As correntes persistentes apresentam um caráter oscilatório, conforme se observa através da sua dependência com $m - \phi_{AB}$. Vemos também que quanto mais intenso for o campo magnético externo aplicado⁴, maiores serão os valores atingidos pelas correntes persistentes.

O parâmetro α , característico do defeito presente na esfera com desclinação, causa uma redução por um fator $1/\alpha$ nas oscilações das correntes persistentes e da magnetização obtidas.

⁴Vale lembrar que o parâmetro ω_c depende do campo magnético externo B

Capítulo 5

DINÂMICA PARA UMA DENSIDADE DE DEFEITOS

Neste capítulo chegaremos às autofunções e autovalores de energia associados a uma partícula em um meio com uma densidade de deslocamentos do tipo hélice, tanto no caso livre quanto no caso onde está presente um campo magnético externo. Estudaremos a dinâmica quântica, tanto não-relativística quanto relativística, para um espaço com essa densidade de defeitos.

A métrica investigada nesta seção é obtida a partir de uma analogia com a métrica de Som-Raychadhuri apresentada na referência [77]. Para isso, em lugar da métrica na forma

$$- (cdt + \Omega\rho^2 d\varphi)^2 + d\rho^2 + \rho^2 d\varphi^2 + dz^2 \quad , \quad (5.1)$$

que apresenta um acoplamento entre a coordenada dependente do tempo e a coordenada φ , reescrevemos uma métrica onde o acoplamento ocorre entre φ e z . A parte do tensor métrico com dependência temporal, por nós utilizada, será do tipo $-dt^2$, ou seja, consideramos $g_{0\mu} = g_{\mu 0} = 0$ e $g_{00} = -1$. Contudo, no estudo da

dinâmica não-relativística, faremos $t = \text{constante}$ e, para esse caso, $dt^2 = 0$.

Em nossa abordagem, a métrica representaria uma densidade de deslocamentos e o parâmetro Ω está associado a uma densidade superficial do vetor de Burgers.

5.1 Espaço com torção

Já estudamos o caso de um meio com dispiração. Neste capítulo estudaremos o caso de uma densidade de deslocamentos, obtendo autofunções e autovalores para partículas presentes nesse meio com defeito. Nosso procedimento será feito explorando as características de torção que o espaço tem, via ferramentas da Geometria Diferencial.

De início, consideremos o caso de uma deslocação tipo hélice ao longo da direção z . A métrica para o meio com esse tipo de defeito é dada por

$$ds^2 = d\rho^2 + (dz + \beta d\varphi)^2 + \rho^2 d\varphi^2 \quad , \quad (5.2)$$

onde o parâmetro β está ligado ao vetor de Burgers b^z pela expressão

$$b^z = 2\pi\beta \quad . \quad (5.3)$$

Este defeito carrega torção, mas não curvatura, e corresponde a uma singularidade na origem. Sua única componente não-nula para o tensor de torção é a 2-forma (de torção)

$$T^1 = 2\pi\beta \delta^2(\rho) d\rho \wedge d\phi \quad , \quad (5.4)$$

onde $\delta^2(\rho)$ é a função delta bidimensional no espaço plano. Em outras palavras, o espaço é euclidiano em toda parte, exceto na posição onde se localiza a singularidade que gera torção.

A geometria tridimensional do meio, neste caso, é caracterizada por torção não-

trivial, que é identificada com a densidade superficial do vetor de Burgers na teoria da elasticidade clássica. Desse modo, o vetor de Burgers pode ser visualizado como um fluxo de torção, dado por

$$\int_{\Sigma} T^1 = \oint_S e^1 = 2\pi\beta = b, \quad (5.5)$$

onde adotamos a seguinte representação de tríade (base de 1-formas) para a métrica

$$\begin{aligned} e^1 &= dz + \beta d\varphi \\ e^2 &= d\rho \\ e^3 &= \rho d\varphi \quad , \end{aligned} \quad (5.6)$$

e a 2-forma de torção está relacionada à tríade por

$$\mathbf{T} = d\mathbf{e} + \mathbf{\Gamma}^{(L)} \wedge \mathbf{e}, \quad (5.7)$$

onde $\mathbf{\Gamma}^{(L)}$ é a conexão de Lorentz, que é zero para esta geometria, haja vista que não há curvatura envolvida. Esta equação leva ao resultado (5.4) quando substituimos (5.6) nela.

Para comparação futura com o tensor de Faraday $F_{\mu\nu}$ do campo eletromagnético, coloquemos a torção em notação tensorial [102]

$$T_{\mu\nu}^a = \partial_{\mu}e_{\nu}^a - \partial_{\nu}e_{\mu}^a - (e_{\mu}^b\omega_{\nu b}^a - e_{\nu}^b\omega_{\mu b}^a) \quad , \quad (5.8)$$

onde $\omega_{\nu b}^a$ é a conexão de *spin* e T^a a componente da 2-forma de torção, definida como $T^a = T_{\mu\nu}^a dx^{\mu} \wedge dx^{\nu}$ e a componente tríade $e^a = e_{\mu}^a dx^{\mu}$.

A similaridade entre deslocamentos tipo hélice e um fluxo magnético foi investigada em artigos recentes [103, 104]. Esta relação tem uma origem física, a qual discutiremos a seguir.

O vetor de Burgers está associado ao fluxo de torção do defeito. Este fato é demonstrado na expressão (5.4), na qual a torção é nula em toda parte, exceto onde o defeito se encontra. Analogamente, em um solenóide infinito, o campo magnético é nulo em toda parte, exceto no ponto onde o solenóide está.

Esta análise também pode ser obtida via comparação da expressão (5.8) com o tensor de Faraday $F_{\mu\nu}$, para o caso eletromagnético. Lembrando que $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$, onde A_μ é o potencial vetor, é singular na linha de fluxo e nulo em outras regiões do espaço. No caso elástico, e_μ^a na expressão (5.8) desempenha o papel de um potencial para a torção, visto que a torção só existe no local em que o defeito se encontra, onde a torção é singular. Deste modo, vemos que a torção tem um comportamento similar ao do tensor eletromagnético $F_{\mu\nu}$.

Katanaev [105] demonstrou que soluções da Teoria Geométrica de Defeitos conduzem a soluções dos mesmos problemas na Teoria da Elasticidade não-linear. Além disso, a métrica que descreve uma solução tipo defeito é uma solução exata, e a elasticidade linear é obtida quando se toma os limites apropriados.

Nesta seção, utilizamos a Teoria Geométrica de Defeitos para descrever uma distribuição contínua de deslocamentos tipo hélice paralelas. Escolhemos a abordagem geométrica desenvolvida por Katanaev e Volovich para defeitos em sólidos. Consideramos uma distribuição cilindricamente simétrica de deslocamentos tipo hélice, admitindo que está uniformemente distribuída no meio elástico. Uma vez que o espaço que descreve o espaço com uma só deslocação tipo hélice é globalmente plano, faz sentido construir uma nova solução para as equações de “Einstein”, correspondente a uma coleção de deslocamentos tipo hélice paralelas. Neste sentido, obtemos a seguinte métrica

$$ds^2 = (dz + \Omega\rho^2 d\varphi)^2 + d\rho^2 + \rho^2 d\varphi^2 \quad , \quad (5.9)$$

com uma densidade do vetor de Burgers dada por $\Omega = b_i \frac{\sigma}{2}$, onde σ é a densidade superficial de deslocamentos.

Nesta métrica, para uma distribuição contínua de deslocamentos tipo hélice, a torção é uniformemente distribuída em todo o espaço. Agora investiguemos as propriedades geométricas deste espaço.

Escolhemos a seguinte base de 1-formas para a métrica (5.9)

$$e^1 = dz + \Omega \rho^2 d\phi \quad (5.10)$$

$$e^2 = d\rho \quad (5.11)$$

$$e^3 = \rho d\phi \quad . \quad (5.12)$$

A partir daí, obtemos o fluxo de torção associado a este espaço

$$\int_{\Sigma} T^1 = \oint_S e^1 = 2\pi\Omega\rho^2 \quad , \quad (5.13)$$

onde fizemos uso do fato $T_{\rho\phi}^1 = -T_{\phi\rho}^1 = 2\Omega$.

5.2 Dinâmica Quântica não-relativística para a densidade de defeitos

5.2.1 Partícula Livre

Inicialmente investigamos a dinâmica de uma partícula não-confinada em um meio com uma densidade de deslocamentos definido pela métrica (5.9). A partir dela, obtemos os seguintes tensores métricos covariante e contravariante, respectivamente,

são dados por:

$$g_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \rho^2 + \Omega^2 \rho^4 & \Omega \rho^2 \\ 0 & \Omega \rho^2 & 1 \end{bmatrix} \quad (5.14)$$

e

$$g^{ij} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\rho^2} & -\Omega \\ 0 & -\Omega & 1 + \Omega^2 \rho^2 \end{bmatrix} \quad (5.15)$$

Em termos da métrica, o operador hamiltoniano tem a forma geral:

$$H = \frac{1}{2\mu\sqrt{g}} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x^i} - \frac{e}{c} A_i \right) \sqrt{g} g^{ij} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x^j} - \frac{e}{c} A_j \right), \quad (5.16)$$

onde μ representa a massa, \hbar é a constante de Planck dividida por 2π , g representa o determinante do tensor métrico covariante (no caso, $g = \rho^2$). Obtemos, portanto, o seguinte hamiltoniano

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - \Omega \rho^2 \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right], \quad (5.17)$$

ou ainda,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - 2\Omega \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial z} + (1 + \Omega^2 \rho^2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right]. \quad (5.18)$$

Por sua vez, a eq. de Schrödinger independente do tempo (ESIT) para o nosso

sistema é:

$$\left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - 2\Omega \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial z} + (1 + \Omega \rho^2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} \right] \Psi = 0. \quad (5.19)$$

Supondo $\Psi(\rho, \varphi, z) = R(\rho)e^{im\varphi}e^{ikz}$, chegamos à seguinte equação

$$\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) - \frac{m^2}{\rho^2} R - k^2 \Omega^2 \rho^2 R + \left(2k\Omega m - k^2 + \frac{2\mu E}{\hbar^2} \right) R = 0 \quad . \quad (5.20)$$

Fazendo a mudança de variável $\xi \equiv k\Omega\rho^2$, chegamos à equação diferencial

$$\xi \frac{d^2 R}{d\xi^2} + \frac{dR}{d\xi} - \frac{m^2}{4\xi} R - \frac{\xi}{4} R + \beta' R = 0 \quad . \quad (5.21)$$

onde $\beta' \equiv \frac{1}{4k\Omega} \left(2k\Omega m - k^2 + \frac{2\mu E}{\hbar^2} \right)$.

Para $\xi \gg 1$, temos $R(\xi) \approx e^{-\frac{\xi}{4}}$; para $\xi \ll 1$, temos $R(\xi) \approx \xi^{\frac{|m|}{2}}$. Dessa maneira podemos supor $R(\xi) = e^{-\frac{\xi}{4}} \xi^{\frac{|m|}{2}} u(\xi)$, onde ter-se-á $u(\xi)$ satisfazendo a equação hipergeométrica confluyente:

$$\xi \frac{d^2 u}{d\xi^2} + (1 + |m| - \xi) \frac{du}{d\xi} + \left(\beta' - \frac{|m| + 1}{2} \right) u = 0 \quad , \quad (5.22)$$

cuja solução é

$$u(\xi) = F \left(-\beta' + \frac{|m| + 1}{2}, |m| + 1, \xi \right) \quad (5.23)$$

Devemos ter, por questão de normalização da função de onda, uma série representativa da função hipergeométrica confluyente $F \left(-\beta' + \frac{|M| + 1}{2}, |M| + 1, \xi \right)$ sendo um polinômio de grau n . Por conseguinte,

$$-\beta' + \frac{|m| + 1}{2} = -n$$

e assim obtemos

$$E = \hbar\omega_{el} \left(n + \frac{|m|}{2} - \frac{m}{2} + \frac{1}{2} \right) + \frac{k^2 \hbar^2}{2\mu}. \quad (5.24)$$

A expressão de autovalores acima representa os níveis de Landau na presença de uma densidade de deslocções, com frequência elástica $\omega_{el} \equiv \frac{2\hbar k\Omega}{\mu}$. Ou seja, a inserção da densidade de deslocções seria análoga ao procedimento de adicionar um campo magnético externo perpendicular ao movimento da partícula.

5.2.2 Partícula sob ação de um Campo Magnético

Agora vamos incluir um campo magnético externo nesse meio com densidade de deslocções. A partir da métrica, chegamos ao seguinte hamiltoniano:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \rho\Omega \frac{\partial}{\partial z} - \frac{ieB\rho}{\hbar c} \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right]. \quad (5.25)$$

Atuando o operador hamiltoniano numa autofunção do tipo $\Psi(\rho, \varphi, z) = R(\rho)e^{im\varphi}e^{ikz}$, chegamos a ESIT:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) - \frac{m^2}{\rho^2} R + \left[2m \left(k\Omega + \frac{eB}{2\hbar c} \right) - k^2 + \frac{2\mu E}{\hbar^2} \right] R + \\ + \left(k\Omega + \frac{eB}{2\hbar c} \right)^2 \rho^2 R = 0 \end{aligned} \quad (5.26)$$

Definindo $k'\Omega \equiv k\Omega + \frac{eB}{2\hbar c}$, isto é, $k' \equiv k + \frac{eB}{2\hbar\Omega c}$, temos

$$\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) - \frac{m^2}{\rho^2} R + \left[2k'\Omega m - k^2 + \frac{2\mu E}{\hbar^2} \right] R + k'^2 \Omega^2 \rho^2 R = 0 \quad (5.27)$$

Com a mudança de variável $\xi = k'\Omega$, chegamos à equação diferencial

$$\xi \frac{d^2 R}{d\xi^2} + \frac{dR}{d\xi} - \frac{m^2}{4\xi} R - \frac{\xi}{4} + \beta' R = 0 \quad (5.28)$$

onde $\beta' \equiv \frac{1}{4k'\Omega} (2k'\Omega m - k^2 + \frac{2\mu E}{\hbar^2})$.

Para $R(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} u(\xi)$, teremos $R(\xi)$ satisfazendo a equação hipergeométrica confluyente

$$\xi \frac{d^2 u}{d\xi^2} + (1 + |m| - \xi) \frac{du}{d\xi} + \left(\beta' - \frac{|m| + 1}{2} \right) u = 0, \quad (5.29)$$

cujas soluções são

$$u(\xi) = F \left(-\beta' + \frac{|m| + 1}{2}, |m| + 1, \xi \right) \quad (5.30)$$

Devemos ter, pelo argumento de normalização da função de onda, a seguinte condição satisfeita:

$$-\beta' + \frac{|m| + 1}{2} = -n$$

e assim obtemos os seguintes autovalores de energia

$$E = \hbar (\omega_{el} + \omega_c) \left(n + \frac{|m|}{2} - \frac{m}{2} + \frac{1}{2} \right) + \frac{k^2 \hbar^2}{2\mu}. \quad (5.31)$$

Publicamos os resultados referentes à dinâmica não-relativística de uma partícula em um espaço com essa densidade de deslocamentos na referência [9].

5.3 Dinâmica Quântica relativística para a densidade de defeitos

A métrica que representa o espaço com uma densidade de deslocamentos, estudada nas seções anteriores deste capítulo, pode ser investigada do ponto de vista da Relatividade Geral. Para isso, podemos estendê-la como uma solução das equações de Einstein em 4 dimensões como uma métrica do tipo $3 + 1^1$, na forma

$$ds^2 = -dt^2 + d\rho^2 + (dz + \Omega \rho^2 d\varphi)^2 + \rho^2 d\varphi^2. \quad (5.32)$$

¹Uma métrica $3 + 1$ contém 3 coordenadas espaciais e uma dependente do tempo.

Consoante isto, nosso objetivo será estudar a dinâmica de uma partícula escalar (ou seja, com *spin* nulo) nesta métrica. Inicialmente investigamos o caso de uma partícula livre e, em seguida, incluímos um campo magnético externo, comparando as mudanças ocorridas para os níveis de energia do sistema.

5.3.1 Equação de Klein-Gordon para partícula livre e com *spin* nulo

Nesta seção buscamos autofunções e autovalores para uma partícula livre, mas com energia no domínio relativístico. Neste caso, a equação de Schrödinger não é suficiente; por isso aplicamos a equação de Klein-Gordon. Esta última equação é adequada para a descrição quântica de partículas relativísticas de *spin* nulo.

Em sua forma covariante, a equação de Klein-Gordon pode ser dada por

$$\square = \frac{1}{\sqrt{-g}} \frac{\partial}{\partial x^\mu} \left(\sqrt{-g} g^{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial x^\nu} \right) . \quad (5.33)$$

Para a métrica (5.32), a equação (5.33) pode ser expressa como

$$-\frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi + \nabla^2 \Psi - M^2 \Psi = 0 . \quad (5.34)$$

Isso posto, chegamos à seguinte equação diferencial para a dinâmica relativística de partículas (com *spin* nulo) em um espaçotempo dado por (5.32)

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - \Omega \rho^2 \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] - M^2 \right\} \Psi = 0 , \quad (5.35)$$

ou ainda,

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - 2\Omega \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial z} + (1 + \Omega^2 \rho^2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] - M^2 \right\} \Psi = 0 . \quad (5.36)$$

Supondo $\Psi(\rho, \varphi, z, t) = e^{-iEt} R(\rho) e^{im\varphi} e^{ikz}$

$$\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) - \frac{m^2}{\rho^2} R - k^2 \Omega^2 \rho^2 R + (2k\Omega m - k^2 + E^2 - M^2) R = 0 \quad . \quad (5.37)$$

Fazendo a mudança de variável $\xi \equiv k\Omega\rho^2$, chegamos à equação diferencial

$$\xi \frac{d^2 R}{d\xi^2} + \frac{dR}{d\xi} - \frac{m^2}{4\xi} R - \frac{\xi}{4} R + \beta' R = 0 \quad . \quad (5.38)$$

onde $\beta' \equiv \frac{1}{4k\Omega} (2k\Omega m - k^2 + E^2 - M^2)$.

Para $\xi \gg 1$, temos $R(\xi) \approx e^{-\frac{\xi}{2}}$; para $\xi \ll 1$, temos $R(\xi) \approx \xi^{\frac{|m|}{2}}$. Dessa maneira podemos supor $R(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} u(\xi)$, onde ter-se-á $u(\xi)$ satisfazendo a equação hipergeométrica confluyente:

$$\xi \frac{d^2 u}{d\xi^2} + (1 + |m| - \xi) \frac{du}{d\xi} + \left(\beta' - \frac{|m| + 1}{2} \right) u = 0 \quad , \quad (5.39)$$

cuja solução é

$$u(\xi) = F \left(-\beta' + \frac{|m| + 1}{2}, |m| + 1, \xi \right) \quad (5.40)$$

Devemos ter, por questão de normalização da função de onda, uma série representativa da função hipergeométrica confluyente $F \left(-\beta' + \frac{|M|+1}{2}, |M| + 1, \xi \right)$ sendo um polinômio de grau n . Por conseguinte,

$$-\beta' + \frac{|m| + 1}{2} = -n \quad ,$$

o que nos leva à seguinte expressão de autovalores de energia

$$E = \sqrt{4k\Omega \left(n + \frac{|m|}{2} - \frac{m}{2} + \frac{1}{2} \right) + k^2 + M^2} \quad . \quad (5.41)$$

5.3.2 Equação de Klein-Gordon para partícula com *spin* nulo sujeita à ação de um campo magnético

Nesta seção buscamos autofunções e autovalores para uma partícula sob a ação de um campo magnético, ainda no domínio energético relativístico. Para isso escolhemos o calibre simétrico (4.5) com a única componente não-nula

$$A_\varphi = \frac{1}{2}B\rho \quad , \quad (5.42)$$

que aponta na direção φ .

Neste caso, a equação de Klein-Gordon será dada por

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{e}{\hbar c} \frac{B\rho}{2} - \rho\Omega \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] - M^2 \right\} \Psi = 0 \quad . \quad (5.43)$$

Supondo $\Psi(\rho, \varphi, z, t) = e^{-iEt} R(\rho) e^{im\varphi} e^{ikz}$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) - \frac{m^2}{\rho^2} R + \left[2m \left(\frac{eB}{2\hbar c} + k\Omega \right) - k^2 + E^2 - M^2 \right] R \\ + \left(\frac{eB}{2\hbar c} + k\Omega \right) \rho^2 R = 0 \quad . \end{aligned} \quad (5.44)$$

Definindo $k'\Omega \equiv k\Omega + \frac{eB}{2\hbar c}$, isto é, $k' \equiv k + \frac{eB}{2\hbar c\Omega}$, temos

$$\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) - \frac{m^2}{\rho^2} R - k'^2 \Omega^2 \rho^2 R + (2k'\Omega m - k^2 + E^2 - M^2) R = 0 \quad . \quad (5.45)$$

Fazendo a mudança de variável $\xi \equiv k'\Omega\rho^2$, chegamos à equação diferencial

$$\xi \frac{d^2 R}{d\xi^2} + \frac{dR}{d\xi} - \frac{m^2}{4\xi} R - \frac{\xi}{4} R + \beta' R = 0 \quad . \quad (5.46)$$

onde $\beta' \equiv \frac{1}{4k'\Omega} (2k'\Omega m - k^2 + E^2 - M^2)$.

Para $\xi \gg 1$, temos $R(\xi) \approx e^{-\frac{\xi}{2}}$; para $\xi \ll 1$, temos $R(\xi) \approx \xi^{\frac{|m|}{2}}$. Dessa maneira podemos supor $R(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} u(\xi)$, onde ter-se-á $u(\xi)$ satisfazendo a equação hipergeométrica confluyente:

$$\xi \frac{d^2 u}{d\xi^2} + (1 + |m| - \xi) \frac{du}{d\xi} + \left(\beta' - \frac{|m| + 1}{2} \right) u = 0 \quad , \quad (5.47)$$

cuja solução é

$$u(\xi) = F \left(-\beta' + \frac{|m| + 1}{2}, |m| + 1, \xi \right) \quad (5.48)$$

Devemos ter, por questão de normalização da função de onda, uma série representativa da função hipergeométrica confluyente $F \left(-\beta' + \frac{|M| + 1}{2}, |M| + 1, \xi \right)$ sendo um polinômio de grau n . Por conseguinte,

$$-\beta' + \frac{|m| + 1}{2} = -n \quad ,$$

o que nos leva à seguinte expressão de autovalores de energia

$$E = \sqrt{4 \left(k + \frac{eB}{2\hbar\Omega c} \right) \Omega \left(n + \frac{|m|}{2} - \frac{m}{2} + \frac{1}{2} \right) + k^2 + M^2} \quad . \quad (5.49)$$

Observe que, comparando (5.49) com (5.41), a expressão de autovalores nos mostra que o número quântico k sofre deslocamento de uma quantidade dependente do campo magnético externo aplicado e do parâmetro Ω ligado à densidade de defeitos.

5.3.3 Limite não-relativístico

Investiguemos agora o limite não-relativístico aplicado às expressões (5.41) e (5.49). Para isso reescrevemos cada uma delas, respectivamente, nas formas

$$E = M \sqrt{\frac{4k\Omega}{M^2} \left(n + \frac{|m|}{2} - \frac{m}{2} + \frac{1}{2} \right) + \frac{k^2}{M^2} + 1} \quad (5.50)$$

e

$$E = M \sqrt{\frac{4\Omega}{M^2} \left(k + \frac{eB}{2\hbar\Omega c} \right) \left(n + \frac{|m|}{2} - \frac{m}{2} + \frac{1}{2} \right) + \frac{k^2}{M^2} + 1} \quad (5.51)$$

Fazendo a expansão em série de Taylor, até os termos de primeira ordem, as expressões (5.50) e (5.51) ficam, respectivamente, dadas por

$$E = M + \frac{2k\Omega}{M} \left(n + \frac{|m|}{2} - \frac{m}{2} + \frac{1}{2} \right) + \frac{k^2}{2M} \quad (5.52)$$

e

$$E = M + \frac{2k\Omega}{M} \left(k + \frac{eB}{2\hbar\Omega c} \right) \left(n + \frac{|m|}{2} - \frac{m}{2} + \frac{1}{2} \right) + \frac{k^2}{2M} \quad (5.53)$$

Observe que tanto (5.52) quanto (5.53) recaem nas expressões não-relativísticas para energia, dadas, respectivamente, por (5.41) e (5.49). Temos ainda que (5.52) e (5.53), quando comparadas com seus análogos não-relativísticos, apresentam um termo adicional, que é a massa de repouso M . Este termo adicional, a massa de repouso, também aparece na expressão relativística para os níveis de Landau em um espaço usual, sem curvatura ou torção.

Capítulo 6

CONCLUSÕES

Ao longo desta tese investigamos como a curvatura e a torção alteram as propriedades físicas dos sistemas.

No capítulo 3 estudamos a dinâmica em um espaço com uma dispiração. Analisamos as situações de um fio quântico, de um anel quântico com largura finita e do modelo de confinamento dado na referência [1].

Quando estudamos a dinâmica em um fio quântico em um espaço com uma dispiração, vimos que a torção afeta os autovalores de energia através do parâmetro β . Por sua vez, a curvatura afeta os níveis de energia através do parâmetro α . Considerando que para uma desclinação positiva $\alpha < 1$, que é o caso de um cone, vemos que a contribuição do raio R_0 nos autovalores de energia para o fio quântico é reduzida por um fator α em comparação com o caso plano (em que $\alpha = 1$). Quando incluímos um fluxo de Aharonov-Bohm, o número quântico m sofre um deslocamento por uma quantidade $\frac{\Phi_{AB}}{\Phi_0}$.

Estudamos também um sistema do tipo anel quântico, modelado via potencial *parede rígida*. Assim teríamos a extensão do fio quântico (sistema unidimensional) para um sistema bidimensional, caso mais realístico. No limite em que os raios interno a e externo b do anel quântico são tais que $b \rightarrow a$, teremos uma expressão de

autovalores de energia para o anel quântico (bidimensional) que é similar àquela obtida para o fio quântico (unidimensional). Resta uma diferença, contudo, e esta reside em uma contribuição geométrica, dependente do raio de curvatura; esta contribuição coaduna com o estudo na referência [90], onde uma superfície de dimensão menor que esteja imersa em outra de dimensão maior apresenta uma contribuição aos níveis de energia que depende da curvatura.

O último sistema abordado no capítulo 3 foi o confinamento de Tan e Inkson [1] para partículas em um espaço com uma dispiração. Vimos tanto β quanto α , novamente, alteram os níveis de energia do sistema.

No capítulo 4 investigamos a dinâmica de partículas em um espaço esférico. Na primeira seção do capítulo estudamos o caso sem defeitos; na segunda, o de uma esfera com uma desclinação. Observamos que à medida que o raio de curvatura a tende a um valor diminuto, a energia do sistema também tende a valores altos, indicando que sistemas com essa geometria e pequenas dimensões poderiam ser bons dispositivos para armazenar ou transmitir grandes lotes de informação a partir de energia eletromagnética, com eventuais usos tecnológicos. Observamos ainda que para $m = 0$ não há degenerescência nos níveis de energia, enquanto que para $m \neq 0$ ocorre degenerescência dupla. A frequência efetiva ω_m associada aos níveis de Landau apresenta dependência com os parâmetros do confinamento abordado no capítulo e com o campo magnético externo que esteja atuando. Vimos também que tanto quando a esfera tende ao plano via condição $a \rightarrow 0$, quanto para o caso $a \gg 1$, as correntes persistentes e a magnetização para o sistema tendem a valores constantes.

Verificamos também que, no caso em que a desclinação está presente na esfera, a energia, as correntes persistentes e a magnetização são afetadas pelo parâmetro α ligado ao defeito. Quando introduzimos o limite $\alpha \rightarrow 1$, recuperamos as expressões obtidas para o caso esférico sem defeito.

No capítulo 5 estudamos a dinâmica quântica, tanto não-relativística quanto relativística para partículas em um espaço com uma densidade de deslocções. No caso relativístico, lidamos com partículas escalares (sem *spin*). A métrica para o caso não-relativístico, apresentada em 3 dimensões, é uma analogia com a geometria de Som-Raychadhuri na forma apresentada na referência [77].

Analisando a métrica (5.9) sob a ótica da Geometria Diferencial, vimos que os elementos e_μ^a desempenham um papel para a 2-forma de torção que é similar àquele do potencial vetor para o tensor eletromagnético $F_{\mu\nu}$. Além disso, ao obter o espectro de energia para partículas não-relativísticas no espaço com a densidade de deslocções, mas sem quaisquer campos magnéticos externos presentes, observamos a presença de um análogo dos níveis de Landau de natureza magnética. A esses níveis de energia, associados à frequência efetiva ω_{el} , chamamos níveis de Landau elásticos. Estes dois últimos resultados mencionados, em conjunto, poderiam corroborar a idéia de uma “equivalência” entre campos magnéticos e a torção.

Quando investigamos a dinâmica relativística de partículas escalares em um espaço dotado da métrica (5.32), vimos que o parâmetro Ω , ligado à torção, novamente altera os níveis de energia do sistema. Por sua vez, quando aplicamos o limite relativístico para as expressões de autovalores de energia para o caso relativístico, recuperamos as expressões obtidas para o caso não-relativístico.

BIBLIOGRAFIA

- [1] TAN, W. C. e INKSON, J.C., *Electron states in a two-dimensional ring - an exactly soluble model*, Semiconductor Science and Technology, 11, p.1635, 1996.
- [2] TAN, W. C. e INKSON, J.C., *Landau quantization and the Aharonov-Bohm effect in a two-dimensional ring*, Physical Review B, **53**, 11, p.6947, 1996.
- [3] TAN, W. C. e INKSON, J.C., *Magnetization, persistent currents, and their relation in quantum rings and dots*, Physical Review B, **60**, p.5626, 1999.
- [4] KITTEL, C., *Introduction to Solid State Physics*, 8ed., John Wiley & Sons, 2005.
- [5] REZENDE, S.M, *Materiais e dispositivos eletrônicos*, 2ed., Editora Livraria da Física (São Paulo), 2004.
- [6] FERRY, D. K., GOODNICK, S. M. e BIRD, J., *Transport in Nanostructures*, 2nd. edition, Cambridge University Press, 2009.
- [7] BULAEV, D.V., GEYLER, V.A. e MARGULIS, V.A., *Effect of surface on magnetic moment and persistent currents in two-dimensional quantum rings and dots*, Physical Review B **69**, p.195313, 2004.

- [8] SILVA NETTO, A.L. e FURTADO, C., *Influence of Topology in a Quantum Ring*, Physics Letters A **372**, 3894, 2008.
- [9] SILVA NETTO, A.L. e FURTADO, C., *Elastic Landau levels*, Journal of Physics: Condensed Matter **20**, 125209, 2008.
- [10] ZANELLA, I. *et al*, *Abordagens em Nanociência e Nanotecnologia para o Ensino Médio*, XVIII Simpósio Nacional de Ensino de Física, 2009.
- [11] SCHMID, G., *Nanoparticles: From Theory to Application*, WILEY-VCH (Weinheim), 2004.
- [12] BAPTISTA, P.V. *et al*, Clin. Chem., **52**, 1433, 2006.
- [13] HINESTROZA, J. P., Materials Today, **10**, 56, 2007.
- [14] YOU, C. C. *et al*, Curr. Opin. Chem. Biol., **9**, 639, 2005.
- [15] YOU, C. C. *et al*, Nat. Nanotechnol., **2**, 318, 2007.
- [16] KAYACAN, O. *et al*, Defence Science Journal, **55**, 195, 2005.
- [17] REZA, M. M. *et al*, Journal of Liposome Research, **18**, 309, 2008.
- [18] BRAYNER, R., NanoToday, **3**, 48, 2008.
- [19] HILLIE, T. *et al*, Nat. Nanotechnol., **2**, 663, 2007.
- [20] VALADARES, E. C., CHAVES, A. S., ALVES, E. G., *Aplicações da física quântica: do transistor à nanotecnologia*, 1ed., Editora Livraria da Física (São Paulo), 2005.
- [21] PAGNOSSIN, I.R., *Propriedades de transporte elétrico de gases bidimensionais de elétrons nas proximidades de pontos-quânticos de InAs*. 2004. 165f. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo.

- [22] DOOSE, S., *Single-Molecule Characterization of Photophysical and Colloidal Properties of Biocompatible Quantum Dots*. 2003. 188f. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de Heidelberg.
- [23] WILLIAMS, S. C., *Patterning Nanocrystals Using DNA*. 2003. 200f. Tese (Doutorado em Química) - Universidade da Califórnia.
- [24] HINZER, K., *Semiconductor Quantum Dot Lasers*. 1998. 110f. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de Ottawa.
- [25] KASTNER, M.A., *Artificial atoms*, Physics Today, **46**, 1, pp.24-31, 1993.
- [26] FRADKIN, E., *Field Theories of Condensed Matter Systems*, Addison-Wesley Publishing Company, 1991.
- [27] DIVINCENZO *et al* em *Quantum Mesoscopic Phenomena and Mesoscopic Devices in Microelectronics* (I. O. Kulik and R. Ellialtioglu, eds.), Kluwer, 2000. cond-mat/9911245.
- [28] MAKHLIN, Y. *Quantum-state engineering with Josephson-junction devices*, Rev. Mod. Phys., **73**, 357, 2001.
- [29] DEVORET, M. H. *et al*, *Superconducting qubits: A short review* cond-mat/0411174.
- [30] KANE, B. E., *A silicon-based nuclear spin quantum computer*, Nature, **393**, 133, 1998.
- [31] AVISHAI, Y., HATSUGAI, Y. e KOHMOTO, M., *Persistent currents and edge states in a magnetic field*, Physical Review B, **47**, p.9501, 1993.
- [32] AVISHAI, Y. e KOHMOTO, M., *Quantized persistent currents in quantum dot at strong magnetic field*, Physical Review Letters, **71**, p.279, 1993.

- [33] KUMAGAI, M. e OHNO, T., *Topology in Artificial Structures*, Solid State Communications, **83**, 11, p.837, 1992.
- [34] FUHRER, A., LÜSCHER, S., IHN, T., HEINZEL, T., ENSSLIN, K., WEGSCHEIDER, W. e BICHLER, M., *Energy spectra of quantum rings*, Nature, **413**, p.822, 2001.
- [35] KLAMA, S., *The electron energy spectrum of a circular ring in an external magnetic field*, Journal of Physics: Condensed Matter **5**, p.5609, 1993.
- [36] SAKURAI, J.J., *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
- [37] HUND, F., Ann. der Physik **32**, 102, 1938.
- [38] PAULING, L., *The diamagnetic anisotropy of aromatic molecules*, J. Chem. Phys. **4**, 673, 1936.
- [39] LONDON, F., *Théorie quantique des courants interatomiques dans les combinaisons aromatiques*, J. Phys. Radium **8**, 397, 1937.
- [40] IMRY, Y., *Introduction to Mesoscopic Physics*, Oxford University Press (New York), 1997.
- [41] HAWKING, S.W., *O Universo numa Casca de Noz*, Ediouro, 2009.
- [42] WEINBERG, S., *Cosmology*, Oxford University Press (Oxford), 2008.
- [43] CHENG, TA-PEI, *Relativity, Gravitation, and Cosmology: a basic introduction*, Oxford University Press (Oxford), 2005.
- [44] BLANDFORD, R.D., *Cosmological Applications of Gravitational Lensing*, Annual Review of Astronomy and Astrophysics **30**, p. 311, 1992.

- [45] WALSH, D., CARSWELL, R.F., WEYMANN, R.J., 0957 + 561 *A, B: twin quasistellar objects or gravitational lens?*, Nature **279**, p. 381, 1979.
- [46] JACKSON, J.D., *Classical Electrodynamics*, Wiley, 3ed., 1998.
- [47] AURELL, E., *Torsion and electron motion in quantum dots with crystal lattice dislocations*, Journal of Physics A: Math. Gen. **32**, p. 571, 1999.
- [48] SÁTIRO, C., MORAES, F., *Lensing effects in a nematic liquid crystal with topological defects*, The European Physical Journal E (Soft Matter) **20**, p. 173, 2006.
- [49] SÁTIRO, C., MORAES, F., *On the deflection of light by topological defects in nematic liquid crystals*, The European Physical Journal E (Soft Matter) **25**, p. 425, 2008.
- [50] DE GENNES, P. G. and PROST, J., *The Physics of Liquid Crystals*, Oxford University Press (Oxford), 1993.
- [51] CHANDRASEKHAR, S., *Liquid Crystals*, Cambridge University Press (Cambridge), 1993.
- [52] NABARRO, F.R.N., *Theory of Crystal Dislocations*, Dover (Nova Iorque), 1987.
- [53] KRÖNER, E., *Dislocations and continuum mechanics*, Appl. Mech. Rev. **15**, p.599, 1962.
- [54] BILBY, B.A., BULLOUGH, R. e SMITH, E., *Continuous distributions of dislocations: a new application of methods of non-Riemannian geometry*, Proc. R. Soc. A **231**, p.263, 1955.
- [55] DZYALOSHINSKII, I.E. e VOLOVIK, G.E., Ann. Phys. **125**, p.67, 1980.

- [56] KATANAIEV, M. O. e VOLOVICH, I.V., *Theory of Defects in Solids and Three-Dimensional Gravity*, Annals of Physics **216**, p.1, 1992.
- [57] KLEINERT, H., *Gauge Fields in Condensed Matter*, volume 2, World Scientific (Cingapura), 1989.
- [58] BAUSCH, R., SCHMITZ, R. e TURSKI, L.A., Physics Review Letters **80**, p.2257, 1998.
- [59] DOMINGUES, H.H., *Espaços Métricos e Introdução à Topologia*, Atual (São Paulo), 1982.
- [60] LANDAU, L.D. e LIFSHITZ, E.M., *Teoria do Campo*, Mir (Moscou), 1980.
- [61] PUNTIAGAM, R.A. e SOLENG, H.H., *Volterra Distortions, Spinning Strings, and Cosmic Defects*, Classical and Quantum Gravity **14**, 1129, 1997.
- [62] MARQUES, G.A. de, FURTADO, C., BEZERRA, V.B. e MORAES, F., *Landau levels in the presence of topological defects*, Journal of Physics A: Mathematical and General **34**, p.5945, 2001.
- [63] KATANAIEV, M.O., *Geometric theory of defects*, arXiv:cond-mat/0407469 v3 5 Dec 2005 ; KATANAIEV, M.O., *Introduction to the Geometric Theory of Defects*, arXiv:cond-mat/0502123 v1 4 Feb 2005.
- [64] SÁTIRO, C. e MORAES, F., *Lensing effects in a nematic liquid crystal with topological defects*, arXiv:cond-mat/0503482 v2 18 May 2006.
- [65] BOWICK, M.J., CHANDAR, L. e SCHIFF, E.A., *The Cosmological Kibble Mechanism in the Laboratory: String Formation in Liquid Crystals*, arXiv:hep-ph/9208233 v1 19 Aug 1992.

- [66] VILENKIN, A. e SHELLARD, E.P.S., *Cosmic Strings and other Topological Defects*, Cambridge University Press, 1994.
- [67] FURTADO, C., BEZERRA, V.B. e MORAES, F., *Berry's quantum phase in media with dislocations*, Europhysics Letters **52**, 1, 2000.
- [68] PASSOS, E., RIBEIRO, L.R., FURTADO, C. e NASCIMENTO, J.R., *Noncommutative Anandan quantum phase*, Physics Review A **76**, 012113, 2007.
- [69] ASSIS, J.G., FURTADO, C. e BEZERRA, V.B., *Gravitational Berry's quantum phase*, Physics Review D **62**, 045003, 2000.
- [70] FURTADO, C., MORAES, F. e CARVALHO, A.M.M., *Geometric phases in graphitic cones*, Physics Letters A **372**, 5368, 2008.
- [71] BAKKE, K., NASCIMENTO, J.R. e FURTADO, C., *Geometric phase for a neutral particle in the presence of a topological defect*, Physics Review D **78**, 064012, 2008.
- [72] BAKKE, K., PEDROSA, I.A. e FURTADO, C., *Geometric phases and squeezed quantum states of relic gravitons*, Journal of Mathematical Physics **50**, 113521, 2009.
- [73] de PADUA, A., PARISIO-FILHO, F. e MORAES, F., *Geodesics around line defects in elastic solids*, Physics Letters A **238**, 153, 1998.
- [74] MORAES, F., *Geodesics around a dislocation*, Physics Letters A **214**, 189, 1996.
- [75] FURTADO, C., ROSAS, A. e AZEVEDO, S., *Landau quantization and curvature effects in a two-dimensional quantum dot*, Europhysics Letters **79**, 57001, 2007.

- [76] RIBEIRO, L.R, PASSOS, FURTADO, C. e NASCIMENTO, J.R., *Landau analog levels for dipoles in non-commutative space and phase space*, European Physical Journal C - Particle and Fields **56**, 597, 2008.
- [77] DAS, S. e GEGENBERG, J., *Gravitational non-commutativity and Gödel-like spacetimes*, arXiv:hep-th/0407053v3 1 Feb 2008.
- [78] HODGKIN, L., *A History of Mathematics*, Oxford University Press, 2005.
- [79] JAMES, I.M., *History of Topology*, Elsevier, 1999.
- [80] NAKAHARA, M., *Geometry, Topology and Physics*, 2ed., IOP Publishing (Bristol and Philadelphia), (2003).
- [81] CARTER ,J. S., *How surfaces intersect in space: an introduction to topology*, World Scientific, 2ed., 1995.
- [82] SPIVAK, M., *A Comprehensive Introduction to Differential Geometry*, vol.2, 3ed., Publish or Perish, 1999.
- [83] ISHAM, C.J., *Modern Differential Geometry for Physicists*, World Scientific, 2ed., 1999.
- [84] HEHL, F.W *et al*, *Metric-affine gauge theory of gravity: field equations, Noether identities, world spinors, and breaking of dilation invariance*, Physics Reports **258**, 1, (1995).
- [85] NASH, C., SEN,S., *Topology and Geometry for Physicists*, 7ed., Academic Press, 1992.
- [86] WARNICK, K.F. *et al*, *Electromagnetics Made Easy: Differential Forms as a Teaching Tool*, URL: <http://fie-conference.org/fie96/papers/443.pdf>. (Acesso em 12/02/2010).

- [87] WARNICK, K.F., SELFRIDGE, R.H., e ARNOLD, D.V., *Electromagnetics*, URL: <http://eceformsweb.groups.et.byu.net/ftext.ps>. (Acesso em 12/02/2010).
- [88] A GEOMETRIA DOS ESPAÇOS CURVOS OU GEOMETRIA NÃO-EUCLIDIANA, Observatório Nacional.
- [89] ABRAMOWITZ, M. e STEGUN, I.A., *Handbook of Mathematical Functions*, National Bureau of Standards (Washington), 1964.
- [90] COSTA, R.C.T., *Quantum mechanics of a constrained particle*, Physical Review A, **23**, 4, p.1982, 1981.
- [91] FROLOV, V.P., SKARZHINSKY, V.D. e JOHN, R.W., Nuovo Cimento, **99**, p.67, 1987.
- [92] BEZERRA, V.B., Journal of Mathematical Physics, **30**, p.2895, 1989.
- [93] BIALYNICKI-BIRULA, I., CIEPLAK, M. e KAMINSKI, J., *Theory of Quanta*, Oxford University Press (Oxford), 1992.
- [94] HUANG, K., *Statistical Mechanics*, 2nd edition, John Wiley & Sons, 1987.
- [95] BYERS, N. e YANG, C.N., *Theoretical Considerations Concerning Quantized Magnetic Flux in Superconducting Cylinders*, Physical Review Letters **7**, p.46, 1961.
- [96] FURTADO, C., MORAES, F., *Harmonic oscillator interacting with conical singularities*, Journal of Physics A: Mathematical and General, **33**, p.5513, 2000.

- [97] RUSSO JR., M. F. e CUROTTOA, E., *Stereographic projections path integral in S^1 and $(S^2)^m$ manifolds*, Journal of Chemical Physics, **118**, 15, p.6806, 2003.
- [98] LANDAU, L.D. e LIFSHITZ, E.M., *Mecânica Quântica: teoria não relativista*, Mir (Moscou), 1985.
- [99] BOGACHEK, E.N. e LANDMAN, U., *Edge states, Aharonov-Bohm oscillations, and thermodynamic and spectral properties in a two-dimensional electron gas with antidots*, Physical Review B, **52**, p.14067, 1995.
- [100] FURTADO, C., de LIMA RIBEIRO, C.A., AZEVEDO, S. *Aharonov-Bohm effect in the presence of a density of defects*, Physical Letters A, **296**, p.171, 2002.
- [101] DUNNE, G.V., *Hilbert Space for Charged Particles in Perpendicular Magnetic Fields*, Annals of Physics, **215**, p.233, 1992.
- [102] KATANAIEV, M.O., *Geometric Theory of Defects*, Physics Uspekhi **48**, p.675, 2005.
- [103] FURTADO, C., BEZERRA, V.B. e MORAES, F., Europhysics Letters **52**, p.1 2000.
- [104] FURTADO, C., BEZERRA, V.B. e MORAES, Physics Letters **A 289**, p. 160 2001.
- [105] KATANAIEV, M. O., Theor. Math. Phys. 135 (2), 733 (2003).
- [106] BUTKOV, E., *Física Matemática*, Editora LTC, 1ed., 1988.
- [107] ARFKEN, G.B., WEBER, H.J., *Mathematical Methods For Physicists - International Student Edition*, 6ed., Academic Press, 2005.