

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

José Fernando Oliveira de Souza

Nanoestruturas de grafeno e o problema do
confinamento de partículas de Dirac na
descrição do contínuo

João Pessoa, PB
2015

José Fernando Oliveira de Souza

Versão final de trabalho de tese intitulado

**Nanoestruturas de grafeno e o problema do
confinamento de partículas de Dirac na descrição do
contínuo**

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal da Paraíba como requisito obrigatório para a obtenção do título de doutor.

Universidade Federal da Paraíba

Orientador: Claudio Benedito Silva Furtado

João Pessoa, PB
2015

S729n Souza, José Fernando Oliveira de.
Nanoestruturas de grafeno e o problema do confinamento
de partículas de Dirac na descrição do contínuo / José
Fernando Oliveira de Souza.- João Pessoa, 2015.
54f. : il.
Orientador: Claudio Benedito Silva Furtado
Tese (Doutorado) - UFPB/CCEN
1. Física. 2. Grafeno. 3. Equação de Dirac. 4. Condições de
contorno. 5. Faixas de Möbius. 6. Nanofitas.

UFPB/BC

CDU: 53(043)



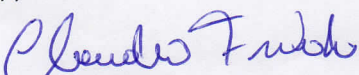
Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Programa de Pós-Graduação *Stricto Sensu* em Física

DECLARAÇÃO DE TITULAÇÃO
doutorado

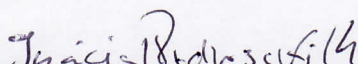
A Comissão Examinadora que abaixo assina este documento, reunida no dia 08 de agosto de 2014, Auditório da Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal da Paraíba, APROVA **José Fernando Oliveira de Sousa** na defesa de sua tese intitulada "*Nanoestruturas de grafeno e o problema do confinamento de partículas de Dirac na descrição do contínuo*".

João Pessoa, 08 de agosto de 2014


Orientador:


Prof. Dr. Cláudio Furtado
(DF/UFPB)


1º Examinador:


Prof. Dr. Inácio de Almeida Pedrosa
(DF/UFPB)

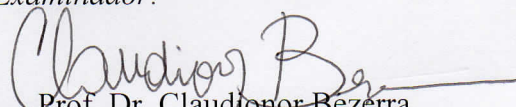
2º Examinador:


Prof. Dr. Alexandre Carvalho
(UFAL)

3º Examinador:


Prof. Dr. Knut Bakke Filho
(UFPB)

4º Examinador:


Prof. Dr. Claudionor Bezerra
(UFRN)

Agradecimentos

Em primeiro lugar, agradeço aos meus pais por tudo que não poderia caber neste pequeno espaço.

Agradeço a todos que estão à minha volta, seja pela cumplicidade, pela convivência, pelo suporte ou por quaisquer outros motivos que agora não me vêm à cabeça, mas que sei que existem. Especialmente, quero agradecer à minha namorada e ao nosso molequinho, por poder desfrutar de momentos que me fazem desejar outros mais. Também à minha irmã, não apenas pela ajuda com a edição das figuras, mas também pela parceria constante. A minha avó, em especial, não apenas pelo óbvio, mas também por estar sempre como uma segunda mãe. A toda minha família, incluindo tios, primos e amigos próximos, pelo apoio e por estarem sempre presentes tanto nos bons quanto nos maus momentos.

Agradeço também a todos no meio acadêmico que de alguma maneira têm participação na minha formação e, particularmente, neste momento; orientador, professores, funcionários, amigos e colegas de trabalho.

Agradeço à CAPES, pelo apoio financeiro concedido durante todo este período.

Agradeço, por fim, a todos aqueles que por algum motivo não foram mencionados aqui, por entenderem que já estou cansado de escrever.

Resumo

Neste trabalho, investigamos paralelamente os aspectos físicos e matemáticos inerentes ao problema do confinamento de férmions de Dirac sem massa em nanoestruturas de grafeno. Em uma abordagem no limite de baixas energias, propomos modelos para descrever sistemas confinantes no âmbito da física do grafeno e estudamos de que modo a escolha das condições de contorno do problema - ou, equivalentemente, dos domínios do operador de Dirac - exercem influência sobre as propriedades físicas de tais sistemas. Neste cenário, concentramo-nos essencialmente no estudo do comportamento físico de nanoanéis e nanofitas de grafeno em resposta a aspectos como topologia, geometria de borda e interface e interações com campos externos. Ao mesmo tempo, também é realizada uma rigorosa investigação acerca dos aspectos formais do problema e do modo como eles se refletem fisicamente. À luz da teoria dos operadores lineares em espaços de Hilbert, analisamos o papel desempenhado pela noção de *self-adjointness* na modelagem do problema e estabelecemos conjuntos de condições de contorno fisicamente aceitáveis relativamente ao grafeno, o que corresponde matematicamente à definição de extensões auto-adjuntas do Hamiltoniano de Dirac da descrição do contínuo. Conjuntos propostos no tratamento de algumas das configurações estudadas são abordados neste contexto. Além disso, apresentamos um estudo à parte em que examinamos a influência de defeitos topológicos na física de férmions com massa no grafeno na presença de interações de Coulomb e de campos magnéticos uniformes.

Palavras-chave: grafeno, equação de Dirac, condições de contorno, faixas de Möbius, nanofitas, extensões auto-adjuntas, nanocones.

Abstract

In this work, we investigate in parallel physical and mathematical aspects inherent to the problem of confinement of massless Dirac fermions in graphene nanostructures. In a low energy approach, we propose models to describe confining systems in graphene and study how the choice of boundary conditions of the problem - or, equivalently, of domains of the Dirac operator - affects the physical properties of such systems. In this scenario, we concentrate essentially on the study of the physical behavior of graphene nanorings and nanoribbons in response to aspects such as topology, edge and interface geometry and interactions with external fields. At the same time, a rigorous investigation concerning formal aspects of the problem and the way that they manifest themselves physically is also performed. In light of the theory of linear operators on Hilbert spaces, we analyze the role played by the notion of self-adjointness in the problem and establish sets of boundary conditions physically acceptable in graphene, which mathematically corresponds to the definition of self-adjoint extensions of the Dirac Hamiltonian from the continuum description. Sets proposed in the treatment of some studied configurations are approached in this context. In addition, we present a particular study in which we examine the influence of topological defects on the physics of massive fermions in graphene in the presence of Coulomb and uniform magnetic fields.

Keywords: graphene, Dirac equation, boundary conditions, Möbius strips, nanoribbons, self-adjoint extensions, nanocones.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Rede hexagonal do grafeno	24
Figura 2 – Primeira zona de Brillouin e estrutura de bandas nas proximidades dos pontos de Dirac	25
Figura 3 – Região bidimensional	30
Figura 4 – Interface de Möbius via células unitárias e cruzamento das subredes . .	36
Figura 5 – Folha de grafeno	48
Figura 6 – Interface de Möbius em nanofitas com bordas <i>zigzag</i>	49
Figura 7 – Interfaces de Möbius em nanofitas com bordas <i>armchair</i>	55
Figura 8 – Nanofita com bordas <i>zigzag</i> na presença de um campo elétrico	58
Figura 9 – Criação de uma 1-disclinação e a produção de um cone de grafeno . . .	83
Figura 10 – Gráficos das energias em função do parâmetro topológico	89
Figura 11 – Faixa de Möbius	95
Figura 12 – Fabricação de uma faixa de Möbius	96
Figura 13 – Representação gráfica do domínio de Möbius	96

Sumário

1	Introdução	15
2	Breve introdução à descrição do contínuo no grafeno	23
3	Do confinamento de férmions de Dirac sem massa do grafeno em faixas de Möbius	29
3.1	Aspectos matemáticos do problema	29
3.2	Solução do problema	31
3.3	Implicações físicas no grafeno	35
4	O efeito Aharonov-Bohm em faixas de Möbius de grafeno	39
4.1	O efeito Aharonov-Bohm em anéis de grafeno	39
4.2	Confinamento eletrônico	41
4.3	Correntes persistentes	44
5	Estados de bulk e de borda em faixas de Möbius com bordas zigzag e armchair	47
5.1	Fundamentação teórica	47
5.2	Faixas de Möbius com borda zigzag	48
5.2.1	Estados de bulk	50
5.2.2	Estados de borda	51
5.2.3	Estados de borda com energia nula em anéis ordinários	53
5.3	Faixas de Möbius com borda armchair	54
6	Efeito de campos elétricos uniformes em nanofitas de grafeno com bordas zigzag	57
6.1	Partícula de Dirac em campos elétricos uniformes fracos	57
6.2	Nanofita com bordas zigzag na presença de campos elétricos transversais	59
6.2.1	Caso $\eta > 0$	59
6.2.2	Caso $\eta < 0$	61
7	Extensões auto-adjuntas do operador de Dirac do grafeno e o confinamento de férmions sem massa em anéis 2D	65
7.1	Operadores lineares auto-adjuntos em espaços de Hilbert	65
7.2	Self-Adjointness e conjuntos aceitáveis de condições de contorno no grafeno	66
7.2.1	Caso bidimensional	70
7.3	Aspectos formais do confinamento em anéis periódicos e de Möbius	72

8	Sobre as condições de contorno em nanofitas com bordas armchair	75
8.1	Breve histórico e noções preliminares	75
8.2	Self-adjointness do operador de Dirac e a consistência do modelo	76
9	Cones de grafeno com impurezas de carga na presença de campos magnéticos uniformes	81
9.1	Grafeno com gap e férmions de Dirac com massa	81
9.2	Cones de grafeno na presença de campos de Coulomb e campos magnéticos uniformes	82
9.3	Solução do problema	85
10	Considerações Finais	91
APÊNDICE A	Condições de contorno e aspectos topológicos em faixas de Möbius	95
ANEXO A	Lista de publicações	99
	Referências	101

1 Introdução

O carbono é possivelmente o quarto elemento mais abundante no Universo¹ e o terceiro mais abundante nos organismos vivos, sendo uma das bases fundamentais para a formação e evolução da vida em nosso planeta [1, 2]. Compondo uma porção ínfima da crosta terrestre e sendo estimado como apenas o décimo quarto constituinte mais abundante na Terra, a ocorrência mais antiga observada pelo homem é possivelmente o carvão vegetal, ainda na Pré-História [2, 3, 4, 5]. Ocorrências puras como o diamante e o grafite já eram identificadas entre as primeiras civilizações da Antiguidade, embora sua natureza comum não fosse conhecida. Estas ocorrências se formam sob diferentes condições na Terra, tais como de temperatura e pressão, e são denominadas alótropos. Em geral, o carbono pode ser encontrado na natureza em algumas variedades alotrópicas. Quimicamente semelhantes, mas diferindo por seus arranjos espaciais e pela natureza de suas ligações, estes alótropos distinguem-se fundamentalmente por suas propriedades físicas, fato desencadeante da recente revolução causada pela nova geração de nanomateriais baseados em carbono, como o fulereno, os nanotubos e o grafeno.

As primeiras realizações teóricas e experimentais na química do carbono são frequentemente creditadas a Lavoisier [2, 5], como a descoberta do diamante como uma forma pura de carbono [3, 5], por volta de 1772. Somente em 1779, a primeira relação entre o grafite - conhecido na época como chumbo negro - e o carbono foi sugerida por Scheele [6]. Até então, o grafite era frequentemente confundido com outros elementos, dentre os quais figurava notadamente o chumbo, razão pela qual era conhecido por tal designação. Scheele mostrou que, assim como o diamante, o grafite era também uma forma alotrópica do carbono. Em 1789, o recém-descoberto alótropo foi batizado por Werner com o nome de “grafite”, derivado do grego $\gamma\rho\alpha\phi\epsilon\iota\eta$ (*graphein*), que significa “escrever”².

São marcantes as diferenças entre as propriedades encontradas no grafite e no diamante. Do ponto de vista estrutural, o diamante consiste em átomos de carbono dispostos em uma geometria tetraédrica, conectados por fortes ligações formadas a partir de orbitais em uma hibridização sp^3 . O grafite, por sua vez, consiste de várias camadas de uma rede bidimensional composta de átomos arranjados hexagonalmente, com ligações em uma hibridização sp^2 . Tais camadas são unidas por uma fraca interação do tipo van der Waals. Essencialmente em decorrência desses aspectos, as propriedades físicas são notavelmente distintas para estes dois alótropos.

Até 1985, os dois únicos alótropos do carbono conhecidos eram o diamante e o grafite.

¹ Classificações desta natureza referem-se a estimativas e, assim sendo, pontuais discrepâncias podem ser encontradas na literatura em geral.

² A título de digressão, uma boa exposição traçando aspectos gerais sobre as origens e linhas etimológicas do termo pode ser encontrada no *Dicionário etimológico da língua portuguesa*, de Antônio Geraldo da Cunha.

Naquele ano, foi anunciada a descoberta por Kroto *et al.* [7] de uma nova forma alotrópica: o fulereno. Vaporizando o grafite por irradiação a laser, eles detectaram uma nova espécie de arranjo estrutural formado pelos átomos de carbono que eram desprendidos em decorrência do processo. A mais estável, batizada de *Buckminsterfullerene* (C_{60}), seria composta de 60 átomos de carbono em uma particular geometria. Por considerações de natureza química, os referidos pesquisadores sugeriram que tal estrutura teria a geometria de uma bola de futebol ou, mais precisamente, um icosaedro composto de 20 hexágonos e 12 pentágonos cujos vértices corresponderiam às posições ocupadas pelos átomos. Tal descoberta rendeu ao grupo o prêmio Nobel de química de 1996. Em 1990, visando à fabricação de fulereno em larga escala, Krätschmer *et al.* [8, 9] fizeram uma nova importante descoberta. Utilizando uma nova técnica de síntese, eles descobriram o C_{60} sólido, um fulereno com estrutura cristalina, o qual chamaram de fullerito.

Um novo horizonte de pesquisa se abriu com a descoberta do fulereno, e uma grande expectativa em relação a este material foi criada. A possibilidade de produção de novas estruturas de carbono era outra questão que emergia com o precedente aberto pela síntese do fulereno. Tal panorama levou então, em 1991, a uma nova revolução na física da matéria condensada com a síntese dos nanotubos de carbono por Ijima [10]. Em um aparato similar àquele utilizado na produção do fulereno por Krätschmer *et al.*, foram crescidos tubos em escala nanoscópica formados por (entre 2 e 50) cilindros gráfiticos coaxiais com diâmetros típicos da ordem de 3-40 nm; por essa razão, foram denominados nanotubos de múltiplas paredes. Mais tarde, também foram sintetizados nanotubos com uma única parede, novamente por Ijima [11]. Embora grande parcela da literatura credite a Ijima a descoberta dos nanotubos de carbono, há uma certa discussão recente a respeito da anterioridade de tal descoberta. Segundo Monthieux e Kuznetsov [12], há um considerável número de trabalhos tratando de nanotubos que precedem o artigo de Ijima; e a primeira evidência comprovada da síntese de nanotubos pode ser encontrada na publicação russa [13], de 1954, por Radushkevich e Lukyanovich. Sendo assim, a descoberta teria se dado quase 40 anos antes da publicação considerada como a pioneira no assunto.

Apesar de não ser um trabalho pioneiro, é unanimidade o fato de que a publicação de Ijima é o grande marco inicial da área, o responsável por impulsionar o maciço e recente interesse científico em nanotubos de carbono. O trabalho de Ijima não é importante apenas por sua relevância histórica, nele também é identificado um aspecto morfológico importante associado ao processo de crescimento dos nanotubos; lá é notado que as cascas cilíndricas que compõem as agulhas $1D^3$ têm um particular arranjo em hélice da rede e que esta característica varia de casca a casca, em um único tubo, e de agulha para agulha. Este é um detalhe de grande relevância especialmente por causa das propriedades eletrônicas que estão associadas a ele. Trabalhos teóricos posteriores apontaram uma relação estreita entre o comportamento eletrônico desses objetos e tal aspecto. Os na-

³ No artigo original, os nanotubos de múltiplas paredes são identificados como agulhas unidimensionais.

notubos apresentariam um comportamento metálico ou semicondutor dependendo desta característica de sua morfologia [14, 15, 16, 17].

Desde muito cedo, os nanotubos de carbono têm se revelado materiais promissores não só por suas propriedades eletrônicas únicas, suas propriedades físicas de um modo geral têm despertado bastante atenção [18, 19]. A grande excitação no meio científico causada pela descoberta do fulereno e dos nanotubos de carbono atingiu o seu ápice com a síntese do alótropo base de suas morfologias: o grafeno.

As bases teóricas que descrevem o comportamento eletrônico do grafeno já estavam estabelecidas desde o trabalho de Wallace [20]. Wallace foi o primeiro a calcular a estrutura de bandas para uma monocamada de grafite e a demonstrar que ela se comporta como um semicondutor de *gap* nulo, ou seja, que as bandas de valência e de condução se tocam em determinados pontos. Mais que isso, ele também apontou que, nas proximidades desses pontos, a relação de dispersão apresentava uma relação linear entre energia e momento. Por sua vez, a abordagem do contínuo centrada na equação de Dirac para a vizinhança desses pontos pode ser encontrada já no trabalho de Di Vincenzo e Mele [21] em uma tratamento para sistemas grafiticos de intercalação via aproximação de massa efetiva. No entanto, até recentemente os avanços alcançados nesse sentido eram todos de natureza teórica, uma vez que a estudada monocamada de grafite ainda não havia sido isolada em laboratório. O cenário estabelecido anteriormente à obtenção em laboratório do grafeno não fornecia grandes expectativas em relação a sua realização experimental. A existência de redes bidimensionais era considerada bastante improvável segundo as previsões teóricas de Landau e Peirls. De acordo com Landau [22], as flutuações térmicas gerariam na rede deslocamentos que se tornariam infinitos à medida que o tamanho da rede crescia e, assim, ela dificilmente poderia ser encontrada na natureza.

Em 2004, Novoselov *et al.* finalmente isolaram o grafeno em laboratório [23]. Eles obtiveram amostras grafiticas com algumas poucas camadas, incluindo uma monocamada, por uma técnica bastante simples de esfoliação mecânica. A técnica original consistia basicamente na retirada de camadas de uma amostra de grafite por um repetido processo de adesivação e remoção. Com um campo elétrico aplicado às amostras, efetuaram as primeiras medições das propriedades de transporte do grafeno. Posteriormente, tal processo de fabricação foi aprimorado por uma técnica conhecida como clivagem mecânica, que consistia em friccionar duas camadas de um determinado material, resultando na produção de flocos contendo poucas camadas [24]; além do grafeno, monocamadas de outros materiais também foram isoladas por esse processo, tais como BN, NbSe₂, MoS₂ e Bi₂Sr₂CaCu₂O_x. Por complemento, também merecem nota a fabricação de grafeno crescido epitaxialmente em substratos de SiC por Berger *et al.* [25] e a produção de amostras suspensas livres de substratos por Meyer *et al.* [26].

Algumas das já bem conhecidas propriedades eletrônicas peculiares do grafeno foram observadas experimentalmente logo cedo pelo grupo de Novoselov e Geim [27]. Em tal

trabalho, é reportada a observação experimental de um comportamento atípico de elétrons como partículas relativísticas sem massa. As medições indicavam fenômenos incomuns tais como a existência de um efeito Hall quântico inteiro anômalo e uma condutividade exibindo um valor mínimo finito mesmo quando a densidade de partículas era zero, que eram compatíveis com tal comportamento. Desde então, uma robusta literatura sobre os mais variados aspectos físicos do grafeno vem sendo estabelecida na área; a mesma traz vários artigos de revisão contendo boa parcela das contribuições mais relevantes [28, 29, 30, 31], e nos quais uma exposição mais geral sobre o assunto pode ser encontrada. Hoje, uma década depois, o conhecimento científico acerca das particularidades do grafeno encontra-se em estado relativamente avançado e as primeiras aplicações começam a virar realidade. Sabe-se que o grafeno é cenário para uma gigantesca diversidade de fenômenos de natureza quântica e que suas propriedades são de extrema importância para a física teórica e para a nanotecnologia. Todos esses aspectos elevaram o grafeno à posição de um dos mais notáveis e promissores materiais já estudados e, hoje, ele ocupa um espaço único na física da matéria condensada.

A partir de 2004, nanoestruturas de grafeno como nanofitas e nanoanéis passaram a receber grande atenção da comunidade científica. Particularmente, nanofitas de grafeno têm alcançado grande notoriedade em virtude das propriedades que emergem do confinamento transversal característico de sua descrição e das possibilidades de aplicação das mesmas em dispositivos eletrônicos à base de grafeno [32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39]. Neste contexto, características como a presença de um *gap* de energia que decresce com o aumento da largura da fita são de particular interesse em certos dispositivos [35, 36, 37, 38, 39]. Uma outra particularidade notável típica de tais nanoestruturas é o aparecimento de estados de borda em nanofitas com bordas *zigzag* [32, 33]. Esta classe de nanofitas apresenta estados eletrônicos que se localizam nas bordas da fita e mostra um comportamento tipicamente metálico, com ausência de *gap*. Além disso, nanofitas com bordas *armchair* ainda exibem uma incomum dependência entre a largura e a natureza eletrônica, alternando entre os regimes metálico e isolante de acordo com suas dimensões físicas [32, 33]. Diversas outras propriedades físicas relevantes e aplicáveis do ponto de vista tecnológico têm aparecido tanto em investigações teóricas quanto experimentais.

Por outro lado, anéis de grafeno têm se revelado nanoestruturas capazes de exibir fenômenos quânticos tipicamente observados em anéis metálicos mesoscópicos. Recentemente, a manifestação de fenômenos quânticos de interferência como o aparecimento de oscilações Aharonov-Bohm foi observada experimentalmente em tais nanoestruturas [40, 41, 42], tornando-os ainda mais atraentes de um ponto de vista de aplicação. Devido ao interesse em suas propriedades eletrônicas, anéis quânticos de grafeno estão sendo produzidos e estudados sob os mais variados arranjos experimentais e modelos teóricos [40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50]. Neste contexto, além de sua utilidade de natureza eletrônica, como, por exemplo, a origem de correntes persistentes, o efeito Aharonov-Bohm

[51] aparentemente também exerce um papel importante em relação à física do grafeno. Recentemente, a introdução e a manipulação de um fluxo Aharonov-Bohm em anéis demonstraram ser um possível caminho para quebrar e controlar a degenerescência de vale no grafeno [43, 44], o que pode ser bastante interessante do ponto de vista experimental.

Os primeiros estudos em nanoestruturas de grafeno com um viés topológico antecedem a descoberta deste material. Após a produção de cones de grafite em 1993 por Krishnan *et al.* [52], Lammert e Crespi [53] propuseram o primeiro modelo teórico descrevendo cones construídos a partir de uma monocamada de grafite com uma abordagem topológica. Neste tratamento, o cone é descrito como uma folha de grafeno na presença de um defeito topológico conhecido como disclinação, cuja influência efetiva sobre o sistema se manifesta de um tal modo que sua contribuição pode ser equivalentemente modelada incorporando ao mesmo um fluxo fictício que se comporta como um fluxo Aharonov-Bohm. Tal modelo foi empregado anteriormente para descrever moléculas de fulereno por González, Guinea e Vozmediano [54, 55]. Lá, moléculas de fulereno eram concebidas como provenientes de uma inserção conjunta de defeitos topológicos responsável pela geração de curvatura no grafeno, sendo formadas, especificamente, a partir da adição de anéis pentagonais a suas redes hexagonais típicas; e os efeitos da topologia na formulação do contínuo eram simulados por uma ação de campo associada a um monopólo magnético. Neste viés particular, inúmeras contribuições têm sido dadas abordando o assunto sob algumas configurações físicas particulares. Lammert e Crespi [56] apresentaram uma classificação de cones com duas disclinações pentagonais em termos do fluxo fictício; no mesmo trabalho, também calcularam os níveis de Landau para o caso com uma disclinação genérica. Outras contribuições relevantes foram dadas por Cortijo e Vozmediano [57, 58]. Também, formulações puramente geométricas para o problema têm sido abordadas por alguns autores [59, 60]. Recentemente, o problema de impurezas de Coulomb no grafeno [61, 62, 63, 64, 65] tem sido investigado em tal cenário por Chakraborty *et al.* [66, 67].

Nesse mesmo viés, nanoanéis com a topologia da faixa de Möbius têm sido bastante explorados em trabalhos recentes. Muito antes das primeiras abordagens teóricas tratando de faixas de Möbius à base de grafeno, porém, materiais incorporando o seu aspecto topológico característico já haviam sido pontualmente estudados e algumas contribuições anteriores tanto de natureza teórica quanto experimental podem ser encontradas na literatura da física da matéria condensada. Contudo, a noção de uma topologia de Möbius associada a moléculas cíclicas, proposta teoricamente por Heilbronner [68], foi a precursora no assunto em âmbito científico. Uma série de contribuições teóricas foi dada na área da química [69, 70, 71, 72] até que, em 2003, uma molécula estável com tal topologia foi sintetizada em laboratório e as predições de Heilbronner foram confirmadas [73].

Apenas recentemente o interesse teórico em efeitos da topologia de Möbius sobre a física de materiais foi despertado. Em 2002, Tanda *et al.* [74] sintetizaram cristais de nióbio e selênio (NbSe_3) que exibiam uma topologia de Möbius. Em tal artigo, são

descritos três diferentes arranjos nos quais a estrutura pode ser encontrada: um anel ordinário, uma faixa de Möbius e uma fita mais exótica em forma de oito; todas elas relacionadas às condições de crescimento da estrutura. Embora uma certa dificuldade na produção da estrutura com o aspecto de Möbius seja descrita, as condições que permitem sua síntese e os mecanismos que geram a topologia são razoavelmente bem determinados. Com isso, é aberta a possibilidade de fabricação de inúmeras outras estruturas compostas por materiais diversos. Há algumas contribuições teóricas descrevendo sistemas físicos que incorporam tal topologia que são anteriores ao trabalho desenvolvido pelo grupo de Tanda [75, 76, 77], mas não há dúvidas de que a realização experimental, a obtenção em laboratório de cristais sob a forma de faixas de Möbius foi a grande responsável por intensificar o interesse dos pesquisadores da área.

Algumas propriedades físicas interessantes exibidas por sistemas em faixas de Möbius têm sido relatadas nos últimos anos. Fenômenos associados diretamente à sua natureza topológica têm sido cada vez mais descritos na literatura e a chance de sua utilização em nanodispositivos eletrônicos tem se tornado cada vez mais concreta. De grande importância, como exemplo, é a investigação teórica das propriedades de correntes persistentes em anéis quânticos sob a forma de faixas de Möbius realizada por Yakubo, Avishai e Cohen [78], ainda antes da descoberta do grafeno. Uma abordagem de sistema confinante de Schrödinger nessa mesma direção foi empregada por Martins Ferreira *et al.* [79]. Igualmente, propriedades tais como a supressão da transmissão em anéis de Möbius, encontradas no trabalho de Zhao *et al.* [80] e mais tarde também encontrada em sistemas de grafeno [81], são também de extrema relevância.

Particularmente, investigações teóricas nesse sentido têm se demonstrado bastante frutíferas em relação ao grafeno. Os efeitos de tal topologia em sistemas gráficos foram logo cedo abordadas teoricamente por Wakabayashi e Harigaya [82]. Recentemente, Guo *et al.* [81] estudaram as propriedades eletrônicas de faixas de Möbius com bordas *zigzag* e demonstraram que elas se comportam como isolantes topológicos. No trabalho é mostrado que, na presença de um campo elétrico transversal, há uma densidade de estados de borda não nula nos pontos de Dirac e que, assim, não há um *gap* de energia como nos anéis ordinários. Este é um resultado de grande relevância quando consideramos a extensa e crescente literatura sobre os aspectos físicos e as promissoras possibilidades dos isolantes topológicos. Em uma outra direção, mais recentemente cálculos de primeiros princípios revelaram importantes aspectos estruturais em faixas de Möbius de grafeno de largura variável [83]. Propriedades eletrônicas, óticas e estruturais de sistemas análogos também têm sido estudadas por Caetano *et al.* [84, 85].

Nesta tese, investigamos as propriedades físicas de nanoestruturas de grafeno sob influência de aspectos topológicos e geométricos em configurações livres ou na presença de interações com campos externos. Particularmente, estudamos o problema do confinamento de férmions de Dirac sem massa em faixas de Möbius e nanofitas de grafeno

ao mesmo tempo que investigamos formalmente o aparato matemático que caracteriza a descrição. Configurações que incorporam aspectos como geometria de borda e interface, o efeito Aharonov-Bohm e topologia são cuidadosamente abordadas. Em adição, investigamos o comportamento eletrônico do grafeno com *gap* na presença de defeitos topológicos e interagindo com campos de Coulomb e campos magnéticos uniformes.

Inicialmente, é realizada uma breve introdução à física do grafeno, destacando-se os pontos fundamentais para a construção e a compreensão dos assuntos tratados nos capítulos seguintes. É dada uma breve prescrição do desenvolvimento que leva ao limite do contínuo no grafeno e os principais elementos que serão usados em nosso tratamento são introduzidos. À exceção deste capítulo de revisão, a totalidade da tese versa sobre trabalhos inéditos provenientes da pesquisa de doutorado do presente autor, sendo escritos, em essência, a partir dos esboços dos artigos para publicação.

O primeiro trabalho trata do confinamento de partículas de Dirac sem massa em faixas de Möbius. Em uma abordagem topológica, é proposto um modelo de confinamento para férmions relativísticos sem massa livres via adoção de condições de contorno, a partir do qual investigamos as propriedades físicas do sistema, assim como suas implicações diretas no grafeno. O trabalho seguinte aborda os aspectos gerais do efeito Aharonov-Bohm em tal cenário. Partindo do modelo proposto, são estudados os efeitos da presença de um fluxo Aharonov-Bohm nas propriedades eletrônicas dessas faixas de Möbius. A dependência do fluxo no espectro energético e as correntes persistentes são analisadas para esses anéis quânticos. No terceiro trabalho, adicionamos à nossa descrição de sistemas confinantes de Möbius o papel que pode ser exercido pela geometria das bordas. Especificamente, descrevemos faixas de Möbius com borda *zigzag* e *armchair* propondo conjuntos de condições de contorno que incorporam compativelmente a informação a respeito da natureza da borda e da interface ao confinamento. Estudamos o comportamento eletrônico de tais estruturas, examinando as propriedades dos estados de *bulk* e de borda, para o caso *zigzag*, e certas características da estrutura de bandas do caso *armchair*. No quarto trabalho, investigamos o comportamento de nanofitas com bordas *zigzag* na presença de campos elétricos uniformes no regime de campo fraco. Resolvemos o problema de Dirac em tal configuração e caracterizamos o sistema desejado através da imposição de condições de contorno apropriadas. Estudamos como a presença de um campo elétrico transversal pode modificar as propriedades de tais nanofitas, observando como se apresentam os estados de borda e de *bulk* nessa configuração. Além disso, discutimos como tal influência pode ser refletida na descrição de faixas de Möbius construídas a partir das mesmas. No quinto, concentramo-nos especificamente no formalismo matemático que rege o problema do confinamento de partículas de Dirac sem massa em nanoestruturas de grafeno. Tratamos das extensões auto-adjuntas do operador de Dirac 2D do grafeno e estabelecemos conjuntos de condições de contorno acessíveis a sistemas confinantes grafiticos, tais como nanofitas, nanoanéis e faixas de Möbius. Na sequência, focamos no problema de nanofitas com bor-

das *armchair* no limite de baixas energias. Demonstramos que o conjunto de condições de contorno vigente para a descrição de tais nanoestruturas representa um modelo formalmente consistente e que o Hamiltoniano de Dirac do grafeno incorporando tal conjunto caracteriza-se como um operador verdadeiramente auto-adjunto. Além disso, analisamos um Hamiltoniano problemático para o qual tais condições não são permitidas. Por fim, no último é realizado um estudo à parte do segmento central do presente trabalho de tese. É válido salientar que o referido capítulo não integrava originalmente o corpo pensado para esta tese e, portanto, não há uma relação tão estreita entre o conteúdo dos capítulos que o precedem e o conteúdo do mesmo, apesar de todos se referirem à física de nanoestruturas de grafeno. Por razões que excedem o escopo desta introdução, fez-se necessário introduzir o trabalho já publicado. Sendo assim, o presente autor considerou razoável finalizar a tese com o mesmo. Apesar de não planejado para a estrutura original, não há uma perda considerável na linha de conteúdo, pois há muitos aspectos que podem ser postos em paralelo na tentativa de clarear o nosso entendimento sobre o comportamento quântico de partículas de Dirac em nanoestruturas de grafeno, de um modo geral. Lá, são investigadas as propriedades físicas de partículas de Dirac com massa em nanocônes de grafeno na presença de interações Coulombianas e com campos magnéticos uniformes. Os resultados apresentados lá podem ser encontrados na publicação [86].

Ao final, encerramos a presente tese com um último capítulo dedicado às considerações gerais acerca do trabalho desenvolvido, onde discorremos em síntese sobre os principais resultados encontrados ao longo da pesquisa e brevemente apontamos para algumas perspectivas gerais a respeito de questões em aberto e possíveis futuras linhas de investigação.

2 Breve introdução à descrição do contínuo no grafeno

O grafeno é uma rede bidimensional formada por átomos de carbono dispostos hexagonalmente, como mostrado na Figura 1. Tal disposição provém de ligações formadas a partir de orbitais em uma hibridização sp^2 . Cada átomo de carbono possui um orbital s e três orbitais p que se hibridizam para formar três orbitais sp^2 a partir dos quais são produzidas ligações σ com outros três átomos, ao mesmo tempo em que um orbital p é preservado. Estas ligações σ são fortes e garantem a estabilidade e a rigidez da rede. Por outro lado, os orbitais p não hibridizados, que são perpendiculares ao plano, hospedam os elétrons de condução da rede e são, portanto, os responsáveis pelas propriedades eletrônicas do grafeno. No grafite, a partir desses orbitais é produzida uma fraca interação de van der Waals com as camadas de grafeno adjacentes. Aqui, vamos considerar apenas transições entre tais orbitais não hibridizados.

Usualmente, tal rede é descrita em termos de duas subredes triangulares superpostas, tipicamente denominadas A e B . Nela, define-se um célula unitária composta por dois átomos, sendo um pertencente à subrede A e outro à subrede B . Definimos também os vetores de rede

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

e os vetores

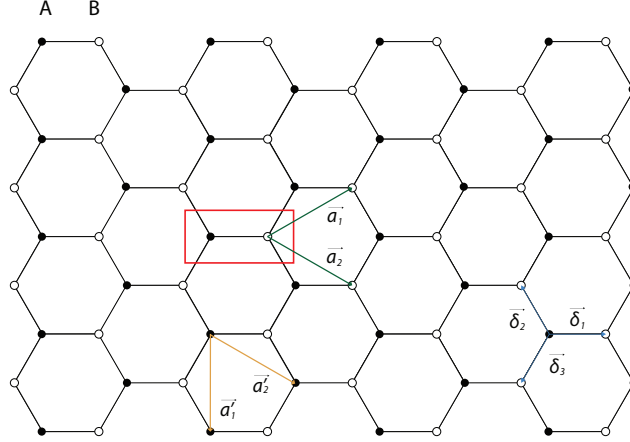
$$\vec{\delta}_1 = a_0 (1, 0), \quad \vec{\delta}_2 = a_0 \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \text{ e } \vec{\delta}_3 = a_0 \left(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad (2.2)$$

responsáveis por conectar os sítios localizados na subrede A aos seus primeiros vizinhos na subrede B ; a_0 é a distância entre átomos de carbono na rede. Todos estes elementos podem ser vistos na Figura 1. A partir destas definições, podemos empregar a descrição matemática tradicional baseada em uma aproximação *tight-binding* para primeiros vizinhos. Nesta aproximação, o Hamiltoniano para o sistema pode ser escrito da seguinte forma:

$$H = \tau \sum_i \sum_j a(\vec{r}_i) b^\dagger(\vec{r}_i + \vec{\delta}_j) + a^\dagger(\vec{r}_i) b(\vec{r}_i + \vec{\delta}_j), \quad (2.3)$$

onde τ (≈ -3 eV) representa a probabilidade de tunelamento entre os orbitais e os operadores a (a^\dagger) e b (b^\dagger) são os operadores de criação (aniquilação) agindo sobre as subredes A e B , respectivamente. Dessa forma, o primeiro termo ab^\dagger representa a criação de um elétron em um sítio A simultaneamente à aniquilação de um elétron em B , isto é, corresponde à transferência de um elétron de um sítio B para um sítio A . Analogamente, o segundo descreve o tunelamento de A para B .

Figura 1 – Rede hexagonal do grafeno



1 - Rede hexagonal do grafeno. Os sítios pretos e brancos representam as subredes A e B , respectivamente. A região delimitada em vermelho corresponde à célula unitária, os vetores \vec{a}_1 e \vec{a}_2 são os vetores da rede e os vetores $\vec{\delta}_1$, $\vec{\delta}_2$ e $\vec{\delta}_3$ conectam os sítios A aos seus primeiros vizinhos. Os vetores \vec{a}'_1 e \vec{a}'_2 representam uma escolha alternativa para os vetores de rede.

Com este esquema, migramos para o espaço dos momentos por meio de uma transformada de Fourier definida como

$$a(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \bar{a}(\vec{k}) \quad (2.4)$$

e

$$b(\vec{r}') = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}'} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} \bar{b}(\vec{k}'), \quad (2.5)$$

onde N é o número de células unitárias. Substituindo (2.4) e (2.5) no Hamiltoniano (2.3), podemos escrever

$$H = \frac{\tau}{N} \sum_{i,j} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} e^{-i\vec{k}'\cdot(\vec{r}_i+\vec{\delta}_j)} \bar{a}(\vec{k}) \bar{b}^\dagger(\vec{k}') + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{r}_i+\vec{\delta}_j)} \bar{a}^\dagger(\vec{k}) \bar{b}(\vec{k}') \right] \quad (2.6)$$

$$= \frac{\tau}{N} \sum_{i,j} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \left[e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{\delta}_j} \bar{a}(\vec{k}) \bar{b}^\dagger(\vec{k}') + e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{\delta}_j} \bar{a}^\dagger(\vec{k}) \bar{b}(\vec{k}') \right] \quad (2.7)$$

$$= \frac{\tau}{N} \sum_j \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \left[\delta_{\vec{k}\vec{k}'} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{\delta}_j} \bar{a}(\vec{k}) \bar{b}^\dagger(\vec{k}') + \delta_{\vec{k}\vec{k}'} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{\delta}_j} \bar{a}^\dagger(\vec{k}) \bar{b}(\vec{k}') \right] \quad (2.8)$$

$$= \tau \sum_j \sum_{\vec{k}} \left[e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_j} \bar{a}(\vec{k}) \bar{b}^\dagger(\vec{k}) + e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_j} \bar{a}^\dagger(\vec{k}) \bar{b}(\vec{k}) \right]. \quad (2.9)$$

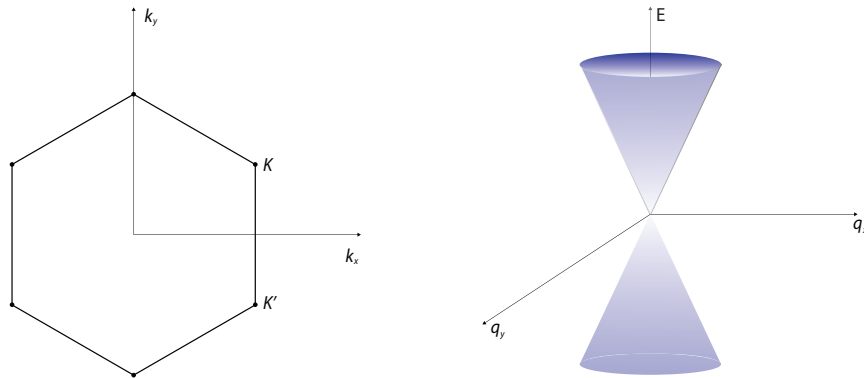
Dessa forma, escrevemos em forma matricial

$$H = \sum_{\vec{k}} \begin{pmatrix} \bar{a}^\dagger(\vec{k}) \\ \bar{b}^\dagger(\vec{k}) \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 0 & \tau \sum_j e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_j} \\ \tau \sum_j e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_j} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{a}(\vec{k}) \\ \bar{b}(\vec{k}) \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

A diagonalização da matriz fornece a relação

$$E^2 = \tau^2 \left| e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_2} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_3} \right|^2, \quad (2.11)$$

Figura 2 – Primeira zona de Brillouin e estrutura de bandas nas proximidades dos pontos de Dirac



2 - À esquerda, pontos \vec{K} e \vec{K}' localizados nos vértices da primeira zona de Brillouin. À direita, estrutura de bandas nas proximidades dos pontos \vec{K} e \vec{K}' .

a partir da qual, com a substituição dos vetores $\vec{\delta}_1$, $\vec{\delta}_2$ e $\vec{\delta}_3$ definidos acima, finalmente encontramos a relação de dispersão:

$$E^2 = \tau^2 \left[3 + 2 \cos(\sqrt{3}a_0k_y) + 4 \cos\left(\frac{3}{2}a_0k_x\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}a_0k_y\right) \right]. \quad (2.12)$$

Tal relação nos dá a estrutura de bandas do grafeno. Ela descreve duas regiões permitidas, uma para cada sinal da energia, conhecidas como bandas de valência e de condução. A banda de valência, que corresponde à região com $E < 0$, abrange os estados ocupados por elétrons. Por outro lado, a banda de condução, com $E > 0$, está completamente vazia.

Diante da relação (2.12), podemos identificar dois pontos que têm uma fundamental importância para o grafeno. São eles $\vec{K} = \left(\frac{2\pi}{3a_0}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a_0}\right)$ e $\vec{K}' = \left(\frac{2\pi}{3a_0}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a_0}\right)$, os pontos onde a relação de dispersão acima é zero, ou seja, pontos onde as bandas de valência e de condução se encontram. Há, na realidade, um conjunto de seis pontos no espaço dos momentos para os quais a relação acima se anula, mas eles se reduzem a apenas dois não equivalentes, a saber \vec{K} e \vec{K}' . Estes pontos estão localizados nos vértices de uma região conhecida como primeira zona de Brillouin do espaço recíproco, que está esquematizada na Figura 2.

Sem dúvida, uma das características mais interessantes relativamente ao grafeno diz respeito à física nas proximidades desses pontos, ao comportamento eletrônico no limite de baixas energias. Este aspecto pode ser visualizado escrevendo $E(\vec{k})$ para pequenos momentos em torno do ponto \vec{K} , isto é, tomando $\vec{k} = \vec{K} + \vec{q}$, com $\vec{q} \ll \vec{K}$ o momento relativo a \vec{K} . Efetuando-se tal substituição e desprezando os termos de maior potência em \vec{q} , a relação de dispersão finalmente escreve-se como

$$E \approx \pm v_F q, \quad (2.13)$$

onde $v_F = \frac{3}{2}\tau a_0$ é a velocidade de Fermi. Como podemos observar, neste regime a energia apresenta uma relação linear com o momento similar à relação de dispersão relativística

para partículas de massa nula; e, portanto, a estrutura de bandas é cônica nas proximidades de tal ponto, o que está representado na Figura 2. Sendo assim, é possível descrever os elétrons nesse regime como partículas sem massa propagando-se com uma velocidade da luz efetiva de aproximadamente 10^6 m/s, e cujo comportamento dinâmico é governado por uma equação de Dirac particular. O mesmo comportamento é encontrado para \vec{K}' . Por essa razão, tais pontos são comumente chamados de pontos de Dirac. Com isso, neste limite, o Hamiltoniano (2.10) pode ser posto sob a seguinte forma:

$$H = v_F \sum_{\vec{q}} \begin{pmatrix} \bar{a}^\dagger(\vec{q}) \\ \bar{b}^\dagger(\vec{q}) \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y \\ q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{a}(\vec{q}) \\ \bar{b}(\vec{q}) \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

uma vez que a diagonalização de tal matriz nos fornece os autovalores $E = \pm v_F \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$. Esta expressão pode ainda ser escrita da seguinte forma:

$$H = \sum_{\vec{q}} \Psi^\dagger (v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{q}) \Psi, \quad (2.15)$$

onde $\Psi(\vec{q}) = (a(\vec{q}), b(\vec{q}))^T$ e $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ são as matrizes de Pauli¹, a saber

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{e} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Por fim, retornamos ao espaço das coordenadas por meio de uma nova transformada de Fourier. O detalhe é que, como tomamos um limite onde $\vec{q} \ll \vec{K}$ e \vec{K} é inversamente proporcional a a_0 , a distância típica entre átomos na rede agora é muito pequena e o vetor posição pode ser visto como uma variável contínua. Assim, todas as somas em \vec{r} devem ser substituídas por integrais. Caracteriza-se, dessa forma, o limite do contínuo. Com a nova transformada, então, temos:

$$H = -iv_F \int \Psi^\dagger(\vec{r}) \left(\sigma_x \frac{\partial}{\partial x} + \sigma_y \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi(\vec{r}) d^2\vec{r}, \quad (2.17)$$

e agora os elétrons passam a ser regidos pela equação de Dirac

$$-iv_F \left(\sigma_x \frac{\partial}{\partial x} + \sigma_y \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi(x, y) = E\Psi(x, y), \quad (2.18)$$

onde $\Psi = (\psi_A, \psi_B)^T$ é a função de onda que descreve o comportamento quântico dos elétrons no regime de baixas energias, interpretada tal como no aparato usual que rege a teoria quântica, com as componentes spinoriais ψ_A e ψ_B associadas às subredes A e B , respectivamente. Mais detalhes acerca da química e da formulação matemática do grafeno podem ser encontradas, por exemplo, nas Referências [29, 87, 88, 89].

¹ Complementarmente, destacamos que com alguma frequência ao longo desta tese é também empregada uma versão 2×2 da matriz β da representação de Dirac canônica (matriz normalmente associada ao termo de massa da equação de Dirac 4×4), a qual coincide com a terceira matriz de Pauli, a saber σ_z . Nesta tese, ambas as notações são empregadas designando a mesma matriz.

É não apenas instrutivo, mas ainda oportuno acrescentar que, muito embora a estrutura de bandas seja invariável e, conseqüentemente, a existência de um formalismo de Dirac seja intrínseca, sua localização no espaço dos momentos é relativa e varia de acordo com a orientação da folha de grafeno e seus elementos de rede. Sendo assim, a localização dos pontos de Dirac por si só não tem um papel relevante na descrição e pode ser livremente escolhida a fim de atender a requisitos particulares. Particularmente em relação a esta tese, os capítulos que seguem em sua maioria deixam não especificada ou arbitrária tal localização, porque, desde que a compatibilidade entre a orientação da folha e a forma em que expressamos as condições na fronteira seja assumida, não é realmente necessário assinalar tais pontos. Por outro lado, por razões de conveniência e simplicidade, outros dois capítulos empregam uma dada orientação na qual tais pontos deitam-se sobre o eixo k_y , isto é, $K_y = K'_y = 0$, escrevendo-se precisamente como $\vec{K} = (\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0}, 0)$ e $\vec{K}' = (-\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0}, 0)$. Esta escolha, por exemplo, pode ser alcançada considerando-se uma rotação anti-horária de 90° da rede - correspondendo a um arranjo onde a assinatura *armchair* está ao longo da direção y e a *zigzag*² está ao longo da x - e tomando uma escolha conveniente para os vetores de rede tal como aquela ilustrada pelos vetores \vec{a}'_1 e \vec{a}'_2 da Figura 1. Tal configuração se mostrará, como veremos, especialmente útil no Capítulo 5 e no Capítulo 8, quando aspectos associados aos vales revelam-se fundamentais na natureza das condições de contorno. Nos outros capítulos, indicações quanto à localização não são de fato especificadas, implicitamente assumida, portanto, uma consistência com a geometria de fronteira desejada e com a forma das condições de contorno tomadas.

² Tal nomenclatura é tipicamente usada para designar o aspecto geométrico de borda em nanoestruturas de grafeno. O termo “armchair” traduz-se literalmente como “cadeira de braço”, e bordas com esta assinatura são aquelas cuja geometria remete a tal formato. Bordas *zigzag* são aquelas que apresentam um formato zigue-zague característico. A Figura 1 ilustra tais padrões de borda ao longo das direções horizontal e vertical, respectivamente. Não há razão maior para a escolha de não utilizar o termo traduzido no caso zigue-zague nesta tese, apenas a intenção de manter a coerência na nomenclatura.

3 Do confinamento de férmions de Dirac sem massa do grafeno em faixas de Möbius

Diante da possibilidade de trabalhar diretamente com a equação de Dirac e, consequentemente, com sistemas confinantes no âmbito da física do grafeno, neste capítulo é proposta uma investigação do problema do confinamento dos férmions de Dirac sem massa encontrados no grafeno em faixas de Möbius e suas implicações físicas mais imediatas.

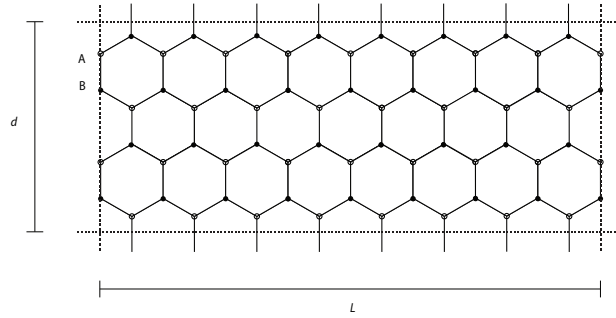
Na primeira parte, apresentamos uma breve descrição do problema, formulando uma construção mais formal do modo como ele se manifesta matematicamente, em que destacamos o papel da teoria dos operadores auto-adjuntos em espaços de Hilbert na essência do problema. Na seção seguinte, propomos e desenvolvemos um modelo para investigar o problema, do qual decorrem pelo menos três possíveis abordagens, com características físicas distintas, e obtemos a solução analiticamente. Por fim, colocamos a essência dos resultados em contato com o aparato matemático da teoria do grafeno propriamente dita, estabelecendo uma possível interpretação sobre o modo como as nossas soluções refletem nesse sentido.

3.1 Aspectos matemáticos do problema

Faixas de Möbius são objetos geométricos únicos que têm aparecido recorrentemente na literatura científica desde o trabalho pioneiro de Heilbronner [68]. Uma superfície não orientável exibindo topologia não trivial, uma faixa de Möbius pode ser construída a partir de uma fita bidimensional plana identificando suas extremidades após a torção de uma delas por um ângulo de 180° . Embora alguns aspectos particulares não possam ser determinados sem empregar métodos geométricos gerais, tal caráter topológico peculiar pode ser inserido dentro de um domínio quântico impondo à função de onda do problema condições de contorno adequadas, o que corresponde à descrição tradicional de sistemas confinantes na mecânica quântica. Dessa forma, entidades físicas descritas como tal podem ser chamadas de faixas de Möbius topológicas. Um enfoque neste sentido não é o propósito desta seção, e uma breve exposição complementar pode ser encontrada no Apêndice A.

No caso não relativístico, onde lidamos com a equação de Schrödinger, o confinamento de Möbius é caracterizado assumindo que a função de onda é nula nas extremidades de um poço unidimensional, transversalmente, e em seguida impondo a condição de Möbius na direção longitudinal [78, 79]. Desse modo, obtemos um sistema físico cuja caracterização nos remete ao confinamento de um elétron em uma faixa de Möbius e a solução, neste caso, se apresenta sem problemas. No entanto, adotando um tratamento análogo para o caso relativístico, deparamo-nos já no processo de confinamento unidimensional com o

Figura 3 – Região bidimensional

3 - Faixa de comprimento L e largura d .

problema da solução trivial [90], que nos mostra a necessidade de uma nova maneira de modelar o problema. Essa dificuldade surge como manifestação do fato de que o Hamiltoniano de Dirac, com um domínio que incorpora essas condições de contorno em particular, não é um operador verdadeiramente auto-adjunto. Sendo assim, no caso relativístico, o problema se traduz pela procura por extensões auto-adjuntas capazes de reproduzir um cenário físico que corresponda ao sistema que nos propomos a investigar.

Do ponto de vista formal, o nosso problema consiste em resolver a equação de Dirac livre

$$v_F (\vec{\sigma} \cdot \vec{q}) \psi = E\psi, \quad (3.1)$$

onde \vec{q} é o momento relativo ao ponto de Dirac e v_F é a velocidade de Fermi, e impor à solução geral um determinado conjunto de condições de contorno, compatíveis com a situação física proposta, tal que o operador de Dirac livre ($T, D(T)$) seja verdadeiramente auto-adjunto. Aqui, T é o operador formal

$$T = -iv_F \left(\sigma_x \frac{\partial}{\partial x} + \sigma_y \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (3.2)$$

e $D(T)$ é o seu domínio, no qual devem estar introduzidas as condições de contorno que caracterizarão a configuração. Como região do plano com a qual vamos trabalhar e para a qual deverão ser impostas as condições adequadas ao problema, tomamos a seguinte:

$$R = \{(x, y) \mid x \in [0, L] \text{ e } y \in [0, d]\}. \quad (3.3)$$

Esta região define uma faixa de comprimento L e largura d , como pode ser visto na Figura 3. Portanto, por meio da imposição de conjuntos apropriados de condições de contorno ao spinor de Dirac acima, a partir desta região podemos descrever sistemas confinantes gerais no âmbito do grafeno, tais como nanofitas e nanoanéis. Em particular, a topologia de Möbius pode ser introduzida por meio de condições de contorno longitudinais capazes de codificar tal peculiar periodicidade com torção; sendo assim, capazes de carregar as características que vão nos permitir observar como nanoanéis de grafeno respondem fisicamente sob tal influência. A partir da próxima seção, dentro deste esquema

apresentamos um caminho para tratar o problema à parte de qualquer prova relativa a *self-adjointness* do operador em questão, admitindo por hipótese que tal abordagem nos levará a uma solução exata para o problema, e que ela nos permitirá elaborar conjecturas a respeito dessa questão.

3.2 Solução do problema

Como ponto de partida, levando em consideração a já bem conhecida solução livre da equação de Dirac e as características do tipo de confinamento que desejamos, tomamos o seguinte *Ansatz*:

$$\psi(x, y) = \left[\left(\frac{1}{\frac{v_F(q_x + iq_y)}{E}} \right) \mathcal{K}_1 e^{iq_y y} + \left(\frac{1}{\frac{v_F(q_x - iq_y)}{E}} \right) \mathcal{K}_2 e^{-iq_y y} \right] e^{iq_x x}, \quad (3.4)$$

onde \mathcal{K}_1 e \mathcal{K}_2 são constantes a serem determinadas. Para configurar o sistema físico em questão, o primeiro passo é caracterizar matematicamente o confinamento transversal do férmion, definindo um poço unidimensional na direção y . Para isso, recorreremos a um típico artifício já empregado para descrever desde partículas de Dirac em sistemas confinantes usuais [91] até excitações de baixas energias em nanoestruturas de grafeno [92, 93], bem conhecido do programa de Berry e Mondragon para neutrinos [94] e originalmente encontrado no *MIT bag model* [95, 96, 97]. Este método consiste basicamente na introdução de um potencial V via acoplamento escalar, como um termo de massa, que aqui definimos da seguinte forma:

$$V(y) = \begin{cases} M, & y < 0 \\ 0, & 0 \leq y \leq d \\ M, & y > d \end{cases}, \quad (3.5)$$

e na adoção de um conjunto particular de condições de contorno responsável pela caracterização matemática do confinamento em âmbito relativístico. A importância de trabalhar com esse tipo de acoplamento, no caso da equação de Dirac, reside no fato de que ele evita o paradoxo de Klein [98]. Em mecânica quântica relativística, quando introduzimos barreiras de potencial por meio de um acoplamento usual, se as barreiras excedem um determinado valor crítico, então passamos para um nível em que temos que levar em consideração a possibilidade de criação espontânea de pares elétron-pósitron. O que ocorre é que, para este caso, estados associados a elétrons e estados associados a pósitrons passam a se superpor, de modo que não é mais necessária a introdução de uma energia adicional para criar um par elétron-pósitron, isto é, torna-se possível que pares sejam criados espontaneamente. Já quando efetuamos um acoplamento do tipo escalar, esse efeito é automaticamente suprimido, uma vez que os estados nunca se superpõem, e é justamente essa vantagem que justifica o seu emprego.

Posteriormente à introdução de tal potencial, tomamos então o limite $V \rightarrow \infty$ nas regiões fora do poço, o que nos garante que $\psi \rightarrow 0$ nessas regiões, e, por fim, impomos o seguinte conjunto de condições de contorno:

$$\pm i\beta\sigma_y\psi = \psi. \quad (3.6)$$

Estas condições garantem que a corrente de densidade de probabilidade seja nula nas extremidades $y = 0$ e $y = d$ do poço. Da imposição da primeira condição ao nosso spinor (3.4), obtemos a relação entre os coeficientes \mathcal{K}_1 e \mathcal{K}_2 :

$$\mathcal{K}_1 = -\frac{\lambda_2 - 1}{\lambda_1 - 1}\mathcal{K}_2, \quad (3.7)$$

onde $\lambda_1 = \frac{v_F(q_x + iq_y)}{E}$ e $\lambda_2 = \frac{v_F(q_x - iq_y)}{E}$. Já da outra condição e da relação acima, chegamos a

$$i \tan(q_y d) = \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\lambda_1 \lambda_2 - 1} \rightarrow \infty, \quad (3.8)$$

o que nos conduz à seguinte regra de quantização para q_y :

$$q_y = \frac{n\pi}{2d}, \quad (3.9)$$

com n ímpar. É importante observar que as relações (3.7) e (3.8), no limite $q_x \rightarrow 0$, estão em concordância com as expressões encontradas em [91] para o caso de uma partícula de Dirac confinada em uma caixa unidimensional. Finalmente, usando (3.7) e (3.9), reescrevemos o nosso *Ansatz* como

$$\psi(x, y) = 2\mathcal{K}_1 e^{i\frac{\theta}{2}} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{n\pi y}{2d} - \frac{\theta}{2}\right) \\ \cos\left(\frac{n\pi y}{2d} + \frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} e^{iq_x x}, \quad (3.10)$$

onde $\theta = \tan^{-1}(q_y/q_x)$. Uma vez realizado o confinamento na direção y da faixa, devemos nos preocupar com um meio de caracterizar o nosso sistema físico como uma faixa de Möbius. Antes de considerar a periodicidade própria de tais configurações, no entanto, para efeito comparativo vejamos como se comporta tal solução sob imposição de uma condição do tipo periódica, como em um anel ordinário. Neste caso, impomos ao spinor a seguinte condição:

$$\psi(0, y) = \psi(L, y). \quad (3.11)$$

Aqui, sem perda de generalidade, suprimimos a fase presente em sistemas periódicos gráficos como, por exemplo, em nanotubos de carbono [17, 18]. As duas componentes nos fornecem a mesma regra de quantização para q_x :

$$e^{iq_x L} = 1, \quad (3.12)$$

da qual obtemos seus valores discretos $q_x = \frac{m\pi}{L}$, com m par. Dessa forma, podemos escrever

$$E_{nm}^2 = v_F^2 \left[\left(\frac{m\pi}{L}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{2d}\right)^2 \right] \quad (3.13)$$

como espectro de energia, e as autofunções ψ_{nm} escrevem-se como acima por substituição destes mesmos valores discretos, o que significa que não há quaisquer restrições de domínio sobre a solução e nenhuma inconsistência matemática aparente é encontrada. Vemos, portanto, que o caso periódico é perfeitamente solucionável, com uma solução que emerge sem qualquer característica patológica, o que nos dá uma razão para acreditar que o mesmo deve valer para o caso de Möbius.

Partindo para o caso em questão, devemos impor condições de Möbius típicas na direção x . Para isso, tomamos

$$\psi(0, y) = \psi(L, d - y). \quad (3.14)$$

Impondo a condição à primeira componente do spinor, obtemos a seguinte relação:

$$\cos\left(q_y y - \frac{\theta}{2}\right) = (-1)^t \sin\left(q_y y + \frac{\theta}{2}\right) e^{iq_x L}, \quad (3.15)$$

com $t = \frac{n-1}{2}$. Da segunda componente, entretanto, encontramos:

$$\cos\left(q_y y + \frac{\theta}{2}\right) = (-1)^t \sin\left(q_y y - \frac{\theta}{2}\right) e^{iq_x L}, \quad (3.16)$$

que, tomada em conjunto com a equação (3.15), para $y = 0$, nos leva a um absurdo. Essa inconsistência na solução sugere que, talvez, o nosso operador não seja uma extensão auto-adjunta como supomos por hipótese. Por outro lado, essa dificuldade pode ser matematicamente contornada supondo que as equações (3.15) e (3.16) não são satisfeitas simultaneamente para todo y , ou seja, vamos admitir que, ao identificarmos as extremidades da faixa garantindo a periodicidade de Möbius, alguns valores de y serão proibidos. Sem nos preocuparmos, a princípio, com o significado físico desse comportamento anômalo, busquemos quantificar o que foi dito acima. De (3.15) e (3.16), obtemos a seguinte relação:

$$\frac{\sin\left(q_y y - \frac{\theta}{2}\right)}{\sin\left(q_y y + \frac{\theta}{2}\right)} = \frac{\cos\left(q_y y + \frac{\theta}{2}\right)}{\cos\left(q_y y - \frac{\theta}{2}\right)} \quad (3.17)$$

e a regra de quantização de q_x é dada pela equação

$$e^{-iq_x L} = (-1)^t \frac{\sin\left(q_y y + \frac{\theta}{2}\right)}{\cos\left(q_y y - \frac{\theta}{2}\right)}. \quad (3.18)$$

A expressão (3.17) é satisfeita para qualquer ângulo $q_y y$ múltiplo inteiro ímpar de $\frac{\pi}{4}$, isto é, para $q_y y = \frac{k\pi}{4}$, com k ímpar. Em outras palavras, essa relação nos conduz a uma expressão para os valores de y com os quais a condição de Möbius imposta logo acima é satisfeita:

$$y = \frac{k d}{n 2}. \quad (3.19)$$

De (3.19), já vemos, de imediato, que valores como $y = 0$ e $y = d$, facilmente descartados olhando para as relações (3.15) e (3.16), são de fato proibidos. Fundamentalmente, esse

resultado nos diz que um comportamento tipo Möbius da solução implica necessariamente uma seleção dos valores de y , ou seja, apenas para alguns determinados pontos ao longo da direção transversal da faixa o nosso spinor satisfaz a condição de Möbius.

Antes de iniciar uma análise mais específica acerca desta questão, olhemos mais alguns aspectos físicos e matemáticos inerentes à solução. Levando em conta os ângulos para os quais a expressão (3.17) é satisfeita, podemos escrever a relação (3.18) como

$$e^{-iq_x L} = (-1)^{t+l}, \quad (3.20)$$

onde $k = 2l + 1$, com l natural. Essa expressão nos permite escrever o espectro energético como:

$$E^2 = \begin{cases} v_F^2 \left[\left(\frac{m_1 \pi}{L} \right)^2 + \left(\frac{n \pi}{2d} \right)^2 \right], & \text{para } t+l \text{ ímpar} \\ v_F^2 \left[\left(\frac{m_2 \pi}{L} \right)^2 + \left(\frac{n \pi}{2d} \right)^2 \right], & \text{para } t+l \text{ par} \end{cases}, \quad (3.21)$$

para m_1 ímpar e m_2 par. De imediato, reconhecemos a expressão (3.13), do caso periódico, para o caso em que $t+l$ é par. Além disso, é fácil mostrar que a imposição de uma nova condição de Möbius - isto é, assumindo agora que $\psi(L, y) = \psi(2L, d - y)$ -, produz as seguintes relações:

$$\sin \left(q_y y + \frac{\theta}{2} \right) = (-1)^t \cos \left(q_y y - \frac{\theta}{2} \right) e^{iq_x L} \quad (3.22)$$

e

$$\sin \left(q_y y - \frac{\theta}{2} \right) = (-1)^t \cos \left(q_y y + \frac{\theta}{2} \right) e^{iq_x L}, \quad (3.23)$$

de modo que voltamos, em acordo com o já esperado, à expressão inicial para o spinor, reproduzindo o comportamento periódico associado a faixas de Möbius para quando $x \rightarrow x + 2L$. Isso faz com que as nossas expressões recaiam automaticamente naquelas relativas ao caso periódico encontradas anteriormente.

Finalmente, como tentativa paralela para propósitos de comparação, devotamos esta parte final a um breve olhar sobre como se comporta o presente modelo diante da imposição de um conjunto distinto de condições de Möbius, a saber

$$\psi_A(0, y) = \psi_B(L, d - y) \quad (3.24)$$

e

$$\psi_B(0, y) = \psi_A(L, d - y). \quad (3.25)$$

Uma condição semelhante aparece em [81], onde é realizado um tratamento via uma abordagem *tight-binding* para faixas com bordas *zigzag*. Tal condição tem um significado físico muito bem delineado em relação ao grafeno, o que será discutido mais adiante. Verificamos, porém, que as condições do *MIT bag model*, para o confinamento transversal, e as condições (3.24) e (3.25) não são compatíveis quando tomadas conjuntamente, apresentando resultados que conduzem a uma contradição matemática. Em outras palavras, as condições do *bag model* geram um confinamento transversal que impede a imposição de uma periodicidade de Möbius tal como acima.

3.3 Implicações físicas no grafeno

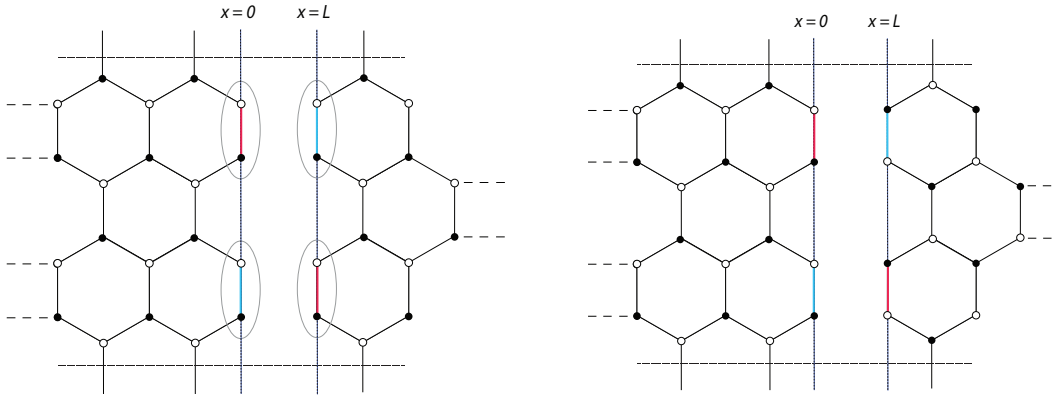
Tendo em vista o significado da representação spinorial relativamente à descrição matemática empregada para o grafeno no limite do contínuo, os resultados encontrados na seção anterior apontam alguns pontos interessantes. À luz da física do grafeno, a escolha de uma componente do spinor para a imposição de um comportamento de Möbius significa assumir uma periodicidade de Möbius associada a apenas uma das subredes, a saber A ou B . Em face dos nossos resultados, verificamos que há uma série de possíveis caminhos para tratar o problema. Cada possibilidade, por sua vez, corresponde a uma configuração física específica e com características bem definidas, que discutiremos a seguir.

Do primeiro conjunto proposto, caracterizado pelas condições (3.6) e (3.14) da seção anterior, apontamos três abordagens possíveis para modelar o problema em questão, cada uma incorporando uma descrição física particular relativamente ao grafeno e a geometria das bordas ao longo da direção x . A primeira consiste em tomar tal conjunto completo, onde reunimos as condições do *bag model*, para o confinamento transversal, e uma periodicidade de Möbius advinda da adoção integral da condição expressa em (3.14), isto é, tomada para as duas componentes spinoriais ao mesmo tempo. Aqui, destacamos que a adoção de tal conjunto se aplicaria a um cenário mais geral, entendendo o problema como o do confinamento usual de uma partícula relativística e deixando a identidade geométrica do grafeno e, mais especificamente, de suas bordas como uma questão mais secundária. Em outras palavras, o presente modelo é proposto para descrever sistemas confinantes relativísticos de uma maneira genérica, independentemente do significado que as condições de contorno possam assumir em relação ao grafeno. De qualquer modo, relativamente a este material, podemos ainda interpretar a periodicidade de Möbius implementada por (3.14) como característica de uma particularidade na identificação das bordas ao longo de x . Neste caso, não caracterizamos a faixa de Möbius pela identificação das subredes A e B presentes nas extremidades da faixa original, mas pela identificação das células compostas pelos átomos A e B . Ou seja, estabelecemos a célula A - B como unidade elementar para compor a interface, como ilustrado na Figura 4. Esta é uma interpretação plausível se considerarmos o fato de que, no limite do contínuo, a distância típica de rede é muito pequena e, assim, as condições de contorno não deveriam ser muito sensíveis à diferença entre as subredes, fornecendo uma boa aproximação para uma identificação através das células unitárias.

Alternativamente, podemos tomar uma periodicidade de Möbius associada a apenas uma das componentes spinoriais. Com as devidas modificações na orientação da faixa, do ponto de vista físico essa escolha corresponderia a uma situação onde as bordas a serem identificadas, na direção longitudinal, possuem átomos pertencentes a apenas uma subrede, a saber A ou B . Refirimo-nos a esse tipo de interface como do tipo *zigzag*-Klein.

Do outro conjunto, onde o caráter de Möbius é introduzido por meio de (3.24) e (3.25), verificamos a incompatibilidade entre as condições do *MIT bag model* e as condições que

Figura 4 – Interface de Möbius via células unitárias e cruzamento das subredes



4 - Formação de interfaces de Möbius por identificação das extremidades $x = 0$ e $x = L$ via células unitárias (esquerda) e cruzamento de subrede (direita). A correspondência em cor indica as linhas transversais associadas na composição da interface, representando a torção de 180° característica.

descrevem uma mistura das subredes na identificação das extremidades, exatamente como no caso de terminações com um padrão estritamente do tipo *armchair*. Tal situação também é ilustrada na Figura 4.

Um aspecto físico interessante que emerge do nosso modelo é a possibilidade de um *gap* atípico no espectro de energia. Sabe-se que o confinamento transversal presente em nanofitas de grafeno é responsável pelo aparecimento de um termo de massa no espectro energético, como já bem destacamos na introdução (ver as Referências [35, 36, 37, 38, 39]). Este *gap*, por sua vez, exhibe uma dependência da largura cuja expressão está relacionada à assinatura de borda e, conseqüentemente, à natureza das condições de contorno. Por uma perspectiva puramente teórica, definimos aqui a presença de um *gap* dual, a partir do qual é possível observar uma dependência vinculada não apenas às condições de contorno transversais, como usualmente encontrada, mas também associada à direção longitudinal. Ou seja, aqui encontramos uma resposta do *gap* relacionada com as condições de contorno na direção x . Tal aspecto pode ser observado tomando $m = 0$ e $n = 1$ ($n = 3$) para $l = 0$ ($l = 0$) na expressão para o espectro:

$$E_0 = \begin{cases} \pm \pi v_F \sqrt{\frac{1}{L^2} + \frac{9}{4d^2}}, & \text{para } t + l = 1 \\ \pm \pi v_F \frac{1}{2d}, & \text{para } t + l = 0 \end{cases}. \quad (3.26)$$

Assim, o termo $2\pi v_F \sqrt{\frac{1}{L^2} + \frac{9}{4d^2}}$ pode ser pensado como um *gap* para o primeiro caso e $\pi v_F/d$ para o segundo, caracterizando, assim, dois regimes eletrônicos que se distinguem de acordo com a paridade de $t+l$. Em outras palavras, podemos enxergar duas estruturas de banda isolantes coexistentes na faixa em que a paridade de $t+l$ determina em qual delas os estados eletrônicos estão localizados. Tal vínculo com a paridade nos diz que a determinação do regime eletrônico responde tanto ao confinamento transversal quanto aos valores que regem as posições na faixa. Além disso, para $t+l$ ímpar, vemos que a largura

do *gap* evolui simultânea e inversamente com a largura d e o comprimento L da faixa. Isso demonstra que, assim como as condições responsáveis pelo confinamento transversal, as condições de contorno na direção x também afetam a natureza do *gap* encontrado em nanofitas de grafeno. Neste caso em particular, isso pode estar relacionado à topologia da faixa de Möbius, ao fato de que as condições de Möbius produzem níveis longitudinais antiperiódicos, isto é, valores de q_x que satisfazem a relação de quantização $e^{-iq_x L} = -1$.

Obviamente, a visão acima pode ser posta em questão. O ponto fundamental que se pode questionar é a escolha de tratar a faixa através de dois regimes eletrônicos paralelos, cada um com seus respectivos *gaps*, pelo fato dela responder diferentemente à paridade de $t + l$. Pode parecer natural considerar apenas um regime com todos os níveis associados à quantização de q_x e caracterizado por um único *gap* (o menor deles). No entanto, parece-nos razoável visualizar a faixa como uma nanoestrutura consistindo de dois sistemas distintos coexistentes; mais precisamente, seriam dois anéis 2D, um periódico e o outro antiperiódico, cuja passagem entre eles se daria através da paridade do índice $t + l$. Da regra de quantização para q_x , notamos que ela codifica dois tipos de condições de contorno para esta direção, um correspondendo a um anel periódico, para $t + l$ par, e outro a um antiperiódico, para o caso $t + l$ ímpar. Portanto, tal comportamento poderia ser compativelmente simulado por dois anéis quânticos 2D tomados conjuntamente. Porém, é importante frisar que a essência desta maneira de enxergar o sistema deita na possibilidade de controlar a paridade externamente, pressupondo a existência de mecanismos capazes de selecionar ou suprimir uma determinada paridade desejada para o sistema. Sem esta possibilidade, torna-se supérflua tal descrição.

Por fim, focamos no significado físico do caráter anômalo encontrado na nossa solução. À primeira vista, pode parecer tentador inferir que, à medida que o caráter de Möbius é incorporado a uma fita caracterizada por meio das condições do *MIT bag model*, é produzido algum tipo de fenômeno de interferência destrutiva, e que os valores que não satisfazem a condição de Möbius correspondem a localidades realmente inacessíveis ao elétron, pontos onde a probabilidade de encontrá-lo seria nula. No entanto, a princípio seria precipitado afirmar algo nesse sentido, e o máximo que se pode dizer aqui é que elas correspondem apenas a localidades que impedem um comportamento de Möbius, a posições para as quais a informação sobre o momento na direção longitudinal é desconhecida, possivelmente em decorrência de uma limitação da descrição.

Outra questão de interesse é a origem do efeito. Este ponto pode ser melhor elucidado traçando um paralelo entre nossos resultados e outras situações específicas. Como verificamos, este efeito não é encontrado para anéis ordinários. Da mesma forma, também não há a manifestação desse fenômeno em âmbito não relativístico. Um paralelo direto com esses casos sugere que nossos resultados surjam de uma particularidade relativa ao confinamento transversal ou, mais precisamente, às condições do *MIT bag model*. Estas condições criariam uma assimetria tal entre as componentes spinoriais relativamente

à linha média da faixa que impediria a identificação do tipo Möbius das extremidades para certos valores da posição y . Pelo mesmo motivo, elas bloqueariam completamente o caráter de Möbius das condições que cruzam as subredes.

4 O efeito Aharonov-Bohm em faixas de Möbius de grafeno

Neste capítulo, investigamos a influência do efeito Aharonov-Bohm e suas implicações em sistemas formados por elétrons sem massa do grafeno confinados em faixas de Möbius. Aplicando o modelo de confinamento proposto no capítulo anterior, propomos um tratamento para o problema de Aharonov-Bohm em anéis de grafeno com a topologia de Möbius, e examinamos como se apresentam os efeitos topológicos subjacentes nas propriedades físicas de tais sistemas em resposta à inserção de um fluxo Aharonov-Bohm.

Na primeira seção, apresentamos uma descrição do problema e encontramos sua solução analiticamente. Primeiramente, a partir de uma determinada região do plano, configuramos um anel quântico incorporando à sua descrição um fluxo Aharonov-Bohm. Em seguida, obtemos a solução geral para o problema, à qual devem ser impostas as condições de contorno responsáveis por introduzir as características desejadas para o confinamento eletrônico. Na segunda seção, caracterizamos matematicamente o confinamento em um anel de Möbius, em uma abordagem via condições de contorno, aplicando nosso modelo ao sistema físico em questão. Introduzimos um termo extra nas condições de contorno na direção longitudinal, impondo ao spinor de Dirac do problema uma periodicidade de Möbius que carrega uma fase arbitrária. Com essa imposição, encontramos as expressões para as quantizações das componentes do momento e, conseqüentemente, da energia, e observamos como a natureza do confinamento se manifesta nas propriedades do sistema. Também, mostramos como o termo extra inserido pode ser manipulado a fim de modificar as características dos estados eletrônicos na faixa. Na última parte, mostramos de que modo as propriedades oriundas do nosso modelo afetam a produção de correntes persistentes no anel. Encontramos expressões para a corrente em uma temperatura $T = 0$.

4.1 O efeito Aharonov-Bohm em anéis de grafeno

Novamente em um regime de baixas energias, partimos da descrição em termos da seguinte equação de Dirac:

$$-iv_F \left(\sigma_x \frac{\partial}{\partial x} + \sigma_y \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi = E\psi, \quad (4.1)$$

onde v_F é a velocidade de Fermi, $\vec{q} = -i\vec{\nabla}$ é o momento relativamente ao ponto de Dirac \vec{K} e $\vec{\sigma}$ são as matrizes de Pauli. Como posto acima, o objetivo central deste capítulo consiste em modelar o confinamento de elétrons de baixas energias em um anel com a topologia de Möbius na presença de um fluxo do tipo Aharonov-Bohm e estudar como se dá a influência dessa caracterização nas suas propriedades físicas. Configurar este cenário físico no contexto de anéis quânticos consiste em adicionar um fluxo magnético envolto em uma tal forma que o campo seja zero na região de confinamento, ou seja, as partículas

confinadas na estrutura não interagirão com campos magnéticos em um sentido clássico. De acordo com os trabalhos teóricos de Aharonov e Bohm [51], mesmo em uma região livre onde o campo magnético é nulo, elétrons devem exibir certa sensibilidade à presença do fluxo, dando origem a um fenômeno de interferência não clássico hoje conhecido como efeito Aharonov-Bohm.

Em primeiro lugar, para modelarmos um sistema físico tal como desejamos, tomamos a região R definida no capítulo anterior como

$$R = \{(x, y) \mid x \in [0, L], y \in [0, d]\}. \quad (4.2)$$

Para estudarmos o referido efeito quântico em um anel construído a partir dessa região, inicialmente efetuamos a mudança de variável $x = r_a \theta$, onde $r_a = \frac{L}{2\pi}$, de modo que reescrevemos (4.1) como:

$$-iv_F \left[\sigma_x \left(\frac{1}{r_a} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \sigma_y \frac{\partial}{\partial y} \right] \psi = E\psi. \quad (4.3)$$

Aqui, é interessante destacar que tal mudança se justifica devido à escolha da geometria que pretendemos caracterizar. Rigorosamente, deveríamos utilizar coordenadas polares e reescrever a equação em termos das mesmas. No entanto, obteríamos um anel deitando-se radialmente sobre o plano, o que impede a construção de uma faixa de Möbius via condições de contorno. Por outro lado, não é lícito tomar uma equação de Dirac tridimensional e reduzi-la a uma bidimensional em termos de (θ, z) , pois a descrição intrínseca ao limite do contínuo exige que a equação seja da forma escrita em (4.1). Sendo assim, a única saída para uma abordagem topológica descrevendo faixas de Möbius é simular a situação através de (4.3).

Considerando tal configuração, a presença do fluxo Aharonov-Bohm pode ser matematicamente codificada em nossa prescrição introduzindo um potencial vetor escrito como

$$\vec{A} = \frac{\phi}{2\pi r} \hat{\theta}, \quad (4.4)$$

tomado em $r = r_a$, que levará em conta a interação entre as partículas confinadas e um campo magnético uniforme perpendicular \vec{B} cujo fluxo constante ϕ atravessa o plano $r-\theta$ nos limites de um círculo de raio $r_c < r_a$, a saber $\vec{B} = B\vec{y}$ e $\phi = \pi r_c^2 B$. Finalmente, acoplado este potencial na equação de Dirac, podemos reescrevê-la como:

$$-iv_F \left[\sigma_x \frac{1}{r_a} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \frac{\phi}{\phi_0} \right) + \sigma_y \frac{\partial}{\partial y} \right] \psi = E\psi, \quad (4.5)$$

onde ϕ_0 é o quantum de fluxo. Desta equação, obtemos o seguinte sistema:

$$\begin{cases} -iv_F \frac{1}{r_a} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \frac{\phi}{\phi_0} \right) \psi_B - v_F \frac{\partial \psi_B}{\partial y} = E\psi_A \\ -iv_F \frac{1}{r_a} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \frac{\phi}{\phi_0} \right) \psi_A + v_F \frac{\partial \psi_A}{\partial y} = E\psi_B \end{cases}, \quad (4.6)$$

onde definimos $\psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}$. Isolando ψ_B na primeira equação e substituindo na segunda, encontramos:

$$-\frac{1}{r_a^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - 2i \frac{\phi}{\phi_0} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\phi^2}{\phi_0^2} \right) \psi_A - \frac{\partial^2 \psi_A}{\partial y^2} = \frac{E^2}{v_F^2} \psi_A, \quad (4.7)$$

onde temos

$$E^2 = v_F^2 (q_x^2 + q_y^2) = v_F^2 \left[\frac{1}{r_a^2} \left(q_\theta - \frac{\phi}{\phi_0} \right)^2 + q_y^2 \right]. \quad (4.8)$$

Logo, supondo uma solução do tipo $\psi_A(\theta, y) = F_A(\theta)G_A(y)$, obtemos

$$\frac{d^2 G_A(y)}{dy^2} + q_y^2 G_A(y) = 0, \quad (4.9)$$

para a função $G_A(y)$, e

$$\frac{d^2 F_A(\theta)}{d\theta^2} - 2i \frac{\phi}{\phi_0} \frac{dF_A(\theta)}{d\theta} + \left[\left(q_\theta - \frac{\phi}{\phi_0} \right)^2 - \frac{\phi^2}{\phi_0^2} \right] F_A(\theta) = 0 \quad (4.10)$$

para $F_A(\theta)$. Com as soluções de (4.9) e (4.10), podemos finalmente escrever a expressão para a componente ψ_A :

$$\psi_A(\theta, y) = (Ae^{iq_y y} + Be^{-iq_y y}) e^{iq_\theta \theta}. \quad (4.11)$$

Além disso, da segunda equação do sistema verificamos que:

$$\psi_B = \frac{v_F}{E} \left[\frac{1}{r_a} \left(q_\theta - \frac{\phi}{\phi_0} \right) + iq_y \right] \psi_A, \quad (4.12)$$

o que nos permite, finalmente, escrever a solução geral de (4.5). Definindo $q'_x = \frac{1}{r_a} \left(q_\theta - \frac{\phi}{\phi_0} \right)$, temos a seguinte expressão para o spinor ψ :

$$\psi(\theta, y) = \left[\left(\frac{1}{\frac{v_F(q'_x + iq_y)}{E}} \right) \mathcal{K}_1 e^{iq_y y} + \left(\frac{1}{\frac{v_F(q'_x - iq_y)}{E}} \right) \mathcal{K}_2 e^{-iq_y y} \right] e^{iq_\theta \theta}. \quad (4.13)$$

Dessa forma, colocamos o problema na mesma rota do tratamento do capítulo anterior.

4.2 Confinamento eletrônico

O passo seguinte na caracterização do problema consiste no confinamento dos elétrons descritos pela equação (4.5). Assim como no capítulo anterior, a fim de evitar o paradoxo de Klein, o confinamento deve ser realizado por meio da introdução de um potencial que se acopla como um termo de massa à equação de Dirac. Definindo

$$V(y) = \begin{cases} M, & y < 0 \\ 0, & 0 \leq y \leq d \\ M, & y > d \end{cases}, \quad (4.14)$$

escrevemos a equação de Dirac da seguinte maneira:

$$-iv_F \left[\sigma_x \left(\frac{1}{r_a} \frac{\partial}{\partial \theta} - i \frac{\phi}{\phi_0} \right) + \sigma_y \frac{\partial}{\partial y} \right] \psi + \beta v_F^2 V(y) \psi = E \psi. \quad (4.15)$$

Em seguida, fazemos as soluções para $y < 0$ e $y > d$ tenderem a zero tomando o limite $M \rightarrow \infty$, de modo que apenas a solução na região central, cuja expressão é aquela dada por (4.13), seja não nula. A essa solução, impomos as condições de contorno características do nosso modelo. Para o confinamento na direção transversal, utilizamos o conjunto de condições provenientes do *bag model*:

$$\begin{cases} +i\beta\sigma_y\psi|_{y=0} = \psi|_{y=0} \\ -i\beta\sigma_y\psi|_{y=d} = \psi|_{y=d} \end{cases}, \quad (4.16)$$

as quais são responsáveis por produzir um poço infinito na direção desejada. Submetendo o spinor (4.13) a essas condições, encontramos as relações

$$\mathcal{K}_1 = -\frac{(\lambda_2 - 1)}{(\lambda_1 - 1)} \mathcal{K}_2 \quad (4.17)$$

e

$$i \tan(q_y d) = \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\lambda_1 \lambda_2 - 1}, \quad (4.18)$$

agora com $\lambda_1 = \frac{v_F(q'_x + iq_y)}{E}$ e $\lambda_2 = \frac{v_F(q'_x - iq_y)}{E}$. Com a substituição das expressões de λ_1 e λ_2 na equação (4.18), chegamos ao seguinte limite:

$$\cos(q_y d) \rightarrow 0, \quad (4.19)$$

de onde emerge a quantização de q_y :

$$q_y = \frac{n_y \pi}{2d}, \quad n_y \text{ ímpar}. \quad (4.20)$$

Com tudo isso, podemos reescrever a nossa solução como

$$\psi(\theta, y) = 2\mathcal{K}_1 e^{i\frac{\alpha}{2}} \begin{pmatrix} \cos(q_y y - \frac{\alpha}{2}) \\ \cos(q_y y + \frac{\alpha}{2}) \end{pmatrix} e^{iq_\theta \theta}, \quad (4.21)$$

com $\alpha = \arctan\left(\frac{r_a q_y}{q_\theta - \frac{\phi}{\phi_0}}\right)$. Por fim, configuramos o caráter desejado para o anel impondo o conjunto de condições de Möbius à expressão (4.21). Aqui, vamos supor a presença de uma fase extra na condição de periodicidade. Para isso, impomos a seguinte condição:

$$\psi(0, y) = e^{i2\pi\xi} \psi(2\pi, d - y). \quad (4.22)$$

Como mencionado no capítulo anterior (ver as Referências [17, 18]), uma fase assim pode ser encontrada na caracterização de nanotubos de carbono. Dessa condição, chegamos à regra de quantização para q_θ :

$$e^{-i2\pi(q_\theta + \xi)} = (-1)^t \frac{\sin\left(q_y y + \frac{\alpha}{2}\right)}{\cos\left(q_y y - \frac{\alpha}{2}\right)}, \quad (4.23)$$

sujeita à relação adicional

$$\frac{\sin\left(q_y y + \frac{\alpha}{2}\right)}{\cos\left(q_y y - \frac{\alpha}{2}\right)} = \frac{\sin\left(q_y y - \frac{\alpha}{2}\right)}{\cos\left(q_y y + \frac{\alpha}{2}\right)}. \quad (4.24)$$

Aqui, definimos $t = \frac{n_y - 1}{2}$. Como vemos, o procedimento é análogo ao empregado no capítulo anterior. Com efeito, observamos que a condição (4.24) é idêntica àquela encontrada no primeiro capítulo e, portanto, resulta em uma contradição para determinados valores de y , como, por exemplo, para $y = 0$. Dessa forma, novamente verificamos que as duas relações que se originam da imposição da periodicidade de Möbius às componentes spinoriais não podem ser satisfeitas ao mesmo tempo para todos os valores de y , de modo que há automaticamente uma seleção das posições transversais acessíveis a uma solução tipo Möbius. A relação (4.24) é satisfeita para ângulos $q_y y$ que são múltiplos ímpares de $\frac{\pi}{4}$. Denotando por k o inteiro ímpar e escrevendo $k = 2l + 1$, onde l é um natural qualquer, a equação (4.23) pode ser escrita como

$$e^{-i2\pi(q\theta + \xi)} = (-1)^{t+l}. \quad (4.25)$$

A partir dessa expressão, considerando também a quantização obtida para q_y , chegamos ao espectro energético:

$$E_{nm}^2 = \begin{cases} v_F^2 \left[\frac{4\pi^2}{L^2} \left(m - \xi - \frac{\phi}{\phi_0}\right)^2 + \frac{\pi^2}{d^2} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \right], & n + l \text{ par} \\ v_F^2 \left[\frac{4\pi^2}{L^2} \left(m + \frac{1}{2} - \xi - \frac{\phi}{\phi_0}\right)^2 + \frac{\pi^2}{d^2} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \right], & n + l \text{ ímpar} \end{cases}. \quad (4.26)$$

onde fazemos $t = n$, e m é um inteiro. Primeiramente, negligenciemos por um momento a presença de ξ e olhemos o caso usual. Podemos observar que, assim como no caso em que não lidamos com o fluxo Aharonov-Bohm, a energia possui uma dependência da paridade do índice $n + l$, dependência esta que implica automaticamente um vínculo em relação à quantização de q_y e às posições permitidas ao longo da direção transversal da faixa. Além disso, é fácil notar que ela se caracteriza como uma função periódica do fluxo ϕ , com um período ϕ_0 . Para ver isso, é suficiente observar que, fazendo $\phi \rightarrow \phi - \phi_0$, encontramos $E_{n,m+1}(\phi) = E_{nm}(\phi + \phi_0)$. Na próxima seção, investigamos como as características do nosso modelo se manifestam no aparecimento de correntes persistentes na faixa, correntes estas que surgem como consequência dessa dependência do fluxo.

Em adição a isso, ressaltamos que considerações semelhantes àsquelas do capítulo anterior a respeito da presença de um *gap* dual podem ser feitas aqui. Para valores múltiplos inteiros do quantum de fluxo ϕ_0 , o único papel do fluxo Aharonov-Bohm é deslocar os níveis que produzem os estados de menor energia (em módulo) e, conseqüentemente, o *gap*. Isso pode ser facilmente visto fazendo $\phi = \gamma\phi_0$. Vemos que, neste caso, o menor valor da energia se dá para $m = \gamma$, e não mais para $m = 0$ como antes.

Considerando a fase na condição de Möbius e sua implicação na expressão das energias, notamos que o termo extra ξ possibilita a manipulação da inversão da paridade no espectro. Por exemplo, se tomamos ξ múltiplo ímpar de $1/2$ ($\xi = \frac{\nu}{2}$), os termos longitudinais nas expressões em (4.26) se escrevem como

$$E_L = \frac{2\pi v_F}{L} \left(m - \frac{\nu}{2} - \frac{\phi}{\phi_0} \right), \quad (4.27)$$

para $n + l$ par, e

$$E_L = \frac{2\pi v_F}{L} \left(m + \frac{1}{2}(1 - \nu) - \frac{\phi}{\phi_0} \right), \quad (4.28)$$

para $n + l$ ímpar, que efetivamente correspondem a uma inversão na paridade. Os níveis antipériódicos agora são encontrados para $n + l$ par, enquanto que os periódicos para $n + l$ ímpar. Portanto, encontramos um mecanismo de troca de paridade do número quântico transversal. Vale ainda acrescentar que, no caso de estruturas de grafeno, tal fase engloba uma razão entre o comprimento da faixa e a distância típica de rede e propicia então uma restrição em relação às dimensões físicas da nanoestrutura. Dessa forma, teríamos uma forma de controlar essa característica através do comprimento da faixa. De modo semelhante, esta mesma manipulação também pode ser alcançada supondo um fluxo em múltiplos ímpares de $\phi_0/2$;

4.3 Correntes persistentes

Como bem se sabe, a introdução de um fluxo Aharonov-Bohm dá origem a correntes persistentes no anel. Em um anel quântico, como mostrado, as energias são funções periódicas do fluxo Aharonov-Bohm, e as correntes persistentes surgem a partir da variação da energia com relação a esse fluxo. Em $T = 0$, a corrente persistente pode ser calculada por meio da seguinte expressão:

$$I = -\frac{\partial E}{\partial \phi}, \quad (4.29)$$

onde $E = \sum_{n,m} E_{nm}$. Em nosso caso, temos duas expressões para a corrente, conforme a paridade de $n + l$. Negligenciando o termo ξ , para o caso em que $n + l$ é par temos a seguinte expressão:

$$I^{(p)} = \frac{v_F}{r_a^2 \phi_0} \sum_{n,m} \frac{m - \frac{\phi}{\phi_0}}{\left[\frac{1}{r_a^2} \left(m - \frac{\phi}{\phi_0} \right)^2 + \frac{\pi^2}{d^2} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \right]^{1/2}}. \quad (4.30)$$

Já para o caso onde $n + l$ é ímpar, encontramos:

$$I^{(i)} = \frac{v_F}{r_a^2 \phi_0} \sum_{n,m} \frac{m + \frac{1}{2} - \frac{\phi}{\phi_0}}{\left[\frac{1}{r_a^2} \left(m + \frac{1}{2} - \frac{\phi}{\phi_0} \right)^2 + \frac{\pi^2}{d^2} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \right]^{1/2}}. \quad (4.31)$$

Como podemos ver, a corrente varia não apenas de acordo com o índice n_y , mas também de acordo com as posições transversais no anel. Para um determinado valor do número quântico n_y , há uma alternância nas expressões à medida que percorremos a direção transversal. Por exemplo, para $n_y = \{1, 5, 9, \dots\}$, temos que $n = p$ e, conseqüentemente, $n + l = l + p = l'$, onde p é um número par. Dessa forma, para as posições indexadas com l par, a corrente deve ter um valor calculado via equação (4.30), uma vez que l' é par. Enquanto que, para aquelas com l ímpar, temos a equação (4.31). Já para o caso em que $n_y = \{3, 7, 11, \dots\}$, temos exatamente o oposto. Nesse caso, n é ímpar e lidamos com a expressão (4.30) para as posições indexadas com l ímpar, ao passo que lidamos com (4.31) para aquelas com l par.

Quanto ao seu comportamento relativo, percebemos logo à primeira vista que a expressão de $I^{(i)}$ pode ser obtida de $I^{(p)}$ tomando um fluxo adicional de $-\phi_0/2$, ou seja, fazendo

$$I^{(p)}(\phi - \phi_0/2) = I^{(i)}(\phi). \quad (4.32)$$

Em outras palavras, as expressões estão deslocadas por $\phi_0/2$ e o gráfico de uma é uma translação do gráfico da outra ao longo da direção ϕ do plano I - ϕ . Obviamente, tal comportamento é o mesmo para as autoenergias.

5 Estados de bulk e de borda em faixas de Möbius com bordas zigzag e armchair

Neste capítulo, investigamos as propriedades físicas de faixas de Möbius de grafeno com bordas *zigzag* e *armchair* igualmente centrados em uma abordagem no contínuo, no limite de baixas energias. Ao contrário do modelo utilizado nos dois primeiros capítulos, aqui são propostos conjuntos de condições de contorno capazes de incorporar, ao mesmo tempo, o caráter de Möbius e a natureza geométrica das bordas transversais da faixa, ou seja, as bordas não identificáveis. Em especial, são estudadas faixas de Möbius com bordas *zigzag* e *armchair*. Para tais estruturas, investigamos como tal modelo reflete nas propriedades dos seus estados de borda e de *bulk*.

Na primeira seção, é feita uma breve revisão preliminar dos pontos principais necessários para o desenvolvimento do trabalho. Na segunda seção, propomos um modelo que combina a adoção das condições típicas de nanofitas de bordas *zigzag* com condições que introduzem o caráter de Möbius de forma compatível. Estudamos as propriedades dos estados de bulk e de borda do sistema à luz do presente modelo e traçamos alguns paralelos entre os nossos resultados e a formulação *tight-binding*. Na última seção, é proposto um conjunto que incorpora as condições características de nanofitas com bordas *armchair* e uma condição de Möbius que caracteriza uma interface compatível com a geometria das bordas. Também é analisada uma interface que implica quebra na simetria da rede.

5.1 Fundamentação teórica

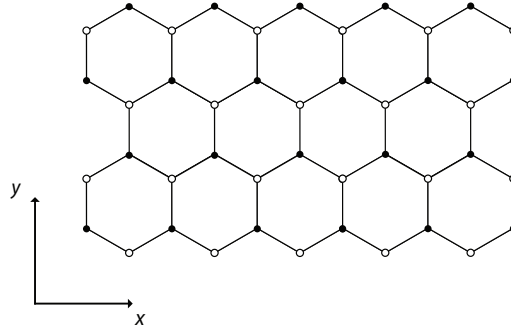
Até o presente momento, trabalhamos com descrições que consideram apenas o regime nas proximidades do ponto de Dirac \vec{K} , que corresponde a uma construção centrada em uma equação implementada por um Hamiltoniano de Dirac 2×2 . A partir deste capítulo, começamos a lidar também com descrições que incorporam as vizinhanças (vales) de ambos os pontos, \vec{K} e \vec{K}' , e que podem ser equivalentemente caracterizadas por uma equação de Dirac 4×4 . Nos capítulos anteriores, vimos que elétrons próximos ao ponto \vec{K} passam a obedecer a uma equação do tipo Dirac para partículas sem massa; esta equação se escreve como

$$v_F (\vec{\sigma} \cdot \vec{q}) \psi = E\psi, \quad (5.1)$$

onde $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$, as matrizes de Pauli, e \vec{q} é o momento relativo a \vec{K} . Por outro lado, quando consideramos o ponto \vec{K}' , temos uma equação análoga, mas que difere da primeira por um sinal em σ_x . Ela pode ser escrita como

$$v_F (\vec{\sigma}' \cdot \vec{q}) \psi' = E\psi'. \quad (5.2)$$

Figura 5 – Folha de grafeno



5 - Folha de grafeno com terminação *zigzag* na direção y e terminação *armchair* na direção x .

Aqui, $\vec{\sigma}' = (-\sigma_x, \sigma_y)$ e o spinor ψ' corresponde à função de onda relativamente ao vale \vec{K}' .

Como sabemos, nessa descrição as componentes spinoriais estão relacionadas às subredes A e B do grafeno, de modo que qualquer tentativa de trabalhar com o confinamento de elétrons em uma folha de grafeno deve associar, automaticamente, a atribuição de condições de contorno às componentes spinoriais com a distribuição física de átomos nas bordas da folha. Entretanto, nesse contexto, para a imposição de condições de contorno devemos lidar com as funções de onda completas nas respectivas subredes [29]:

$$\Psi_A(\vec{r}) = e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}\psi_A(\vec{r}) + e^{i\vec{K}'\cdot\vec{r}}\psi'_A(\vec{r}) \quad (5.3)$$

e

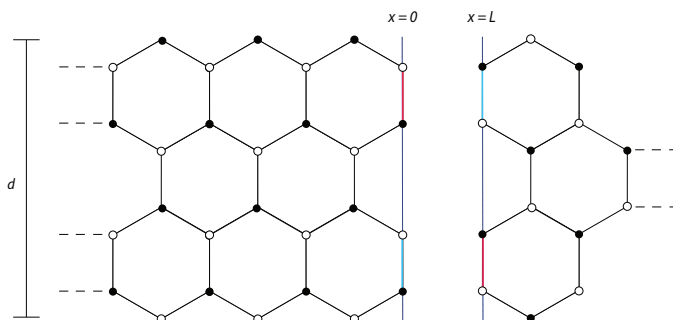
$$\Psi_B(\vec{r}) = e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}\psi_B(\vec{r}) + e^{i\vec{K}'\cdot\vec{r}}\psi'_B(\vec{r}), \quad (5.4)$$

onde ψ e ψ' representam os spinores associados aos vales \vec{K} e \vec{K}' , respectivamente. Aqui, escrevemos os pontos de Dirac como $\vec{K} = (K, 0)$ e $\vec{K}' = (-K, 0)$, com $K = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0}$.

5.2 Faixas de Möbius com borda zigzag

Dentro da abordagem proposta, temos modelado a inserção da topologia de Möbius em sistemas confinantes através da introdução de condições de contorno adequadas. Neste esquema, descrevemos faixas de Möbius a partir de nanofitas onde a natureza geométrica de suas terminações transversais não foi levada em consideração, tratando-as efetivamente como sistemas relativísticos convencionais. No presente capítulo, introduzimos este aspecto modelando o confinamento transversal por meio de condições impostas capazes de traduzir a geometria de borda a ser escolhida ao mesmo tempo em que impomos uma periodicidade de Möbius compatível com tal escolha.

Inicialmente, vamos lidar com faixas com bordas do tipo *zigzag*. Para uma faixa orientada tal como na Figura 5, primeiramente impomos o seguinte conjunto de condições

Figura 6 – Interface de Möbius em nanofitas com bordas *zigzag*

6 - Formação de uma interface de Möbius por identificação das extremidades $x = 0$ e $x = L$ (ver texto) para uma nanofita de largura d com bordas *zigzag*. Como anteriormente, a marcação em cor realça linhas transversais associadas na composição da interface, codificando a torção própria à topologia.

de contorno para a direção y :

$$\psi_A(x, 0) = \psi_B(x, d) = 0. \quad (5.5)$$

Essas condições de contorno foram propostas em [100] para caracterizar o confinamento em nanofitas com bordas *zigzag*. Em seguida, para configurar uma faixa de Möbius a partir dessa nanofita, propomos o seguinte conjunto de condições:

$$\psi_A(0, y) = e^{iKL} \psi_B(L, d - y) \quad (5.6)$$

e

$$\psi_B(0, y) = e^{iKL} \psi_A(L, d - y). \quad (5.7)$$

Construímos essas condições levando em consideração as subredes presentes nas extremidades da faixa. Para isso, consideramos as funções de onda completas (5.3) e (5.4) e tomamos:

$$\Psi_A(0, y) = \Psi_B(L, d - y) \quad (5.8)$$

e

$$\Psi_B(0, y) = \Psi_A(L, d - y). \quad (5.9)$$

Condições semelhantes às (5.8) e (5.9) são tomadas em [81], no contexto de um modelo *tight-binding*. No entanto, elas não precisam ser tão gerais para uma abordagem no limite do contínuo, podendo-se então efetuar algumas escolhas razoáveis. Sendo assim, com a imposição de (5.8) e (5.9), tomamos as escolhas (5.6) e (5.7) para as condições de contorno a serem satisfeitas pelas componentes spinoriais ψ_A e ψ_B . A Figura 6 ilustra a geometria de borda e interface na presente situação.

A fim de estudarmos as propriedades dos estados de *bulk* e de borda no presente contexto, devemos investigar como o emprego conjunto das condições *zigzag* (5.5) e de Möbius (5.6) e (5.7) se manifesta nas propriedades físicas do sistema. Para isso, consideramos o

sistema obtido a partir da equação (5.1):

$$\begin{cases} -i \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi_B = E \psi_A \\ -i \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi_A = E \psi_B \end{cases}, \quad (5.10)$$

com $E^2 = q_x^2 - k_y^2$, onde fazemos $k_y = i q_y$ e $v_F = 1$. É bem sabido que nanofitas de grafeno exibem duas soluções bastante distintas dependendo da definição do momento k_y [29, 100]. Mais precisamente, quando k_y é um número imaginário temos um determinado comportamento eletrônico, enquanto que um outro completamente distinto emerge quando k_y é real. Nas próximas subseções, vamos nos concentrar nessa questão para faixas de Möbius.

5.2.1 Estados de bulk

Quando k_y é complexo (q_y real), lidamos com os chamados estados de *bulk*, que correspondem aos estados de confinamento na faixa. Neste caso, as soluções são tipicamente oscilantes. Como sabemos, a imposição das condições *zigzag* nos leva a funções trigonométricas e à seguinte regra de quantização [100]:

$$\tan(q_y d) = \frac{q_y}{q_x}. \quad (5.11)$$

A partir disso, a introdução das condições de Möbius (5.6) e (5.7) nos conduz às equações

$$\sin(q_y y - \theta) = \sin(q_y(d - y)) e^{i(K+q_x)L} \quad (5.12)$$

e

$$\sin(q_y y) = \sin(q_y(d - y) - \theta) e^{i(K+q_x)L}, \quad (5.13)$$

com $\tan \theta = \frac{q_y}{q_x}$ novamente. Da primeira, temos o seguinte conjunto:

$$\begin{cases} \cos \theta = -\cos(q_y d) e^{i(K+q_x)L} \\ \sin \theta = -\sin(q_y d) e^{i(K+q_x)L} \end{cases}. \quad (5.14)$$

Em primeiro lugar, observamos que, isolando o termo exponencial comum em uma e substituindo na outra, juntas elas fornecem $\tan \theta = \tan(q_y d)$, que é a mesma relação (5.11) proveniente da imposição das condições *zigzag*. Esta relação nos diz que $\frac{\sin(q_y d)}{\sin \theta} = \frac{\cos(q_y d)}{\cos \theta}$, relação cuja importância será percebida mais adiante. Em segundo lugar, notamos que a primeira delas exige que $\cos(K + q_x) = \pm 1$, com o sinal dependendo se $\cos(q_y d) = \cos \theta$ ou $\cos(q_y d) = -\cos \theta$. Assim sendo, escrevemos

$$e^{-i(K+q_x)L} = -\frac{\cos(q_y d)}{\cos \theta} \quad (5.15)$$

$$= (-1)^\gamma, \quad (5.16)$$

com $\gamma = 0$ quando $\cos(q_y d) = -\cos \theta$ e $\gamma = 1$ quando $\cos(q_y d) = \cos \theta$.

Por outro lado, a segunda relação de (5.14) nos fornece

$$e^{-i(K+q_x)L} = -\frac{\sin(q_y d)}{\sin \theta}. \quad (5.17)$$

Como $\frac{\sin(q_y d)}{\sin \theta} = \frac{\cos(q_y d)}{\cos \theta}$, esta relação é idêntica à equação (5.16). Portanto, obtemos consistentemente a regra de quantização $e^{-i(K+q_x)L} = (-1)^\gamma$.

Até agora, concentramo-nos apenas na equação (5.12) e a consistência com a equação (5.13) ainda não foi verificada. Podemos verificá-la facilmente escrevendo-a como segue:

$$\sin(q_y y) = [\sin(q_y y(d-y)) \cos \theta - \sin \theta \cos(q_y(d-y))] e^{i(K+q_x)L} \quad (5.18)$$

$$= \{\cos \theta [\sin(q_y d) \cos(q_y y) - \sin(q_y y) \cos(q_y d)] + \quad (5.19)$$

$$+ \sin \theta [\cos(q_y d) \cos(q_y y) + \sin(q_y d) \sin(q_y y)]\} e^{i(K+q_x)L}$$

$$= [\cos \theta \sin \theta - \cos \theta \sin \theta] \cos(q_y y) + [\cos^2 \theta + \sin^2 \theta] \sin(q_y y) \quad (5.20)$$

$$= \sin(q_y y), \quad (5.21)$$

onde foram utilizadas as relações do conjunto (5.14) na passagem de (5.19) para (5.20). Assim, verificamos que a condição (5.12) é matematicamente consistente com a (5.13) e, portanto, não produzem qualquer tipo de contradição.

Como podemos ver, o caráter de Möbius se manifesta através da duplicidade relativa à periodicidade das componentes do spinor de Dirac. Quando o parâmetro γ é zero, caracteriza-se um comportamento periódico similar àquele encontrado em anéis ordinários, enquanto que, para $\gamma = 1$, há uma antiperiodicidade inerente aos estados. É fato que não há aqui a restrição nas posições presente no modelo dos capítulos anteriores, mas novamente percebemos que o índice que regula a passagem entre os dois comportamentos está diretamente ligado à natureza do confinamento transversal.

5.2.2 Estados de borda

Por outro lado, quando k_y é um número real (q_y imaginário), lidamos com os estados que correspondem aos estados de borda do sistema [100], aos estados que se localizam nas bordas da nanofita. Assim como no caso anterior, a imposição das condições *zigzag* leva à conhecida relação¹:

$$e^{2k_y d} = \frac{q_x + k_y}{q_x - k_y}. \quad (5.22)$$

Diferentemente dos estados de *bulk*, no entanto, quando k_y é real podemos escrever as componentes como

$$\psi_A(x, y) = 2\mathcal{K}_1 e^{k_y d} \sinh(k_y y - k_y d) e^{iq_x x} \quad (5.23)$$

e

$$\psi_B(x, y) = 2\mathcal{K}_1 (q_x + k_y) \sinh(k_y y) e^{iq_x x}, \quad (5.24)$$

¹ Para k_y imaginário, isto é, $k_y = iq_y$, a relação se escreve como $e^{2iq_y d} = \frac{e^{i\theta}}{e^{-i\theta}}$, com θ como definido acima, o que leva à relação (5.11).

onde \mathcal{K}_1 é a constante de normalização. Aqui, imediatamente observamos que elas diferem daquelas para os estados de *bulk* principalmente por não serem soluções oscilantes. Mais que isso, percebemos também um comportamento hiperbólico típico inerente, que corresponde à localização desses estados nas bordas da faixa. Por fim, em face desse cenário, para caracterizar tais estados como os estados de borda de uma faixa de Möbius, aplicamos as condições de Möbius às componentes spinoriais ψ_A e ψ_B acima. Curiosamente, as duas condições fornecem a mesma relação:

$$e^{2i(K+q_x)L} = 1, \quad (5.25)$$

que implica a regra de quantização

$$(q_x + K)L = n\pi, \quad (5.26)$$

onde n é um inteiro. Aqui, alguns pontos merecem ser observados. Em primeiro lugar, notamos que há mais estados de borda acessíveis aos elétrons do que no caso periódico, onde temos a relação $(q_x + K)L = 2n\pi$. Portanto, os estados eletrônicos nas proximidades das bordas são duas vezes mais numerosos para uma faixa de Möbius do que para um anel típico com condições periódicas. Os estados correspondentes a múltiplos pares de π estão presentes em ambos os casos. Para a faixa de Möbius, no entanto, observamos também a presença de níveis intermediários, que associamos à antiperiodicidade inerente a uma parte dos estados. Neste ponto, percebemos que estes níveis antiperiódicos revelam-se efetivamente como de natureza periódica; e também, um parâmetro controlando a duplicidade de periodicidade, como em situações anteriores, é ausente. Um outro ponto a ser frisado é que a relação (5.25) escreve-se como um condição $2L$ -periódica para o nosso spinor, isto é, temos que $\psi(0, y) = \psi(2L, y)$. Este fato em particular acreditamos estar relacionado a uma particularidade da topologia da faixa de Möbius. Como sabemos, ao conectar os dois lados da faixa, a topologia de Möbius gera efetivamente uma única borda com duas vezes o seu comprimento original. Então, parece-nos razoável apontar este fato como manifestação desta característica particular.

Em face dessas características, acreditamos que o aparecimento destes níveis adicionais no caso de Möbius poderia produzir, em uma descrição fundamentalmente distinta, o comportamento apontado em [81] via cálculos *tight-binding* e cálculos numéricos, no qual uma faixa de Möbius com bordas *zigzag* na presença de um campo elétrico uniforme transversal apresenta uma densidade de estados não nula em $E = 0$, ou seja, ela não tem um *gap* de energia como ocorre nos anéis ordinários. Com a presença de novos níveis associados ao momento q_x e a conseqüente diminuição no espaçamento entre eles, o deslocamento em determinados níveis de energia causado pela perturbação do campo poderia ser suficiente para anulá-la. Ou seja, com os níveis adicionais provenientes da antiperiodicidade inerente à topologia de Möbius, é possível que o efeito da perturbação seja de tal forma que a expressão $E^2 = q_x^2 - k_y^2$ se cancele. Dessa forma, seriam produzidos

estados de borda com energia nula e a faixa se comportaria como um isolante topológico. Esta discussão será retomada no próximo capítulo.

Tal perspectiva se baseia no fato de que os efeitos da topologia sobre as propriedades físicas de tais nanoestruturas se manifestam efetivamente por meio do aparecimento de estados antiperiódicos. Assim, um tratamento topológico para descrever faixas de Möbius no presente contexto deveria necessariamente produzir efeitos que se associem a tais estados. Muito embora a abordagem adotada por Guo *et al.* [81] seja de origem fundamentalmente distinta, uma descrição no contínuo tal como caracterizada aqui e mais adiante no próximo capítulo também deve incorporar as predições apontadas. Se estas predições não emergirem de nossa abordagem, então teremos um indício de que não há influência da topologia sobre tal aspecto, o que indicaria uma falha na abordagem adotada pelos referidos autores. Assim sendo, o referido efeito não existiria.

5.2.3 Estados de borda com energia nula em anéis ordinários

Neste ponto, notamos a possibilidade de obter estados de borda com energia nula para anéis tipicamente periódicos. Se a conjectura da subseção anterior acerca da origem dos estados de energia nula em faixas de Möbius estiver correta, então é possível obter tais estados mesmo para anéis ordinários. Através da manipulação da fase em K e de um fluxo Aharonov-Bohm, em tese podemos alcançar níveis longitudinais antiperiódicos no espectro de um anel periódico e, assim, produzir estados de borda com energia zero na presença de um campo elétrico, caracterizando-o um isolante topológico. Vejamos isso.

Na presença de um fluxo Aharonov-Bohm, os níveis longitudinais para um anel periódico são

$$E_L = \frac{2\pi}{L} \left(n - \frac{\phi}{\phi_0} \right) - K. \quad (5.27)$$

Olhando para a expressão acima, percebemos primeiramente que para $K = \mu \frac{\pi}{L}$, com μ um número ímpar, obtemos sempre níveis associados à antiperiodicidade. Assim, o anel automaticamente se apropria de valores que, de acordo com nossa conjectura, darão origem aos estados com energia zero na presença de um campo elétrico transversal. Esta nuance nos diz que para determinados valores do comprimento da faixa é possível um anel periódico se comportar como um isolante topológico, ou seja, as dimensões do anel seriam determinantes no seu comportamento eletrônico. É claro que aqui vamos obter níveis antiperiódicos a menos de K , mas isso pode ser facilmente contornado tomando um fluxo conveniente. De maneira equivalente, ajustando-se um fluxo $\phi = \mu \frac{\phi_0}{2}$ diretamente na expressão o mesmo efeito é produzido.

Portanto, na teoria parece ser possível produzir anéis periódicos comportando-se como isolantes topológicos, o que é realmente interessante, uma vez que teríamos características únicas associadas a sistemas com topologias não triviais para um sistema topologicamente comum.

5.3 Faixas de Möbius com borda armchair

Nanofitas de grafeno com bordas *armchair* são descritas por meio da introdução de outro conjunto de condições de contorno [100]. Neste caso, são empregadas condições que misturam os vales \vec{K} e \vec{K}' ou, mais precisamente, que misturam as funções de onda associadas aos vales:

$$\psi_\mu(0, y) + \psi'_\mu(0, y) = 0 \quad (5.28)$$

e

$$e^{iKL}\psi_\mu(L, y) + e^{-iKL}\psi'_\mu(L, y) = 0, \quad (5.29)$$

onde $\mu = A, B$. Aqui, descrevemos uma nanofita de largura L e comprimento d , com bordas *armchair* ao longo da direção x , como indicado na Figura 5. Essas condições nos fornecem a relação $q_x = \frac{1}{L}n\pi - K$, com n inteiro, em acordo com [29, 100].

Para construir uma faixa de Möbius a partir de uma nanofita caracterizada por essas condições, propomos uma condição do tipo Möbius da seguinte forma:

$$\Psi_A(x, 0) = \Psi_A(L - x, d). \quad (5.30)$$

A adoção de apenas uma condição e a escolha de não cruzar as subredes são compatíveis com a situação física em questão, pois codificam corretamente uma interface do tipo *zigzag-Klein* na direção y , necessária quando lidamos com bordas do tipo *armchair* na direção transversal da faixa. Esta situação pode ser visualizada na Figura 7. Tal condição é escrita em termos das componentes spinórias da seguinte forma:

$$e^{iKx}\psi_A(x, 0) + e^{-iKx}\psi'_A(x, 0) = e^{iK(L-x)}\psi_A(L - x, d) + e^{-iK(L-x)}\psi'_A(L - x, d). \quad (5.31)$$

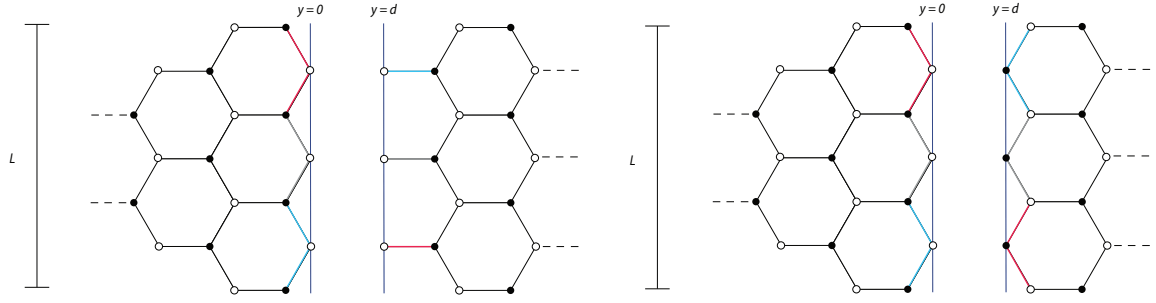
Tomando essa condição para uma nanofita obtida das condições (5.28) e (5.29), obtemos a seguinte expressão para a quantização da componente q_y do momento:

$$e^{-iq_y d} = (-1)^n. \quad (5.32)$$

Portanto, vemos que as autoenergias dependem dos valores associados à quantização do momento na direção y , variando de acordo com a paridade do número quântico n . Para n ímpar, temos $q_y = \frac{1}{L}(2m + 1)\pi$, enquanto que, para o caso com n par, temos $q_y = \frac{2}{L}m\pi$. Aqui, m é um inteiro. Consequentemente, as energias são escritas como

$$E^2 = \begin{cases} \frac{\pi^2}{d^2}(2m + 1)^2 + \left(\frac{n\pi}{L} - K\right)^2, & \text{para } n \text{ ímpar} \\ \frac{4\pi^2}{d^2}m^2 + \left(\frac{n\pi}{L} - K\right)^2, & \text{para } n \text{ par} \end{cases}. \quad (5.33)$$

Assim como nos capítulos anteriores, podemos enxergar este resultado de uma outra maneira. Como sabemos, para uma nanofita, um segundo termo na expressão da energia representa um *gap*, que pode ser pensado como um termo de massa na relação de dispersão relativística. Dessa forma, podemos interpretar como segue. A expressão (5.33)

Figura 7 – Interfaces de Möbius em nanofitas com bordas *armchair*

7 - Formação de interfaces de Möbius por identificação das extremidades $y = 0$ e $y = d$ (ver texto) para nanofitas de largura L com bordas *armchair* em padrões tipo *zigzag-Klein* (esquerda) e *zigzag-zigzag* (direita). A marcação em cor tem o mesmo significado que anteriormente.

determina um comportamento eletrônico variável associado a uma duplicidade de *gap*, onde a paridade de n determina o modo como ele deve variar. Para n ímpar, podemos enxergar um *gap* com a expressão $\alpha_n = 2\sqrt{\frac{\pi^2}{d^2} + \beta_n}$, onde $2\beta_n^{1/2} = 2\left(\frac{n\pi}{L} - K\right)$ seria o *gap* para n par. Então, temos $E = \left(\frac{4\pi^2}{d^2}m^2 + \beta_n\right)^{1/2}$ para n par, enquanto que $E = \left(\frac{4\pi^2}{d^2}(m^2 + m) + \alpha_n^2/4\right)^{1/2}$ para n ímpar.

Além disso, outras características importantes podem ser observadas. Quando n é par, vemos que uma ausência de *gap* torna-se possível com $K = \frac{n\pi}{L}$, uma vez que neste caso $E = \frac{2\pi m}{d}$, para m inteiro; se $m = 0$, há estados com $E = 0$ e as bandas se tocam. Isso nos diz que, para determinados valores da largura, a faixa se comporta como um condutor. Este resultado também pode ser encontrado em nanofitas com bordas *armchair* [32, 33, 100], com a diferença de que lá o momento na direção longitudinal não é quantizado. Por outro lado, quando n é ímpar, a relação

$$(4m + 1)\frac{\pi^2}{d^2} = -\left(\frac{n\pi}{L} - K\right)^2 \quad (5.34)$$

nos dá a restrição que produz o cancelamento dos dois últimos termos em (5.33). Aqui, um ponto fundamental é a impossibilidade de ausência de *gap*. Se $m = 0$, então devemos ter $\frac{\pi^2}{d^2} = -\left(\frac{n\pi}{L} - K\right)^2$, que nunca é satisfeito.

Dessa forma, encontramos uma propriedade eletrônica única. Observamos que a faixa de Möbius com borda *armchair* apresenta paralelamente dois comportamentos eletrônicos distintos para uma mesma razão a/L - ou seja, para uma faixa com dimensões fixas - e que a paridade do número quântico associado à quantização na direção transversal é o responsável pela alternância entre estes, funcionando como uma chave entre os regimes condutor e isolante. Isso significa que, em teoria, temos um sistema físico que exhibe um comportamento dual, metálico ou isolante, cuja manipulação é dada através de um aspecto interno do sistema, e não através de fatores externos de sua morfologia como no caso de nanotubos de carbono [14, 15, 16, 17, 18], onde a helicidade e o diâmetro governam tal característica, ou no caso de nanofitas de grafeno, como já mencionado. Sendo assim,

teríamos uma nanoestrutura capaz de fornecer duas estruturas de banda convivendo em paralelo, o que poderia ser bastante útil em termos de aplicação. O único desafio seria encontrar um mecanismo externo para a manipulação da paridade na quantização do momento transversal.

Finalmente, atentamos para a possibilidade de atribuir um outro caráter à natureza geométrica da interface na direção x , trabalhando com uma interface do tipo *zigzag-zigzag*. Para isso, propomos um outro conjunto de Möbius:

$$\Psi_A(x, 0) = \Psi_B(L - x, d), \quad (5.35)$$

ou, em termos das componentes spinoriais,

$$e^{iKx}\psi_A(x, 0) + e^{-iKx}\psi'_A(x, 0) = e^{iK(L-x)}\psi_B(L - x, d) + e^{-iK(L-x)}\psi'_B(L - x, d). \quad (5.36)$$

Dessas condições, encontramos

$$\tan(q_y d) = -\frac{q_y}{q_x}, \quad (5.37)$$

relação similar àquela obtida no caso *zigzag*, exceto pelo fato de que aqui lidamos com uma inversão na direção das componentes do momento q_x e q_y . Este caso representa uma configuração em que há uma quebra na simetria da rede; não há na interface a estrutura hexagonal característica da rede, como também ilustrado na Figura 7.

6 Efeito de campos elétricos uniformes em nanofitas de grafeno com bordas zigzag

Neste capítulo, investigamos a influência de campos elétricos transversais nas propriedades eletrônicas de nanofitas de grafeno com bordas *zigzag*. Novamente em uma abordagem no limite de baixas energias, investigamos como interações elétricas no regime de campo fraco afetam a dinâmica de férmions de Dirac sem massa confinados em tais geometrias, buscando observar e quantificar a resposta das propriedades físicas dos estados eletrônicos à presença desses campos.

Na primeira parte, resolvemos analiticamente a equação de Dirac incorporando a interação com um campo elétrico transversal uniforme no regime de campo fraco. Reduzimos a equação resultante a uma equação de Airy e escrevemos nossa solução em termos de funções conhecidas denominadas de funções de Airy. Apontamos dois casos distintos que emergem da solução e os associamos com os estados de *bulk* e de borda do sistema. Em seguida, na segunda parte, empregamos as condições de contorno que configuram uma nanofita com bordas *zigzag* e obtemos o espectro de energia

6.1 Partícula de Dirac em campos elétricos uniformes fracos

Mencionamos, no segundo capítulo, que o fluxo Aharonov-Bohm poderia ser codificado na descrição através de um acoplamento na equação de Dirac, embora não tenhamos especificado tal acoplamento precisamente. De modo geral, campos externos podem ser incorporados à descrição quântica por acoplamentos nas equações que regem a dinâmica das partículas em questão. No nosso caso, como já exaustivamente comentado, tal equação é a equação de Dirac. Para introduzir os campos, inserimos o seguinte acoplamento:

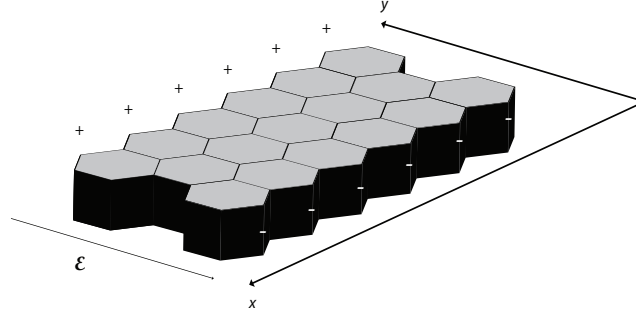
$$q^\mu \longrightarrow q^\mu - eA^\mu, \quad (6.1)$$

onde $A^\mu = (\phi, \vec{A})$, com \vec{A} o potencial vetor e ϕ o potencial escalar. No caso de um campo elétrico, trabalhamos apenas com o potencial escalar. Diferentemente do caso em que trabalhamos com o fluxo Aharonov-Bohm, no segundo capítulo, aqui o potencial escalar deve ser introduzido como um termo do tipo tempo. Desejamos introduzir um campo elétrico uniforme $\vec{\mathcal{E}} = -\mathcal{E}\hat{y}$ transversalmente à fita, como mostrado na Figura 8. Assim, tomamos o potencial escalar como $\phi = \mathcal{E}y$ e inserimos na equação, escrevendo-a como

$$v_F \left[\vec{\sigma} \cdot \vec{q} + \mathcal{I} \left(\frac{e\mathcal{E}}{v_F} \right) y \right] \psi = E\psi, \quad (6.2)$$

onde \mathcal{I} é a matriz identidade. Em forma matricial, tal equação escreve-se como

$$\begin{pmatrix} e\mathcal{E}y & q_x - k_y \\ q_x + k_y & e\mathcal{E}y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}, \quad (6.3)$$

Figura 8 – Nanofita com bordas *zigzag* na presença de um campo elétrico8 - Nanofita com bordas *zigzag* na presença de um campo elétrico uniforme transversal.

onde fizemos $v_F = 1$. Ela produz o seguinte sistema de equações para ψ_A e ψ_B :

$$\begin{cases} (e\mathcal{E}y)\psi_A + (q_x - k_y)\psi_B = E\psi_A \\ (q_x + k_y)\psi_A + (e\mathcal{E}y)\psi_B = E\psi_B \end{cases} \quad (6.4)$$

Isolando ψ_B na segunda equação e substituindo na outra, encontramos

$$(q_x^2 - k_y^2)\psi_A = (E^2 - 2e\mathcal{E}y + e^2\mathcal{E}^2y^2)\psi_A. \quad (6.5)$$

Para $\mathcal{E} \ll 1$, isto é, no limite de campos fracos, podemos negligenciar o termo quadrático na equação acima, o que permite chegar à seguinte equação para a componente ψ_A :

$$-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi_A = (E^2 - 2e\mathcal{E}y)\psi_A. \quad (6.6)$$

Tomando uma solução da forma $\psi_A = e^{iq_x x}\phi_A(y)$, esta equação fornece

$$\frac{d^2\phi_A}{dy^2} + (E' - 2e\mathcal{E}y)\phi_A = 0, \quad (6.7)$$

com $E' = E^2 - q_x^2$. Para escrevê-la em uma forma mais conveniente, fazemos a seguinte mudança de variável:

$$\eta = \frac{E'}{(2e\mathcal{E})^{2/3}} - (2e\mathcal{E})^{1/3}y. \quad (6.8)$$

Com isso, a equação (6.7) pode ser reescrita como

$$\frac{d^2\phi_A}{d\eta^2} + \eta\phi_A = 0. \quad (6.9)$$

Tal equação é conhecida na literatura como equação de Airy, e suas soluções são dadas em termos das funções Ai e Bi , também conhecidas como funções de Airy [101, 102]. Portanto, podemos escrever a solução geral de (6.9) como

$$\phi_A(\eta) = \mathcal{K}_1 Ai(-\eta) + \mathcal{K}_2 Bi(-\eta), \quad (6.10)$$

onde \mathcal{K}_1 e \mathcal{K}_2 são constantes a serem determinadas. A esta solução, na próxima seção, iremos impor condições de contorno características de uma nanofita com bordas *zigzag*.

Podemos distinguir dois casos particulares de acordo com o sinal de η . Quando $\eta > 0$, temos $E' - 2e\mathcal{E}y > 0$, o que a grosso modo¹ associamos a $k_y^2 < 0$ e, portanto, k_y como um número imaginário. Neste caso, as soluções são do tipo oscilante, uma vez que as funções de Airy apresentam um comportamento oscilatório para argumentos negativos. Assim, associamos o caso aos estados de *bulk*. Por outro lado, para $\eta < 0$, encontramos $E' - 2e\mathcal{E}y < 0$, correspondendo a k_y real. Aqui, as soluções crescem ou decrescem exponencialmente, pois as funções de Airy Ai e Bi têm, respectivamente, um comportamento exponencial decrescente e crescente para um domínio positivo. Este comportamento é compatível com a localização nas bordas característica dos estados de borda de uma nanofita. Então, naturalmente associamos este regime aos estados de borda do sistema. Como vemos, temos aqui a mesma relação entre a definição de k_y e a descrição de estados de *bulk* e de borda do caso sem o campo. Na próxima seção, elaboramos e discutimos mais esses pontos.

6.2 Nanofita com bordas zigzag na presença de campos elétricos transversais

Considerando a orientação da nanofita como mostrada na figura, devemos empregar as seguintes condições de contorno:

$$\psi_B(x, 0) = \psi_A(x, d) = 0, \quad (6.11)$$

que em termos de $\phi(\eta)$ escrevem-se como

$$\phi_B \left(\frac{E'}{(2e\mathcal{E})^{2/3}} \right) = \phi_A \left(\frac{E'}{(2e\mathcal{E})^{2/3}} - (2e\mathcal{E})^{1/3}d \right) = 0. \quad (6.12)$$

Dessa forma, codificamos uma configuração onde sítios da subrede B estão na borda $y = 0$ e sítios da subrede A na borda $y = d$. Vamos estudar os dois casos acima mencionados separadamente; primeiramente o correspondente aos estados de *bulk* da nanofita ($\eta > 0$) e, em seguida, aquele associado aos estados de borda ($\eta < 0$).

6.2.1 Caso $\eta > 0$

Aplicando a condição para ψ_B , encontramos a relação

$$\frac{1}{E} [q_x (\mathcal{K}_1 Ai(-\omega) + \mathcal{K}_2 Bi(-\omega)) + (2e\mathcal{E})^{1/3} \mathcal{K}_1 Ai'(-\omega) + (2e\mathcal{E})^{1/3} \mathcal{K}_2 Bi'(-\omega)] = 0, \quad (6.13)$$

¹ Rigorosamente, a comparação via (6.5) não pode ser feita, uma vez que o momento k_y é um operador e implementa uma equação diferencial para $\phi_A(y)$. No caso sem o campo, temos uma equação cuja forma da solução permite escrevê-la em termos dos autovalores.

com $\omega = \frac{E'}{(2e\mathcal{E})^{2/3}}$. As funções Ai' e Bi' são as derivadas de Ai e Bi , respectivamente. Tal condição implica

$$\mathcal{K}_2 = -\frac{q_x Ai(-\omega) + (2e\mathcal{E})^{1/3} Ai'(-\omega)}{q_x Bi(-\omega) + (2e\mathcal{E})^{1/3} Bi'(-\omega)} \mathcal{K}_1 \quad (6.14)$$

$$= \mathcal{R}i(\omega) \mathcal{K}_1, \quad (6.15)$$

onde definimos a razão $\mathcal{R}i(\omega)$ apenas para simplificar a notação. Com isso, a solução geral se escreve como

$$\phi_A(\eta) = \mathcal{K}_1 [Ai(-\eta) + \mathcal{R}i(\omega) Bi(-\eta)]. \quad (6.16)$$

A partir daqui, percebemos que a imposição da outra condição para essa função não parece ser um caminho trivial para a obtenção do espectro analiticamente, uma vez que estaremos lidando com os zeros de uma função que é uma combinação das duas funções de Airy. No entanto, sem recorrer a cálculos numéricos, para ganharmos alguma noção mais clara acerca da resposta dos momentos e, conseqüentemente, das energias, podemos efetuar a escolha $\mathcal{K}_2 = 0$ na relação (6.13), que nos leva a uma solução em termos de Ai :

$$\phi_A(\eta) = \mathcal{K}_1 Ai(-\eta), \quad (6.17)$$

satisfazendo a seguinte relação:

$$q_x Ai(-\omega) + (2e\mathcal{E})^{1/3} Ai'(-\omega) = 0, \quad (6.18)$$

que restringe os valores de q_x em relação a \mathcal{E} . Levando em conta essa escolha, a condição sobre ψ_A , por sua vez, fornece

$$\psi_A(x, d) = \phi_A \left(\frac{E'}{(2e\mathcal{E})^{2/3}} - (2e\mathcal{E})^{1/3} d \right) \quad (6.19)$$

$$= \mathcal{K}_1 Ai \left(-\frac{E'}{(2e\mathcal{E})^{2/3}} + (2e\mathcal{E})^{1/3} d \right) \quad (6.20)$$

$$= Ai(-h) \quad (6.21)$$

$$= 0 \quad (6.22)$$

onde definimos $h = (\omega - (2e\mathcal{E})^{1/3} d)$. Como vemos, esta condição significa que os pontos h são iguais aos zeros da função Ai . Dessa forma, encontramos o espectro de energias

$$E_n^2 = q_x^2 + (2e\mathcal{E})^{2/3} f \left[\frac{3\pi}{8} (4n - 1) \right] + 2e\mathcal{E}d, \quad (6.23)$$

onde $f(x) = x^{2/5} \left(1 + \frac{5}{48} \frac{1}{x^2} - \frac{5}{36} \frac{1}{x^4} + \frac{77125}{82944} \frac{1}{x^6} - \dots \right)$ são os zeros da função Ai [101].

A primeira observação é que os momentos nas direções x e y não apresentam uma relação explícita como no caso livre, ou seja, a presença do campo quebra o vínculo existente entre as componentes q_x e k_y , de modo que agora elas evoluem independentemente. Este

aspecto pode ser particularmente relevante em vista do fato de que, sob essas circunstâncias, o efeito de uma perturbação sobre uma dada direção não afetaria indiretamente os níveis na outra. No entanto, é preciso ressaltar que este caso corresponde a uma escolha particular que restringe os valores de q_x em relação ao campo, válida para algumas situações apenas, e um comportamento mais geral exibindo certo grau de dependência deve emergir da imposição das condições à solução (6.16).

Olhando para (6.23), também atentamos para um outro aspecto. Podemos perceber que a expressão é compatível com o que apontamos logo acima em relação à definição de k_y . Neste caso em particular, podemos associar os dois últimos termos na expressão a um E_y , de modo que teremos que $-k_y^2 > 0$ e, então, k_y como um número imaginário. Porém, salientamos que aqui o campo está dirigido no sentido negativo do eixo y , o que gera um termo positivo $2e\mathcal{E}d$ no espectro. Por outro lado, se consideramos um campo da forma $\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E}\hat{y}$ (que pode ser obtido fazendo $\mathcal{E} \rightarrow -\mathcal{E}$ na expressão acima), tal termo passa a ser negativo. Assim, para que essa definição de k_y seja preservada, devemos ter

$$f > (2e\mathcal{E})^{1/3}d. \quad (6.24)$$

Tal condição é facilmente satisfeita uma vez que $\mathcal{E} \ll 1$ e $f_0 > 1$.

Em adição, observamos também que ela expressa uma contribuição do campo que decresce à medida que o nível energético aumenta. Da definição de f podemos ver que quanto maior o seu argumento, maior valor ela assume, mas mais próximos estão tais pontos. Ou seja, quanto maior o índice n associado à quantização, menor a diferença $f_n - f_{n-1}$ e cada vez menos acentuada é a contribuição do termo proporcional ao campo na expressão. Consequentemente, a distância entre os níveis de energia deslocados pela presença do campo, isto é, a distância entre E_n e E_{n-1} , torna-se menor para maiores valores de n .

Embora estejamos no contexto dos estados de *bulk*, podemos projetar esta situação para o caso dos estados de borda. Supondo por simplificação uma perturbação do campo qualitativamente similar, é possível que, para uma contribuição do momento transversal negativa na expressão da energia (k_y real), alguns dos valores intermediários de q_x encontrados no Capítulo 5 para faixas de Möbius coincidam com tais valores; dessa forma, estados com energia zero apareceriam na presença do campo. É claro que esta é uma análise qualitativa bastante simplificada, tanto pelo fato de que a expressão acima só é válida para certos valores de q_x e \mathcal{E} quanto pela natureza consideravelmente distinta entre estados de borda e de *bulk*; no entanto, ela nos dá uma certa percepção física do efeito em questão. Retomaremos este ponto na próxima subseção.

6.2.2 Caso $\eta < 0$

Quando $\eta < 0$, as funções de Airy não se comportam como funções oscilantes. Assintoticamente, elas se comportam como exponenciais do tipo $e^{-\frac{2}{3}\eta^{2/3}}$ e $e^{\frac{2}{3}\eta^{2/3}}$ [101]. Assumindo

o comportamento de ambas as funções para argumentos positivos, podemos escrever nossa solução geral como

$$\phi_A(\eta) \approx \frac{\mathcal{K}_1}{2\pi\eta^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}\eta^{2/3}} L\left(-\frac{2}{3}\eta^{2/3}\right) + \frac{\mathcal{K}_2}{\pi\eta^{1/4}} e^{\frac{2}{3}\eta^{2/3}} L\left(\frac{2}{3}\eta^{2/3}\right) \quad (6.25)$$

A imposição da primeira condição à componente ϕ_B leva a

$$\mathcal{K}_2 = -\frac{\frac{q_x}{\omega^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}\omega^{2/3}} L\left(-\frac{2}{3}\omega^{2/3}\right) - \omega^{1/4} (2e\mathcal{E})^{1/3} e^{-\frac{2}{3}\omega^{2/3}} M\left(-\frac{2}{3}\omega^{2/3}\right)}{\frac{q_x}{\omega^{1/4}} e^{\frac{2}{3}\omega^{2/3}} L\left(\frac{2}{3}\omega^{2/3}\right) + \omega^{1/4} (2e\mathcal{E})^{1/3} e^{\frac{2}{3}\omega^{2/3}} M\left(\frac{2}{3}\omega^{2/3}\right)} \mathcal{K}_1, \quad (6.26)$$

com ω como antes. As funções L e M são definidas como [101]

$$L(x) = 1 + \frac{3.5}{1!216} \frac{1}{x} + \frac{5.7.9.11}{2!216^2} \frac{1}{x^2} + \frac{7.9.11.13.15.17}{3!216^3} \frac{1}{x^3} + \dots \quad (6.27)$$

e

$$M(x) = 1 - \frac{3.7}{1!216} \frac{1}{x} - \frac{5.7.9.13}{2!216^2} \frac{1}{x^2} - \frac{7.9.11.13.15.19}{3!216^3} \frac{1}{x^3} - \dots \quad (6.28)$$

Mais uma vez por simplificação, vamos definir a razão acima como $\mathcal{H}i(\omega)$, de modo que $\mathcal{K}_2 = \mathcal{H}i(\omega)\mathcal{K}_1$. Assim, escrevemos

$$\phi_A(\eta) \approx \frac{\mathcal{K}_1}{2\pi\eta^{1/4}} \left[e^{-\frac{2}{3}\eta^{2/3}} L\left(-\frac{2}{3}\eta^{2/3}\right) + 2\mathcal{H}i(\omega) e^{\frac{2}{3}\eta^{2/3}} L\left(\frac{2}{3}\eta^{2/3}\right) \right]. \quad (6.29)$$

Como vemos, um dos termos exponenciais apresenta um dado peso, representado por $\mathcal{H}i(\omega)$ e pela quantidade codificada na diferença entre $L(x)$ e $L(-x)$. Isso pode significar, dependendo do valor desse peso, que os estados eletrônicos estão mais (ou menos) localizados em uma das bordas em relação à outra. Intuitivamente, associamos esta característica ao fato de que a borda mais próxima ao pólo positivo do campo é mais populosa do que a mais distante.

Por fim, podemos impor a condição sobre a componente ϕ_A . Ela nos dá

$$e^{\frac{4}{3}h^{2/3}} = -\frac{L\left(-\frac{2}{3}h^{2/3}\right)}{2\mathcal{H}i(\omega)L\left(\frac{2}{3}h^{2/3}\right)}. \quad (6.30)$$

Apesar de escrever a relação em uma forma parecida com aquela do caso sem o campo, vemos que, da mesma forma que para $\eta > 0$, a percepção física não é tão clara como lá.

Finalmente, resta-nos observar que, em virtude da forma das nossas soluções, não é trivial impor as condições de Möbius e, assim, descrever uma faixa de Möbius analiticamente. Aparentemente, não há propriedades conhecidas que permitam descobrir como as funções de Airy, suas derivadas e as funções auxiliares se comportam sob tais condições de modo que possamos extrair propriedades físicas analiticamente. Por essa razão, limitamo-nos ao estudo das nanofitas e às conjecturas. Podemos, entretanto, fazer uma análise qualitativa. Supondo que aqui temos um comportamento similar àquele encontrado no caso dos estados de borda para faixas na ausência de campo, os níveis longitudinais devem apresentar uma duplicidade livre quanto à periodicidade, ou seja, a regra de quantização deve gerar efetivamente níveis periódicos e antiperiódicos sem um parâmetro típico

separando-os. Sendo assim, argumentamos que um efeito de campo tal como discutido na subseção anterior possivelmente cancelaria a expressão da energia para valores de q_x que corresponderiam ao caráter antiperiódico. Como os níveis periódicos estão presentes também nos anéis periódicos e os mesmos não apresentam estados de energia nula, achamos válido inferir que, para a faixa de Möbius, a perturbação gerada pela presença do campo anularia alguns dos níveis adicionais equivalentes ao caráter antiperiódico. Assim sendo, existiriam estados de energia nula localizados nas bordas da faixa e ela se comportaria como um isolante topológico. Ressaltamos, porém, que em nossa descrição tal efeito deve ser aproximado e menos acentuado do que na formulação *tight-binding*; o número de estados com $E \approx 0$ encontrados deve ser bastante reduzido, porque no nosso caso estamos nos limitando às proximidades dos pontos de Dirac; momentos distantes desses pontos são considerados na abordagem *tight-binding*. Posteriores cálculos numéricos poderão testar todas estas conjecturas.

7 Extensões auto-adjuntas do operador de Dirac do grafeno e o confinamento de férmions sem massa em anéis 2D

Neste capítulo, investigamos os aspectos matemáticos inerentes ao problema do confinamento em nanoestruturas de grafeno, tais como nanofitas e anéis bidimensionais. Olhando mais rigorosamente para o papel da teoria dos operadores lineares auto-adjuntos em espaços de Hilbert na modelagem de sistemas confinantes relativísticos, investigamos o comportamento do operador de Dirac livre 2D relativamente às condições de contorno do problema e estabelecemos suas possíveis extensões auto-adjuntas ou, equivalentemente, seus conjuntos fisicamente aceitáveis de condições de contorno.

Na primeira seção, introduzimos os conceitos mais elementares do aparato matemático necessário para os propósitos acima referidos. É realizada uma breve apresentação dos elementos através dos quais são definidos os objetos matemáticos que serão centrais em nossa investigação - tais como operadores adjuntos, simétricos, auto-adjuntos e a noção de extensão auto-adjunta -, juntamente com as convenções adotadas no trabalho.

Na segunda seção, calculamos e analisamos as relações a partir das quais é possível introduzir a noção de *self-adjointness* para os operadores de Dirac unidimensionais correspondentes às direções x e y . Partindo de uma análise desses operadores, construímos a noção para o operador 2D e estabelecemos conjuntos admissíveis de condições de contorno para o problema bidimensional, sempre ressaltando o significado físico das mesmas.

Na terceira seção, estudamos o problema do confinamento em anéis bidimensionais periódicos e de Möbius à luz da construção da seção anterior. Provamos a *self-adjointness* do operador de Dirac para os conjuntos propostos no Capítulo 3, isto é, mostramos que as condições do *MIT bag model* em conjunto com as condições periódicas ou de Möbius são conjuntos matematicamente aceitáveis. Além disso, o mesmo é mostrado para faixas com bordas *zigzag*.

7.1 Operadores lineares auto-adjuntos em espaços de Hilbert

A noção de *self-adjointness* desempenha um papel crucial no formalismo matemático da mecânica quântica. Como bem se sabe, os observáveis físicos da teoria quântica são descritos por meio de operadores que são, por definição, auto-adjuntos. Assim, essa questão passa a representar um alicerce fundamental na construção formal da teoria. Aqui, apresentamos uma breve síntese de algumas das noções e definições necessárias para a caracterização formal desse conceito. Para uma apresentação mais ampla e detalhada dessas definições, ver as Referências [103, 104, 105, 106].

Dado um espaço de Hilbert \mathcal{H} qualquer, denotamos convencionalmente um operador T em \mathcal{H} pelo par $(T, D(T))$, onde $D(T) \subset \mathcal{H}$ é dito o domínio de T . Dizemos que T é

densamente definido em \mathcal{H} se $D(T)$ é denso em \mathcal{H} .

Dado um operador $(T, D(T))$ densamente definido em \mathcal{H} , definimos o seu adjunto

$$T^\dagger : D(T^\dagger) \subset \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H} \quad (7.1)$$

como o operador a partir do qual associamos um $T^\dagger\phi$ para todo ϕ em algum $D(T^\dagger) \subset \mathcal{H}$, e para o qual vale a seguinte identidade:

$$\langle T^\dagger\phi, \psi \rangle = \langle \phi, T\psi \rangle, \quad (7.2)$$

$\forall \psi \in D(T)$, onde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denota o produto interno em \mathcal{H} . Desse modo, fica automaticamente definido o domínio de T^\dagger como o conjunto dos ϕ satisfazendo tal relação, ou seja:

$$D(T^\dagger) = \{ \phi \in \mathcal{H} \mid \langle T^\dagger\phi, \psi \rangle = \langle \phi, T\psi \rangle; \forall \psi \in D(T) \}. \quad (7.3)$$

O operador $(T, D(T))$ é dito um operador simétrico ou hermitiano se $T\psi = T^\dagger\psi$, $\forall \psi \in D(T) \subset D(T^\dagger)$. Equivalentemente, a relação (7.2) reescrita como

$$\langle T\phi, \psi \rangle = \langle \phi, T\psi \rangle, \quad (7.4)$$

$\forall \psi, \phi \in D(T)$, reproduz essa propriedade. Se, além disso, tivermos $D(T) = D(T^\dagger)$, dizemos que o operador é auto-adjunto. Portanto, para introduzirmos a noção de *self-adjointness*, devemos impor que T seja formalmente auto-adjunto, isto é, que $T = T^\dagger$, e que adicionalmente os domínios sejam idênticos.

Nas seções seguintes, encontramos algumas extensões auto-adjuntas para operadores de Dirac do grafeno unidimensionais e construímos, a partir dessas, a mesma noção para o caso bidimensional através da introdução de conjuntos de condições de contorno aceitáveis oriundas do caso 1D. Tecnicamente, o método empregado consiste em partir de operadores simétricos cujos domínios são restritos e não implicam *self-adjointness*, correspondendo a $D(T) \subset D(T^\dagger)$, e estendê-los até que a condição $D(T) = D(T^\dagger)$ seja satisfeita. Dessa forma, fica sempre subentendida a existência de um tal operador simétrico não auto-adjunto como ponto de partida.

Além disso, lidaremos em particular com funções que vivem em $L^2([a, b])$, isto é, funções ditas de quadrado integrável, cujo produto interno definimos como:

$$\langle \phi, \psi \rangle = \int_a^b (\phi^* \psi) d\alpha, \quad (7.5)$$

onde ϕ^* denota o complexo conjugado de ϕ , e que satisfazem $\int_a^b |\psi(\alpha)|^2 d\alpha < \infty$.

7.2 Self-Adjointness e conjuntos aceitáveis de condições de contorno no grafeno

Inicialmente, consideramos a equação de Dirac para os elétrons livres no grafeno nas proximidades dos pontos de Dirac \vec{K} :

$$T\Psi(x, y) = -iv_F \left(\sigma_x \frac{\partial}{\partial x} + \sigma_y \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi(x, y) = E\Psi(x, y). \quad (7.6)$$

Cada componente spinorial é uma função de quadrado integrável, ou seja, trata-se de um elemento do espaço $L^2(\mathbb{R}^2)$, e o operador de Dirac T é uma aplicação da forma:

$$T : D(T) \subset L^2(\mathbb{R}^2) \oplus L^2(\mathbb{R}^2) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^2) \oplus L^2(\mathbb{R}^2), \quad (7.7)$$

formalmente definido em (7.6). Por definição, um spinor é um elemento de um espaço de Hilbert que é a soma direta de espaços de Hilbert [103, 107], usualmente denotada por \oplus ; por essa razão, escrevemos nossa aplicação como acima. No domínio $D(T)$, encontram-se as condições de contorno características do problema físico a ser estudado. Para ser fisicamente aceitável, o operador T deve ser auto-adjunto e, portanto, respeitar as condições $T = T^\dagger$ e $D(T) = D(T^\dagger)$.

Para efetuarmos um estudo a respeito das condições de contorno admissíveis para o spinor $\Psi(x, y)$, fazemos inicialmente uso do fato de que o espaço $L^2(\mathbb{R}^2)$ é isomorfo a $L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2(\mathbb{R})$, onde o símbolo \otimes denota o produto tensorial de espaços [103]. Isso significa, basicamente, que tais espaços são equivalentes de um ponto de vista algébrico, apresentando um comportamento similar no que diz respeito às suas propriedades gerais. Esse fato nos permite modelar o nosso problema utilizando o formalismo de produtos tensoriais de espaços de Hilbert, assim como usualmente acontece em mecânica quântica. Dessa forma, podemos recorrer à análise dos operadores unidimensionais T_x e T_y separadamente e construir as condições de contorno para o caso bidimensional a partir das condições associadas aos casos em uma dimensão.

Em primeiro lugar, tomamos uma região $R \subset \mathbb{R}^2$ definida da seguinte forma:

$$R = \{(x, y) \mid x \in [0, l], y \in [0, d]\}, \quad (7.8)$$

para a região de confinamento, e definimos os operadores T_x e T_y como:

$$(T_x, D(T_x)) = \begin{cases} T_x : D(T_x) \subset L^2([0, l]) \oplus L^2([0, l]) \longrightarrow L^2([0, l]) \oplus L^2([0, l]) \\ T_x = -iv_F \sigma_x \frac{d}{dx} \end{cases} \quad (7.9)$$

e

$$(T_y, D(T_y)) = \begin{cases} T_y : D(T_y) \subset L^2([0, d]) \oplus L^2([0, d]) \longrightarrow L^2([0, d]) \oplus L^2([0, d]) \\ T_y = -iv_F \sigma_y \frac{d}{dy} \end{cases} \quad (7.10)$$

Para esses operadores, através da imposição da *self-adjointness*, encontraremos conjuntos de condições de contorno fisicamente aceitáveis separadamente.

Como sabemos dos textos mais elementares de mecânica quântica [108, 109], uma condição necessária (mas não suficiente) para que operadores possam designar observáveis físicos é que tais operadores sejam, por definição, simétricos ou hermitianos. Então, em face dessa necessidade, o primeiro passo que damos em direção à determinação das condições de contorno físicas é impor a condição de simetria aos operadores definidos em (7.9) e (7.10). Para isso, tomamos o produto interno:

$$\langle \phi, T_\alpha \psi \rangle = \int_a^b \phi^*(T_\alpha \psi) d\alpha, \quad \alpha = x, y, \quad (7.11)$$

e impomos $\langle \phi, T_\alpha \psi \rangle = \langle T_\alpha^\dagger \phi, \psi \rangle$, com $T_\alpha \psi = T_\alpha^\dagger \psi$, $\forall \psi \in D(T_\alpha)$. Aqui, tomamos um $\psi = \psi(\alpha) = \begin{pmatrix} \psi_A(\alpha) \\ \psi_B(\alpha) \end{pmatrix}$, e $[a, b] = [0, l]$ para a direção x e $[a, b] = [0, d]$ para y . Para a direção x , podemos, então, escrever (7.11) como:

$$\langle \phi, T_x \psi \rangle = \int_0^l \phi^* (T_x \psi) dx \quad (7.12)$$

$$= \int_0^l \phi^* \left(-iv_F \sigma_x \frac{d}{dx} \psi \right) dx \quad (7.13)$$

$$= -iv_F [\phi_A^*(x)\psi_B(x)|_0^l + \phi_B^*(x)\psi_A(x)|_0^l] + \int_0^l \left(-iv_F \sigma_x \frac{d}{dx} \phi^* \right) \psi dx \quad (7.14)$$

$$= -iv_F [\phi_A^*(x)\psi_B(x)|_0^l + \phi_B^*(x)\psi_A(x)|_0^l] + \langle T_x \phi, \psi \rangle. \quad (7.15)$$

Portanto, para que T_x seja simétrico, devemos ter:

$$\phi_A^*(l)\psi_B(l) - \phi_A^*(0)\psi_B(0) + \phi_B^*(l)\psi_A(l) - \phi_B^*(0)\psi_A(0) = 0. \quad (7.16)$$

Da mesma forma, para T_y temos:

$$\langle \phi, T_y \psi \rangle = \int_0^d \phi^* (T_y \psi) dy \quad (7.17)$$

$$= \int_0^d \phi^* \left(-iv_F \sigma_y \frac{d}{dy} \psi \right) dy \quad (7.18)$$

$$= -iv_F [\phi_A^*(y)\psi_B(y)|_0^d - \phi_B^*(y)\psi_A(y)|_0^d] + \int_0^d \left(-iv_F \sigma_y \frac{d}{dy} \phi^* \right) \psi dy \quad (7.19)$$

$$= -iv_F [\phi_A^*(y)\psi_B(y)|_0^d - \phi_B^*(y)\psi_A(y)|_0^d] + \langle T_y \phi, \psi \rangle. \quad (7.20)$$

A imposição de simetria à equação (7.20) nos fornece a seguinte relação:

$$\phi_A^*(d)\psi_B(d) - \phi_A^*(0)\psi_B(0) - \phi_B^*(d)\psi_A(d) + \phi_B^*(0)\psi_A(0) = 0. \quad (7.21)$$

De posse das relações (7.16) e (7.21), podemos facilmente observar algumas possíveis relações que implicam $D(T_\alpha) = D(T_\alpha^\dagger)$, requisito restante para se caracterizar a *self-adjointness*, e estabelecer algumas condições de contorno unidimensionais admissíveis para a construção de um conjunto de condições de contorno para o caso bidimensional. De imediato, podemos reconhecer alguns dos conjuntos mais tradicionais satisfazendo tal requisito¹. Em primeiro lugar, destacamos as condições de contorno provenientes do *MIT bag model* [95, 96, 97]:

$$\begin{cases} \psi_A(0) = i\psi_B(0) \\ \psi_A(l) = -i\psi_B(l) \end{cases} \iff \pm i\beta \sigma_x \psi(x)|_{0,l} = \psi(x)|_{0,l}, \quad (7.22)$$

¹ Aqui é válido destacar que o problema de extensões auto-adjuntas do operador de Dirac 1D convencional $H_x = -i\alpha_x \frac{d}{dx} + \beta mc^2$ já foi estudado anteriormente (ver, por exemplo, as Referências [90, 110]), e algumas das condições mais tradicionais foram verificadas para tal operador. O operador 2×2 na direção x analisado aqui, a saber T_x , deve se comportar de maneira similar.

para T_x , e

$$\begin{cases} \psi_A(0) = \psi_B(0) \\ \psi_A(d) = -\psi_B(d) \end{cases} \iff \pm i\beta\sigma_y\psi(y)|_{0,d} = \psi(y)|_{0,d}, \quad (7.23)$$

para o operador T_y . Vemos que, para as relações (7.16) e (7.21) serem satisfeitas, devemos ter necessariamente também:

$$\begin{cases} \phi_A(0) = i\phi_B(0) \\ \phi_A(l) = -i\phi_B(l) \end{cases} \quad (7.24)$$

e

$$\begin{cases} \phi_A(0) = \phi_B(0) \\ \phi_A(d) = -\phi_B(d) \end{cases}. \quad (7.25)$$

Em outros termos, isso significa que temos $D(T_\alpha) = D(T_\alpha^\dagger)$. Portanto, verificamos que as condições de contorno características do *MIT bag model* são fisicamente aceitáveis, em ambas as direções, no âmbito do grafeno. Além disso, destacamos também as condições de contorno periódicas e antiperiódicas típicas de nanotubos de carbono, isto é, condições que exibem um fase como $\psi(a) = \pm e^{-i\xi}\psi(b)$, que, através das mesmas relações, são também verificadas para elementos do conjunto $D(T_\alpha^\dagger)$, ou seja, temos $\phi(a) = \pm e^{-i\xi}\phi(b)$.

Já focando especificamente no contexto do grafeno, invocamos, por fim, as condições de contorno características do confinamento em nanofitas com bordas *zigzag*, *Klein-zigzag* e *armchair* e as condições (anti)periódicas para interfaces construídas a partir dessas bordas. Primeiramente, consideremos o caso com bordas *zigzag*, onde o sistema é configurado por meio do seguinte conjunto de condições:

$$\psi_A(a) = \psi_B(b) = 0. \quad (7.26)$$

É fácil ver que, com (7.26), as expressões (7.16) e (7.21) são satisfeitas apenas se $D(T) = D(T^\dagger)$, o que garante tal conjunto como admissível. No caso *Klein-zigzag*, as bordas se caracterizam através de

$$\psi_A(a) = \psi_A(b) = 0 \quad (7.27)$$

ou

$$\psi_B(a) = \psi_B(b) = 0. \quad (7.28)$$

Novamente, a igualdade entre os domínios também é obtida para estas condições. As condições características do modelo vigente para nanofitas de bordas *armchair* são mais elaboradas e serão vistas com mais detalhes no próximo capítulo.

Já para as interfaces, encontramos que condições (anti)periódicas de interface *zigzag-zigzag*,

$$\psi_{A/B}(a) = \pm\psi_{B/A}(b) \quad (7.29)$$

e de interface *zigzag-Klein*,

$$\psi_{A/B}(a) = \pm\psi_{A/B}(b), \quad (7.30)$$

ambas não satisfazem a condição de *self-adjointness* qualquer que seja a direção. Por outro lado, para uma interface misturando as componentes encontramos uma característica incomum. Verificamos que as condições

$$\begin{cases} \psi_A(a) = \pm\psi_B(b) \\ \psi_B(a) = \pm\psi_A(b) \end{cases} \quad (7.31)$$

são aceitáveis apenas para a direção x ; na direção y , a relação (7.21) não se anula para domínios iguais. Estas interfaces, embora nomeadas com terminologia usual do grafeno, não são propriamente físicas, porque para sistemas físicos (anti)periódicos as componentes spinoriais devem ser iguais; com isso, as condições recaem nas (anti)periódicas convencionais. Este fato é reforçado logo abaixo. Apesar disso, é ao menos curioso que exista tal assimetria em relação à direção escolhida para operadores de Dirac.

7.2.1 Caso bidimensional

Em posse dessas condições, podemos finalmente partir para o problema bidimensional e construir as condições de contorno acessíveis ao operador T , definido em (7.6), tal que ele seja verdadeiramente auto-adjunto. Seja, por hipótese,

$$\Psi(x, y) = \begin{pmatrix} F_A(x)G_A(y) \\ F_B(x)G_B(y) \end{pmatrix} \quad (7.32)$$

o spinor de Dirac em (7.6). Invocando (7.22) e (7.23), logo percebemos que elas nos fornecem a possibilidade de lidar com as condições do *MIT bag model* também no caso bidimensional, como era de esperar. No entanto, para isso, notamos que neste caso há a necessidade de uma pequena restrição imposta às funções em (7.32). Se considerarmos a aplicação de tais condições unicamente em uma fixada direção, percebemos que a mesma condição só se manifesta em $\Psi(x, y)$ se as funções da variável associada à outra direção forem iguais. Ou seja, se aplicamos (7.23) às funções $G_A(y)$ e $G_B(y)$, podemos escrever

$$\begin{cases} +i\beta\sigma_y\Psi(x, y)|_{y=0} = \Psi(x, y)|_{y=0} \\ -i\beta\sigma_y\Psi(x, y)|_{y=d} = \Psi(x, y)|_{y=d} \end{cases} \quad (7.33)$$

para Ψ apenas se $F_A(x) = F_B(x)$. O mesmo vale para (7.22). Como sabemos, essa imposição é bastante natural no contexto do confinamento em anéis. Porém, este aspecto representa apenas um indício físico sobre a forma que Ψ deve ter. Na realidade, um fato muito mais geral proíbe escrever o spinor $\Psi(x, y)$ como em (7.32). Na nossa construção, a função Ψ também deve ser escrita como um produto $P(x, y) = F(x)G(y) \in (L^2(\mathbb{R}) \oplus L^2(\mathbb{R})) \otimes (L^2(\mathbb{R}) \oplus L^2(\mathbb{R}))$, ou seja, tal função deve ser um spinor de duas componentes formado a partir do produto de dois outros spinores. Se ambas as funções $F(x)$ e $G(x)$ forem spinores (matrizes) 2×1 , isto é, se as duas possuírem duas componentes

distintas, então não há produto (matricial) que permita escrevê-las da referida forma. Só se torna possível se pelo menos uma for uma função usual. Assim, devemos ter

$$\Psi(x, y) = \begin{pmatrix} G_A(y) \\ G_B(y) \end{pmatrix} F(x) \quad (7.34)$$

ou

$$\Psi(x, y) = \begin{pmatrix} F_A(x) \\ F_B(x) \end{pmatrix} G(y) \quad (7.35)$$

$\in (L^2(\mathbb{R}) \oplus L^2(\mathbb{R})) \otimes L^2(\mathbb{R}) \equiv (L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2(\mathbb{R})) \oplus (L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2(\mathbb{R}))$. Lembramos que $F(x)$ e $G(y)$ como acima são ainda spinores, só que definidos em $L^2(\mathbb{R}) \oplus \emptyset$.

Seja o primeiro caso. Este fato implica que o operador T_x agirá sobre um elemento de $L^2(\mathbb{R}) \oplus \emptyset$, ou seja,

$$-iv_F \sigma_x \frac{d}{dx} F(x) = E_x F(x), \quad (7.36)$$

que é equivalente a um operador diferencial $T_D = -iv_F \frac{d}{dx}$ usual agindo sobre a função $F(x)$. O mesmo procedimento aplicado anteriormente leva a já conhecida relação entre as condições de contorno do operador momento [105, 106]. Sendo assim, em nosso problema devem ser satisfeitas simultaneamente as relações

$$\mathcal{G}_A^*(d)G_B(d) - \mathcal{G}_A^*(0)G_B(0) - \mathcal{G}_B^*(d)G_A(d) + \mathcal{G}_B^*(0)G_A(0) = 0, \quad (7.37)$$

para a direção y , e

$$\mathcal{F}^*(l)F(l) - \mathcal{F}^*(0)F(0) = 0, \quad (7.38)$$

para a direção x , onde \mathcal{G} e \mathcal{F} são funções que vivem nos domínios dos adjuntos de T_y e T_x , respectivamente. O segundo caso é análogo. Daqui, para que o operador 2D seja verdadeiramente auto-adjunto, isto é, para que $D(T) = D(T^\dagger)$, é preciso que as relações acima sejam satisfeitas simultaneamente com condições iguais para $G \in D(T_y)$ e $\mathcal{G} \in D(T_y^\dagger)$ e para $F \in D(T_x)$ e $\mathcal{F} \in D(T_x^\dagger)$. Tomando $G = \mathcal{G}$ e $F = \mathcal{F}$, temos

$$\begin{cases} |F(l)| = |F(0)| \\ \mathcal{G}_A^*(d)G_B(d) - \mathcal{G}_A^*(0)G_B(0) = \mathcal{G}_B^*(d)G_A(d) - \mathcal{G}_B^*(0)G_A(0) \end{cases} \quad (7.39)$$

As condições de contorno que satisfazem estas relações simultaneamente representam os conjuntos admissíveis ao problema do confinamento no grafeno, e os pares $(T, D(T))$, com domínios incorporando tais condições, correspondem às extensões auto-adjuntas do operador de Dirac 2D do grafeno.

Por fim, vale destacar a possibilidade de adoção conjunta das condições periódicas (antiperiódicas) e as do *MIT bag model*, *zigzag*, *armchair* e Klein. Através dos casos 1D acima destacados, é possível também expressar essas mesmas condições em termos de Ψ e escrever uma série de combinações possíveis envolvendo elas e outras condições. Em particular, por razões que residem na próxima seção, chamamos a atenção para a possibilidade da utilização combinada das condições do *MIT bag model* ou do tipo *zigzag*, em uma dada direção, e das periódicas (antiperiódicas) na outra.

7.3 Aspectos formais do confinamento em anéis periódicos e de Möbius

Como sabemos, o confinamento de partículas em regime relativístico se revela uma questão muito mais delicada do que no caso não relativístico. Apesar de ambas as situações estarem relacionadas ao aparato formal da teoria dos operadores auto-adjuntos em espaços de Hilbert, é apenas no caso relativístico que o papel fundamental da mesma se torna mais evidente em um nível elementar, como no caso do confinamento em um poço unidimensional [90, 91, 110]. Dessa forma, é naturalmente lançado um olhar mais profundo acerca da importância do aspecto matemático do problema e, mais especificamente, da questão da *self-adjointness*. No grafeno, por se tratar de um cenário análogo, a situação é bem semelhante.

Para modelarmos o confinamento de férmions de Dirac sem massa do grafeno em anéis 2D periódicos e de Möbius em uma abordagem mais geral, lidamos com quatro classes de condições de contorno, cada uma associada a um caso em particular. Nos dois primeiros, utilizamos para garantir o confinamento transversal as condições do *MIT bag model*, o que representa uma maneira mais geral de modelar o problema, uma vez que não é levada em conta a natureza das bordas do grafeno. Para o caso periódico, temos:

$$\begin{cases} \pm i\beta\sigma_y\Psi|_{y=0,d} = \Psi|_{y=0,d} \\ \Psi(0, y) = \Psi(l, y) \end{cases}, \quad (7.40)$$

Já para o caso de Möbius, propusemos no Capítulo 3:

$$\begin{cases} \pm i\beta\sigma_y\Psi|_{y=0,d} = \Psi|_{y=0,d} \\ \Psi(0, y) = \Psi(l, d - y) \end{cases}. \quad (7.41)$$

Busquemos, portanto, mostrar que tais condições são permitidas em uma descrição física. Primeiramente, tomamos $F_A(x) = F_B(x) = F(x)$ para ambos os casos, como esclarecido na seção anterior. Sendo assim, é fácil ver que, da utilização de (7.23) sobre as funções $G_A(y)$ e $G_B(y)$ e da condição periódica sobre $F(x)$, é possível termos (7.40) admissível para Ψ . Para a faixa de Möbius, procedemos de uma outra forma. A aplicação das condições do *MIT bag model* nos permite escrever o spinor (7.32) com $G_A(y) = f(\theta) \cos(q_y y) + g(\theta) \sin(q_y y)$, a partir do qual escrevemos

$$G_A(d - y) = (-1)^t [f(\theta) \sin(q_y y) + g(\theta) \cos(q_y y)] \quad (7.42)$$

onde t é um natural associado à quantização de q_y e $f(\theta) = \cos(\frac{\theta}{2})$ e $g(\theta) = \sin(\frac{\theta}{2})$. Com isso, devemos ter $G_A(y) = G_A(d - y)$ e, conseqüentemente, $\Psi_A(0, y) = \Psi_A(l, d - y)$ apenas em duas situações aceitáveis implicando uma única condição sobre $F(x)$. Quando t é par, fazemos $\sin(q_y y) = \cos(q_y y)$, que corresponde a ângulos $q_y y = \{\frac{\pi}{4}, \frac{5\pi}{4}, \dots\}$, o que implica:

$$F(0)G_A(y) = F(l)G_A(y) \quad (7.43)$$

e, portanto, $F(0) = F(l)$, uma condição periódica na direção x . Analogamente, quando t é ímpar, temos $\sin(q_y y) = -\cos(q_y y)$, correspondendo a ângulos $q_y y = \{\frac{3\pi}{4}, \frac{7\pi}{4}, \dots\}$,

levando à mesma condição sobre $F(x)$. É importante destacar que as situações podem ser invertidas, de modo a produzirem a condição antiperiódica $F(0) = -F(l)$.

Para a função G_B , a análise é exatamente a mesma. Portanto, vemos que é possível escrever (7.41) por meio de condições de contorno 1D aceitáveis que se aplicam individualmente às funções em (7.32). Entretanto, um pequeno detalhe na análise acima deve ser salientado. Se é requerida uma única condição sobre a direção x , as soluções correspondentes abrangem apenas uma determinada parcela da solução completa encontrada no Capítulo 3. Ou seja, para o caso descrito logo acima, onde recaímos em uma condição periódica, automaticamente incorporamos apenas as energias associadas a

$$e^{-iq_x l} = 1, \quad (7.44)$$

uma vez que $t + h$ é sempre par. Da mesma forma, se nós lidamos com a condição antiperiódica $F(0) = -F(l)$, temos $t + h$ sempre ímpar. Aqui, $h = (k - 1)/2$. No entanto, este cenário é válido apenas quando desconsideramos o fato de que, para uma dada paridade de t , as identidades a serem satisfeitas não precisam ser as mesmas para valores distintos de y , ou seja, não há nada que impeça que façamos $\sin(q_y y) = \cos(q_y y)$ para determinados valores de y e $\sin(q_y y) = -\cos(q_y y)$ para outros. Isso significa que, fixada a paridade de t , as posições na faixa podem ditar ângulos e, conseqüentemente, a condição sobre $F(x)$; como destacado logo acima, as mesmas identidades são satisfeitas tanto com a condição periódica quanto com a antiperiódica. Sendo assim, podemos associar as duas condições ao mesmo tempo para t par ou ímpar, desde que as posições sejam distintas. Por exemplo, quando t é par, as posições com h par levam à relação $\sin(q_y y) = \cos(q_y y)$, enquanto as com h ímpar produzem $\sin(q_y y) = -\cos(q_y y)$ e, portanto, a condição periódica é produzida para determinadas posições e a condição antiperiódica para outras. O mesmo vale para t ímpar. Dessa forma, cada situação pode carregar as duas condições ao mesmo tempo para valores distintos da posição na faixa. Portanto, verificamos a consistência do modelo proposto no Capítulo 3 para o confinamento de partículas de Dirac sem massa em faixas de Möbius.

Similarmente, é fácil ver que o conjunto composto pelas condições do *MIT bag model* e pelas condições de Möbius cruzando as subredes não é aceitável. Para isso, aplicamos as condições do *MIT bag model* e obtemos $G_B(y) = f(\theta) \cos(q_y y) - g(\theta) \sin(q_y y)$ e $G_A(d - y)$ como no caso anterior. Assim, para t par, devemos ter simultaneamente $\sin(q_y y) = \cos(q_y y)$ e $\sin(q_y y) = -\cos(q_y y)$ e a igualdade entre as componentes não é satisfeita para um dado y , implicando uma inconsistência. O mesmo vale para t ímpar.

Por fim, olhemos para os dois outros casos. Aqui, é considerado o papel da natureza das bordas no processo de confinamento e, por conseqüência, nas propriedades do sistema. Mais especificamente, trabalhamos com anéis com bordas *zigzag*. No caso periódico, basta substituir a condição do *MIT bag model* em (7.40) pela condição *zigzag*. Novamente, a partir dos casos unidimensionais é fácil ver que constituem um conjunto acessível ao operador.

Por outro lado, para uma faixa de Möbius, tal configuração implica novas condições do tipo Möbius para a direção x , condições que sejam compatíveis com o aspecto geométrico das bordas *zigzag*. No Capítulo 5, propusemos a adoção combinada de:

$$\Psi(x, 0) = \Psi(x, d) = 0 \tag{7.45}$$

e

$$\begin{cases} \Psi_A(0, y) = \Psi_B(l, d - y) \\ \Psi_B(0, y) = \Psi_A(l, d - y) \end{cases} . \tag{7.46}$$

Como uma análise mais cuidadosa já foi realizada na situação anterior e é muito mais trivial olhar direto para a quantização do momento, aqui não procederemos da mesma forma; faremos uma análise mais objetiva. No referido capítulo, vimos que a imposição das condições *zigzag* leva a uma quantização controlada por um certo parâmetro γ , a saber $e^{-i(K+q_x)L} = (-1)^\gamma$. Para $\gamma = 0$, temos $e^{-i(K+q_x)L} = 1$, que é equivalente a $F(0) = e^{-iKL}F(L)$, uma condição periódica acessível ao operador de Dirac na direção x . Para $\gamma = 1$, temos a condição antiperiódica $F(0) = -e^{-iKL}F(L)$, igualmente acessível.

8 Sobre as condições de contorno em nanofitas com bordas *armchair*

As condições de contorno que caracterizam o modelo para descrever nanofitas com bordas *armchair* constituem um conjunto ligeiramente mais rebuscado e merecem um pouco mais de atenção do que aquelas típicas de fitas *zigzag* vistas no capítulo anterior. Neste capítulo, investigamos então a consistência formal de tal modelo à luz do aparato da teoria dos operadores em espaços de Hilbert e apontamos para a importância da análise formal do problema do confinamento.

Na primeira seção, apresentamos um breve histórico acerca do modelo em questão e fazemos uma breve revisão de alguns dos conceitos relativos à física do grafeno necessários para a aplicação do mesmo. Na segunda seção, demonstramos formalmente a consistência matemática do referido modelo invocando a noção de *self-adjointness* enquanto aspecto chave para a descrição quântica. Ao final, examinamos um Hamiltoniano problemático que produz inconsistências na presença de tais condições e provamos que o problema tem sua origem nesse aparato formal, mostrando assim a relevância desse aspecto.

8.1 Breve histórico e noções preliminares

Como vimos, o limite do contínuo suporta descrições de nanoestruturas através da imposição de condições de contorno ao problema de Dirac correspondente. O modelo aceito atualmente para tratar nanofitas com bordas *armchair* na descrição de baixas energias foi originalmente proposto por Brey e Fertig [99, 100]. Lá, é proposto um conjunto de quatro condições de contorno que, em oposição ao caso de bordas *zigzag*, misturam as funções de onda associadas aos dois vales \vec{K} e \vec{K}' . Ou seja, é destacado que as componentes dos spinores relativos a ambos os vales são igualmente decisivas para uma descrição consistente de nanofitas com bordas *armchair*. Algumas das propriedades físicas previstas teoricamente por formulações *tight-binding* anteriores [32, 33, 34] são obtidas para a abordagem do contínuo através de tal modelo.

Antes de partir em direção ao objetivo chave deste capítulo, vamos primeiramente caracterizar o cenário no qual vamos trabalhar. Como exposto na primeira seção do Capítulo 5, há duas diferentes equações dependendo do ponto para o qual a vizinhança é considerada. Relativamente ao ponto de Dirac \vec{K} , pontos em sua vizinhança apresentam uma dispersão relativística que, no espaço real, leva a uma descrição no contínuo na qual elétrons obedecem a uma determinada equação de Dirac. Similarmente, o regime de pequenos momentos nas proximidades do outro ponto de Dirac \vec{K}' também leva a uma equação de Dirac, mas com uma ligeira diferença de sinal. Neste esquema, é bastante usual implementar uma descrição em termos de uma equação de Dirac 4×4 , onde a

informação compreendendo ambos os vales é levada em consideração.

Para os pontos de Dirac definidos como $\vec{K} = (K, 0)$ e $\vec{K}' = (-K, 0)$, o Hamiltoniano se escreve

$$-iv_F \begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y} & 0 & 0 \\ \frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y} \\ 0 & 0 & -\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \\ \psi'_A \\ \psi'_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \\ \psi'_A \\ \psi'_B \end{pmatrix}, \quad (8.1)$$

onde ψ_A e ψ_B representam as componentes da função de onda relativa ao vale \vec{K} , enquanto ψ'_A e ψ'_B referem-se ao vale \vec{K}' . Temos, então, uma matriz 4×4 composta por dois blocos de matrizes 2×2 , cada um correspondendo a um vale e agindo em seus respectivos spinores $\psi = (\psi_A, \psi_B)^T$ e $\psi' = (\psi'_A, \psi'_B)^T$. Assim, é muito fácil ver que tal equação carrega simultaneamente a informação contida nas duas equações mencionadas e que, portanto, as formulações são equivalentes. Por fim, nota-se ainda que as condições de contorno devem ser impostas considerando-se as funções de onda completas em cada subrede:

$$\Psi_\mu(\vec{r}) = e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}\psi_\mu(\vec{r}) + e^{i\vec{K}'\cdot\vec{r}}\psi'_\mu(\vec{r}), \quad (8.2)$$

onde $\mu = A, B$. Do cancelamento dessas funções de onda completas chega-se às condições típicas. Orientamos a folha de grafeno como no artigo original [29, 100], de modo que as bordas *armchair* serão paralelas ao eixo y . Escrevemos então as funções de onda como:

$$\psi(x, y) = \begin{pmatrix} \phi_A(x) \\ \phi_B(x) \end{pmatrix} e^{iq_y y}. \quad (8.3)$$

Uma expressão análoga é tomada para ψ' em termos de funções ϕ'_A e ϕ'_B . Com isso, finalmente as condições de contorno se escrevem como

$$\phi_\mu(0) + \phi'_\mu(0) = 0 \quad (8.4)$$

e

$$e^{iKL}\phi_\mu(L) + e^{-iKL}\phi'_\mu(L) = 0, \quad (8.5)$$

A partir dessas condições, fica caracterizado o regime de baixas energias em nanofitas com bordas *armchair*.

8.2 Self-adjointness do operador de Dirac e a consistência do modelo

Nesta seção, mostramos que o modelo vigente para descrever nanofitas com borda *armchair* é formalmente consistente. Mais especificamente, provamos a *self-adjointness* do Hamiltoniano de Dirac associado ao problema e, assim, demonstramos matematicamente que o conjunto de condições de contorno características do modelo é um conjunto fisicamente aceitável.

Para demonstrar tal fato, consideramos o Hamiltoniano com a seguinte expressão formal:

$$H = -iv_F \begin{pmatrix} 0 & \frac{d}{dx} + q_y & 0 & 0 \\ \frac{d}{dx} - q_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{d}{dx} + q_y \\ 0 & 0 & -\frac{d}{dx} - q_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (8.6)$$

que aparece quando tomamos as duas equações contidas em (8.1) com as suas respectivas autofunções escritas como em (8.3). Neste caso, as autofunções de H são escritas como $\phi = (\phi_A(x), \phi_B(x), \phi'_A(x), \phi'_B(x))^T$. O seu adjunto H^\dagger possui a mesma expressão formal em uma restrição de seu domínio, ou mais precisamente, $H\phi = H^\dagger\phi$, $\forall \phi \in D(H) \subset D(H^\dagger)$. Aqui, denotamos por $D(H)$ e $D(H^\dagger)$ os domínios de H e H^\dagger , respectivamente. Dessa forma, H e H^\dagger são ditos operadores simétricos ou hermiteanos. Para serem verdadeiramente auto-adjuntos, os operadores devem ter o mesmo domínio, isto é, é preciso garantir que $D(H) = D(H^\dagger)$. Portanto, no nosso caso, o que queremos é mostrar que os domínios, onde estão incorporadas as condições de contorno, são iguais.

De início, tomamos o produto interno:

$$\langle \eta, H\phi \rangle = \int_0^L \eta^* (H\phi) dx, \quad (8.7)$$

onde denotamos por $\eta(x) = (\eta_A(x), \eta_B(x), \eta'_A(x), \eta'_B(x))^T$ as funções que vivem no domínio de H^\dagger e por η^* o seu complexo conjugado. Sendo assim, temos:

$$\langle \eta, H\phi \rangle = \int_0^L \eta^* (H\phi) dx \quad (8.8)$$

$$= -iv_F \int_0^L \eta^* \left(\alpha_x \frac{d}{dx} + i\alpha_y q_y \right) \phi dx \quad (8.9)$$

$$= -iv_F \left[\eta_A^* \phi_B \Big|_0^L + \eta_B^* \phi_A \Big|_0^L - \eta_A'^* \phi_B' \Big|_0^L - \eta_B'^* \phi_A' \Big|_0^L \right] + \int_0^L (H\eta)^* \phi dx \quad (8.10)$$

$$= -iv_F \left[\eta_A^* \phi_B \Big|_0^L + \eta_B^* \phi_A \Big|_0^L - \eta_A'^* \phi_B' \Big|_0^L - \eta_B'^* \phi_A' \Big|_0^L \right] + \langle H\eta, \phi \rangle, \quad (8.11)$$

onde $\alpha_x = \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & -\sigma_x \end{pmatrix}$ e $\alpha_y = \begin{pmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & \sigma_y \end{pmatrix}$.

O cancelamento da relação entre colchetes implica que o Hamiltoniano é hermitiano. No entanto, isso ainda não significa que ele é um operador verdadeiramente auto-adjunto. Para isso, é preciso observar se tal cancelamento se dá com as funções $\phi \in D(H)$ e $\eta \in D(H^\dagger)$ satisfazendo as mesmas condições de contorno. De fato, é fácil ver que isso ocorre para o conjunto em questão. Tomando o primeiro e terceiro termos na expressão entre colchetes com a substituição das condições para ϕ , temos:

$$R_1 = \phi_B(L) [\eta_A^*(L) + \eta_A'^*(L)e^{2iKL}] - \phi_B(0) [\eta_A^*(0) + \eta_A'^*(0)]. \quad (8.12)$$

Igualmente para o segundo e o quarto termos, obtemos:

$$R_2 = \phi_A(L) [\eta_B^*(L) + \eta_B'^*(L)e^{2iKL}] - \phi_A(0) [\eta_B^*(0) + \eta_B'^*(0)]. \quad (8.13)$$

Assim, é fácil enxergar que exatamente as mesmas condições para η_A e η'_A anulam R_1 e as mesmas para η_B e η'_B anulam R_2 ; conseqüentemente, a relação entre colchetes inteira se anula para as condições completas para η . Dessa forma, fica demonstrado que o Hamiltoniano de Dirac do problema é um operador verdadeiramente auto-adjunto e que as condições de contorno são fisicamente acessíveis ao sistema.

Antes de finalizar a seção, atentamos para um aspecto que pode ser instrutivo analisar. No artigo de revisão de Castro Neto *et al.* [29], é escrito um Hamiltoniano problemático que não corresponde à descrição física proposta e que gera inconsistências. Mais precisamente, a expressão formal do Hamiltoniano relativo a ambos os vales está incorreta por um sinal e este pequeno problema é suficiente para impedir que as condições de contorno do modelo satisfaçam as relações que implicam *self-adjointness*. Esta situação ilustra bem a importância da perspectiva formal do problema. Vejamos isso em detalhes. Para tal, seja o Hamiltoniano tal como definido lá:

$$H = -iv_F \begin{pmatrix} 0 & \frac{d}{dx} + q_y & 0 & 0 \\ \frac{d}{dx} - q_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{d}{dx} - q_y \\ 0 & 0 & \frac{d}{dx} + q_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.14)$$

Tomando o produto interno para este Hamiltoniano, temos:

$$\langle \eta, H\phi \rangle = \int_0^L \eta^* (H\phi) dx \quad (8.15)$$

$$= -iv_F \int_0^L \eta^* \left(\alpha_x \frac{d}{dx} + i\alpha_y q_y \right) \phi dx \quad (8.16)$$

$$= -iv_F \left[\eta_A^* \phi_B|_0^L + \eta_B^* \phi_A|_0^L + \eta_A'^* \phi_B'|_0^L + \eta_B'^* \phi_A'|_0^L \right] + \int_0^L (H\eta)^* \phi dx \quad (8.17)$$

$$= -iv_F \left[\eta_A^* \phi_B|_0^L + \eta_B^* \phi_A|_0^L + \eta_A'^* \phi_B'|_0^L + \eta_B'^* \phi_A'|_0^L \right] + \langle H\eta, \phi \rangle, \quad (8.18)$$

onde agora $\alpha_x = \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{pmatrix}$ e $\alpha_y = \begin{pmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & -\sigma_y \end{pmatrix}$.

A relação entre as condições de contorno no lado direito da equação (8.18) pode ser igual a zero e, neste caso, seria preciso demonstrar que ela se anula estritamente sem a exigência de tomar o mesmo conjunto de condições simultaneamente para as funções ϕ e η , isto é, sem que $D(H) = D(H^\dagger)$. Por outro lado, se a relação não for nula, a demonstração será direta, sendo suficiente mostrar que a imposição das condições para ambas as funções não a anula. Ou seja, assumindo a validade das condições devemos encontrar que a relação $\langle \eta, H\phi \rangle = \langle H\eta, \phi \rangle$ não é satisfeita e, portanto, H não pode ser auto-adjunto. O nosso caso se enquadra nesta última. De fato, verificamos que essa relação entre as condições de contorno não se anula quando impomos as condições (8.4) e (8.9) para as funções ϕ e η . Para este caso, da aplicação das condições às componentes de H na relação entre colchetes de (8.18), temos

$$R_1 = \phi_B(L) [\eta_A^*(L) - \eta_A'^*(L)e^{2iKL}] - \phi_B(0) [\eta_A^*(0) - \eta_A'^*(0)]. \quad (8.19)$$

e

$$R_2 = \phi_A(L) [\eta_B^*(L) - \eta_B'^*(L)e^{2iKL}] - \phi_A(0) [\eta_B^*(0) - \eta_B'^*(0)], \quad (8.20)$$

que não se anulam com a imposição das mesmas condições às componentes de H^\dagger . Assim, demonstramos que tais condições de contorno não são fisicamente aceitáveis, pois não implicam *self-adjointness* ao operador de Dirac H . No referido artigo, tal fato se manifesta nas condições para a subrede A ; elas dão uma relação que contradiz a escolha tomada na imposição das condições para B .

9 Cones de grafeno com impurezas de carga na presença de campos magnéticos uniformes

No capítulo de revisão, foi apresentada uma breve digressão acerca dos elementos básicos que constituem a abordagem *tight-binding* para o grafeno e da construção que leva à descrição do contínuo. Lá, foi visto que, neste limite, os elétrons se apresentam como partículas sem massa obedecendo a uma dinâmica relativística e que é lícito trabalhar com um equação de Dirac. Neste capítulo, porém, vamos lidar com um outro tipo de descrição que emerge com a quebra de simetria de subrede no grafeno: o grafeno com *gap*. Em tais sistemas, o limite do contínuo fornece uma descrição em que os férmions de Dirac adquirem massa e a possibilidade de trabalhar com uma equação de Dirac com um termo de massa. Neste cenário, investigamos as propriedades físicas de cones de grafeno com *gap* na presença de campos magnéticos uniformes e de Coulomb estudando a resposta dada por férmions com massa à interação com campos topológicos, magnéticos e de Coulomb.

Na primeira seção, é feita uma breve caracterização do cenário matemático no qual situamos a nossa investigação. É apresentado um breve desenvolvimento da abordagem *tight-binding* para o grafeno com *gap*, culminando com a descrição no limite de baixas energias e o aparecimento de férmions de Dirac com massa. Na segunda seção, partindo de um tipo de construção bem estabelecida nessa linha, configuramos o cenário físico correspondente ao nosso sistema e escrevemos o Hamiltoniano do problema. Tomamos os limites assintóticos para a equação radial e encontramos suas soluções analiticamente. Na terceira seção, obtemos as soluções do problema. Usando o método de Frobenius, encontramos o espectro de energias e os valores permitidos para o campo magnético. Este capítulo é essencialmente o já publicado artigo [86].

9.1 Grafeno com *gap* e férmions de Dirac com massa

É um fato experimental que, quando há uma quebra na simetria de subrede, um *gap* de energia é observado na estrutura de bandas do grafeno, isto é, as bandas de valência e de condução não mais se tocam nos pontos de Dirac \vec{K} e \vec{K}' . Como exemplo, o crescimento de grafeno em determinados substratos produz amostras que exibem tal particularidade [111].

Para o grafeno com *gap*, o Hamiltoniano agora se escreve como

$$H = \tau \sum_i \sum_j a(r_i) b^\dagger(r_i + \delta_j) + a^\dagger(r_i) b(r_i + \delta_j) \quad (9.1)$$

$$+ \Delta \sum_i [a^\dagger(r_i) a(r_i) - b^\dagger(r_i + \delta_j) b(r_i + \delta_j)]. \quad (9.2)$$

Aqui, o termo adicional introduz a diferença de energia entre sítios A e B na rede que corresponde à assimetria de subrede criada. Se $\Delta = 0$, preservamos tal simetria e recaímos no caso tradicional sem *gap*.

Os passos que levam à descrição do contínuo são semelhantes àqueles descritos no capítulo de revisão e, portanto, não os repetiremos aqui. É suficiente observar que a relação de dispersão agora se escreve como

$$E^2 = \Delta^2 + \tau^2 \left[3 + 2 \cos(\sqrt{3}a_0k_y) + 4 \cos\left(\frac{3}{2}a_0k_x\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}a_0k_y\right) \right]. \quad (9.3)$$

Como podemos ver, se consideramos Δ diferente de zero, então essa relação significa que os pontos que anulam E para o caso tradicional agora estão separados por um *gap* de 2Δ . Ou seja, a estrutura de bandas do grafeno agora exibe uma separação entre as bandas de valência e de condução. Para o mesmo limite de pequenos momentos nas proximidades de um ponto de Dirac, novamente encontramos uma relação de dispersão tipicamente relativística, mas agora diferindo por um termo de massa. Em outras palavras, os elétrons nesse regime se comportam como partículas de Dirac com massa, com uma energia escrita como

$$E^2 = m^2v_F^4 + v_F^2q^2, \quad (9.4)$$

onde v_F é novamente velocidade de Fermi e $m = \frac{4}{9\tau^2a_0^2}\Delta$. Dessa forma, enquanto a velocidade de Fermi faz o papel da velocidade da luz, o termo m representa uma massa efetiva associada ao *gap*. Portanto, um tratamento no regime de baixas energias fica inteiramente caracterizado através da equação de Dirac com massa:

$$-iv_F \left(\sigma_x \frac{\partial}{\partial x} + \sigma_y \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi(x, y) + mv_F^2 \sigma_z \psi(x, y) = E\psi(x, y), \quad (9.5)$$

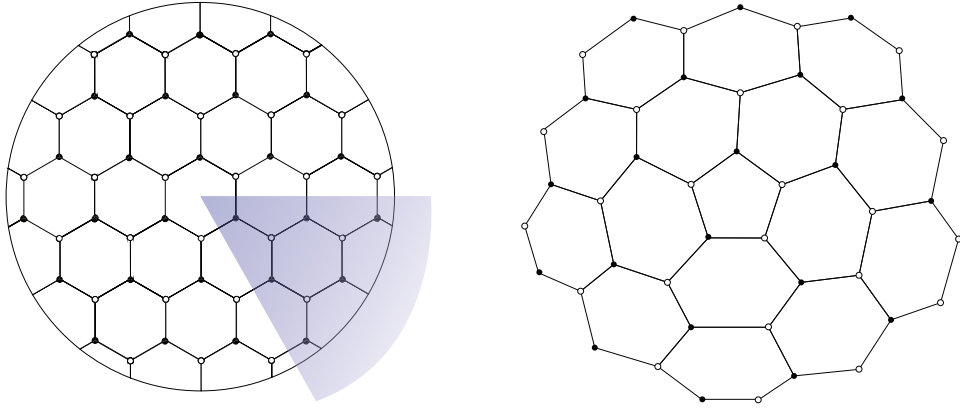
onde $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ são as matrizes de Pauli usuais. Para o resto do capítulo, vamos tomar $v_F = 1$.

9.2 Cones de grafeno na presença de campos de Coulomb e campos magnéticos uniformes

Como já tratado em capítulos anteriores, a inserção de campos no âmbito da mecânica quântica relativística - e, mais particularmente, no grafeno - é formalmente caracterizada através de acoplamentos na equação de Dirac. No nosso caso em particular, como será mostrado, o problema é caracterizado via definição de um quadrivetor potencial especial responsável por conter toda a informação a respeito da topologia e das interações com os campos externos. A seguir, gradualmente introduzimos cada um dos componentes físicos que configuram o sistema.

A caracterização matemática de um cone de grafeno se dá através de uma transformação topológica conhecida como processo de Volterra [112]. Ela consiste em remover

Figura 9 – Criação de uma 1-disclinação e a produção de um cone de grafeno



9 - À esquerda, corte e remoção de um setor angular de 60° produzindo uma 1-disclinação. À direita, cone de grafeno com um pentágono em seu vértice produzido por tal processo.

um setor angular múltiplo inteiro de 60° de um folha de grafeno e identificar as novas bordas, originando uma disclinação consistindo de um polígono de menos lados que o hexágono original da rede. Tal procedimento é ilustrado na Figura 9. Seguindo a abordagem original de Lammert e Crespi [53, 56, 66, 67], incorporamos a natureza cônica do problema por meio da introdução de um potencial vetor específico capaz de reproduzir o já conhecido efeito da topologia do cone sobre o comportamento do spinor. Como bem se sabe, na prática, o aspecto topológico do cone se manifesta através do aparecimento de uma fase no spinor de Dirac. O transporte efetivo do spinor de Dirac em torno do vértice corresponde a uma transformação de holonomia que, para uma n -disclinação arbitrária, fornece uma fase dada por [67]:

$$\psi(r, \theta + 2\pi) = e^{i2\pi \left[\pm \frac{n}{4} \sigma^0 + \left(1 - \frac{n}{6}\right) \frac{\sigma^3}{2} \right]} \psi(r, \theta), \quad (9.6)$$

onde n é o número de setores removidos do plano a partir do qual construímos o cone e σ^0 é a matriz identidade. Para uma descrição detalhada do aparato matemático, ver as referências acima mencionadas. Esta fase, por sua vez, pode ser pensada como uma fase do tipo Aharonov-Bohm [53, 56], proveniente da presença de um fluxo fictício, o que permite modelar o efeito da topologia cônica por meio da definição do potencial vetor dado por:

$$\vec{A} = \frac{1}{er} \left[\pm \frac{\frac{n}{4} \sigma^0}{\left(1 - \frac{n}{6}\right)} + \frac{\sigma^3}{2} \right] \hat{\theta}. \quad (9.7)$$

Portanto, para introduzirmos o efeito da topologia do cone na descrição física do nosso sistema à base de grafeno, devemos acoplar esse potencial vetor na equação de Dirac (9.5).

Na presença de um campo magnético uniforme $\vec{B} = B\hat{z}$, podemos modelar o cone de grafeno através da introdução de um termo extra ao potencial vetor (9.7). Seja $\vec{A}_m = \frac{1}{2} Br \hat{\theta}$ o termo responsável por incorporar o campo magnético ao sistema. En-

tão, redefinimos tal potencial como

$$\vec{A} = \frac{1}{er} \left[\pm \frac{\frac{n}{4}\sigma^0}{(1-\frac{n}{6})} + \frac{\sigma^3}{2} + \frac{1}{2}eBr^2 \right] \hat{\theta}. \quad (9.8)$$

Por fim, acoplamos o termo referente à interação coulombiana, dado por

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r}, \quad (9.9)$$

que representa uma impureza carregada localizada no vértice do cone. Aqui, temos que $\alpha = \frac{Ze^2}{\hbar\kappa}$, onde Z é o número atômico e κ é a constante dielétrica. Então, levando em conta tal termo e acoplando-o com uma componente tipo tempo, escrevemos a equação de Dirac como

$$\begin{pmatrix} m - \frac{\alpha}{r} - E & \partial_r - \frac{i}{r(1-\frac{n}{6})}\partial_\theta \pm \frac{\frac{n}{4}}{r(1-\frac{n}{6})} + \frac{1}{2r} - \frac{1}{2}eBr \\ -\partial_r - \frac{i}{r(1-\frac{n}{6})}\partial_\theta \pm \frac{\frac{n}{4}}{r(1-\frac{n}{6})} - \frac{1}{2r} - \frac{1}{2}eBr & -m - \frac{\alpha}{r} - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = 0. \quad (9.10)$$

Tomando uma solução da forma

$$\psi(r, \theta) = \sum_j \begin{pmatrix} R_A^{(j)}(r) \\ R_B^{(j)}(r) \end{pmatrix} e^{ij\theta}, \quad (9.11)$$

verificamos que, para r pequeno, a equação radial se reduz à seguinte forma:

$$\frac{d^2 R_{A(B)}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{A(B)}}{dr} - \frac{1}{r^2} \left(\gamma^2 - \frac{1}{4} \right) R_{A(B)} = 0, \quad (9.12)$$

com

$$\gamma = \sqrt{\nu^2 - \alpha^2}, \quad \nu = \frac{(j \pm \frac{n}{4})}{(1 - \frac{n}{6})}, \quad (9.13)$$

onde j é o momento angular. A solução de (9.12) é dada por:

$$R_{A(B)} \sim r^{\gamma - \frac{1}{2}}, \quad (9.14)$$

Aqui, destacamos que α pode exceder ν em módulo, produzindo um γ imaginário. Neste caso, as soluções no limite de pequenas distâncias apresentam um comportamento oscilatório sem um limite bem definido. Para o nosso caso, vamos trabalhar com o parâmetro γ no regime subcrítico, isto é, $|\nu| > |\alpha|$. As soluções $R_{A(B)}$ revelam, neste regime, o mesmo comportamento para o caso sem o campo magnético descrito em [67], como já esperado.

Por outro lado, para r muito grande, a equação obtida é

$$\frac{d^2 R_{A(B)}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{A(B)}}{dr} - \frac{1}{4} (e^2 B^2 r^2) R_{A(B)} = 0, \quad (9.15)$$

cuja solução é do tipo

$$R_{A(B)} \sim e^{-\frac{eB}{4}r^2}. \quad (9.16)$$

Aqui, já eliminamos a exponencial crescente em decorrência da imposição física de termos uma solução normalizável. Como podemos observar, temos o mesmo comportamento encontrado no caso sem massa na ausência do campo de Coulomb [56].

9.3 Solução do problema

Como vimos na seção anterior, o sistema em questão é descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H = \begin{pmatrix} m - \frac{\alpha}{r} & \partial_r - \frac{i}{r(1-\frac{n}{6})}\partial_\theta \pm \frac{\frac{n}{4}}{r(1-\frac{n}{6})} + \frac{1}{2r} - \frac{1}{2}eBr \\ -\partial_r - \frac{i}{r(1-\frac{n}{6})}\partial_\theta \pm \frac{\frac{n}{4}}{r(1-\frac{n}{6})} - \frac{1}{2r} - \frac{1}{2}eBr & -m - \frac{\alpha}{r} \end{pmatrix}, \quad (9.17)$$

que introduz, simultaneamente, o efeito da topologia do cone, a interação coulombiana e o campo magnético uniforme. Então, o nosso problema consiste em resolver a seguinte equação:

$$\begin{pmatrix} m - \frac{\alpha}{r} - E & \partial_r - \frac{i}{r(1-\frac{n}{6})}\partial_\theta \pm \frac{\frac{n}{4}}{r(1-\frac{n}{6})} + \frac{1}{2r} - \frac{1}{2}eBr \\ -\partial_r - \frac{i}{r(1-\frac{n}{6})}\partial_\theta \pm \frac{\frac{n}{4}}{r(1-\frac{n}{6})} - \frac{1}{2r} - \frac{1}{2}eBr & -m - \frac{\alpha}{r} - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = 0. \quad (9.18)$$

Para tal, consideremos o já mencionado *Ansatz*:

$$\begin{cases} \psi_A = R_A e^{ij\theta} \\ \psi_B = R_B e^{ij\theta} \end{cases}. \quad (9.19)$$

Substituindo (9.19) em (9.18), encontramos:

$$\begin{cases} (m - \frac{\alpha}{r} - E) R_A + \left[\frac{d}{dr} + \frac{j}{r(1-\frac{n}{6})} \pm \frac{\frac{n}{4}}{r(1-\frac{n}{6})} + \frac{1}{2r} - \frac{1}{2}eBr \right] R_B = 0 \\ \left[-\frac{d}{dr} + \frac{j}{r(1-\frac{n}{6})} \pm \frac{\frac{n}{4}}{r(1-\frac{n}{6})} - \frac{1}{2r} - \frac{1}{2}eBr \right] R_A + (-m - \frac{\alpha}{r} - E) R_B = 0 \end{cases}. \quad (9.20)$$

Levando em conta o comportamento assintótico da solução visto na seção anterior, sugerimos como *Ansatz* as funções

$$R_A(r) = e^{-\frac{eB}{4}r^2} r^{\gamma-\frac{1}{2}} F(r) \quad (9.21)$$

e

$$R_B(r) = e^{-\frac{eB}{4}r^2} r^{\gamma-\frac{1}{2}} G(r), \quad (9.22)$$

esperando encontrar equações diferenciais para as funções $F(r)$ e $G(r)$. Substituindo (9.21) e (9.22) em (9.20), chegamos às seguintes equações:

$$rF'(r) - (\gamma - \nu) F(r) + [(m + E)r - \alpha] G(r) = 0, \quad (9.23)$$

e

$$rG'(r) + (\gamma + \nu - eBr^2) G(r) + [(m - E)r - \alpha] F(r) = 0. \quad (9.24)$$

Isolando G em (9.23) e substituindo em (9.24), encontramos, finalmente, a equação que deve ser satisfeita pela função F :

$$r^2 F''(r) + \left[- \left(\frac{m+E}{(m+E)r+\alpha} \right) r^2 + c_1 r + c_2 r^3 \right] F'(r) + \left[- \left(\frac{(m+E)(\gamma-\nu)}{(m+E)r+\alpha} \right) r + c_3 r^2 + c_4 r \right] F(r) = 0, \quad (9.25)$$

onde definimos $c_1 = 2\gamma + 1$, $c_2 = -eB$, $c_3 = -[(\gamma - \nu)eB + m^2 - E^2]$ e $c_4 = 2E\alpha$.

Podemos reescrever (9.25) em uma forma mais tratável fazendo a mudança de variável $u = \left(\frac{m+E}{\alpha}\right)r$. Tal mudança nos conduz à seguinte forma:

$$u^2 F''(u) + \left[- \frac{1}{(1+u)} u^2 + k_1 u + k_2 u^3 \right] F'(u) + \left[\frac{k_3}{(1+u)} u + k_4 u^2 + k_5 u \right] F(u) = 0, \quad (9.26)$$

com $k_1 = c_1$, $k_2 = \frac{\alpha^2}{(m+E)^2} c_2$, $k_3 = -(\gamma - \nu)$, $k_4 = \frac{\alpha^2}{(m+E)^2} c_3$ e $k_5 = \frac{\alpha}{m+E} c_4$. A equação (9.26) ao que parece não pode ser reduzida a uma cuja solução é conhecida. Sendo assim, devemos encontrar sua solução diretamente, aplicando o Método de Frobenius. Pelo teorema de Frobenius, sabemos que, em torno de um ponto singular regular u_0 , existe pelo menos uma solução na forma:

$$F(u) = \sum_{\bar{n}=0}^{\infty} C_{\bar{n}} (u - u_0)^{\bar{n}+\delta}, \quad (9.27)$$

onde δ é uma constante a ser determinada. Desse modo, supomos uma solução desse tipo com $u_0 = 0$, um ponto singular regular da equação (9.26), e a substituímos na mesma no intuito de determinar o valor de δ e as relações entre os coeficientes $C_{\bar{n}}$. Fazendo isso, encontramos a seguinte relação:

$$\begin{aligned} & [(\bar{n} + \delta + 3)(\bar{n} + \delta + 2) + k_1(\bar{n} + \delta + 3)] C_{\bar{n}+3} + \\ & + [(\bar{n} + \delta + 2)(\bar{n} + \delta + 1) - (\bar{n} + \delta + 2) + k_1(\bar{n} + \delta + 2) + k_3 + k_5] C_{\bar{n}+2} + \\ & + [k_2(\bar{n} + \delta + 1) + k_4 + k_5] C_{\bar{n}+1} + \\ & + [k_2(\bar{n} + \delta) + k_4] C_{\bar{n}} = 0, \end{aligned} \quad (9.28)$$

onde $\delta = 1 - k_1$ ou $\delta = 0$, as raízes da equação indicial.

Como bem se sabe, para a solução ser normalizável, a série deve quebrar em algum termo. Assim, com a imposição dessa condição, da relação de recorrência (9.28) verificamos que devemos ter:

$$k_2(\bar{n} + \delta) + k_4 = 0, \quad (9.29)$$

de onde obtemos, para $\delta = 0$, a expressão para as autoenergias:

$$E^2 = m^2 + (\bar{n} + \gamma - \nu)eB, \quad \bar{n} = 0, 1, 2, \dots \quad (9.30)$$

Substituindo γ e ν nesta expressão, escrevemos

$$E^2 = m^2 + eB_{\bar{n}\nu} \left(\bar{n} + \sqrt{\left(\frac{j \pm \frac{n}{4}}{1 - \frac{n}{6}}\right)^2 - \alpha^2} - \frac{(j \pm \frac{n}{4})}{(1 - \frac{n}{6})} \right). \quad (9.31)$$

Aqui, escrevemos $B_{\bar{n}\nu}$ porque, como veremos a seguir, apenas alguns valores de campo magnético são permitidos quando a condição de truncamento da série é requerida. A expressão (9.31) é bastante semelhante àquela do caso planar do problema de Dirac-Coulomb na presença de campos magnéticos obtida por Ho e Khalilov [113], reduzindo-se à mesma no limite $n = 0$, isto é, na ausência de disclinação. Por outro lado, os resultados encontrados por Lammert e Crespi [56] para os níveis de Landau em um cone de grafeno na ausência de interação coulombiana não podem ser obtidos diretamente de tal expressão. Isto porque o limite $\alpha \rightarrow 0$ em (9.31) é incorreto em vista do fato de que a nossa mudança de variável $u = \left(\frac{m+E}{\alpha}\right)r$ divergiria neste caso. Dessa forma, tal limite deve ser tomado a partir da equação (9.25).

Como vemos, os autovalores dependem dos parâmetros γ e ν , que contêm o parâmetro n , responsável por caracterizar o defeito topológico, e a magnitude da impureza de Coulomb α . Particularmente, o efeito da topologia cônica sobre o espectro pode ser percebida pela presença de um número quântico efetivo ν substituindo o momento angular, o que corresponde a uma ferramenta prática para caracterizar o cenário cônico. A presença da impureza, por sua vez, elimina a degenerescência infinita associada à região $\nu > 0$. Para esta região, cada nível \bar{n} tem infinitos estados com a mesma energia correspondendo aos infinitos valores de momento angular; o parâmetro α assegura que o parâmetro ν não desapareça no espectro e, dessa forma, a degenerescência é quebrada.

Além disso, os autovalores também exibem uma dependência dos valores particulares de campo magnético $B_{\bar{n}\nu}$ e da massa m . Mais adiante veremos que uma relação direta entre estes termos também é presente. A presença da massa codifica o modo pelo qual a simetria de subrede é quebrada e indica como ela modifica as propriedades físicas do sistema. Dessa forma, tal relação demonstra uma conexão explícita entre o *gap* gerado pela quebra de simetria de subrede e os conjuntos de valores de campo magnético topologicamente controláveis. Como consequência, em adição ao termo explícito de massa em sua expressão, a energia também responde a tal assimetria através do campo magnético. Este aspecto será mostrado na sequência.

Embora nós tenhamos encontrado os autovalores de energia, a relação (9.29) não é suficiente para garantir que a série seja truncada. Para isso, precisamos impor outras condições relacionando alguns outros coeficientes na série. Mais precisamente, para cada \bar{n} , há $\bar{n}+1$ equações envolvendo os coeficientes $(C_0, \dots, C_{\bar{n}+3})$, com C_0 , C_1 e C_2 satisfazendo as seguintes relações:

$$k_1 C_1 + (k_3 + k_5) C_0 = 0 \quad (9.32)$$

e

$$(3 + 2k_1)C_2 + (-1 + k_1 + k_3 + k_5)C_1 + (k_4 + k_5)C_0 = 0. \quad (9.33)$$

Todas estas imposições levam a uma expressão envolvendo uma restrição sobre os valores assumidos por B , e uma dependência nos índices \bar{n} e ν é introduzida. Aqui, já que estamos lidando com uma complicada relação de recorrência, nós estudamos só os três primeiros casos. Para $\bar{n} = 0$, temos

$$(6 + 3k_1)C_3 + (2k_1 + k_3 + k_5)C_2 + (k_2 + k_4 + k_5)C_1 = 0. \quad (9.34)$$

Neste caso, é requerido que todos os coeficientes sejam zero, exceto por C_0 . Além disso, queremos lidar com apenas uma relação. A escolha $k_3 = -k_5$ fornece, por (9.32), $C_1 = 0$, mas ela não nos permite escrever a relação entre C_2 e C_1 usando (9.32) e (9.33), porque é proporcional a $(k_3 + k_5)^{-1}$. Assim, rigorosamente não podemos ter $C_2 = 0$. Então, tomamos a escolha $C_0 = 0$ e anulamos a função de onda para $\bar{n} = 0$. Isso significa que o estado com $\bar{n} = 0$ não existe aqui e o primeiro autovalor de energia deve ser obtido para $\bar{n} = 1$ em (9.31). Obviamente é possível cancelar C_2 em (9.33) assumindo $k_4 = -k_5$ como uma segunda relação, mas isso implica uma contradição.

Para $\bar{n} = 1$, as equações são

$$(6 + 3k_1)C_3 + (2k_1 + k_3 + k_5)C_2 + (k_2 + k_4 + k_5)C_1 = k_2C_0 \quad (9.35)$$

e

$$(12 + 4k_1)C_4 + (3 + 3k_1 + k_3 + k_5)C_3 + (2k_2 + k_4 + k_5)C_2 = 0. \quad (9.36)$$

A fim de cancelar todos os coeficientes após C_0 e C_1 , considerando as relações (9.32) e (9.33), deveríamos manipular estas duas equações cuidadosamente. Assim, podemos escrever

$$C_2 = \frac{1}{3 + 2k_1} \left[(-1 + k_1 + k_3 + k_5) \frac{(k_3 + k_5)}{k_1} - (k_4 + k_5) \right] C_0 \quad (9.37)$$

e

$$C_3 = -\frac{(2k_1 + k_3 + k_5)}{6 + 3k_1} C_2 - \frac{1}{6 + 3k_1} \left[\frac{(k_2 + k_4 + k_5)(k_3 + k_5)}{k_1} + k_2 \right] C_0. \quad (9.38)$$

Anulando os termos entre colchetes, obtemos $C_2 = 0$ e $C_3 = 0$. Consequentemente, a expressão (9.36) dá $C_4 = 0$. Além disso, a seguinte expressão é obtida:

$$(-1 + k_3 + k_5)k_2 = (k_3 - k_4)k_5, \quad (9.39)$$

a partir da qual encontramos a equação para $B_{1\nu}$

$$[2(\nu - \gamma) - 1]B_{1\nu} \pm \frac{2m(\nu - \gamma)}{e(\gamma - \nu + 1)} [m^2 + (\gamma - \nu + 1)eB_{1\nu}]^{1/2} + \frac{2m^2(\nu - \gamma)}{e(\gamma - \nu + 1)} = 0. \quad (9.40)$$

Em particular, para $m \ll |E|$ podemos encontrar $B_{1\nu}$:

$$B_{1\nu} = \frac{2m^2(\nu - \gamma)}{e(\gamma - \nu + 1)[1 - 2(\nu - \gamma)]}, \quad m \ll |E|. \quad (9.41)$$

Para $\bar{n} = 2$, o mesmo procedimento é empregado. As equações são:

$$(6 + 3k_1) C_3 + (2k_1 + k_3 + k_5) C_2 + (k_2 + k_4 + k_5) C_1 = 2k_2 C_0, \quad (9.42)$$

$$(12 + 4k_1) C_4 + (3 + 3k_1 + k_3 + k_5) C_3 + (2k_2 + k_4 + k_5) C_2 = k_2 C_1 \quad (9.43)$$

e

$$(20 + 5k_1) C_5 + (8 + 4k_1 + k_3 + k_5) C_4 + (3k_2 + k_4 + k_5) C_3 = 0. \quad (9.44)$$

De modo análogo, de (9.42) podemos escrever uma expressão relacionando C_3 e C_0 , que pode ser inserida em (9.43). Cancelando os termos apropriados, os coeficientes C_3 , C_4 e C_5 serão automaticamente zero na série e uma equação para B é determinada. Encontramos

$$(k_3 + k_5) (k_5 - k_2) k_5 + 2k_2 k_1 k_5 = - (2k_1 + k_3 + k_5) (k_3 + k_5) k_2. \quad (9.45)$$

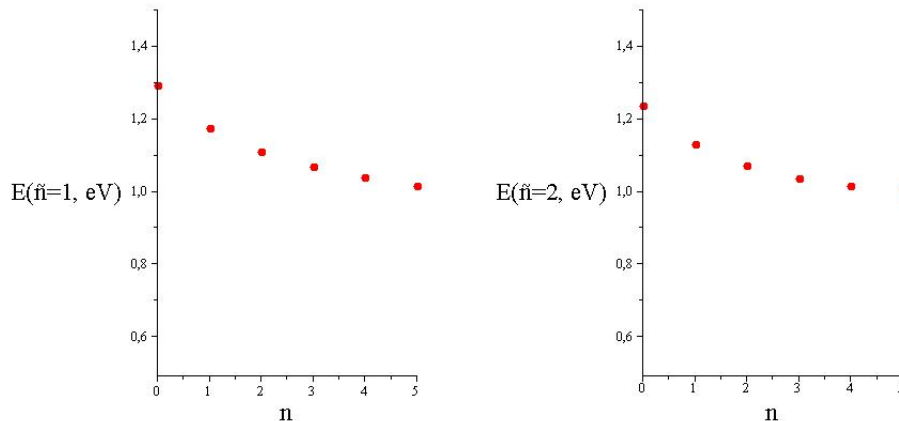
Esta relação produz uma equação bastante densa para o campo $B_{2\nu}$. Não a apresentaremos aqui. Entretanto, uma grande simplificação é encontrada quando consideramos o caso onde $m \ll |E|$. Neste caso, a equação (9.45) dá

$$B_{2\nu} = - \frac{m^2 [(\nu - \gamma) + 2\alpha^2]}{e(\gamma - \nu + 2) [(\nu - \gamma) + 2\alpha^2] - e [(2\gamma + 1) \alpha^2 + \frac{1}{4}(\nu - \gamma) \epsilon_1 + \frac{1}{2}\epsilon_1 \alpha^2]}, \quad (9.46)$$

com $\epsilon_1 = 3\gamma + \nu + 2$.

Como podemos ver, os resultados mostram que os valores discretos permitidos ao campo magnético B são determinados pelos números quânticos \bar{n} e j e pela topologia cônica do sistema, caracterizada pelo parâmetro n . Para cada estado \bar{n} , o campo magnético exibe um conjunto de valores controlados diretamente pelos aspectos topológicos da configuração. Considerando as expressões (9.41) e (9.46) obtidas acima, a fim de ilustrar como a energia responde à presença do defeito, plotamos os autovalores $E_{\bar{n}=1}$ e $E_{\bar{n}=2}$ em termos do parâmetro topológico n . O comportamento típico pode ser observado nos gráficos da Figura 10. Notamos que, para ambos os gráficos, os autovalores mostram uma

Figura 10 – Gráficos das energias em função do parâmetro topológico



10 - À esquerda, autovalor $E_{\bar{n}=1}$ em função do parâmetro n , com $m = 1.0$, $e = 1.0$, $j = \frac{3}{2}$ e $\alpha = 0.75$. À direita, gráfico do autovalor $E_{\bar{n}=2}$ para os mesmos valores. (Gráficos retirados da Referência [86])

dependência decrescente de n , isto é, eles se tornam menores quando o número de setores removidos aumenta.

10 Considerações Finais

Nesta tese, abordamos vários aspectos referentes à física de nanoestruturas de grafeno sob as mais diferentes configurações, especialmente nanoanéis e nanofitas. Focamos tanto na investigação teórica das propriedades físicas de tais estruturas quanto nas bases matemáticas que sustentam e descrevem o problema do confinamento de partículas de Dirac no limite do contínuo. Do ponto de vista físico, em uma abordagem inteiramente analítica, modelamos e exploramos a descrição de baixas energias em faixas de Möbius, nanofitas e cones de grafeno; em particular, descrevemos sistemas confinantes através da imposição de conjuntos de condições de contorno ao mesmo tempo que estudamos os mecanismos através dos quais se manifestam efeitos topológicos, de geometria de borda e interface e de interação com campos externos nas propriedades físicas de partículas de Dirac confinadas em tais nanoestruturas. Do ponto de vista matemático, investigamos cuidadosamente a construção formal para o problema do confinamento quântico de partículas sem massa no grafeno. Trabalhamos com o operador de Dirac 2D típico do limite do contínuo e a noção de *self-adjointness* no intuito construir conjuntos de condições de contorno acessíveis à caracterização de nanoestruturas de grafeno. A seguir, assinalamos mais especificamente as abordagens e os resultados encontrados nesta tese.

O Capítulo 3 trata exclusivamente de um modelo que propomos para realizar uma descrição no contínuo de faixas de Möbius de grafeno. Através da adoção de condições de contorno apropriadas, precisamente modelamos sistemas confinantes gerais com tal topologia no âmbito da mecânica quântica relativística, onde abrimos uma rota de aplicação ao grafeno. Dentro deste tratamento, podemos destacar alguns resultados como a restrição nos valores possíveis de posição ao longo da direção transversal, bem como a sensibilidade conjunta exibida pelos autovalores de energia à quantização do momento nesta mesma direção e a estas posições permitidas. Também aludimos para a definição de um *gap* duplo, associando um comportamento eletrônico dual ao sistema cuja manipulação - e mesmo a plausibilidade - estaria vinculada à existência de mecanismos externos de controle.

Em seguida, o Capítulo 4 realiza um estudo sobre a manifestação do efeito Aharonov-Bohm à luz do modelo proposto no capítulo anterior. Aspectos similares àqueles do capítulo precedente são encontrados novamente para as autoenergias, assim como para as correntes persistentes na faixa. Ou seja, é mostrado que, como esperado, tais correntes igualmente carregam a mesma sensibilidade quanto à quantização transversal e às posições na faixa observada nos autovalores de energia, apresentando expressões distintas de acordo a paridade que codifica estes elementos. Além disso, reconhecemos a possibilidade de manipular ou trocar a paridade de tal índice através da introdução de uma fase extra ou do fluxo Aharonov-Bohm.

O Capítulo 5, por sua vez, traz um tratamento que visa a compatibilizar a inserção da

topologia de Möbius com a assinatura de borda via atribuição de condições de contorno, concentrando especificamente nas terminações *zigzag* e *armchair*. Dois modelos orientados nesta direção são propostos a fim de descrever faixas com tais terminações de borda, através dos quais estudamos as propriedades de seus estados eletrônicos. Dentre os resultados mais proeminentes, mostramos que os estados de *bulk* em faixas com borda *zigzag* são notadamente regulados por uma duplicidade associada ao confinamento transversal, e não exibem qualquer sensibilidade relativa às posições transversais como nos casos anteriores; assim como que estados de borda revelam-se duas vezes mais numerosos que aqueles encontrados em anéis periódicos e comportam-se como tipicamente provenientes de estruturas análogas de comprimento $2L$, indicando manifestação explícita da topologia de Möbius na configuração; também, conjecturamos a respeito do aparecimento de estados de borda com energia nula na presença de campo elétrico no contexto do contínuo e a possibilidade de obter tais estados mesmo para anéis ordinários por manipulação da fase ou de um fluxo Aharonov-Bohm. Da mesma forma, quanto aos estados eletrônicos em faixas de Möbius com bordas *armchair*, demonstramos que eles são também regulados a partir do confinamento transversal; mais precisamente, pela paridade associada ao número quântico transversal, exibindo uma duplicidade no espectro de energias, à qual atribuímos uma possível dualidade no comportamento eletrônico cuja manipulação estaria estritamente conectada com mecanismos internos de controle. Nesta situação, entretanto, não encontramos qualquer sensibilidade às posições ao longo da faixa, e muito menos uma restrição nos valores permitidos para tal variável. Também, percebemos que, se passível de controle, a dualidade encontrada significaria uma propriedade eletrônica única em nanoestruturas de grafeno, pois neste caso corresponderia à presença e à ausência de *gap* simultaneamente, e estariam acessíveis em um único sistema regimes metálico e isolante permutáveis independentemente de aspectos morfológicos da estrutura.

No Capítulo 6, examinamos como as propriedades dos estados de Dirac são afetadas por campos elétricos transversais em nanofitas de grafeno com bordas *zigzag*. Especificamente, resolvemos o problema de Dirac sob influência de campos elétricos uniformes no regime de campo fraco e situamos tal solução à luz dos aspectos físicos encontrados em nanofitas *zigzag*. Identificamos dois domínios distintos associados à solução e classificamos o comportamento correspondente em termos de estados de *bulk* e de borda para a configuração estudada. Em tal cenário, por imposição de condições de contorno típicas encontramos expressões que regem o comportamento eletrônico decorrente do confinamento.

Já no Capítulo 7, focamos na estrutura matemática que sustenta o formalismo quântico-relativístico do limite de baixas energias. É realizado um estudo acerca do comportamento do operador de Dirac no qual está centrada tal descrição invocando elementos da teoria dos operadores em espaços de Hilbert; particularmente, o papel da noção de *self-adjointness* e extensões auto-adjuntas no âmago da teoria quântica. Concretamente, calculamos as

relações que garantem esta noção para os operadores de Dirac 2×2 unidimensionais nas direções x e y , e para ambos estabelecemos uma série de conjuntos físicos de condições de contorno como aceitáveis por satisfazer tal exigência. A partir disto, construímos a mesma noção para o Hamiltoniano de Dirac 2D combinando as relações obtidas individualmente e expressamos as relações a serem satisfeitas simultaneamente para a definição de suas extensões auto-adjuntas. Em adição, verificamos a consistência de alguns modelos de confinamento em nanoanéis bidimensionais levando em conta os conceitos em questão.

Posteriormente, o Capítulo 8 complementa esta linha, tratando do caso *armchair* em separado. Tal capítulo é basicamente uma parte desmembrada do anterior que, em razão de sua finalidade original e de sua extensão, foi mantida como tal. Mostramos que as condições de contorno típicas de nanofitas *armchair* constituem um conjunto que assegura a referida noção e provamos a consistência formal do modelo. Complementarmente, para fins de ilustração, é analisado um exemplo problemático de Hamiltoniano para o qual demonstramos que as mesmas condições não são admissíveis quando associadas a ele.

Finalmente, o Capítulo 9 traz uma investigação sobre as propriedades dos estados de Dirac de baixa energia sob efeito da topologia e de interações com campos magnéticos e de Coulomb. Resolvemos o problema de Dirac-Coulomb no grafeno com *gap* em um cenário topológico na presença de um campo magnético uniforme, obtendo o espectro de energias e uma relação de recorrência para a construção das autofunções. Como pontos adicionais a serem destacados, salientamos características particulares inerentes ao tipo de tratamento empregado, como a restrição nos valores permitidos de campo magnético para os quais a solução é normalizável e, portanto, válida; e a dependência que tal solução exige de entidades físicas notadamente independentes para a determinação destes valores de campo; como também o comportamento decrescente que os autovalores exibem em resposta ao traço topológico da configuração, a saber, ao número de setores angulares removidos na construção do cone.

Os modelos, os métodos e os resultados contidos nesta tese apontam algumas direções futuras na pesquisa do presente autor. Alguns tópicos ainda merecem uma maior atenção e alguns problemas ainda permanecem em aberto. Como exemplo, a razão pela qual a periodicidade de Möbius responde de forma anômala a um confinamento transversal via condições do *MIT bag model* é uma questão particularmente intrigante, especialmente quando se leva em conta o contexto geral da mecânica quântica relativística, independentemente do grafeno. O fato de ser uma característica não observada em sistemas de Möbius não relativísticos sugere que um melhor entendimento deste ponto pode ter implicações relevantes na descrição de sistemas confinantes de Dirac; mais precisamente, no papel exercido pelas condições de contorno em geral neste contexto. Um outro aspecto é a confirmação da conjectura a respeito da origem dos estados de borda com energia zero em nanofitas de Möbius com borda *zigzag*; igualmente, as implicações apontadas aqui são de particular relevância; mesmo a não confirmação deste aspecto levantaria questões

interessantes para serem examinadas. Este ponto possivelmente só poderá ser testado via cálculos numéricos através das expressões encontradas analiticamente aqui. A procura por extensões auto-adjuntas e o estudo formal acerca das condições de contorno para operadores de Dirac do grafeno com termos de interação é outro tópico de interesse que emerge como uma continuidade da investigação feita aqui. O próprio Hamiltoniano incorporando a interação elétrica visto aqui é um exemplo de interesse. Além disso, campos de interação de um modo geral e contribuições da topologia podem ser uma linha interessante a ser explorada nesta direção.

Por fim, cabe o adendo de que estas contribuições não se encerram aqui. As versões finais dos trabalhos aqui apresentados contendo perspectivas e resultados ainda em fase de maturação e posteriores acréscimos ou alterações gerais poderão ser encontrados em publicações futuras. No final desta tese, há uma lista com os artigos ainda em preparação.

APÊNDICE A – Condições de contorno e aspectos topológicos em faixas de Möbius

Faixas de Möbius são superfícies nas quais é impossível introduzir a noção geométrica de orientabilidade (ver Figura 11). A rigor, isso significa que lidamos com uma superfície onde não podemos definir consistentemente um campo normal tomado ponto a ponto ao longo do seu traço, como acontece em superfícies mais convencionais como planos, cilindros e esferas, entre outras. Em termos práticos, este aspecto traduz-se como a definição de um anel dotado de um único lado, no qual não há uma noção intrínseca capaz de distinguir entre as partes ditas interna e externa. Para construir tal estrutura, procedemos como indicado na Figura 12. Tomando uma região bidimensional do plano, torcemos uma de suas extremidades por um ângulo de 180° e em seguida as identificamos. Com este processo, obtemos a faixa, que pode ser vista na figura.

No entanto, tais entes podem ser tratados de uma forma não geométrica de modo a extrair a sua natureza topológica independentemente; de fato, a topologia inerente a tal superfície pode ser codificada em nossa descrição através da imposição de condições de contorno a serem satisfeitas pela função de onda do sistema. Estas condições reproduzem o cenário em questão atribuindo à função de onda uma periodicidade de Möbius através de uma identificação apropriada tomada nas extremidades da região bidimensional dada. Este requisito é atendido pela seguinte condição:

$$\psi(0, y) = \psi(L, d - y), \quad (\text{A.1})$$

onde ψ representa uma função de quadrado integrável arbitrária, a saber, uma função de onda, e L e d são, respectivamente, o comprimento e a largura da faixa mostrada na figura. É fácil ver que a forma da condição expressa em (A.1) é compatível com uma interface de Möbius. Ela identifica pontos opostos equidistantes em relação à linha de simetria da faixa - isto é, sua linha média transversal - para as duas extremidades $x = 0$ e

Figura 11 – Faixa de Möbius

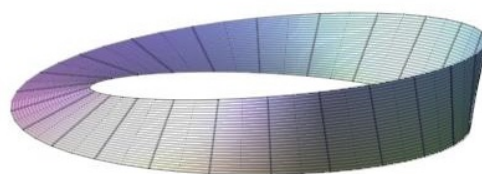
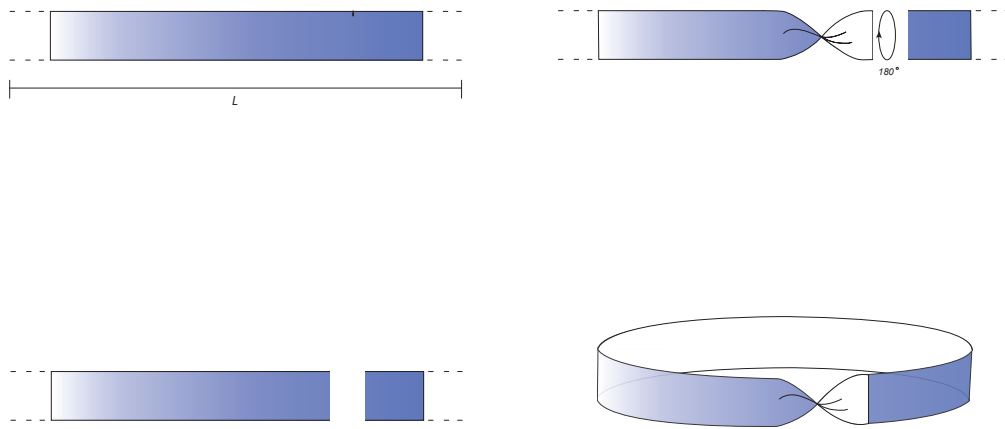


Figura 12 – Fabricação de uma faixa de Möbius

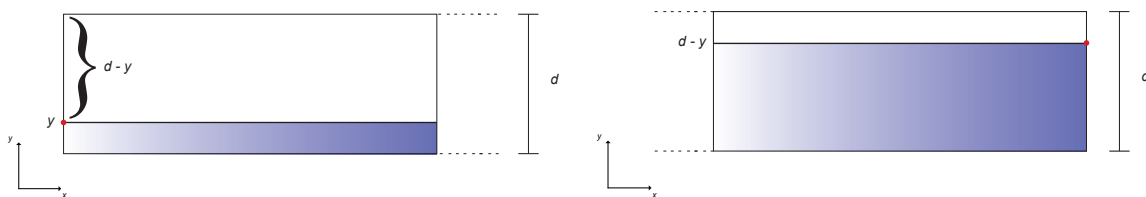


12 - Processo de fabricação de uma faixa de Möbius. À esquerda, os quadros superior e inferior mostram, respectivamente, uma faixa arbitrária de comprimento L e as extremidades da mesma postas em primeiro plano. À direita, o quadro superior mostra a torção característica de 180° de uma das extremidades, enquanto o processo de identificação posterior é ilustrado logo abaixo.

$x = L$, compondo corretamente o comportamento topológico supracitado. Este fato pode ser melhor visualizado na Figura 13.

No caso de sistemas relativísticos, descritos dentro de um formalismo de Dirac, uma extensão natural sugere que esta condição deveria ser satisfeita para ambas as componentes spinoriais ao mesmo tempo; porém, esta não é necessariamente a única maneira de proceder. Como continuamente pontuado ao longo dos capítulos, a escolha estará sujeita a aspectos formais que governam a estrutura matemática da mecânica quântica relativística. Particularmente a respeito do grafeno, em face das exigências quanto à natureza do sistema a ser estudado, tais condições devem assumir formas convenientes a fim de simu-

Figura 13 – Representação gráfica do domínio de Möbius



13 - Esquema ilustrando o domínio da função de onda e a assinatura de Möbius expressa na condição assumida. À direita, uma dado ponto arbitrário $(0, y)$ do domínio definido sobre a extremidade $x = 0$, em vermelho. À esquerda, também em vermelho, o ponto de simetria $(L, d - y)$ sobre $x = L$ com o qual será identificado o primeiro, atribuindo a periodicidade característica ao sistema.

lar características diversas como, por exemplo, aquelas relativas à geometria de borda e interface. Sendo assim, há uma numerosa gama de possibilidades para as condições de contorno a serem assumidas no escopo em questão.

ANEXO A – Lista de publicações

- DE SOUZA, J. F. O.; DE LIMA RIBEIRO, C. A.; FURTADO, C. Bound states in disclinated graphene with Coulomb impurities in the presence of a uniform magnetic field. *Physics Letters A*, v. 378, p. 2317-2324, 2014.

- DE SOUZA, J. F. O.; FURTADO, C. On the confinement of massless Dirac fermions in topological Möbius strips. (*Em preparação*)

- DE SOUZA, J. F. O.; FURTADO, C. Aharonov-Bohm effect in graphene Möbius strips: an analytical treatment. (*Em preparação*)

- DE SOUZA, J. F. O.; FURTADO, C. Bulk and edge Dirac states in graphene Möbius strips with zigzag and armchair edges. (*Em preparação*)

- DE SOUZA, J. F. O.; FURTADO, C. Effect of uniform electric fields on Dirac states in graphene nanoribbons with zigzag edges. (*Em preparação*)

- DE SOUZA, J. F. O.; FURTADO, C. Self-adjoint extensions of Dirac operators in condensed matter systems. (*Em preparação*)

Referências

- [1] CAMPBELL, M.; FARREL, S. O. *Bioquímica*. Tradução por All Tasks. São Paulo: Thomson Learning, 2007. Título original: Biochemistry.
- [2] QUADBECK-SEEGER, H.-J. *World of the elements, elements of the world*. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH and Co. KGaA, 2007.
- [3] ENGHAG, P. *Encyclopedia of the elements*. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH and Co. KGaA, 2004.
- [4] NEWSOM, H. E. Composition of the Solar System, planets, meteorite, and major terrestrial reservoirs. In: AHRENS, T. J. (Ed.). *Global Earth physics: a handbook of physical constants*. American Geophysical Union, 1995. cap. 10, p. 159-189.
- [5] KREBS, R. E. *The history and use of our Earth's chemical elements: a reference guide*. 2nd ed. Greenwood Press. 2006.
- [6] GREENBERG, A. *From Alchemy to Chemistry in picture and story*. New Jersey: John Willey and Sons, Inc., 2007.
- [7] KROTO, H. W. et al. C₆₀: Buckminsterfullerene. *Nature*, v. 318, p. 162-163, nov., 1985.
- [8] KRÄTSCHMER, W. et al. Solid C₆₀: a new form of carbon. *Nature*, v. 347, p. 354-358, 1990.
- [9] HUFFMAN, D. R. Solid C₆₀. *Physics Today*, p. 22-29, nov., 1991.
- [10] IJIMA, S. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, v. 354, p. 56-58, nov., 1991.
- [11] IJIMA, S; ICHIHASHI, T. Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter. *Nature*, v. 363, p. 603-605, 1993.
- [12] MONTHIOUX, M; KUZNETSOV, V. L. Who should be given the credit for the discovery of carbon nanotubes? *Carbon*, v. 44, p. 1621-1623, 2006.
- [13] RADUSHKEVICH, L. V.; LUKYANOVICH, V. M. O strukture ugleroda, obrazujucesja pri termiceskom razlozenii okisi ugleroda na zeleznom kontakte. *Zurn. Fisic. Chim.*, v. 26, p. 88-95, 1952.
- [14] HAMADA, N.; SAWADA, S-I.; OSHIYAMA, A. New one-dimensional conductors: graphitic microtubules. *Physical Review Letters*, v. 68, n. 10, p. 1579-1581, mar., 1992.

-
- [15] SAITO, R. et al. Electronic structure of chiral graphene tubules. *Applied Physics Letters*, v. 60, n. 18, p. 2204-2206, may, 1992.
- [16] MINTMIRE, J. W.; WHITE, C. T. Electronic and structural properties of carbon nanotubes. *Carbon*, v. 33, n. 7, p. 893-902, 1995.
- [17] KANE, C. L.; MELE E. J. Size, shape, and low energy electronic structure of carbon nanotubes. *Physical Review Letters*, v. 78, n. 10, p. 1932-1935, 1997.
- [18] ANDO, T. Theory of electronic states and transport in carbon nanotubes. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 74, n. 3, p. 777-817, 2005.
- [19] EBBESEN, T. Carbon nanotubes. *Physics Today*, p. 26-32, jun., 1996.
- [20] WALLACE, P. R. The band theory of graphite. *Physical Review*, v. 71, n. 9, may, 1947.
- [21] Di VICENZO, D. P.; MELE, E. J. Self-consistent effective-mass theory for intralayer screening in graphite intercalation compounds. *Physical Review B*, v. 29, n. 4, p. 1685-1694, feb., 1984.
- [22] LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. *Statistical Physics*, 3rd ed., Pergamos Press, 1980.
- [23] NOVOSELOV, K. S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films *Science* v. 306, p. 666-669, oct., 2004.
- [24] NOVOSELOV, K. S. et al. Two-dimensional atomic crystals. *PNAS*, v. 102, n. 30, p. 10451-10453, 2005.
- [25] BERGER, C. et al. Ultrathin epitaxial graphite: 2D electron gas properties and a route toward graphene-based nanoelectronics. *J. Phys. Chem. B*, v. 108, n. 52, p. 19912-19916, 2004.
- [26] MEYER, J. et al. The structure of suspended graphene sheets. *Nature*, v. 446, p. 60-63, 2007.
- [27] NOVOSELOV, K. S. et al. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature*, v. 438, p. 197-200. nov. 2005.
- [28] GEIM, A. K.; NOVOSELOV, K. S. The rise of graphene. *Nature Materials*, v. 6, p. 183-191, 2007.
- [29] CASTRO NETO, A. H. et al. The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, v. 81, n. 1. jan.-mar., p. 109-162, 2009.

- [30] PERES, N. M. R. The transport properties of graphene: an introduction. *Reviews of Modern Physics*, v. 82, p. 2673-2700, 2010.
- [31] ANDO, T. The electronic properties of graphene and carbon nanotubes. *NPG Asia Materials*, v. 1, p. 17-21, 2009.
- [32] FUJITA, M. et al. Peculiar localized state at zigzag graphite edge. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 65, n. 7, p. 1920-1923, jul., 1996.
- [33] NAKADA, K. et al. Edge state in graphene ribbons: nanometer size effect and edge shape dependence. *Physical Review B*, v. 54, n. 24, p. 954-961, dec., 1996.
- [34] WAKABAYASHI, K. et al. Electronic and magnetic properties of nanographite ribbons. *Physical Review B*, v. 59, n. 12, p. 8271-8282, 1999.
- [35] EZAWA, M. Peculiar width dependence of the electronic properties of carbon nanoribbons. *Physical Review B*, v. 73, n. 045432, p. 1-8, 2006.
- [36] SON, Y.-W.; COHEN, M. L.; LOUIE, S. G. Energy gaps in graphene nanoribbons. *Physical Review Letters*, v. 97, n. 216803, p. 1-4, 2006.
- [37] HAN, M. Y. et al. Energy band-gap engineering of graphene nanoribbons. *Physical Review Letters*, v. 98, n. 206805, p. 1-4, may, 2007.
- [38] CHEN, Z. et al. Graphene nano-ribbon electronics. *Physica E*, v. 40, p. 228-232, 2007.
- [39] RITTER, K. A.; LYDING, J. W. The influence of edge structure on the electronic properties of graphene quantum dots and nanoribbons. *Nature Materials*, v. 8, p. 235-242, mar., 2009.
- [40] RUSSO, S. et al. Observation of Aharonov-Bohm conductance oscillations in a graphene ring. *Physical Review B*, v. 77, n. 085413, p. 1-5, 2008.
- [41] HUEFNER, M. et al. Investigation of the Aharonov-Bohm effect in a gated graphene ring. *Physica Status Solidi B*, v. 246, n. 11-12, p. 2756-2759, 2009.
- [42] HUEFNER, M. et al. Aharonov-Bohm effect in a side-gated graphene ring. *New Journal of Physics*, v. 12, n. 043054, p. 1-10, 2009.
- [43] RECHER, P. et al. Aharonov-Bohm effect and broken valley degeneracy in graphene rings. *Physical Review B*, v. 76, n. 235404, p. 1-6, 2007.
- [44] WURM, J. et al. Graphene rings in magnetic fields: Aharonov-Bohm effect and valley splitting. *Semiconductor Science and Technology*, v. 25, n. 034003, p. 1-7, 2010.

- [45] RYCERZ, A.; BEENAKKER, C. W. J. Aharonov-Bohm effect for a valley-polarized current in graphene. *arXiv:0709.3397v1*, 2007.
- [46] BAHAMON, D. A.; PEREIRA, A. L. C.; SCHULZ, P. A. Inner and outer edge states in graphene rings: a numerical investigation. *Physical Review B*, v. 79, n. 125414, p. 1-7, 2009.
- [47] MA, M. M.; DING, J. W.; XU N. Odd-even width effect on persistent current in zigzag hexagonal graphene rings. *Nanoscale*, v. 1, p. 387-390, 2009.
- [48] NGUYEN, V. H.; NIQUET, Y. M.; DOLLFUS, P. Aharonov-Bohm effect and giant magnetoresistance in graphene nanoribbon rings. *Physical Review B*, v. 88, n. 035408, p. 1-6, 2013.
- [49] YAN C-H.; WEI L-F. Size effects in Aharonov-Bohm graphene rings. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 22. n. 295503, p. 1-5, 2010.
- [50] HUANG, B-L.; CHANG, M-C.; MOU, C-Y. Persistent currents in a graphene ring with armchair edges. *Journal of Physics: condensed matter*, v. 24, n. 245304, p. 1-8, 2012.
- [51] AHARONOV, Y.; BOHM, D. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory. *Physical Review*, v. 115, n. 3, p. 485-491, 1959.
- [52] KRISHNAN, et al. Graphitic cones and the nucleation of curved carbon surfaces. *Nature*, v. 388, 1997.
- [53] LAMMERT, P. E.; CRESPI, V. H. Topological phases in graphitic cones. *Physical Review Letters*, v. 85, n. 24, p. 5190-5193, dec., 2000.
- [54] GONZÁLEZ, J.; GUINEA, F; VOZMEDIANO, M. A. H. Continuum approximation to fullerene molecules. *Physical Review Letters*, v. 69, n. 1, p. 172-175, 1992.
- [55] GONZÁLEZ, J.; GUINEA, F.; VOZMEDIANO, M. A. H. The electronic spectrum of fullerenes from the Dirac equation. *Nuclear Physics B*, v. 406, p. 771-7794, 1993.
- [56] LAMMERT, P. E.; CRESPI, V. H. Graphene cones: classification by fictitious flux and electronic properties. *Physical Review B*, v. 69, n. 035406, p. 1-13, 2004.
- [57] CORTIJO, A.; VOZMEDIANO, M. A. H. Effects of topological defects and local curvature on the electronic properties of planar graphene. *Nuclear Physics B*, v. 763, p. 293-308, 2007.
- [58] CORTIJO, A; VOZMEDIANO, M. A. H. Electronic properties of curved graphene sheets. *EPL A*, v. 77, n. 47002, p. 1-5, 2007. .

- [59] FURTADO, C.; MORAES, F.; CARVALHO, A. M. de M. Geometric phases in graphitic cones. *Physics Letters A*, v. 372, p. 5368-5371, 2008.
- [60] CARVALHO, A. M. de M. et al. Holonomy transformations and applications in the curved structure of graphene. *European Physical Journal Plus*, v. 128, n. 60, p. 1-6, 2013.
- [61] PEREIRA, V. M.; NILSSON, J.; CASTRO NETO, A. H. Coulomb impurity problem in graphene. *Physical Review Letters*, v. 99, n. 166802, p. 1-4, 2007.
- [62] PEREIRA, V. M.; KOTOV, V. N.; CASTRO NETO, A. H. Supercritical Coulomb impurities in gapped graphene. *Physical Review B*, v. 78, n. 085101, p. 1-8, 2008.
- [63] NOVIKOV, D. S. Elastic scattering theory and transport in graphene. *Physical Review B*, v. 76, n. 245435, p. 1-17, 2007.
- [64] GUPTA, K. S.; SEN, S. Bound states in gapped graphene with impurities: effective low-energy description of short-range interactions. *Physical Review B*, v. 78, n. 205429, p. 1-7, 2008.
- [65] GUPTA, K. S.; SAMAROV, A.; SEN, S. Scattering in graphene with impurities: a low energy effective theory. *European Physical Journal B*, v. 73, p. 389-404, 2010.
- [66] CRAKRABORTY, B. GUPTA, K; SEN, S. Effect of topology on the critical charge in graphene. *Physical Review B*, v. 83, n. 115412, p. 1-6, 2011.
- [67] CRAKRABORTY, B; GUPTA, K; SEN, S. Effect of topological defects and Coulomb charge on the low energy quantum dynamics of gapped graphene. *Journal of Physics A: mathematical and theoretical*, v. 46, n. 055303, p. 1-25, 2013.
- [68] HEILBRONNER, E. Hückel molecular orbitals of Möbius-type conformations of annulenes. *Tetrahedron Letters*, n. 29, p. 1923-1928, 1964.
- [69] ZIMMERMAN, H. E. On molecular orbital correlation diagrams, the occurrence of Möbius systems in cyclization reactions, and factors controlling ground- and excited-state reactions. *Journal of the American Chemical Society*, v. 88, p. 1564-1565, 1996.
- [70] MAUKSCH, M. et al. Monocyclic $(CH)_9^+$ - A Heilbronner Möbius aromatic system revealed. *Angew. Chem. Int.*, v. 37. n. 17, p. 2395-2397, 1998.
- [71] HAVENITH, R. W. A.; VAN LENTHE, J. H.; JENNESKENS, L. W. Möbius aromaticity in small [n]trans-annulenes? *International Journal of Quantum Chemistry*, v. 85, p. 52-60, 2001.
- [72] CASTRO, C. et al. Aromaticity with a twist: Möbius [4n]annulenes. *Organic Letters*, v. 4, n. 20, p. 3431-3434, 2002.

- [73] AJAMI, D. et al. Synthesis of a Möbius aromatic hydrocarbon. *Nature*, v. 426, p. 819-821. dec., 2003.
- [74] TANDA, S. et al. A Möbius strip of single crystals. *Nature*, v. 417, p. 397-398, may, 2002.
- [75] MILA, F.; STAFFORD, C. A.; CAPPONI, S. Persistent currents in a Möbius ladder: a test of interchain coherence of interacting electrons. *Physical Review B*, v. 57, n. 3, p. 1457-1460, 1998.
- [76] KANEDA, K.; OKABE, Y. Finite-size scaling for the Ising model on the Möbius strip and the Klein bottle. *Physical review Letters*, v. 86, n. 10, p. 2134-2137, 2001.
- [77] HAYASHI, M.; EBISAWA, H. Little-Parks oscillation of superconducting Möbius strip. *arXiv:cond-mat/0107492v1*, 2001.
- [78] YAKUBO, K.; AVISHAI, Y.; COHEN, D.. Persistent Currents in Möbius strips. *Physical Review B*, v. 67, n. 125319, p. 1-5, 2003.
- [79] MARTINS FERREIRA, E. H. et al. Persistent currents in n-fold twisted Möbius strips. *Physics Letters A*, v. 333, p. 146-151, 2004.
- [80] ZHAO, N. et al. Observable topological effects in molecular devices with Möbius topology. *Physical Review B*, v. 79, n. 125440, p. 1-6, 2009.
- [81] GUO, Z. L. et al. Möbius graphene strip as a topological insulator. *Physical Review B*, v. 80, n. 195310, p. 1-8, 2009.
- [82] WAKABAYASHI, K.; HARIGAYA, K. Magnetic structure of nano-graphite Möbius ribbon. *arXiv:cond-mat/0210685v2*, sep., 2003.
- [83] WANG, X. et al. Theoretical investigation of Möbius strips formed from graphene. *Applied Physics Letters*, v. 97, n. 123103, p. 1-3, 2010.
- [84] CAETANO, E. W. S. et al. Möbius and twisted graphene nanoribbons: stability, geometry, and electronic properties. *The Journal of Chemical Physics*, v. 128, n. 164719, p. 1-8, 2008.
- [85] CAETANO, E. W. S. et al. Defects in graphene-based twisted nanoribbons: structural, electronic, and optical properties. *Langmuir*, v. 25 (8), p. 4751-4759, 2009.
- [86] DE SOUZA, J. F. O.; DE LIMA RIBEIRO, C. A.; FURTADO, C. Bound states in disclinated graphene with Coulomb impurities in the presence of a uniform magnetic field. *Physics Letters A*, v. 378, p. 2317-2324, 2014.

- [87] FUCHS, J.-N.; GOERBIG, M. O. Introduction to the physical properties of graphene: lecture notes. 2008.
- [88] CONSTANTINO, M. G. *Química orgânica: curso básico universitário*. v. 1, Rio de Janeiro: LTC, 2008.
- [89] CASTRO NETO, A. H. Les Houches notes on graphene. *arXiv:1004.3682v1*, 2010.
- [90] ALONSO, V.; DE VICENZO, S.; MONDINO L.. On the boundary conditions for the Dirac equation. *European Journal of Physics*, v. 18, p. 315-320, 1997.
- [91] ALBERTO, P.; FIOLEAIS, C.; GIL, V. M. S.. Relativistic particle in a box. *European Journal of Physics*, v. 17, p. 19-24, 1996.
- [92] PERES, N. M. R.; CASTRO NETO, A. H.; GUINEA F. Dirac fermion confinement in graphene. *Physical Review B*, v. 73, n. 241403, p. 1-4, 2006.
- [93] PERES, N. M. R. et al. Dirac electrons in graphene-based quantum wires and quantum dots. *Journal of Physics: condensed matter*, v. 21, n.344202, p. 1-18, 2009.
- [94] BERRY, M. V.; MONDRAGON R. J. Neutrino billiards: time reversal symmetry-breaking without magnetic fields. *Proc. R. Soc. Lond. A*, v. 412, p. 53-74, 1987.
- [95] CHODOS, A. et al. New extended model of hadrons. *Physical Review D*, v. 9, n. 12, p. 3471-3495, 1974.
- [96] JOHNSON K., The M.I.T. bag model. *Acta Physica Polonica*, v. B6, n. 6, p. 865-892, 1975.
- [97] THOMAS, A. W. *Chiral symmetry and the bag model: a newstarting point for nuclear physics*, jul., CERN, 1982.
- [98] GREINER, W. *Relativistic quantum mechanics: wave equations*. 3. ed., Berlin, Heidelberg, New York, Barcelona, Hong Kong, London, Milan, Paris, Singapore, Tokyo: Springer, 2000.
- [99] BREY, L.; FERTIG, H. Edge states and the quantized Hall effect in graphene. *Physical Review B*, v. 73, n. 195408, p. 1-5, 2006.
- [100] BREY, L.; FERTIG, H. A. Electronic states of graphene nanoribbons studied with the Dirac equation. *Physical Review B*, v. 73, n. 235411, p. 1-5, 2006.
- [101] VALEÉ, O.; SOARES, M. *Airy functions and applications to physics*. London: Imperial College Press, 2004.
- [102] ANTOSIEWICZ, H. A. Bessel functions of fractional order. In: ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A (Ed.). *Handbook of mathematical functions*.

-
- [103] REED, M.; SIMON, B. *Methods of modern mathematical physics*. v. 1, Academic Press, 1980.
- [104] KREYSZIG, E. *Introductory functional analysis with applications*. John Wiley and Sons, 1978.
- [105] STONE, M.; GOLDBART, P. *Mathematics for Physics I: lecture notes*. 2008.
- [106] BONNEAU, G.; FARAUT, J.; VALENT, G. Self-adjoint extensions of operators and the teaching of quantum mechanics. *arXiv:quantum-ph/0103153v1*, 2001.
- [107] THALLER, B. *The Dirac equation*. Berlin: Springer-Verlag, 1992.
- [108] GRIFFITHS, D. J. *Introduction to quantum mechanics*. New Jersey: Prentice Hall, 1995.
- [109] COHEN-TANNOUJDI, C.; DIU B.; LALÖE F.. *Quantum mechanics*. v. 1, Herman and John Wiley and Sons, 1977.
- [110] ALONSO V.; DE VICENZO, S. General Boundary conditions for a Dirac particle in a box and their non-relativistic limits. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 30, p. 8573-8585, 1997.
- [111] ZHOU, S. Y. et al. Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene. *Nature Materials*, v. 6, p. 770-775, 2007.
- [112] MORAES, F. Condensed matter physics as a laboratory for gravitation and cosmology. *Brazilian Journal of Physics*, v. 30, n. 2, p. 304-308, 2000.
- [113] HO, C-L; KHALILOV, V. R. Planar Dirac electron in Coulomb and magnetic fields. *Physical Review A*, v. 61, n. 032104, p. 1-7, 2000.